Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 15, 2022 – 09:21 AM EST

PDB ID	:	1LUI
Title	:	NMR Structures of Itk SH2 domain, Pro287cis isoform, ensemble of 20 low energy structures
Authors	:	Mallis, R.J.; Brazin, K.N.; Fulton, B.F.; Andreotti, A.M.
Deposited on	:	2002-05-22

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

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

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

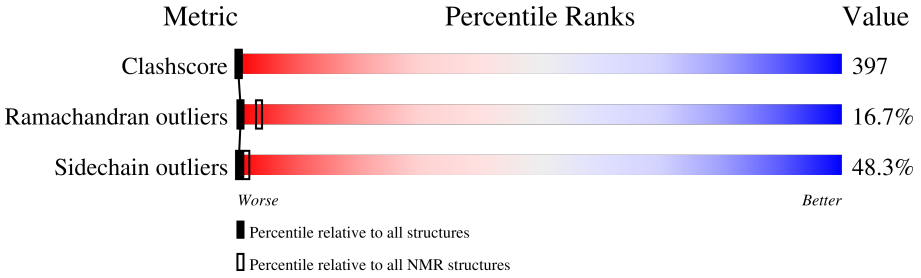
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	110	41% 41% 6% 12%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:6-A:53, A:60-A:70, A:74-A:111 (97)	0.35	11

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1764 atoms, of which 877 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Tyrosine-protein kinase ITK/TSK.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	110	1764	567	877	151	166	3	1

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	111	GLY	-	cloning artifact	UNP Q03526

4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 41% 41% 6% 12%

ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: • 41% 37% 7% 12%

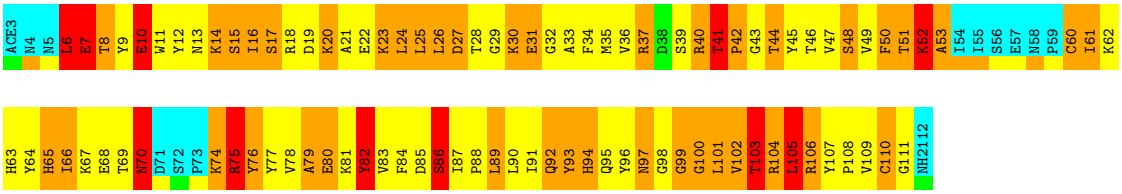
ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

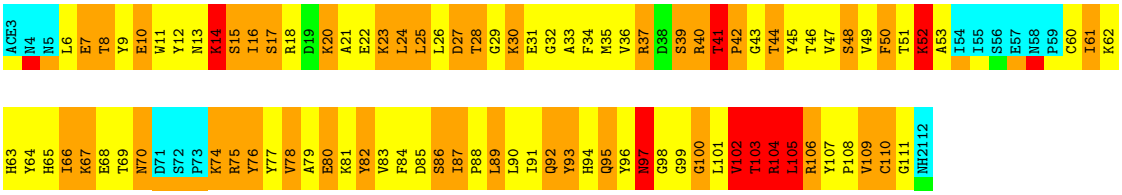
Chain A: • 40% 37% 10% 12%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

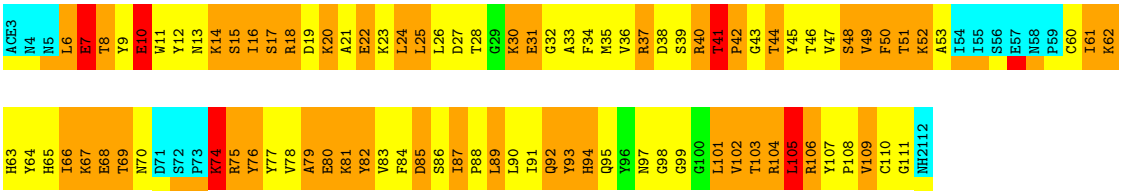
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

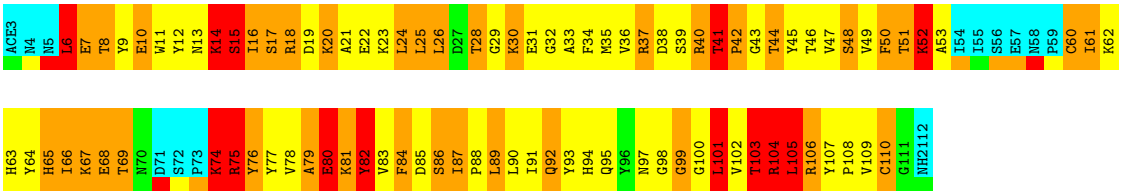
Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

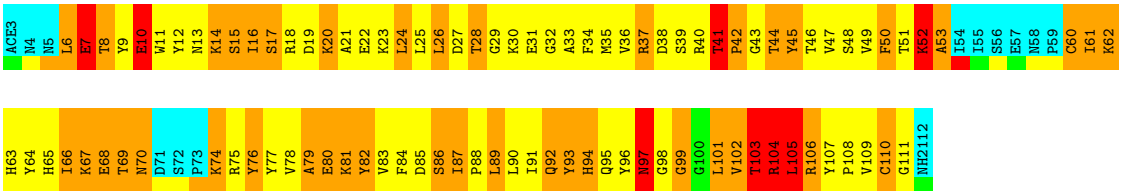
Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

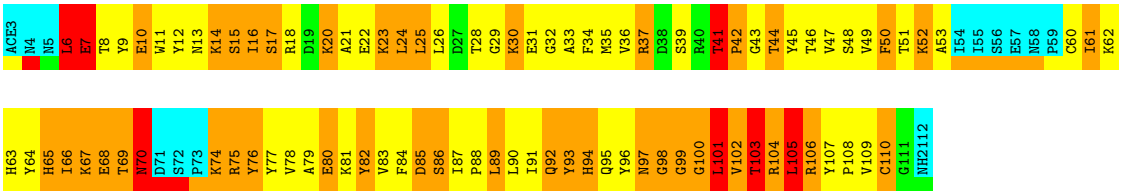
Chain A: 43% 37% 7% 12%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

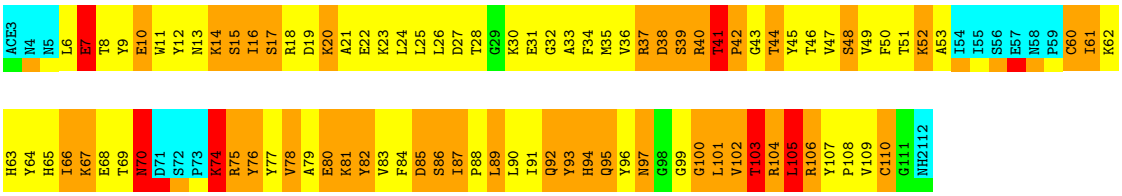
Chain A: 5% 41% 36% 6% 12%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

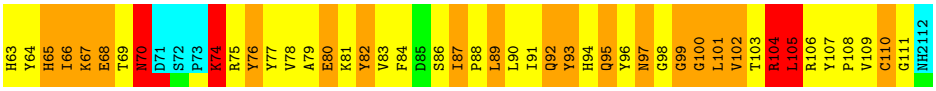
Chain A: 45% 35% 5% 12%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

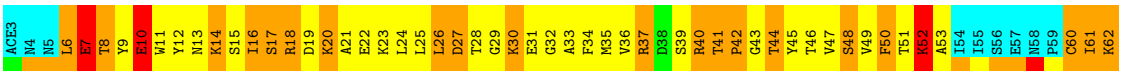
Chain A: 45% 34% 6% 12%

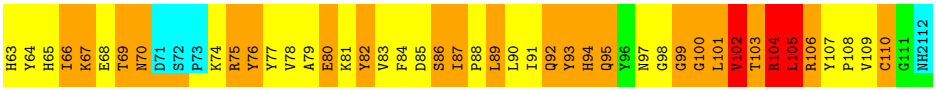


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A:

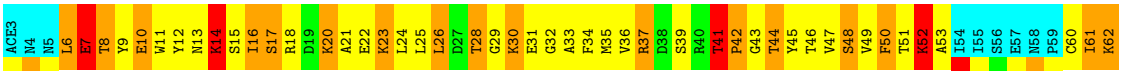


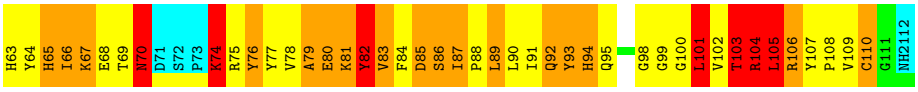


4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A:

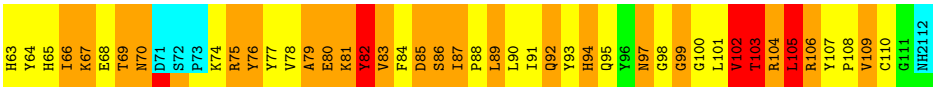




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A:



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 5% 37% 41% 5% 12%

ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 46% 33% 7% 12%

ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 5% 38% 38% 6% 12%

ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 38% 40% 8% 12%

ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

H63 Y64 H65 I66 K67 E68 T69 N70 D71 S72 P73 K74 R75 Y76 Y77 V78 A79 E80 K81 Y82 V83 F84 D85 S86 I87 P88 L89 L90 I91 Q92 Y93 H94 Q95 Y96 N97 G98 G99 G100 L101 V102 T103 R104 L105 R106 Y107 P108 V109 C110 G111 NH2112

4.2.17 Score per residue for model 17

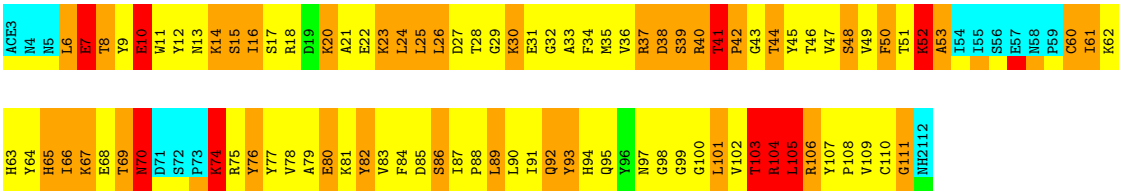
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 37% 43% 6% 12%

4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

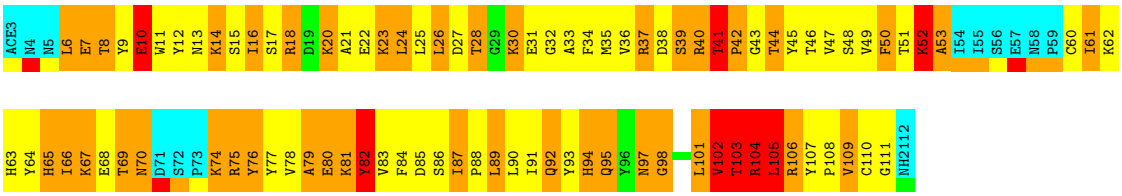
Chain A: 45% 33% 8% 12%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 5% 39% 37% 7% 12%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 43% 37% 5% 12%

H63
Y64
H65
I66
K67
E68
T69
N70
D71
S72
P73
K74
R75
Y76
Y77
V78
A79
E80
K81
Y82
V83
F84
D85
S86
I87
P88
L89
L90
I91
Q92
Y93
H94
Q95
Y96
N97
G98
G99
G100
L101
V102
T103
R104
L105
R106
Y107
P108
V109
C110
G111
NH2112

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy.*

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ACE, NH2

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	800	798	797	634±21
All	All	16000	15960	15940	12672

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 397.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CD1	1.27	1.62	10	20
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD12	1.24	1.64	17	17
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD22	1.24	1.60	6	17
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD22	1.24	1.66	3	11
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CE2	1.23	2.26	15	20
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:HG23	1.22	1.65	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:N	1.21	1.48	20	3
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:SD	1.20	1.77	12	15
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG2	1.20	1.67	1	8
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:OG	1.19	1.37	16	9
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG22	1.19	1.36	5	5
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG23	1.19	1.66	2	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD13	1.18	1.69	8	11
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG13	1.17	1.75	13	20
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CD1	1.16	1.74	8	17
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:HD12	1.15	1.76	3	20
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD22	1.15	1.16	7	17
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG21	1.15	1.72	12	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CZ	1.14	1.75	15	3
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HD13	1.14	1.77	2	10
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:HA	1.14	1.43	12	20
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:OG	1.13	1.42	12	3
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG12	1.13	1.42	1	11
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD21	1.13	1.16	10	10
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD1	1.13	1.72	18	17
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD13	1.12	1.72	19	20
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:HA	1.12	1.41	3	19
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:HD23	1.12	1.42	12	17
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD13	1.12	1.43	18	6
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG23	1.12	1.21	15	9
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CD2	1.11	1.78	2	11
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HG12	1.11	1.44	17	20
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CD2	1.11	1.81	10	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:CB	1.10	1.75	2	14
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG2	1.10	1.75	2	11
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD23	1.10	1.81	12	2
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:N	1.09	1.59	5	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG1	1.09	1.77	4	7
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD12	1.09	1.81	7	3
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD11	1.09	1.18	18	20
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD2	1.09	1.76	3	19
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD11	1.08	1.18	2	11
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HB3	1.08	1.18	2	6
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HG23	1.08	1.77	10	11
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG23	1.08	1.22	9	4
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HB2	1.07	1.24	20	6
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG11	1.07	1.25	8	6
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:HD11	1.07	1.22	8	20
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD1	1.07	2.42	5	6
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HD23	1.06	1.47	2	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD12	1.06	1.48	3	16
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:N	1.06	1.64	11	17
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HG21	1.06	1.28	20	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD12	1.06	1.81	7	2
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG22	1.06	1.23	3	11
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG21	1.05	1.23	3	8
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD21	1.05	1.50	2	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD23	1.05	1.24	20	3
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:C	1.05	1.72	18	6
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:N	1.05	1.90	9	20
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG2	1.05	1.82	9	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD12	1.04	1.81	4	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG11	1.04	1.30	11	7
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:HG23	1.04	1.22	2	8
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD12	1.04	1.05	15	6
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HD3	1.04	1.29	11	11
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HD11	1.03	1.19	1	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD2	1.03	2.41	14	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG21	1.03	1.30	4	5
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD3	1.03	1.25	13	4
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD11	1.03	1.83	20	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CD	1.03	1.84	8	14
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG21	1.03	1.83	4	6
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HD13	1.03	1.29	8	20
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:HD11	1.02	1.84	3	12
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:CD2	1.02	1.83	8	10
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:CD1	1.02	1.83	17	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:O	1.02	1.52	4	7
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD21	1.02	1.68	4	8
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG3	1.02	1.28	8	5
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD12	1.02	1.54	4	12
1:A:36:VAL:HG13	1:A:46:THR:O	1.02	1.54	11	20
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD12	1.02	1.30	5	12
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD12	1.02	1.52	4	4
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:CE1	1.02	2.11	5	20
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD22	1.02	1.24	12	3
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HD11	1.02	1.29	17	2
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:CD1	1.01	2.42	20	20
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:HG22	1.01	1.28	15	20
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:HG12	1.01	1.55	4	20
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD13	1.01	1.90	4	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD13	1.01	1.28	12	3
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG13	1.01	1.54	20	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:CE	1.01	1.83	13	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD1	1.01	2.44	4	3
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:HG22	1.01	1.55	17	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:35:MET:SD	1.01	1.95	14	18
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:N	1.00	1.71	14	4
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD22	1.00	1.85	16	3
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG12	1.00	1.91	1	15
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:HA	1.00	1.57	9	20
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE3	1.00	1.29	5	9
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD22	0.99	1.32	8	18
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG22	0.99	1.33	4	4
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE1	0.99	1.30	17	6
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD2	0.99	2.50	17	9
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:CD1	0.98	2.46	17	20
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG22	0.98	1.55	19	15
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:HD1	0.98	1.17	8	2
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HD1	0.98	1.18	18	16
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG21	0.98	1.36	9	2
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD1	0.98	2.11	4	17
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG22	0.98	1.94	13	20
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:N	0.98	1.72	18	2
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:HG23	0.98	1.35	5	17
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG22	0.98	1.32	12	3
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG23	0.98	1.36	9	6
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:N	0.98	1.74	20	4
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG11	0.97	1.87	8	4
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CD1	0.97	1.88	20	4
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HD12	0.97	1.36	13	6
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CE1	0.97	2.53	5	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG21	0.97	1.35	12	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:HD3	0.96	1.38	4	14
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG12	0.96	1.75	6	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD22	0.96	1.90	3	17
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD11	0.96	1.74	8	4
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HG23	0.96	1.90	14	10
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD23	0.96	1.59	16	3
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CG	0.96	2.53	1	20
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD12	0.96	1.96	20	4
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE1	0.96	1.94	12	4
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CG2	0.96	2.48	18	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD11	0.96	1.91	2	11
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:HD11	0.96	1.91	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CE1	0.96	2.54	19	15
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:OG1	0.95	1.99	18	17
1:A:26:LEU:HG	1:A:61:ILE:HD11	0.95	1.34	14	5
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HD13	0.95	1.32	20	15
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:SG	0.95	2.01	19	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD1	0.95	2.53	1	4
1:A:26:LEU:CG	1:A:61:ILE:HD11	0.95	1.91	14	4
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CD2	0.95	2.45	17	19
1:A:44:THR:CB	1:A:66:ILE:O	0.95	2.15	5	18
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CE1	0.95	1.96	19	17
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG21	0.95	1.97	14	20
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG22	0.95	1.36	4	3
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:CE	0.94	1.91	5	8
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:CD1	0.94	1.91	18	20
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE1	0.94	2.56	2	9
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CE1	0.94	2.55	4	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD11	0.94	1.93	5	15
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CD1	0.94	1.96	19	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:O	0.94	2.00	4	20
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB2	0.94	1.38	9	20
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:CG2	0.94	2.51	15	20
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:HB2	0.94	1.40	9	11
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD1	0.94	2.21	1	6
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:ND1	0.94	2.36	19	16
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.93	1.83	12	2
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:HD23	0.93	1.36	5	1
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD11	0.93	1.79	3	16
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD2	0.93	2.56	7	5
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG12	0.93	1.94	1	15
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:HB3	0.93	1.39	2	20
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:HG13	0.92	1.98	20	20
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE1	0.92	2.58	19	5
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD23	0.92	1.94	20	3
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HB3	0.92	2.00	4	20
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:HD2	0.92	1.94	3	20
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD2	0.92	2.57	2	19
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:CE	0.92	1.93	1	8
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CE	0.92	2.18	2	1
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:HD13	0.92	1.40	9	5
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:HG21	0.92	1.41	8	4
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD21	0.92	2.00	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CH2	0.92	1.99	11	10
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD2	0.92	2.18	16	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD13	0.91	2.00	1	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CZ	0.91	2.57	9	14
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CE1	0.91	2.59	19	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB3	0.91	1.41	19	13
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD2	0.91	1.99	14	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:ALA:N	0.91	1.77	9	4
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG12	0.91	1.40	4	4
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HA	0.91	2.00	8	20
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD13	0.91	1.42	5	4
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD21	0.91	1.95	19	10
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CE2	0.91	2.54	20	20
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CG1	0.91	1.96	2	18
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD21	0.91	1.96	17	4
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HG	0.91	1.38	10	17
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CE1	0.91	2.54	20	14
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE1	0.91	2.58	7	10
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CD1	0.91	2.01	10	12
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD13	0.90	2.01	2	5
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:CG2	0.90	2.54	2	20
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:N	0.90	2.04	8	20
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:CG2	0.90	1.95	19	10
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG13	0.90	1.39	15	2
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD1	0.90	2.01	4	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD21	0.90	1.40	6	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:CA	0.90	2.54	17	7
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:N	0.90	1.78	13	4
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CD2	0.90	2.02	12	4
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE1	0.90	2.60	20	11
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:CD2	0.90	1.96	19	17
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CG	0.90	1.97	20	3
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:CE2	0.90	2.00	17	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	0.90	1.41	13	9
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:OH	0.90	2.23	14	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD21	0.89	1.42	17	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD1	0.89	2.55	10	7
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.89	1.67	5	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD2	0.89	1.98	16	14
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.89	2.41	18	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CG	0.89	1.97	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG21	0.89	1.39	18	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD22	0.89	1.41	6	13
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CZ2	0.89	2.61	3	20
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:CE2	0.89	2.61	15	20
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD1	0.89	2.56	12	4
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:HG21	0.89	1.45	5	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:HB3	0.88	1.43	19	6
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG22	0.88	1.98	1	11
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD23	0.88	2.03	12	4
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG12	0.88	1.44	15	16
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:CE	0.88	1.99	6	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD21	0.88	1.41	7	11
1:A:44:THR:HG23	1:A:65:HIS:NE2	0.88	1.84	4	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG21	0.88	1.45	7	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:CG2	0.88	1.99	5	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:CD	0.88	2.22	10	18
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG1	0.88	1.97	15	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:CE	0.87	2.52	2	15
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CD1	0.87	2.58	19	20
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CG1	0.87	1.97	13	14
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HD12	0.87	1.88	4	4
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:HE2	0.87	1.86	11	20
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:H	0.87	1.25	1	5
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:HE1	0.87	1.42	4	7
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:HD2	0.87	1.47	15	20
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG21	0.87	1.44	2	5
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CD1	0.87	2.35	20	3
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CG	0.87	2.22	14	14
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG21	0.87	1.99	17	6
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:OH	0.87	2.27	6	15
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:CD1	0.87	2.58	7	11
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:CA	0.87	2.22	3	16
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:O	0.87	2.22	14	11
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:CD1	0.87	2.58	10	12
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG11	0.87	1.47	4	8
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.87	2.38	6	20
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE2	0.87	2.05	15	3
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:CG2	0.86	2.53	3	20
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:CD1	0.86	2.05	8	2
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG23	0.86	1.42	19	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:46:THR:O	0.86	1.70	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:HH	0.86	0.96	4	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.86	2.57	11	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CD1	0.86	2.58	11	15
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CD2	0.86	2.58	4	20
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG13	0.86	1.28	7	20
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE3	0.86	1.47	13	8
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB2	0.86	1.70	17	16
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD1	0.86	2.03	12	4
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CG	0.86	2.24	20	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CE2	0.86	2.59	8	20
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG21	0.86	2.01	16	8
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD1	0.85	2.53	4	20
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:CD1	0.85	2.38	3	20
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CD	0.85	2.01	2	20
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HA	0.85	2.05	3	6
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CD2	0.85	2.02	14	6
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD1	0.85	2.59	12	2
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE2	0.85	1.85	6	10
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CB	0.85	2.02	7	20
1:A:36:VAL:CG1	1:A:46:THR:O	0.85	2.24	6	20
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:N	0.85	2.10	17	20
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:O	0.85	2.10	15	20
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:CG2	0.85	2.55	19	13
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:SD	0.85	2.65	12	13
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.85	2.60	7	12
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:CG1	0.85	2.54	12	3
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:N	0.85	2.40	18	8
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD1	0.85	2.54	18	17
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CD	0.85	2.14	17	7
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD13	0.84	2.06	14	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE1	0.84	2.59	15	13
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	0.84	1.85	18	2
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD12	0.84	2.04	17	16
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CD1	0.84	2.39	11	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CG	0.84	2.39	12	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:CB	0.84	2.01	15	14
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HG	0.84	1.72	7	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:CD2	0.84	2.30	3	7
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CZ	0.84	2.60	10	3
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:CZ	0.84	2.60	14	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:CA	0.84	2.02	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD12	0.84	1.48	7	2
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CD1	0.84	2.46	2	2
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.84	2.61	6	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG23	0.84	1.45	14	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG11	0.84	1.49	4	4
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE1	0.84	2.61	4	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:CG2	0.84	2.02	12	8
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CZ	0.84	2.30	19	14
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD12	0.84	1.92	4	10
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD2	0.84	1.47	3	6
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:HA3	0.84	2.08	5	10
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CE2	0.83	2.08	11	20
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CD2	0.83	2.61	10	3
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:CG1	0.83	2.61	9	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB2	0.83	1.50	20	9
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CE1	0.83	2.06	20	8
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HG22	0.83	2.03	13	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HG3	0.83	1.73	4	19
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CD1	0.83	2.60	8	17
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:CG1	0.83	2.03	4	6
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD12	0.83	1.47	4	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:NE2	0.83	2.46	5	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:CD1	0.83	2.02	20	5
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.83	2.40	14	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HG23	0.83	1.50	10	4
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:HG22	0.83	2.03	9	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG3	0.83	1.74	7	10
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:O	0.83	1.74	3	18
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.83	2.03	12	2
1:A:44:THR:HG1	1:A:65:HIS:CD2	0.83	1.92	3	6
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:OH	0.83	2.30	3	4
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:HG21	0.83	1.50	16	4
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HA	0.83	1.49	18	16
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HD12	0.83	1.49	3	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG11	0.83	2.03	8	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.83	2.57	17	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG23	0.82	2.09	9	20
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:HG23	0.82	1.95	11	4
1:A:77:TYR:HB2	1:A:82:TYR:O	0.82	1.74	8	7
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CB	0.82	2.27	20	7
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE2	0.82	2.62	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CD	0.82	2.58	1	16
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD11	0.82	2.10	16	19
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:CA	0.82	2.27	19	20
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD12	0.82	1.72	19	11
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:CE1	0.82	2.47	2	3
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CD2	0.82	2.09	16	13
1:A:77:TYR:CB	1:A:82:TYR:O	0.82	2.27	8	8
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD13	0.82	2.08	1	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CB	0.82	2.05	12	4
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:HD12	0.82	1.48	6	4
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:OG	0.82	2.27	4	11
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD23	0.82	2.04	5	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:HD1	0.82	1.31	1	10
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:HG23	0.82	2.10	9	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:CB	0.82	2.05	20	15
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CD	0.82	2.05	10	8
1:A:13:ASN:N	1:A:36:VAL:O	0.82	2.12	17	20
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:O	0.82	1.75	3	5
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:CD1	0.82	2.62	20	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG2	0.82	2.04	12	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE3	0.81	1.49	1	3
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CE1	0.81	2.63	17	19
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:NE2	0.81	2.43	17	12
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HG3	0.81	2.09	15	9
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HD12	0.81	1.75	3	3
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:CE1	0.81	2.10	11	13
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CE2	0.81	2.09	17	6
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:NE2	0.81	2.43	4	2
1:A:85:ASP:C	1:A:89:LEU:HD11	0.81	1.95	1	5
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:CB	0.81	2.59	17	5
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD1	0.81	2.05	19	7
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:CD1	0.81	2.06	8	14
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG22	0.81	1.74	9	2
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:HD13	0.81	1.75	5	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CE	0.81	2.06	4	5
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CE	0.81	2.44	2	14
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG1	0.81	2.05	10	5
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:HD1	0.81	1.71	6	20
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE2	0.81	2.68	4	3
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CZ	0.81	2.64	5	14
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:HE2	0.81	1.36	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD2	0.80	1.77	7	20
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CE1	0.80	2.34	19	6
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE3	0.80	2.04	16	8
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:O	0.80	2.34	16	4
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CE1	0.80	2.11	6	12
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CE2	0.80	2.69	6	20
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:HB2	0.80	2.06	9	8
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:HE1	0.80	2.05	1	6
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:HG12	0.80	2.11	6	14
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CE1	0.80	2.34	8	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:45:TYR:N	0.80	2.11	2	14
1:A:47:VAL:N	1:A:64:TYR:O	0.80	2.14	19	20
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:ND1	0.80	2.49	1	15
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CZ	0.80	2.70	14	13
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CE1	0.80	2.12	8	20
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:CB	0.80	2.29	17	12
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG22	0.80	1.97	3	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG12	0.80	2.06	6	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:CE	0.80	2.60	6	8
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:HG23	0.80	1.50	8	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE1	0.80	2.10	15	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HG3	0.80	1.91	14	7
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE2	0.80	2.11	19	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:CD2	0.80	2.45	11	10
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:H	0.80	1.37	16	2
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HG12	0.79	1.53	13	10
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CE2	0.79	2.35	10	2
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:HG23	0.79	1.52	14	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CA	0.79	2.31	9	19
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HD2	0.79	1.38	11	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:74:LYS:O	0.79	1.76	11	3
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:NE1	0.79	1.93	8	20
1:A:34:PHE:HE2	1:A:91:ILE:HG21	0.79	1.32	15	20
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CD1	0.79	2.10	13	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CD2	0.79	2.12	6	4
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HD13	0.79	2.12	14	7
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:N	0.79	2.45	19	5
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HB2	0.79	1.92	9	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:CG2	0.79	2.66	7	20
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HA	0.79	2.12	15	13
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:N	0.79	2.16	13	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:C	0.79	2.20	9	20
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:CD2	0.79	2.12	4	20
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CE2	0.79	2.51	4	9
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.79	2.08	6	2
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD13	0.79	1.93	3	4
1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:OE1	0.79	2.16	7	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HG3	0.79	2.13	16	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE2	0.79	2.06	11	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD2	0.79	2.66	14	2
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:CA	0.79	2.30	9	15
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CE1	0.79	2.56	19	12
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HG21	0.78	2.12	12	20
1:A:35:MET:N	1:A:48:SER:O	0.78	2.16	17	20
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CD1	0.78	2.13	5	13
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE1	0.78	2.13	13	2
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:OG	0.78	1.78	4	7
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CD2	0.78	2.66	15	5
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CG	0.78	2.66	12	3
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD2	0.78	2.13	14	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:CG2	0.78	2.61	5	9
1:A:82:TYR:CD1	1:A:82:TYR:N	0.78	2.52	12	14
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:CB	0.78	2.60	20	9
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:O	0.78	1.78	10	11
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG13	0.78	1.52	9	3
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:CG1	0.78	2.09	8	3
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:N	0.78	2.16	7	20
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:HG22	0.78	1.77	1	2
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE2	0.78	2.37	2	4
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:C	0.78	1.99	20	2
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:CE1	0.78	2.13	9	8
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:H	0.78	1.38	7	4
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.78	2.37	14	1
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:CE1	0.78	2.65	4	12
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:HA	0.78	2.13	9	12
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CE2	0.78	2.37	11	3
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HD12	0.78	2.13	4	6
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CG	0.78	2.14	12	3
1:A:36:VAL:CA	1:A:46:THR:O	0.78	2.32	8	20
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:ND2	0.78	2.16	3	3
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HB3	0.78	2.14	12	12
1:A:33:ALA:O	1:A:49:VAL:HA	0.78	1.79	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG23	0.78	2.14	19	20
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CE2	0.78	2.58	3	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:OG	0.78	2.32	16	5
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD13	0.78	2.00	18	1
1:A:41:THR:O	1:A:43:GLY:N	0.77	2.17	4	20
1:A:50:PHE:CA	1:A:60:CYS:O	0.77	2.32	1	15
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:NE2	0.77	1.94	5	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:66:ILE:O	0.77	2.02	7	20
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CB	0.77	2.67	20	4
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD2	0.77	2.09	8	9
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HB3	0.77	2.14	9	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CE	0.77	2.62	9	3
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.77	1.55	19	10
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:CE1	0.77	2.37	18	10
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG22	0.77	1.53	1	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:CG1	0.77	2.08	19	14
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:HD12	0.77	2.09	7	16
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:N	0.77	2.17	19	20
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HB	0.77	1.56	19	13
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.77	2.62	8	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:HD11	0.77	2.14	20	19
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HG2	0.77	1.79	6	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG2	0.77	2.62	10	6
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:CE	0.77	2.62	4	9
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:OG	0.77	1.79	9	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:OD1	0.77	2.37	14	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CD2	0.77	2.15	10	3
1:A:50:PHE:HA	1:A:60:CYS:O	0.77	1.79	16	17
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CE	0.77	2.62	5	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CZ	0.77	2.38	18	9
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HE2	0.77	1.53	11	3
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG21	0.77	2.15	4	20
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:HB3	0.77	2.10	4	20
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:HD2	0.77	1.94	4	16
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CD2	0.77	2.33	2	2
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HG	0.77	2.15	3	10
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:CE1	0.77	2.38	12	3
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.77	2.15	13	6
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CD1	0.77	2.58	17	5
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CE	0.76	2.11	19	15
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HD12	0.76	2.15	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG23	0.76	2.11	19	1
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HG3	0.76	1.80	3	12
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:SD	0.76	2.58	13	10
1:A:64:TYR:HD2	1:A:78:VAL:HG11	0.76	1.41	3	3
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:HG23	0.76	2.09	9	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG11	0.76	2.10	1	4
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HA	0.76	2.09	12	17
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:CD2	0.76	2.53	2	2
1:A:11:TRP:O	1:A:36:VAL:N	0.76	2.18	9	20
1:A:33:ALA:N	1:A:50:PHE:O	0.76	2.19	5	20
1:A:104:ARG:O	1:A:106:ARG:N	0.76	2.18	12	18
1:A:21:ALA:N	1:A:24:LEU:HD21	0.76	1.94	2	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HD12	0.76	2.16	4	4
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CG	0.76	2.39	16	4
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG13	0.76	1.57	8	4
1:A:16:ILE:CD1	1:A:35:MET:SD	0.76	2.74	14	16
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:CD1	0.76	2.49	17	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD1	0.76	2.39	17	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE3	0.76	2.11	14	8
1:A:34:PHE:HB2	1:A:105:LEU:HD12	0.76	1.58	18	16
1:A:44:THR:HB	1:A:66:ILE:O	0.76	1.81	18	18
1:A:45:TYR:O	1:A:65:HIS:ND1	0.76	2.19	7	13
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CA	0.76	2.11	18	13
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB2	0.76	1.80	11	12
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG2	0.76	2.60	12	3
1:A:74:LYS:HG3	1:A:83:VAL:HG23	0.76	1.57	8	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CD	0.76	2.63	8	5
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:N	0.75	2.19	6	16
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE2	0.75	2.69	14	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.75	2.63	3	12
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:CE1	0.75	2.39	10	4
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:O	0.75	2.35	14	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:O	0.75	2.20	19	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CD	0.75	2.33	20	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HA	0.75	1.81	16	19
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:H	0.75	1.41	2	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.75	2.65	17	3
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE1	0.75	2.39	19	5
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CZ3	0.75	2.17	3	10
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:HE2	0.75	1.24	16	4
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.75	1.95	13	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:HD13	0.75	1.39	14	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:N	0.75	2.18	13	14
1:A:32:GLY:CA	1:A:51:THR:OG1	0.75	2.34	16	17
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CD2	0.75	2.55	12	6
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:HG13	0.75	2.11	12	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:CG1	0.75	2.63	18	20
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CE	0.75	2.35	12	8
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD1	0.75	2.65	5	12
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:HB3	0.75	2.16	17	20
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG1	0.75	2.64	1	3
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:HA3	0.75	1.97	5	9
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD22	0.75	1.81	20	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CG	0.74	2.35	16	9
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HD12	0.74	2.12	3	5
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD2	0.74	2.40	14	10
1:A:78:VAL:CG1	1:A:79:ALA:N	0.74	2.49	9	3
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:HD11	0.74	1.41	20	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:NH1	0.74	2.21	20	4
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:N	0.74	2.21	3	20
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:CD1	0.74	2.65	17	11
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG2	0.74	2.36	9	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CE2	0.74	2.18	13	13
1:A:50:PHE:HB2	1:A:60:CYS:O	0.74	1.82	7	17
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG12	0.74	2.17	6	13
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB3	0.74	2.12	2	12
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:CE1	0.74	2.61	4	3
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CZ	0.74	2.41	5	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:NE2	0.74	2.20	17	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG2	0.74	2.11	19	1
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:CD1	0.74	2.50	3	15
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CG2	0.74	2.71	17	20
1:A:36:VAL:CG2	1:A:47:VAL:HG22	0.74	2.09	15	19
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE1	0.74	1.57	6	2
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD13	0.74	1.83	17	3
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:NE2	0.74	2.20	4	12
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG2	0.74	2.13	4	5
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE3	0.73	1.83	14	5
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:N	0.73	2.51	13	2
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:OE1	0.73	2.06	7	2
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:O	0.73	2.06	13	16
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HG	0.73	2.18	14	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD1	0.73	2.76	5	3
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CE1	0.73	2.41	6	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:48:SER:OG	0.73	1.83	7	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD22	0.73	2.04	20	3
1:A:47:VAL:O	1:A:64:TYR:N	0.73	2.18	19	20
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE2	0.73	2.40	3	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HG	0.73	2.13	17	13
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CE2	0.73	2.70	15	3
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG1	0.73	2.67	1	2
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:CG1	0.73	2.14	3	15
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG22	0.73	1.83	2	6
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG2	0.73	2.66	11	8
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:N	0.73	1.82	3	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CD2	0.73	2.19	19	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:CG2	0.73	2.71	4	20
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:CE1	0.73	2.18	20	11
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:CD	0.73	2.67	18	20
1:A:101:LEU:O	1:A:103:THR:N	0.73	2.21	7	10
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CD1	0.73	2.36	20	6
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG12	0.73	1.41	6	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:60:CYS:SG	0.73	2.76	19	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:N	0.73	1.99	4	2
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:HE1	0.73	1.43	2	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:OH	0.73	2.19	6	4
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HB3	0.73	2.19	20	6
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE1	0.73	2.19	2	2
1:A:26:LEU:CD2	1:A:61:ILE:HD11	0.73	2.14	10	3
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:HG21	0.73	1.99	12	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CD	0.73	2.37	13	1
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:N	0.73	2.22	8	20
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CD1	0.73	2.18	13	11
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CG	0.73	2.14	4	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CB	0.73	2.36	17	3
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:CD1	0.72	2.13	9	20
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:NE2	0.72	2.42	4	4
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:O	0.72	2.37	6	8
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CA	0.72	2.37	11	7
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG23	0.72	1.59	18	11
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:CA	0.72	2.15	6	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CG	0.72	2.19	6	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:60:CYS:O	0.72	2.38	1	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CE1	0.72	2.19	4	7
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE2	0.72	2.18	19	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HD1	0.72	1.40	19	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD2	0.72	2.71	6	4
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG22	0.72	2.03	2	9
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:HD13	0.72	2.19	10	3
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CZ	0.72	2.20	8	19
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HG3	0.72	2.19	14	3
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:NE2	0.72	2.22	5	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:HG3	0.72	1.83	20	2
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD3	0.72	2.15	16	13
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CG1	0.72	2.37	2	11
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:CA	0.72	2.73	9	20
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CZ	0.72	2.72	16	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HD21	0.72	1.61	5	12
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CG	0.72	2.37	7	5
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:N	0.72	2.23	3	2
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:CB	0.72	2.14	17	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD22	0.72	1.45	2	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HB3	0.72	2.19	7	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG2	0.72	2.67	17	5
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:HA	0.72	2.20	3	4
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CD1	0.72	2.38	11	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE2	0.72	1.62	6	2
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.72	2.13	2	3
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CD1	0.72	2.72	7	16
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CG	0.72	2.73	15	9
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:CD	0.72	2.13	4	6
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:OG1	0.72	2.23	17	5
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE2	0.72	2.78	14	3
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD2	0.71	2.20	18	9
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:HB	0.71	2.00	2	3
1:A:11:TRP:O	1:A:13:ASN:ND2	0.71	2.22	7	2
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:HG13	0.71	1.61	20	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD21	0.71	2.14	2	5
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG21	0.71	2.14	2	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE1	0.71	2.43	15	10
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:O	0.71	2.09	9	12
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CE2	0.71	2.20	3	5
1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CD	0.71	2.44	7	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:HG23	0.71	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:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD22	0.71	1.61	19	1
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:CD1	0.71	2.68	5	15
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE1	0.71	2.73	4	2
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CZ	0.71	2.20	14	1
1:A:64:TYR:HH	1:A:102:VAL:HG13	0.71	1.44	20	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HD2	0.71	1.62	10	2
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:CE1	0.71	2.21	2	13
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CG	0.71	2.21	19	2
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CD1	0.71	2.74	10	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CD2	0.71	2.21	7	13
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CD	0.71	2.16	9	15
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CD	0.71	2.06	3	4
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:OE1	0.71	2.08	19	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HD2	0.71	1.63	14	3
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:OG	0.71	2.39	17	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD1	0.71	2.19	12	2
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.71	2.15	1	4
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:SD	0.71	2.25	9	4
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG2	0.71	1.61	20	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG21	0.71	2.21	3	18
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CG2	0.71	2.15	10	19
1:A:49:VAL:O	1:A:62:LYS:N	0.71	2.24	18	12
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:CD	0.71	2.39	5	2
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CE2	0.71	2.79	19	18
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:HB2	0.71	1.63	14	13
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:NZ	0.71	2.24	3	7
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD22	0.71	2.19	17	4
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:CD1	0.71	2.13	19	4
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.71	2.57	5	2
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE1	0.71	2.21	14	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CG	0.71	2.39	17	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:CE1	0.70	2.22	20	6
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG11	0.70	1.61	1	4
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:HA	0.70	1.86	10	19
1:A:75:ARG:CG	1:A:85:ASP:HA	0.70	2.16	2	7
1:A:98:GLY:O	1:A:100:GLY:N	0.70	2.24	9	7
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:CG	0.70	2.38	13	5
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:O	0.70	2.24	5	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:OG1	0.70	2.39	10	3
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD23	0.70	1.62	17	2
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:HB2	0.70	2.16	17	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CE2	0.70	2.21	2	3
1:A:77:TYR:HB2	1:A:81:LYS:O	0.70	1.86	12	4
1:A:64:TYR:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.70	2.21	3	3
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.39	20	6
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HG	0.70	1.42	9	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG1	0.70	2.16	13	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:O	0.70	2.24	19	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:CD2	0.70	2.44	12	2
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:N	0.70	2.24	13	14
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:NE2	0.70	2.00	9	10
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CD1	0.70	2.17	15	17
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CA	0.70	2.16	12	11
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CD1	0.70	2.56	13	3
1:A:14:LYS:HG3	1:A:15:SER:N	0.70	2.01	19	5
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.38	5	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:CD2	0.70	2.66	9	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG3	0.70	1.87	3	5
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:CB	0.70	2.16	20	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:CG2	0.70	2.17	5	9
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:HG2	0.70	1.86	17	20
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CG	0.70	2.16	3	11
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:OG	0.70	2.34	12	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD12	0.70	1.44	7	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CE2	0.70	2.73	10	2
1:A:51:THR:N	1:A:60:CYS:O	0.70	2.24	17	11
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CD1	0.70	2.22	16	20
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HB3	0.70	1.86	14	15
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CB	0.70	2.40	19	4
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:CG1	0.70	2.69	12	2
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:CG1	0.70	1.96	4	20
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:CG2	0.70	2.13	15	19
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HG12	0.70	2.21	5	6
1:A:110:CYS:SG	1:A:110:CYS:O	0.70	2.50	8	18
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HD11	0.70	1.64	4	8
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:HB	0.70	2.17	7	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:CD2	0.70	2.22	18	8
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:HD2	0.70	2.17	15	20
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CE	0.70	2.17	2	4
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG2	0.70	1.63	11	4
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:CE	0.70	2.17	15	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CD	0.70	2.39	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HE1	0.70	1.87	7	2
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CD	0.70	2.39	20	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CD	0.70	2.39	17	3
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE3	0.70	1.87	2	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:HB3	0.70	1.60	9	8
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HA	0.70	2.21	16	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD22	0.70	2.17	19	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.16	3	7
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CG2	0.70	2.40	10	4
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD1	0.70	2.17	4	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:OH	0.70	2.23	8	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CG	0.69	2.39	13	4
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HD12	0.69	1.86	10	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:107:TYR:CD2	0.69	2.22	15	2
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:O	0.69	2.40	12	9
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:HG23	0.69	2.17	1	5
1:A:75:ARG:N	1:A:84:PHE:O	0.69	2.25	5	5
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CB	0.69	2.40	4	4
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CD	0.69	2.40	16	4
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CZ2	0.69	2.80	11	19
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CB	0.69	2.17	4	13
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:HE2	0.69	2.06	6	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CG	0.69	2.70	9	11
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG22	0.69	1.64	11	5
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.69	2.22	3	4
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:CD1	0.69	2.74	20	4
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:O	0.69	2.40	14	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:O	0.69	1.87	14	2
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG23	0.69	1.64	8	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:CG1	0.69	2.69	13	7
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CG	0.69	2.75	15	10
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CD	0.69	2.39	17	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG12	0.69	2.17	7	19
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CG	0.69	2.21	9	7
1:A:45:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.69	2.23	17	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:51:THR:OG1	0.69	1.86	14	14
1:A:33:ALA:HA	1:A:107:TYR:O	0.69	1.88	6	16
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD1	0.69	2.40	1	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CG2	0.69	2.18	3	7
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:CG2	0.69	2.17	14	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG1	0.69	2.18	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:HE2	0.69	1.91	5	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB3	0.69	1.87	7	1
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB2	0.69	2.17	17	2
1:A:106:ARG:CZ	1:A:106:ARG:O	0.69	2.41	15	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HB3	0.69	2.17	20	3
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:CE1	0.69	2.23	14	7
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CZ	0.69	2.22	2	13
1:A:96:TYR:O	1:A:98:GLY:N	0.69	2.26	1	2
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:NZ	0.69	2.56	2	5
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:HB2	0.69	1.87	3	1
1:A:22:GLU:N	1:A:22:GLU:OE1	0.69	2.26	4	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:SD	0.69	2.27	16	3
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:CG2	0.69	2.18	14	2
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NH2	0.69	2.26	17	1
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG12	0.69	2.07	13	5
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:CD1	0.69	2.76	3	13
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CB	0.69	2.18	10	13
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CG1	0.69	2.18	6	15
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:NE2	0.69	2.02	4	4
1:A:70:ASN:HA	1:A:75:ARG:HG2	0.69	1.65	6	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:HG13	0.69	2.18	20	2
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:O	0.69	2.25	12	14
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG21	0.69	2.18	7	6
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.69	1.88	2	5
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.69	2.22	5	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HG	0.69	1.63	4	1
1:A:98:GLY:HA3	1:A:104:ARG:CB	0.69	2.18	20	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CD2	0.68	2.80	15	19
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:OG	0.68	2.41	18	4
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:HA2	0.68	1.47	8	2
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:NE2	0.68	2.26	7	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.18	9	14
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:HD1	0.68	1.87	2	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:HH2	0.68	1.43	11	8
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.76	4	7
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:CA	0.68	2.01	8	2
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:CG2	0.68	2.40	17	1
1:A:51:THR:O	1:A:52:LYS:C	0.68	2.30	4	20
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD13	0.68	2.03	18	3
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:HG12	0.68	1.65	17	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB3	0.68	1.87	19	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CG1	0.68	2.19	10	16
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:H	0.68	2.01	2	1
1:A:79:ALA:O	1:A:80:GLU:C	0.68	2.31	8	19
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ALA:H	0.68	1.48	7	4
1:A:51:THR:HG22	1:A:51:THR:O	0.68	1.87	16	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CD	0.68	2.18	4	14
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG13	0.68	1.66	10	18
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:HD12	0.68	1.88	12	16
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:HE2	0.68	2.07	4	3
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:CG2	0.68	2.62	3	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE2	0.68	1.88	19	4
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:CE	0.68	2.62	11	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NE	0.68	2.27	15	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HG	0.68	1.89	2	4
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NH1	0.68	2.27	16	2
1:A:67:LYS:C	1:A:68:GLU:OE1	0.68	2.32	9	6
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.24	12	4
1:A:74:LYS:HE3	1:A:74:LYS:N	0.68	2.02	8	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:NE2	0.68	2.27	12	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:CD2	0.68	2.19	12	15
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:CE1	0.68	2.23	7	2
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:94:HIS:CE1	0.68	2.05	2	2
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD11	0.68	2.23	8	7
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG3	0.68	1.66	15	7
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CB	0.68	2.18	3	5
1:A:39:SER:O	1:A:41:THR:N	0.68	2.27	5	2
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:O	0.68	2.26	16	4
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:CD1	0.68	2.62	3	16
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HA	0.68	1.66	14	20
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:CD1	0.68	2.76	19	1
1:A:95:GLN:N	1:A:105:LEU:HB2	0.68	2.04	15	20
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.18	9	4
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CD2	0.68	2.24	3	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CG	0.68	2.41	17	6
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:NH1	0.68	2.27	20	2
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:HG22	0.68	2.12	12	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE1	0.68	1.64	20	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.23	16	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HG3	0.68	2.19	17	8
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:12:TYR:HB2	0.68	2.24	6	8
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB2	0.68	1.64	20	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CG	0.68	2.24	17	2
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.57	18	2
1:A:62:LYS:HE2	1:A:64:TYR:CZ	0.68	2.23	16	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD2	0.68	2.19	17	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG1	0.67	2.19	1	3
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:N	0.67	2.27	14	1
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:CD1	0.67	2.00	19	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG11	0.67	1.63	10	3
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.67	2.20	12	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:O	0.67	2.26	14	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:CG2	0.67	2.20	3	10
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD21	0.67	2.10	2	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG13	0.67	1.64	6	4
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HG3	0.67	1.89	11	2
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE2	0.67	2.83	4	3
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CB	0.67	2.72	20	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CD2	0.67	2.24	20	1
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.67	2.05	16	10
1:A:37:ARG:N	1:A:46:THR:O	0.67	2.27	9	20
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:CG2	0.67	2.17	9	15
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NH1	0.67	2.28	1	5
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HB	0.67	1.88	7	10
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG22	0.67	1.65	9	2
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:NZ	0.67	2.27	14	3
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:HB2	0.67	1.88	2	13
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:O	0.67	2.42	10	4
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:82:TYR:HE1	0.67	1.31	17	4
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:CE	0.67	2.63	7	5
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CE2	0.67	2.77	12	5
1:A:74:LYS:CB	1:A:84:PHE:C	0.67	2.63	6	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:CD	0.67	2.70	18	20
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.67	2.40	5	6
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.67	2.43	12	20
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:O	0.67	2.11	6	13
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:CG2	0.67	2.19	6	5
1:A:69:THR:CG2	1:A:74:LYS:O	0.67	2.43	11	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:N	0.67	2.27	3	10
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:CA	0.67	2.58	6	5
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HD2	0.67	1.90	1	6
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD2	0.67	2.20	12	11
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CD2	0.67	2.48	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HA	0.67	2.24	4	5
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:HD12	0.67	1.50	4	5
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:NE2	0.67	2.58	4	3
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CD2	0.67	2.83	5	2
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:SG	0.67	2.52	19	1
1:A:34:PHE:CD1	1:A:35:MET:N	0.67	2.63	2	18
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:CD1	0.67	2.58	1	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:N	0.67	2.43	3	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:CG1	0.67	2.20	14	4
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HG21	0.66	1.68	4	18
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD3	0.66	1.90	18	17
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE1	0.66	2.07	12	3
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD2	0.66	2.39	2	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CE2	0.66	2.22	20	13
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:CA	0.66	2.58	5	6
1:A:104:ARG:O	1:A:105:LEU:C	0.66	2.33	5	10
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CZ	0.66	2.48	4	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD2	0.66	2.26	11	3
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:101:LEU:HD11	0.66	1.49	12	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HB3	0.66	2.04	20	2
1:A:12:TYR:CE1	1:A:14:LYS:HG3	0.66	2.25	20	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CD2	0.66	2.78	2	10
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HG2	0.66	1.66	1	10
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG13	0.66	1.65	13	13
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:CE	0.66	2.20	2	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HD12	0.66	2.24	4	2
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG2	0.66	1.90	7	3
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:CD1	0.66	2.64	17	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:N	0.66	2.51	5	5
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NH2	0.66	2.29	1	1
1:A:39:SER:OG	1:A:40:ARG:N	0.66	2.27	1	6
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CB	0.66	2.43	5	2
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG13	0.66	2.20	12	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD22	0.66	2.26	1	3
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:CE1	0.66	2.78	2	2
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:HG22	0.66	1.90	4	2
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CE	0.66	2.74	4	1
1:A:70:ASN:HA	1:A:75:ARG:CG	0.66	2.21	6	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:64:TYR:CE1	0.66	2.25	10	2
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:CD	0.66	2.58	16	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:70:ASN:N	0.66	2.27	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE1	0.66	1.91	7	5
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:CG2	0.66	2.20	8	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:CD	0.66	2.34	10	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:84:PHE:O	0.66	2.44	20	4
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HA	0.66	2.26	17	3
1:A:110:CYS:O	1:A:110:CYS:SG	0.66	2.54	11	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:O	0.66	2.13	15	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD2	0.66	2.73	8	14
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:CD2	0.66	2.69	20	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:N	0.66	2.28	12	11
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:HD12	0.66	2.09	18	14
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:ND2	0.66	2.64	3	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.66	2.20	6	2
1:A:18:ARG:NH1	1:A:19:ASP:OD2	0.66	2.29	10	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.19	12	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:GLU:OE1	0.66	2.13	20	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD12	0.66	2.21	17	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HB2	0.66	1.68	17	13
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD3	0.66	2.21	10	7
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD3	0.66	2.13	13	3
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB2	0.66	2.05	13	1
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:O	0.66	1.90	15	20
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG2	0.66	2.10	10	3
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CG	0.66	2.43	3	9
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:C	0.66	2.35	8	8
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:HB3	0.66	2.26	7	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:HB2	0.66	2.21	7	3
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:CG2	0.66	2.31	14	2
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HG	0.65	2.25	2	11
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:HG13	0.65	1.68	12	15
1:A:65:HIS:C	1:A:66:ILE:HD13	0.65	2.11	11	9
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:N	0.65	2.64	14	18
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:N	0.65	2.29	10	13
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HE2	0.65	2.20	5	2
1:A:74:LYS:HE3	1:A:74:LYS:H	0.65	1.50	8	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE1	0.65	2.21	20	3
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:HB	0.65	1.89	14	2
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:N	0.65	2.48	3	20
1:A:69:THR:HG22	1:A:75:ARG:O	0.65	1.91	5	8
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.59	14	4
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:N	0.65	2.44	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CG	0.65	2.34	14	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG13	0.65	2.22	1	1
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:CD1	0.65	2.70	3	17
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CG	0.65	2.20	9	7
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE1	0.65	2.07	19	5
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.65	2.26	7	6
1:A:53:ALA:N	1:A:60:CYS:SG	0.65	2.69	19	1
1:A:53:ALA:CA	1:A:60:CYS:SG	0.65	2.84	19	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:N	0.65	2.65	6	12
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:SD	0.65	2.75	3	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE3	0.65	2.21	14	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD1	0.65	2.21	12	3
1:A:69:THR:O	1:A:70:ASN:C	0.65	2.34	8	8
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:CG2	0.65	2.65	13	4
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:CD	0.65	2.21	1	5
1:A:11:TRP:CA	1:A:35:MET:HA	0.65	2.21	20	15
1:A:81:LYS:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.65	2.25	2	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:C	0.65	2.65	6	1
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CE	0.65	2.59	8	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:20:LYS:NZ	0.65	2.30	10	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.06	14	1
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:N	0.65	2.07	15	4
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:OE1	0.65	2.29	3	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:CD1	0.65	2.45	10	1
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:HE3	0.65	2.12	11	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:CE	0.65	2.22	3	2
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD1	0.65	2.27	12	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD2	0.65	2.21	6	3
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:NZ	0.65	2.07	2	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD11	0.65	1.92	12	5
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:CD	0.65	2.60	20	18
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CD1	0.65	2.27	9	2
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HG	0.65	1.69	14	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD13	0.65	2.27	17	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG2	0.64	1.92	16	16
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:N	0.64	2.65	14	17
1:A:51:THR:O	1:A:53:ALA:N	0.64	2.30	4	3
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:CB	0.64	2.21	5	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CE1	0.64	2.80	10	2
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD12	0.64	2.12	12	2
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:O	0.64	2.15	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:CE	0.64	2.22	18	4
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:CG1	0.64	2.22	8	4
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG23	0.64	1.92	5	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD1	0.64	2.45	3	4
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD2	0.64	2.70	16	7
1:A:30:LYS:O	1:A:52:LYS:CE	0.64	2.46	11	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:107:TYR:CE2	0.64	2.27	15	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HB	0.64	1.67	6	2
1:A:34:PHE:HZ	1:A:91:ILE:CD1	0.64	2.06	3	20
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:OE2	0.64	2.16	18	5
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CG1	0.64	2.74	17	3
1:A:12:TYR:CZ	1:A:14:LYS:HG3	0.64	2.27	20	2
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CG	0.64	2.23	7	9
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:C	0.64	2.35	7	8
1:A:74:LYS:HD3	1:A:74:LYS:N	0.64	2.08	7	3
1:A:14:LYS:CG	1:A:38:ASP:HB2	0.64	2.22	20	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:HD3	0.64	2.21	1	3
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CG	0.64	2.45	2	5
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:CZ	0.64	2.81	7	8
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.64	2.07	11	5
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HG3	0.64	2.22	20	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:HA3	0.64	2.08	12	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HG3	0.64	1.91	13	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG22	0.64	2.23	14	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD13	0.64	2.21	18	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HE2	0.64	2.05	19	4
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:O	0.64	2.16	8	7
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:CE1	0.64	2.86	18	8
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:OE2	0.64	2.16	7	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:83:VAL:HG11	0.64	1.67	17	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:45:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD13	0.64	1.51	17	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CG	0.64	2.76	17	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE2	0.64	1.53	18	5
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG13	0.64	2.23	17	6
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:HD3	0.64	2.23	12	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE2	0.64	2.26	14	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:HG23	0.64	1.93	13	10
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE3	0.64	2.08	3	4
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CD2	0.64	2.81	4	2
1:A:93:TYR:HH	1:A:94:HIS:CE1	0.64	2.09	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ARG:CD	1:A:104:ARG:O	0.64	2.46	9	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HG13	0.64	2.28	12	2
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:CD	0.64	2.67	14	1
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:HE1	0.64	1.76	8	4
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:CD2	0.63	2.46	17	5
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CG	0.63	2.23	9	14
1:A:97:ASN:ND2	1:A:98:GLY:N	0.63	2.46	3	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CG	0.63	2.28	11	5
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.63	2.22	15	5
1:A:70:ASN:CA	1:A:75:ARG:HG2	0.63	2.23	6	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:O	0.63	1.92	7	2
1:A:44:THR:CG2	1:A:66:ILE:O	0.63	2.46	14	3
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CG	0.63	2.86	5	2
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG3	0.63	2.28	18	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CD	0.63	2.76	14	4
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:N	0.63	2.09	11	20
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CE1	0.63	2.81	12	20
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:NE2	0.63	2.66	14	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HB	0.63	1.68	7	3
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CD2	0.63	2.80	8	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD12	0.63	2.28	10	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:CG2	0.63	2.75	14	1
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:H	0.63	1.96	17	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CG1	0.63	2.23	12	5
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:CG	0.63	2.47	1	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB2	0.63	1.93	8	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.63	2.75	15	4
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:C	0.63	2.36	14	8
1:A:28:THR:CB	1:A:109:VAL:CG2	0.63	2.77	17	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HB3	0.63	1.68	17	11
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:C	0.63	2.67	4	9
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:CD1	0.63	2.67	20	8
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD12	0.63	2.09	6	7
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:OH	0.63	2.51	14	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CE2	0.63	2.29	20	1
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:N	0.63	2.09	19	9
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:HD12	0.63	2.14	17	10
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:CE	0.63	2.24	5	3
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:CD	0.63	2.37	7	1
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:O	0.63	2.17	17	6
1:A:94:HIS:CG	1:A:105:LEU:HD23	0.63	2.28	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:C	0.63	2.36	5	5
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG2	0.63	1.93	4	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HB3	0.63	1.70	7	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:HG23	0.63	1.94	11	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD13	0.63	2.14	20	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD1	0.63	2.29	19	14
1:A:34:PHE:HA	1:A:48:SER:O	0.63	1.93	4	12
1:A:37:ARG:CZ	1:A:46:THR:HG21	0.63	2.23	12	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CB	0.62	2.46	14	10
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CB	0.62	2.81	14	11
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD22	0.62	2.07	9	5
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:C	0.62	2.37	9	2
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CD2	0.62	2.87	5	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:OG1	0.62	2.10	9	3
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:CA	0.62	2.23	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HG21	0.62	1.71	20	2
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG23	0.62	2.23	5	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG11	0.62	2.25	9	9
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:CG2	0.62	2.24	7	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CB	0.62	2.63	13	2
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HB	0.62	2.29	6	20
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:HG23	0.62	2.29	15	18
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:HD11	0.62	2.08	16	11
1:A:26:LEU:HG	1:A:61:ILE:CD1	0.62	2.24	7	5
1:A:61:ILE:HD13	1:A:61:ILE:N	0.62	2.09	4	4
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG1	0.62	2.36	1	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:HB3	0.62	2.22	19	5
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:N	0.62	2.31	12	4
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HG2	0.62	1.93	16	4
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE1	0.62	2.18	12	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HB3	0.62	2.24	9	12
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:N	0.62	2.32	4	6
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG23	0.62	2.08	3	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:74:LYS:O	0.62	2.17	4	2
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:OG1	0.62	1.93	9	3
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:101:LEU:CD1	0.62	2.07	12	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG23	0.62	1.94	10	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:OD1	0.62	2.32	19	1
1:A:34:PHE:CD2	1:A:95:GLN:NE2	0.62	2.68	20	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD2	0.62	2.24	2	11
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:NE2	0.62	2.08	4	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:HG21	1:A:66:ILE:O	0.62	1.95	14	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:HE1	0.62	2.15	7	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CD	0.62	2.47	7	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD11	0.62	2.29	8	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CD	0.62	2.24	14	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HD1	0.62	1.55	17	3
1:A:34:PHE:N	1:A:107:TYR:O	0.62	2.30	20	18
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CD1	0.62	2.30	17	8
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:ND2	0.62	2.09	1	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:61:ILE:HB	0.62	2.25	2	5
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:CA	0.62	2.82	9	13
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD13	0.62	2.15	19	6
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CA	0.62	2.48	4	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:CG	0.62	2.67	7	3
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CD	0.62	2.25	17	2
1:A:35:MET:HB3	1:A:109:VAL:O	0.62	1.95	9	1
1:A:35:MET:HB2	1:A:48:SER:OG	0.62	1.95	12	2
1:A:53:ALA:N	1:A:60:CYS:HG	0.62	1.91	19	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:CB	0.62	2.25	19	18
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CD1	0.62	2.47	13	9
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE2	0.62	2.29	2	8
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:O	0.62	1.94	9	6
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HD2	0.62	2.25	4	1
1:A:31:GLU:N	1:A:52:LYS:HE3	0.62	2.10	11	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HE1	0.62	1.93	18	12
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HB3	0.62	1.95	14	6
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.62	2.61	14	3
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:CD	0.62	2.15	17	4
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD22	0.62	1.95	12	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:O	0.62	2.18	20	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CB	0.61	2.83	18	20
1:A:34:PHE:CD2	1:A:108:PRO:HB3	0.61	2.30	6	16
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:HB	0.61	2.15	4	8
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CB	0.61	2.25	9	8
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:NZ	0.61	2.10	20	3
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:C	0.61	2.15	6	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:CB	0.61	2.24	6	1
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:HE3	0.61	2.25	18	3
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CE1	0.61	2.83	16	1
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:CE1	0.61	2.73	9	12
1:A:98:GLY:N	1:A:104:ARG:HD3	0.61	2.10	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:CG1	0.61	2.24	9	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CB	0.61	2.25	8	3
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:HG13	0.61	1.93	8	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:O	0.61	1.94	9	11
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CG2	0.61	2.08	4	17
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:N	0.61	2.10	9	20
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:OG1	0.61	2.16	2	3
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:HG2	0.61	1.95	17	9
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE2	0.61	2.88	19	2
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:HB2	0.61	1.71	15	7
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:CG2	0.61	2.83	19	17
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:C	0.61	2.38	6	6
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CA	0.61	2.83	3	6
1:A:11:TRP:CD1	1:A:95:GLN:NE2	0.61	2.69	5	2
1:A:18:ARG:CZ	1:A:19:ASP:OD2	0.61	2.48	10	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:CB	0.61	2.75	7	14
1:A:91:ILE:C	1:A:105:LEU:HD23	0.61	2.12	12	10
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG12	0.61	1.70	18	10
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CG	0.61	2.49	7	11
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CZ2	0.61	2.89	15	10
1:A:28:THR:CG2	1:A:29:GLY:N	0.61	2.63	6	10
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE3	0.61	2.10	9	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CE	0.61	2.49	20	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:O	0.61	2.39	6	11
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG13	0.61	1.72	19	14
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:HD1	0.61	1.98	11	11
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:HB2	0.61	1.73	5	19
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG3	0.61	1.96	20	12
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:O	0.61	2.18	17	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:CE1	0.61	2.30	5	3
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:CG2	0.61	2.25	14	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CE1	0.61	2.69	18	10
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:H	0.61	2.09	16	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HB3	0.61	1.96	4	4
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:O	0.61	1.95	12	4
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD13	0.61	2.11	5	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CZ	0.61	2.60	7	4
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:C	0.61	2.39	9	7
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE3	0.61	1.53	9	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:81:LYS:NZ	0.61	2.63	11	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:OH	0.61	1.96	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.61	2.34	5	18
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG21	0.61	2.29	2	6
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:CG1	0.61	2.82	8	20
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:H	0.61	1.55	12	13
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CB	0.61	2.26	20	14
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CD	0.61	2.26	9	6
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:N	0.61	2.64	2	1
1:A:74:LYS:O	1:A:75:ARG:HG3	0.61	1.95	9	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:31:GLU:O	0.60	2.49	1	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:108:PRO:O	0.60	2.19	16	3
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CD2	0.60	2.40	2	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HB2	0.60	1.96	20	6
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG2	0.60	1.96	18	5
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CZ	0.60	2.89	5	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:CG1	0.60	2.64	12	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:HG3	0.60	2.26	13	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:OD1	0.60	2.18	14	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:36:VAL:N	0.60	2.11	14	10
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CD1	0.60	2.80	14	9
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HA	0.60	1.95	9	12
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HB2	0.60	2.25	4	3
1:A:64:TYR:CB	1:A:78:VAL:HG21	0.60	2.21	8	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HD3	0.60	2.11	20	3
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG3	0.60	2.17	11	12
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:O	0.60	2.46	3	12
1:A:76:TYR:CE2	1:A:86:SER:HA	0.60	2.30	5	3
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:CG2	0.60	2.77	12	3
1:A:18:ARG:HG2	1:A:19:ASP:N	0.60	2.10	4	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:O	0.60	1.97	19	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CE	0.60	2.24	9	2
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:O	0.60	2.19	15	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CG1	0.60	2.79	12	2
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:CD	0.60	2.49	1	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD2	0.60	1.96	1	5
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HD3	0.60	1.72	4	3
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HD11	0.60	2.26	2	4
1:A:78:VAL:HG23	1:A:81:LYS:HE3	0.60	1.73	2	1
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG23	0.60	1.73	4	3
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:CG1	0.60	2.80	11	5
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CG2	0.60	2.74	14	1
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:ND1	0.60	2.55	11	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:C	0.60	2.40	14	8
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:N	0.60	2.63	5	2
1:A:103:THR:CB	1:A:106:ARG:HB2	0.60	2.27	15	2
1:A:88:PRO:C	1:A:92:GLN:CD	0.60	2.60	17	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:CZ	0.60	2.89	15	16
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD1	0.60	2.69	4	9
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HE2	0.60	1.93	19	5
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CD1	0.60	2.26	20	8
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:HD12	0.60	1.67	7	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE3	0.60	1.72	14	2
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:NZ	0.60	2.11	16	2
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD2	0.60	1.97	16	2
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:CG	0.60	2.50	13	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE2	0.60	2.11	1	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CE2	0.60	2.88	2	3
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:C	0.60	2.40	11	3
1:A:78:VAL:HG21	1:A:94:HIS:CE1	0.60	2.32	18	4
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:OE2	0.60	2.19	10	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HG3	0.60	1.95	12	6
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:H	0.60	2.00	4	20
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:HB	0.60	1.57	4	3
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:CE1	0.60	2.85	18	6
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD3	0.60	1.97	8	4
1:A:25:LEU:HG	1:A:35:MET:SD	0.60	2.36	9	1
1:A:78:VAL:C	1:A:81:LYS:HE2	0.60	2.17	13	1
1:A:103:THR:HG23	1:A:106:ARG:HG3	0.60	1.74	13	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HB2	0.60	1.96	3	6
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:C	0.60	2.40	17	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CB	0.60	2.50	9	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CG2	0.60	2.27	8	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG2	0.60	1.96	7	1
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:HG3	0.60	1.97	13	1
1:A:74:LYS:CD	1:A:83:VAL:HG23	0.60	2.26	14	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:CE1	0.59	2.85	11	11
1:A:67:LYS:NZ	1:A:67:LYS:HA	0.59	2.11	1	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HG	0.59	1.97	2	7
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HB2	0.59	2.27	16	4
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HD2	0.59	2.12	16	2
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HG21	0.59	1.72	5	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:CD2	0.59	2.85	18	3
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD2	0.59	2.26	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:H	0.59	2.01	15	13
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CB	0.59	2.85	18	11
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CD2	0.59	2.15	13	5
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:C	0.59	2.18	16	8
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HG	0.59	2.17	2	5
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:C	0.59	2.56	5	5
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HB	0.59	1.98	4	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:HA	0.59	1.73	6	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HG12	0.59	1.72	12	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:101:LEU:HD11	0.59	2.12	12	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HG13	0.59	2.32	18	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.59	2.13	15	4
1:A:49:VAL:HG23	1:A:49:VAL:O	0.59	1.97	12	5
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CE	0.59	2.27	15	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:CB	0.59	2.80	7	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CG	0.59	2.51	17	2
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HG23	0.59	1.98	18	1
1:A:64:TYR:HH	1:A:101:LEU:HB3	0.59	1.57	1	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:O	0.59	2.21	2	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HB	0.59	1.73	3	4
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HE2	0.59	1.73	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:CB	0.59	2.27	12	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:HD3	0.59	1.98	20	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:CE	0.59	2.09	1	5
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HG13	0.59	2.18	17	3
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB3	0.59	1.74	4	11
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CE1	0.59	2.33	9	2
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:HG13	0.59	1.97	11	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:HE2	0.59	1.54	17	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:104:ARG:HA	0.59	2.28	19	1
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:CG	0.59	2.40	6	3
1:A:6:LEU:CD2	1:A:88:PRO:HD3	0.59	2.22	10	4
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:CG1	0.59	2.51	13	4
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:C	0.59	2.18	10	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG2	0.59	2.28	18	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:91:ILE:HD12	0.59	2.32	19	18
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:HD2	0.59	1.97	5	6
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CE1	0.59	2.32	5	2
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HD2	0.59	1.98	14	2
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE2	0.59	1.75	19	7
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD12	0.59	2.18	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG12	0.59	1.72	19	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CD1	0.59	2.85	20	3
1:A:70:ASN:N	1:A:75:ARG:HG2	0.59	2.13	6	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:CB	0.59	2.28	8	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:82:TYR:HE1	0.59	1.40	16	2
1:A:74:LYS:HA	1:A:83:VAL:O	0.59	1.97	11	3
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:O	0.59	1.97	14	10
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:C	0.59	2.01	6	2
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CD1	0.59	2.76	5	2
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HB	0.58	2.33	1	18
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:CB	0.58	2.51	4	17
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:OG1	0.58	2.21	19	8
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HB2	0.58	2.28	20	2
1:A:18:ARG:HB3	1:A:37:ARG:NH2	0.58	2.13	12	4
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HD1	0.58	2.03	8	3
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:OH	0.58	1.98	11	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CE1	0.58	2.32	16	2
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:OG1	0.58	2.21	4	12
1:A:94:HIS:C	1:A:105:LEU:HB2	0.58	2.19	15	15
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:NH1	0.58	2.56	5	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD2	0.58	1.96	16	4
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HA	0.58	2.33	18	6
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.58	2.92	13	3
1:A:11:TRP:CB	1:A:35:MET:HA	0.58	2.28	9	7
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:CE1	0.58	2.85	20	5
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:CB	0.58	2.28	5	15
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CD1	0.58	2.33	19	7
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HD23	0.58	1.75	3	3
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HB3	0.58	1.98	5	5
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD3	0.58	1.98	6	4
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:CG1	0.58	2.82	13	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD23	0.58	1.97	19	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG2	0.58	2.32	15	7
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:C	0.58	2.42	10	8
1:A:11:TRP:HB2	1:A:35:MET:HA	0.58	1.74	9	6
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:N	0.58	2.66	3	3
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:O	0.58	2.20	13	2
1:A:29:GLY:HA3	1:A:52:LYS:NZ	0.58	2.13	15	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE2	0.58	1.98	20	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:HB	0.58	2.28	16	20
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:OH	0.58	1.99	13	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CD1	0.58	2.86	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:C	0.58	2.18	8	3
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:HB	0.58	2.38	9	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HZ3	0.58	2.11	16	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CB	0.58	2.12	20	2
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HB3	0.58	1.97	1	2
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CB	0.58	2.29	14	12
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:CE	0.58	2.11	13	5
1:A:48:SER:HG	1:A:63:HIS:CE1	0.58	2.16	11	1
1:A:74:LYS:HG3	1:A:83:VAL:O	0.58	1.98	1	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CD	0.58	2.50	2	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:OG	0.58	2.21	2	3
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG12	0.58	1.75	13	1
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE2	0.58	2.17	14	3
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:CD1	0.58	2.52	16	1
1:A:14:LYS:NZ	1:A:38:ASP:CG	0.58	2.57	20	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.58	2.87	9	10
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:CA	0.58	2.67	4	18
1:A:30:LYS:O	1:A:51:THR:HA	0.58	1.98	5	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.58	2.77	6	2
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:N	0.58	2.37	9	4
1:A:11:TRP:HA	1:A:109:VAL:O	0.58	1.99	12	4
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:CD	0.58	2.51	15	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:HG21	0.57	1.75	4	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE3	0.57	2.29	4	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:108:PRO:HB3	0.57	2.34	4	15
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG13	0.57	2.29	16	2
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:HG21	0.57	1.98	10	8
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:SD	0.57	2.92	6	3
1:A:22:GLU:CA	1:A:61:ILE:HG21	0.57	2.19	19	2
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:N	0.57	2.67	11	1
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HG	0.57	1.99	12	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HB3	0.57	2.29	20	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD2	0.57	1.75	20	9
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:CA	0.57	2.51	4	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CD	0.57	2.28	4	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:NE2	0.57	2.67	12	5
1:A:75:ARG:HG2	1:A:84:PHE:O	0.57	1.99	5	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:NE2	0.57	2.14	7	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:HA2	0.57	1.58	17	2
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD1	0.57	2.11	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.17	13	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:CG1	0.57	2.29	17	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:HB	0.57	1.75	3	20
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:HA	0.57	1.99	3	5
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:O	0.57	2.57	6	4
1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:HE2	0.57	2.28	8	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG12	0.57	2.29	13	2
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:C	0.57	2.41	13	3
1:A:67:LYS:HB2	1:A:67:LYS:NZ	0.57	2.14	14	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:100:GLY:N	0.57	2.14	16	1
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:C	0.57	2.42	17	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG13	0.57	1.98	4	4
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CE	0.57	2.29	4	1
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD12	0.57	2.14	15	4
1:A:104:ARG:NH1	1:A:106:ARG:HA	0.57	2.14	12	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:HA2	0.57	2.14	17	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:HG23	0.57	1.76	19	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:CB	0.57	2.88	6	18
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CB	0.57	2.87	1	18
1:A:45:TYR:C	1:A:66:ILE:HG12	0.57	2.20	7	8
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HD1	0.57	1.58	9	13
1:A:23:LYS:HD2	1:A:24:LEU:N	0.57	2.14	7	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:93:TYR:HH	0.57	1.41	13	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD23	0.57	1.99	2	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CG	0.57	2.30	3	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:85:ASP:HA	0.57	1.75	3	3
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HG2	0.57	2.34	8	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:83:VAL:HG11	0.57	1.77	2	2
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:CG	0.57	2.73	10	2
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:HD2	0.57	1.99	3	3
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:N	0.57	2.60	10	6
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CE1	0.57	2.57	5	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:CD2	0.57	2.83	19	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG11	0.57	2.28	2	3
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.57	2.88	3	4
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:HB2	0.57	2.00	4	1
1:A:10:GLU:CA	1:A:110:CYS:HB3	0.57	2.29	19	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA2	0.57	1.75	1	1
1:A:87:ILE:C	1:A:91:ILE:HG12	0.57	2.19	17	18
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:CD2	0.57	2.83	12	11
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CB	0.57	2.52	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:CD1	1:A:45:TYR:CD2	0.57	2.80	16	6
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HD2	0.57	2.00	7	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:CA	0.57	2.53	20	5
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CE2	0.56	2.88	2	9
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HB	0.56	1.77	12	13
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:NZ	0.56	2.68	2	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:CE1	0.56	2.93	2	2
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:CD1	0.56	2.83	3	2
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CE2	0.56	2.18	19	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:HG12	0.56	2.31	11	13
1:A:70:ASN:CG	1:A:70:ASN:O	0.56	2.43	2	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.00	5	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG12	0.56	1.77	6	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CB	0.56	2.87	7	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CG	0.56	2.87	7	2
1:A:95:GLN:OE1	1:A:108:PRO:HD3	0.56	2.00	14	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:CD2	0.56	2.30	19	1
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:HB3	0.56	2.15	1	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:CA	0.56	2.52	10	19
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HG3	0.56	2.16	2	8
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CG2	0.56	2.54	6	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD3	0.56	2.00	12	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CB	0.56	2.88	7	5
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CB	0.56	2.53	3	5
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:O	0.56	2.22	4	2
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HG3	0.56	1.77	5	2
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:C	0.56	2.21	6	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HB2	0.56	1.99	9	1
1:A:86:SER:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.56	2.31	20	6
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:CD	0.56	2.30	12	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG12	0.56	2.30	14	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD13	0.56	2.30	16	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CZ	0.56	2.35	19	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:HE1	0.56	1.61	1	20
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HB	0.56	2.00	6	1
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG3	0.56	2.19	7	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:50:PHE:CE1	0.56	2.36	8	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.01	19	4
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CE1	0.56	2.35	1	9
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:HG21	0.56	1.77	6	4
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG13	0.56	1.76	8	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ARG:CG	1:A:41:THR:N	0.56	2.68	4	1
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:CG2	0.56	2.61	8	1
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:CD	0.56	2.44	12	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HG	0.56	2.34	9	2
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CD2	0.56	2.16	10	2
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:HB3	0.56	1.77	19	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:CE	0.56	2.54	14	1
1:A:10:GLU:O	1:A:10:GLU:HG3	0.56	2.00	12	13
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:C	0.56	2.20	1	2
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:HD3	0.56	2.00	15	3
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA3	0.56	1.77	3	2
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:HG12	0.56	1.78	14	3
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:N	0.56	2.38	19	2
1:A:98:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HB3	0.56	1.77	20	2
1:A:7:GLU:CG	1:A:14:LYS:HE2	0.56	2.30	5	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:OE1	0.56	2.00	12	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG13	0.56	2.15	12	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD2	0.56	2.74	16	1
1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:O	0.56	2.54	18	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HG	0.56	2.31	13	11
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG3	0.56	2.01	5	5
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG12	0.56	1.77	17	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CD2	0.56	2.72	20	2
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:HB	0.56	1.77	7	1
1:A:69:THR:O	1:A:74:LYS:O	0.56	2.23	8	1
1:A:70:ASN:O	1:A:70:ASN:ND2	0.56	2.37	9	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD1	0.56	2.54	14	3
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:NE2	0.56	2.39	4	3
1:A:85:ASP:OD1	1:A:89:LEU:HD11	0.56	2.01	4	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:CB	0.56	2.83	7	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:CE	0.56	2.30	11	1
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HE3	0.56	2.01	14	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD12	0.56	2.30	13	11
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HB3	0.56	2.01	4	3
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:C	0.56	2.03	18	3
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:H	0.56	2.14	11	2
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:CG1	0.56	2.31	8	2
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:CD1	0.56	2.53	12	3
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:HA	0.56	2.16	13	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:CG	0.56	2.30	17	1
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HZ3	0.55	1.99	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CE1	0.55	2.36	6	8
1:A:35:MET:HG2	1:A:36:VAL:H	0.55	1.61	14	3
1:A:52:LYS:HB2	1:A:52:LYS:NZ	0.55	2.16	17	1
1:A:52:LYS:O	1:A:53:ALA:HB2	0.55	2.02	1	5
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:C	0.55	2.44	9	2
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:CB	0.55	2.31	7	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD11	0.55	2.36	10	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:CG	0.55	2.54	11	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:HB3	0.55	2.21	20	1
1:A:7:GLU:HB2	1:A:14:LYS:HD3	0.55	1.79	1	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:CG1	0.55	2.85	19	10
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:CB	0.55	2.31	3	5
1:A:49:VAL:CG2	1:A:49:VAL:O	0.55	2.53	9	9
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD1	0.55	1.59	11	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:74:LYS:CA	0.55	2.84	8	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:ALA:H	0.55	1.54	9	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:99:GLY:HA2	0.55	2.37	11	2
1:A:20:LYS:HD2	1:A:20:LYS:C	0.55	2.22	18	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:OH	0.55	2.01	20	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD3	0.55	1.76	5	6
1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:CE	0.55	2.13	8	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CZ3	0.55	2.90	11	3
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CD1	0.55	2.52	3	2
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:CE1	0.55	2.59	11	2
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:HG22	0.55	2.02	10	5
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD11	0.55	2.36	10	1
1:A:30:LYS:O	1:A:52:LYS:NZ	0.55	2.39	11	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:HD11	0.55	2.12	20	1
1:A:8:THR:HG23	1:A:9:TYR:CE1	0.55	2.37	3	2
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:HB3	0.55	1.61	8	6
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CD2	0.55	2.18	18	5
1:A:67:LYS:C	1:A:68:GLU:CD	0.55	2.65	7	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:CG1	0.55	2.94	9	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HA	0.55	2.02	11	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD2	0.55	1.58	14	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CD	0.55	2.55	18	1
1:A:23:LYS:CG	1:A:24:LEU:N	0.55	2.69	3	10
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD12	0.55	2.31	3	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.55	2.70	5	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HB2	0.55	2.01	15	3
1:A:78:VAL:HG22	1:A:81:LYS:HZ1	0.55	1.61	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:GLY:HA2	1:A:51:THR:HG1	0.55	1.61	12	6
1:A:34:PHE:HZ	1:A:36:VAL:CG2	0.55	2.13	6	18
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HG3	0.55	2.17	8	4
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:O	0.55	2.02	3	7
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:CB	0.55	2.82	7	9
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:HD11	0.55	1.62	3	2
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:HD13	0.55	2.16	3	7
1:A:11:TRP:N	1:A:108:PRO:HB2	0.55	2.16	7	4
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:OD1	0.55	2.01	8	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD3	0.55	2.02	16	4
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG13	0.55	2.31	18	7
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD1	0.55	1.79	1	4
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:HG2	0.55	2.01	14	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HG21	0.55	2.32	5	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:90:LEU:HD13	0.55	1.75	10	3
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:HE2	0.55	1.79	11	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:HG12	0.55	1.79	12	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG13	0.55	1.78	16	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:CA	0.55	2.31	18	1
1:A:85:ASP:C	1:A:86:SER:OG	0.55	2.45	2	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:84:PHE:O	0.55	2.01	19	5
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:HE2	0.55	2.22	9	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:109:VAL:HG11	0.55	1.78	20	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:OD2	0.54	2.25	1	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:OE1	0.54	2.25	1	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:35:MET:O	0.54	2.61	12	9
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HD2	0.54	1.79	1	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE1	0.54	2.31	1	6
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:O	0.54	2.02	19	3
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:CD1	0.54	2.31	3	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CG	0.54	2.20	11	15
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HB3	0.54	2.23	5	2
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CG	0.54	2.56	12	1
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:CG2	0.54	2.85	13	1
1:A:53:ALA:C	1:A:60:CYS:SG	0.54	2.85	19	1
1:A:14:LYS:CG	1:A:38:ASP:CB	0.54	2.83	20	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HG2	0.54	2.03	3	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE3	0.54	1.78	6	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:NE2	0.54	2.70	18	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HB2	0.54	2.03	18	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB3	0.54	1.79	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HD2	0.54	2.23	7	5
1:A:37:ARG:CG	1:A:37:ARG:HH11	0.54	2.14	8	7
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HD3	0.54	1.79	18	4
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HD3	0.54	2.02	7	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CD1	0.54	2.37	14	1
1:A:45:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CD1	0.54	2.14	17	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:CG2	0.54	2.33	19	1
1:A:14:LYS:CE	1:A:38:ASP:HB2	0.54	2.33	20	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HB2	0.54	2.03	5	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD1	0.54	2.90	8	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:93:TYR:OH	0.54	2.02	12	1
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:NE2	0.54	2.00	14	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:O	0.54	2.02	3	4
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:HD3	0.54	2.23	14	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HG2	0.54	2.02	17	1
1:A:34:PHE:C	1:A:108:PRO:HA	0.54	2.23	6	8
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:OH	0.54	2.02	7	5
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:CB	0.54	2.55	3	2
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HB2	0.54	1.79	4	5
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HB	0.54	2.02	6	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HG23	0.54	1.75	14	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HD3	0.54	2.02	17	1
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:N	0.54	2.62	17	15
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:NZ	0.54	2.17	1	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CD1	0.54	2.37	2	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HB	0.54	2.30	3	7
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD3	0.54	1.79	10	5
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ALA:N	0.54	2.16	10	4
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HD2	0.54	1.79	20	3
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:HE2	0.54	2.10	11	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:HA	0.54	1.78	19	1
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:N	0.54	2.60	3	10
1:A:34:PHE:HZ	1:A:91:ILE:HD12	0.54	1.51	2	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:HB2	0.54	2.02	17	5
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:HA	0.54	1.79	8	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CE2	0.54	2.61	17	2
1:A:44:THR:HA	1:A:68:GLU:OE2	0.54	2.03	20	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.54	2.76	3	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CE1	0.54	2.13	4	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:CD	0.54	2.61	7	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD2	0.54	2.56	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:HB2	0.54	2.02	15	1
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:HA	0.53	2.04	6	3
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG21	0.53	2.33	12	1
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:N	0.53	2.60	5	18
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:HE2	0.53	2.17	4	6
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG23	0.53	2.32	5	1
1:A:86:SER:HG	1:A:88:PRO:HG2	0.53	1.61	6	1
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD2	0.53	1.86	14	5
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:HG21	0.53	1.72	12	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:OG1	0.53	2.04	11	12
1:A:39:SER:C	1:A:40:ARG:HG2	0.53	2.23	1	1
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD11	0.53	2.33	2	4
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CZ	0.53	2.97	2	2
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:HE1	0.53	2.22	2	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HB	0.53	1.80	17	7
1:A:67:LYS:CA	1:A:67:LYS:HE3	0.53	2.34	7	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HG	0.53	2.33	13	1
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CZ	0.53	2.39	3	2
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CB	0.53	2.33	18	2
1:A:28:THR:HG23	1:A:29:GLY:N	0.53	2.17	12	4
1:A:69:THR:HG23	1:A:69:THR:O	0.53	2.02	8	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:O	0.53	2.03	11	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HG12	0.53	1.80	18	2
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HB2	0.53	2.23	17	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG21	0.53	1.78	1	2
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:HA3	0.53	1.80	14	4
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:C	0.53	2.07	4	4
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE2	0.53	1.79	3	4
1:A:37:ARG:HG2	1:A:37:ARG:HH11	0.53	1.64	8	5
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA2	0.53	2.04	4	2
1:A:39:SER:C	1:A:41:THR:N	0.53	2.61	5	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:HE1	0.53	1.59	13	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:23:LYS:C	0.53	2.24	19	1
1:A:11:TRP:C	1:A:35:MET:HA	0.53	2.24	17	8
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:CG	0.53	2.16	14	3
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HG	0.53	1.81	17	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:C	0.53	2.47	4	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CA	0.53	2.90	15	6
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:O	0.53	2.57	12	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:23:LYS:CE	0.53	2.33	18	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:HA2	0.53	2.19	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:CD2	0.53	2.86	8	11
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HB	0.53	2.04	2	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HD12	0.53	2.31	4	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:108:PRO:HG2	0.53	2.03	10	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:46:THR:HG21	0.53	1.63	20	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CE1	0.53	2.39	11	7
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:HE1	0.53	2.16	12	2
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CZ	0.53	2.82	3	2
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:CD1	0.53	2.17	13	9
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CG	0.53	2.57	5	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HD2	0.53	2.04	6	2
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HE2	0.53	1.81	7	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:HA	0.53	2.18	8	4
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:H	0.53	2.15	12	6
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:HG2	0.53	2.25	20	3
1:A:104:ARG:HD2	1:A:104:ARG:C	0.53	2.24	12	2
1:A:32:GLY:O	1:A:106:ARG:HB2	0.53	2.04	13	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CG	0.53	2.34	17	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:HB2	0.53	1.82	17	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HG3	0.52	1.63	3	3
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:HD3	0.52	1.65	14	2
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG2	0.52	2.04	20	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:108:PRO:HD3	0.52	2.24	20	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:OG	0.52	2.03	15	4
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HE3	0.52	1.81	4	1
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:ND2	0.52	2.62	7	1
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:C	0.52	2.78	8	1
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:HG	0.52	2.16	9	2
1:A:53:ALA:O	1:A:60:CYS:HB2	0.52	2.05	11	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:HH	0.52	1.63	11	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:HA2	0.52	2.38	17	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HG13	0.52	1.80	2	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CD2	0.52	2.35	20	6
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE2	0.52	2.22	19	2
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CG	0.52	2.16	15	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:O	0.52	2.03	14	1
1:A:20:LYS:H	1:A:20:LYS:CD	0.52	2.16	14	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:19:ASP:N	0.52	2.71	16	1
1:A:89:LEU:O	1:A:92:GLN:HG2	0.52	2.05	17	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:CD	0.52	2.87	1	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:HZ	0.52	2.18	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD2	0.52	2.04	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HB2	0.52	1.80	5	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HG	0.52	1.82	13	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ARG:N	0.52	2.43	7	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG12	0.52	1.80	8	2
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:CG2	0.52	2.30	8	1
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:HB3	0.52	2.05	8	2
1:A:26:LEU:N	1:A:61:ILE:HD11	0.52	2.19	15	2
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:HD2	0.52	2.05	14	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:OG1	0.52	2.28	18	2
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:ND2	0.52	2.72	1	1
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HA	0.52	2.04	3	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:H	0.52	2.18	7	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:34:PHE:CZ	0.52	2.98	15	4
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:OD1	0.52	2.27	10	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD3	0.52	2.34	10	1
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:CG2	0.52	2.58	16	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:HG11	0.52	1.82	19	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:H	0.52	2.22	20	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HG21	0.52	2.34	12	8
1:A:94:HIS:HA	1:A:98:GLY:O	0.52	2.04	4	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:51:THR:HG23	0.52	1.79	7	2
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:C	0.52	2.48	10	2
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HD3	0.52	1.82	12	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:CZ	0.52	2.58	17	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG2	0.52	2.02	1	3
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:HB3	0.52	2.05	2	1
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:HG11	0.52	1.82	8	5
1:A:65:HIS:N	1:A:78:VAL:HG22	0.52	2.19	3	2
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:CA	0.52	2.35	6	1
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG23	0.52	2.25	10	2
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:CB	0.52	2.58	14	2
1:A:67:LYS:HG3	1:A:68:GLU:N	0.52	2.19	15	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CB	0.52	2.33	19	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CE2	0.52	2.93	20	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CG	0.52	2.58	20	1
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:HA	0.52	1.82	15	4
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CG	0.52	2.35	4	3
1:A:93:TYR:CE1	1:A:94:HIS:ND1	0.52	2.78	4	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG3	0.52	2.04	13	5
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CE1	0.52	2.40	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE1	0.52	2.40	12	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:19:ASP:N	0.52	2.18	15	2
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:HB3	0.52	2.05	18	1
1:A:83:VAL:O	1:A:84:PHE:CG	0.52	2.63	14	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HG13	0.52	1.80	18	2
1:A:67:LYS:CA	1:A:67:LYS:HE2	0.52	2.34	2	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:SER:N	0.51	2.72	11	8
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.51	2.35	7	4
1:A:94:HIS:O	1:A:98:GLY:HA2	0.51	2.04	4	1
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:HD13	0.51	1.64	13	5
1:A:30:LYS:N	1:A:52:LYS:HD3	0.51	2.20	6	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:C	0.51	2.25	7	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE1	0.51	1.65	10	2
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:OG1	0.51	2.03	10	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:CE1	0.51	2.40	11	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:CD	0.51	2.87	12	1
1:A:52:LYS:HD2	1:A:52:LYS:O	0.51	2.05	13	1
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:CG1	0.51	2.79	17	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:NE2	0.51	2.20	18	1
1:A:67:LYS:CE	1:A:67:LYS:CA	0.51	2.87	18	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE2	0.51	2.02	2	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.51	2.93	13	8
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:HA	0.51	1.82	7	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HB	0.51	1.83	18	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HB	0.51	2.05	4	3
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:CD1	0.51	2.92	20	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CD1	0.51	2.94	15	5
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CZ	0.51	2.40	7	3
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG2	0.51	2.35	9	8
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CE1	0.51	2.64	9	4
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:CD1	0.51	2.40	16	1
1:A:85:ASP:H	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.16	1	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HZ2	0.51	2.17	2	1
1:A:37:ARG:HG3	1:A:37:ARG:HH11	0.51	1.66	15	5
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.51	1.81	5	5
1:A:25:LEU:HD13	1:A:50:PHE:HB3	0.51	1.81	6	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:77:TYR:O	0.51	2.05	13	1
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:CD2	0.51	2.93	17	2
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:H	0.51	2.07	6	7
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:O	0.51	2.06	1	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD11	0.51	1.81	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:HD1	0.51	1.64	2	1
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:CG2	0.51	2.79	7	5
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CE2	0.51	2.39	8	1
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:CG	0.51	2.58	17	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG3	0.51	2.05	18	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CG	0.51	2.37	19	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG1	0.51	2.59	19	2
1:A:75:ARG:NH1	1:A:76:TYR:CE1	0.51	2.79	19	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:CG1	0.51	2.88	20	3
1:A:49:VAL:N	1:A:62:LYS:O	0.51	2.38	18	4
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.51	2.34	5	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CG	0.51	2.36	9	3
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ALA:C	0.51	2.49	5	5
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:CB	0.51	2.17	2	3
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG12	0.51	2.26	4	1
1:A:40:ARG:HG3	1:A:41:THR:N	0.51	2.21	4	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG23	0.51	2.36	6	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:CB	0.51	2.33	9	2
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CD1	0.51	2.99	9	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:HG23	0.51	1.81	5	3
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:N	0.51	2.63	4	20
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:HE2	0.51	2.36	3	3
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:HD3	0.51	1.82	5	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:NH1	0.51	2.59	5	1
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.79	5	5
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HG21	0.51	1.83	8	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.51	2.95	8	2
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:CG1	0.51	2.92	8	4
1:A:74:LYS:N	1:A:83:VAL:HG23	0.51	2.21	6	1
1:A:74:LYS:H	1:A:83:VAL:CG2	0.51	2.18	14	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:O	0.51	2.06	15	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:CB	0.50	2.36	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:C	0.50	2.71	12	2
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:HG	0.50	1.65	19	1
1:A:35:MET:CG	1:A:36:VAL:N	0.50	2.73	5	11
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:H	0.50	2.18	19	5
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CA	0.50	2.19	6	1
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:CD	0.50	2.75	10	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:81:LYS:HZ3	0.50	1.67	11	1
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:HB2	0.50	1.82	20	2
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:ASP:OD1	0.50	2.05	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG23	0.50	2.22	13	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.50	2.36	20	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HA	0.50	2.36	2	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:85:ASP:HA	0.50	1.82	2	1
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:CB	0.50	2.36	10	5
1:A:35:MET:C	1:A:48:SER:H	0.50	2.10	12	11
1:A:86:SER:C	1:A:88:PRO:HD2	0.50	2.26	7	6
1:A:31:GLU:OE2	1:A:51:THR:HG23	0.50	2.07	7	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HG	0.50	2.40	7	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:C	0.50	2.65	16	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:HB3	0.50	1.82	18	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:HD1	0.50	2.18	2	1
1:A:20:LYS:C	1:A:20:LYS:CD	0.50	2.79	12	2
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:HD12	0.50	1.82	13	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG2	0.50	2.25	18	1
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:CB	0.50	2.20	8	15
1:A:36:VAL:HA	1:A:47:VAL:HA	0.50	1.84	10	18
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:CA	0.50	2.18	8	8
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:HB2	0.50	1.83	6	1
1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:HD2	0.50	2.22	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:N	0.50	2.37	12	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:CG2	0.50	2.59	14	3
1:A:74:LYS:H	1:A:83:VAL:HG21	0.50	1.66	14	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.50	2.64	14	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:HA	0.50	2.05	20	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CG	0.50	2.89	6	3
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE2	0.50	1.83	15	2
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:109:VAL:HG13	0.50	1.65	12	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG12	0.50	2.36	13	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HB2	0.50	2.07	20	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HB3	0.50	1.84	19	1
1:A:33:ALA:O	1:A:50:PHE:N	0.50	2.44	3	12
1:A:106:ARG:HD3	1:A:106:ARG:C	0.50	2.27	18	3
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:O	0.50	2.29	15	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:OD1	0.50	2.30	14	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:HA2	0.50	1.84	16	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HB2	0.50	1.84	20	1
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:HB3	0.50	1.83	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CE1	0.50	2.89	10	8
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CE1	0.50	2.42	2	1
1:A:7:GLU:OE2	1:A:14:LYS:HE2	0.50	2.07	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:OD1	0.50	2.49	11	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HB	0.50	1.83	12	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:H	0.50	2.17	13	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:HA3	0.50	2.37	14	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HG	0.50	2.36	17	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:HG3	0.50	2.07	18	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:N	0.49	2.17	2	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HB2	0.49	2.37	3	2
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:CG1	0.49	2.90	3	2
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG11	0.49	2.37	6	2
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HG	0.49	2.43	6	2
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB3	0.49	2.22	7	2
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:CA	0.49	2.20	18	3
1:A:7:GLU:O	1:A:9:TYR:N	0.49	2.44	12	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:23:LYS:HE3	0.49	1.83	18	2
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:CE	0.49	2.75	3	4
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HG2	0.49	1.83	1	8
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:HE1	0.49	2.01	2	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:N	0.49	2.59	10	3
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.49	2.85	3	5
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HD2	0.49	1.83	4	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CG	0.49	2.73	8	5
1:A:81:LYS:CE	1:A:99:GLY:O	0.49	2.60	5	1
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:H	0.49	2.19	11	1
1:A:20:LYS:HG2	1:A:23:LYS:HE2	0.49	1.84	18	1
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:O	0.49	2.61	15	11
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CB	0.49	2.37	8	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:CD	0.49	2.60	7	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:ASP:CG	0.49	2.27	10	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CE1	0.49	2.42	10	2
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:OD1	0.49	2.08	3	2
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG3	0.49	2.27	5	1
1:A:9:TYR:O	1:A:12:TYR:N	0.49	2.46	14	7
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CG	0.49	2.65	1	1
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HG2	0.49	2.28	1	1
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:HD11	0.49	1.82	3	3
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CB	0.49	2.60	4	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:CD2	0.49	2.43	7	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:HA	0.49	1.83	9	2
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CG1	0.49	2.96	19	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CE2	0.49	2.42	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:O	0.49	2.06	2	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CE2	0.49	2.25	2	3
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HG	0.49	2.37	14	2
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CE2	0.49	3.01	14	2
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:OH	0.49	2.58	14	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:H	0.49	2.20	14	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.49	2.22	18	1
1:A:31:GLU:OE1	1:A:31:GLU:N	0.49	2.46	1	1
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:H	0.49	2.11	11	11
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:HE1	0.49	2.20	20	4
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:CZ	0.49	2.75	10	1
1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:ND2	0.49	2.61	16	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:93:TYR:CE1	0.49	3.01	8	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CG1	0.49	2.38	12	1
1:A:97:ASN:O	1:A:98:GLY:C	0.49	2.49	17	1
1:A:39:SER:OG	1:A:41:THR:HB	0.49	2.08	18	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HG2	0.49	1.84	13	5
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:HB3	0.49	1.84	20	3
1:A:81:LYS:HE3	1:A:94:HIS:CE1	0.49	2.43	12	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:HE1	0.49	1.68	17	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:12:TYR:CB	0.49	2.37	20	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:CG2	0.49	2.29	15	3
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE2	0.49	1.84	4	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HD2	0.49	1.83	13	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD22	0.49	1.84	17	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CD1	0.49	2.90	8	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:HB3	0.49	2.23	11	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CD2	0.49	2.96	20	2
1:A:6:LEU:CD2	1:A:45:TYR:CE2	0.49	2.87	17	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:40:ARG:HG2	0.49	2.08	18	1
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:ND1	0.48	2.23	9	10
1:A:86:SER:HG	1:A:88:PRO:CG	0.48	2.21	6	2
1:A:45:TYR:CD1	1:A:45:TYR:N	0.48	2.80	2	8
1:A:82:TYR:CZ	1:A:99:GLY:HA2	0.48	2.43	2	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:CE	0.48	2.61	9	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:81:LYS:NZ	0.48	2.22	13	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:63:HIS:CD2	0.48	2.43	15	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:N	0.48	2.76	2	4
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:HG11	0.48	2.38	3	2
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD12	0.48	2.44	17	2
1:A:52:LYS:HB2	1:A:52:LYS:HZ3	0.48	1.68	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CB	0.48	2.62	6	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD21	0.48	2.43	7	2
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:CD1	0.48	2.96	12	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CZ2	0.48	2.95	12	5
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD12	0.48	1.86	13	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:HB3	0.48	2.09	3	1
1:A:96:TYR:C	1:A:98:GLY:N	0.48	2.65	3	1
1:A:44:THR:C	1:A:45:TYR:CD1	0.48	2.86	6	4
1:A:7:GLU:C	1:A:9:TYR:N	0.48	2.66	12	1
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD12	0.48	2.38	12	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HD2	0.48	2.23	17	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:60:CYS:HG	0.48	2.21	19	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CE2	0.48	2.96	2	3
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:CG2	0.48	2.90	5	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG23	0.48	1.86	10	2
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:CB	0.48	2.91	10	4
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HD2	0.48	2.07	15	1
1:A:28:THR:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.48	2.38	17	1
1:A:21:ALA:HB3	1:A:48:SER:OG	0.48	2.08	18	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HG2	0.48	1.85	20	1
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:N	0.48	2.64	7	9
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD12	0.48	1.84	2	1
1:A:91:ILE:C	1:A:95:GLN:HG3	0.48	2.28	16	2
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:CB	0.48	2.30	19	2
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.48	2.23	10	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:101:LEU:HD21	0.48	1.85	17	2
1:A:75:ARG:CD	1:A:76:TYR:CE1	0.48	2.97	10	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:N	0.48	2.23	11	1
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:HG21	0.48	2.22	20	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CG	0.48	2.96	6	2
1:A:64:TYR:C	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.82	8	1
1:A:39:SER:O	1:A:41:THR:HB	0.48	2.08	9	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD2	0.48	2.43	14	4
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CD1	0.48	2.40	12	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CG	0.48	2.92	14	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:CA	0.48	2.87	1	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:HD2	0.48	2.22	6	6
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:CA	0.48	2.39	15	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:HE1	0.48	2.19	8	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:CA	0.48	2.39	8	1
1:A:102:VAL:CG1	1:A:103:THR:N	0.48	2.77	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:HD2	0.48	2.23	10	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CG	0.47	2.97	7	2
1:A:7:GLU:CD	1:A:14:LYS:HE2	0.47	2.29	5	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG22	0.47	2.39	5	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:93:TYR:HE1	0.47	2.27	8	2
1:A:103:THR:HB	1:A:106:ARG:HB2	0.47	1.86	9	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HG3	0.47	2.09	12	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:CD1	0.47	2.43	12	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HD3	0.47	2.07	14	1
1:A:106:ARG:CD	1:A:106:ARG:C	0.47	2.83	15	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.47	2.77	18	1
1:A:74:LYS:O	1:A:74:LYS:HD3	0.47	2.08	20	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:CG	0.47	2.22	15	6
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CD1	0.47	2.43	19	2
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CD1	0.47	2.97	14	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE2	0.47	1.85	18	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HD3	0.47	2.23	3	2
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HG	0.47	2.09	16	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:NE2	0.47	2.24	14	1
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB2	0.47	1.79	17	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:CB	0.47	2.63	19	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:HE1	0.47	2.28	20	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HG2	0.47	1.85	4	3
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:C	0.47	2.30	4	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:SD	0.47	3.02	16	3
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.82	17	2
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:C	0.47	2.67	3	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:81:LYS:O	0.47	2.62	5	1
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:OE2	0.47	2.53	10	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CD1	0.47	2.93	13	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:CA	0.47	2.40	18	3
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:HD22	0.47	1.70	14	1
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:N	0.47	2.78	1	3
1:A:36:VAL:CB	1:A:46:THR:O	0.47	2.62	12	14
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:H	0.47	1.69	2	2
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CG	0.47	2.63	3	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:C	0.47	2.26	5	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:CA	0.47	2.97	5	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CG1	0.47	2.91	10	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:HD2	0.47	1.64	6	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:NE2	0.47	2.32	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CG	0.47	2.88	14	2
1:A:26:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HD11	0.47	1.84	10	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CE1	0.47	2.67	10	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE3	0.47	1.85	15	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG1	0.47	2.72	4	1
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:H	0.47	2.12	5	3
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:CA	0.47	2.62	5	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CG1	0.47	2.97	5	2
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:H	0.47	1.53	11	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:CG	0.47	2.98	15	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:CG2	0.47	2.39	12	1
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.47	2.30	12	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:96:TYR:CD1	0.47	2.45	2	1
1:A:98:GLY:N	1:A:104:ARG:CD	0.47	2.78	2	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.31	4	1
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:CD1	0.47	2.88	19	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:62:LYS:HB3	0.47	1.86	18	3
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CE2	0.47	2.45	9	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:O	0.47	2.32	8	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:H	0.47	1.70	11	2
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.63	8	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:C	0.47	2.53	9	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CG	0.47	2.40	20	1
1:A:34:PHE:CB	1:A:108:PRO:HA	0.46	2.41	15	3
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:H	0.46	1.70	3	1
1:A:40:ARG:NE	1:A:41:THR:H	0.46	2.08	4	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:N	0.46	2.24	7	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:76:TYR:OH	0.46	2.48	10	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:HE2	0.46	1.70	11	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:H	0.46	1.69	8	5
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:CD	0.46	2.24	9	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:52:LYS:NZ	0.46	2.83	11	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HD2	0.46	2.09	17	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:87:ILE:HG21	0.46	1.87	19	1
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HD3	0.46	2.41	1	1
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:HE3	0.46	2.10	2	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD23	0.46	2.22	2	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:111:GLY:H	0.46	1.69	9	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:CG2	0.46	2.63	11	1
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HG2	0.46	2.30	20	1
1:A:98:GLY:C	1:A:100:GLY:N	0.46	2.69	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CD	0.46	2.75	7	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:CG	0.46	2.64	10	1
1:A:35:MET:HG3	1:A:109:VAL:O	0.46	2.11	16	2
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:ND2	0.46	2.63	12	1
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CZ	0.46	2.45	8	4
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:HD2	0.46	2.07	9	1
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:HG1	0.46	2.04	18	4
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CD1	0.46	2.45	15	1
1:A:100:GLY:N	1:A:101:LEU:HD13	0.46	2.25	20	1
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CG	0.46	2.40	2	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:HD1	0.46	2.23	3	6
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:HD3	0.46	1.69	3	3
1:A:62:LYS:CB	1:A:64:TYR:HE1	0.46	2.23	20	7
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG2	0.46	2.31	9	4
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:HD1	0.46	2.15	12	1
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:HD1	0.46	2.24	9	3
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE1	0.46	2.23	3	3
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CD2	0.46	2.40	3	1
1:A:97:ASN:HD22	1:A:98:GLY:N	0.46	2.08	3	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:OH	0.46	2.30	4	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:HB3	0.46	2.45	18	2
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:N	0.46	2.49	15	1
1:A:22:GLU:CA	1:A:61:ILE:HG13	0.46	2.41	5	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CB	0.46	2.99	15	2
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG13	0.46	1.80	12	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:HD21	0.46	2.38	12	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CE2	0.46	2.99	14	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG12	0.46	2.26	17	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HB	0.46	2.41	1	2
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:HZ1	0.46	2.23	2	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE3	0.46	1.88	14	3
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CZ	0.46	2.46	10	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:HD2	0.46	2.16	15	2
1:A:18:ARG:O	1:A:18:ARG:HD3	0.46	2.11	14	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:CG1	0.46	2.99	18	3
1:A:28:THR:HB	1:A:109:VAL:CG2	0.46	2.41	17	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:83:VAL:O	0.46	2.11	18	1
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:CG2	0.46	2.58	1	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG13	0.46	1.88	4	1
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:CG	0.46	2.24	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD21	0.46	1.86	8	3
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG2	0.46	2.31	17	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:CB	0.46	2.62	18	1
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:H	0.45	1.71	4	3
1:A:77:TYR:HD2	1:A:80:GLU:N	0.45	2.09	3	4
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CB	0.45	2.65	3	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG23	0.45	1.69	14	7
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:HD2	0.45	2.29	9	2
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:HB	0.45	1.88	20	3
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:C	0.45	2.31	6	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:90:LEU:HA	0.45	2.46	13	1
1:A:70:ASN:H	1:A:70:ASN:ND2	0.45	2.09	14	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:HB3	0.45	2.41	19	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:108:PRO:HA	0.45	1.86	15	3
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE3	0.45	1.86	3	3
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:HE2	0.45	2.27	4	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CE2	0.45	2.28	5	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CD2	0.45	3.04	6	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:60:CYS:C	0.45	2.32	7	3
1:A:86:SER:HB2	1:A:88:PRO:HG2	0.45	1.89	7	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HG	0.45	2.19	9	1
1:A:35:MET:CB	1:A:109:VAL:O	0.45	2.62	9	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HB	0.45	2.41	17	5
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:CE1	0.45	2.98	16	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:HD2	0.45	2.24	20	3
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:HB2	0.45	1.81	20	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:CZ	0.45	2.47	20	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:O	0.45	2.11	1	1
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:N	0.45	2.07	11	3
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:HD1	0.45	2.07	5	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:CD1	0.45	2.91	8	2
1:A:44:THR:HG23	1:A:65:HIS:HE2	0.45	1.70	15	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:C	0.45	2.32	20	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HZ2	0.45	1.72	1	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HG2	0.45	2.42	1	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:HE1	0.45	2.25	3	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:CG2	0.45	2.42	9	3
1:A:64:TYR:HD2	1:A:78:VAL:CG1	0.45	2.25	8	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB3	0.45	2.42	18	1
1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:OE1	0.45	2.11	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:N	0.45	2.64	2	1
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:CA	0.45	2.24	5	2
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CD	0.45	2.94	2	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:CG1	0.45	2.99	5	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HA	0.45	2.41	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:HD22	0.45	2.41	12	1
1:A:44:THR:CA	1:A:68:GLU:HG3	0.45	2.41	12	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:103:THR:O	0.45	2.34	17	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:O	0.45	2.64	1	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG13	0.45	1.86	1	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:H	0.45	1.65	4	1
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CZ	0.45	2.99	5	3
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:HE1	0.45	2.24	8	2
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG23	0.45	2.32	8	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG11	0.45	1.86	12	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD2	0.45	2.70	13	2
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HG3	0.45	2.12	15	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG13	0.45	1.89	18	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:HE21	0.45	2.25	20	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:O	0.45	2.55	19	5
1:A:43:GLY:O	1:A:45:TYR:CE1	0.45	2.69	3	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.45	2.38	4	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:CA	0.45	3.00	20	2
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:HH11	0.45	2.25	6	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:74:LYS:HA	0.45	1.86	8	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:CB	0.45	2.94	16	3
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:HB3	0.45	2.11	20	1
1:A:34:PHE:CG	1:A:35:MET:N	0.45	2.84	17	5
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:HE3	0.45	1.87	3	2
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:CD	0.45	2.25	5	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.45	2.27	9	1
1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CD1	0.45	2.84	10	3
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:CZ	0.45	2.47	11	1
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:CA	0.45	2.40	17	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HG11	0.45	2.12	17	1
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.45	2.24	19	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.45	2.42	2	2
1:A:44:THR:HG1	1:A:45:TYR:N	0.45	2.09	6	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HD23	0.45	2.43	6	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:35:MET:SD	0.45	2.49	9	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:HE1	0.45	2.25	15	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:OH	0.45	2.65	16	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CD	0.45	2.55	1	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:CZ	0.45	2.79	5	3
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:CE1	0.45	2.70	3	1
1:A:97:ASN:HD21	1:A:99:GLY:N	0.45	2.10	3	1
1:A:29:GLY:C	1:A:52:LYS:HD3	0.45	2.33	6	1
1:A:94:HIS:HD2	1:A:101:LEU:CD2	0.45	2.24	8	2
1:A:104:ARG:HH22	1:A:106:ARG:CZ	0.45	2.25	10	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CB	0.45	2.42	12	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD13	0.45	1.71	12	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:CA	0.45	2.41	20	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:GLU:C	0.44	2.55	10	8
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:HA2	0.44	1.89	4	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:CD1	0.44	2.98	8	1
1:A:27:ASP:C	1:A:27:ASP:OD1	0.44	2.54	9	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:110:CYS:N	0.44	2.81	14	2
1:A:105:LEU:HD22	1:A:105:LEU:H	0.44	1.72	17	1
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:HG3	0.44	2.32	18	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:HB2	0.44	2.35	20	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:N	0.44	2.81	1	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CG	0.44	2.85	2	1
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:CD	0.44	2.86	3	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.44	2.42	12	3
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:CD2	0.44	3.00	7	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HG21	0.44	1.87	12	1
1:A:104:ARG:CZ	1:A:106:ARG:HA	0.44	2.42	12	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:N	0.44	2.27	16	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:CE1	0.44	2.47	20	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB3	0.44	2.42	19	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:N	0.44	2.27	6	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HB3	0.44	1.87	7	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HD23	0.44	1.89	15	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG22	0.44	1.89	16	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:H	0.44	1.72	4	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:68:GLU:OE1	0.44	2.65	7	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HB2	0.44	1.70	9	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HD3	0.44	1.89	17	4
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:CA	0.44	3.00	9	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CE1	0.44	2.47	14	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HE2	0.44	1.71	18	6
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:H	0.44	1.71	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HA	0.44	1.89	15	6
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:HE21	0.44	2.10	3	7
1:A:40:ARG:O	1:A:44:THR:HG22	0.44	2.12	4	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CZ	0.44	2.30	4	1
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:CD1	0.44	2.80	4	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HA	0.44	2.42	9	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:61:ILE:CG2	0.44	2.43	12	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:30:LYS:H	0.44	2.25	13	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CB	0.44	2.66	20	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG1	0.44	2.42	20	1
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:CG	0.44	2.26	2	2
1:A:87:ILE:HB	1:A:88:PRO:HD3	0.44	1.90	3	2
1:A:51:THR:HG1	1:A:103:THR:HG21	0.44	1.72	10	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:108:PRO:HG2	0.44	2.12	11	3
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG11	0.44	2.43	13	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HE1	0.44	1.66	14	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE2	0.44	2.26	14	1
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:HD1	0.44	2.10	20	1
1:A:92:GLN:HE22	1:A:95:GLN:NE2	0.44	2.10	7	1
1:A:49:VAL:O	1:A:61:ILE:HA	0.44	2.13	9	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HD2	0.44	1.90	12	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:HG3	0.44	1.89	12	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:49:VAL:CG1	0.44	2.95	17	1
1:A:48:SER:HA	1:A:62:LYS:O	0.44	2.13	18	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:CB	0.44	2.66	19	1
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.44	1.89	2	1
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:O	0.44	2.34	5	1
1:A:6:LEU:H	1:A:6:LEU:CD2	0.44	2.25	7	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HG2	0.44	2.21	12	1
1:A:20:LYS:O	1:A:20:LYS:HD3	0.44	2.13	12	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:81:LYS:NZ	0.44	2.81	13	1
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:HB2	0.44	2.41	15	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HB3	0.44	1.72	19	2
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CD	0.44	2.66	18	1
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:HE3	0.44	2.34	3	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:61:ILE:N	0.44	2.76	4	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:NE	0.44	2.47	6	1
1:A:74:LYS:CB	1:A:85:ASP:N	0.44	2.81	6	1
1:A:93:TYR:HB2	1:A:97:ASN:OD1	0.44	2.12	12	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CA	0.43	2.42	20	6
1:A:24:LEU:HD12	1:A:35:MET:HE3	0.43	1.90	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HE	0.43	2.26	2	1
1:A:40:ARG:HH11	1:A:40:ARG:CG	0.43	2.26	3	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HG	0.43	2.48	3	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:CG1	0.43	2.94	6	1
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:NE2	0.43	2.65	18	2
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HG13	0.43	1.90	7	1
1:A:35:MET:CE	1:A:111:GLY:H	0.43	2.26	19	2
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:HD22	0.43	2.27	14	1
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:HD12	0.43	1.72	15	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG12	0.43	1.89	4	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HG21	0.43	2.13	6	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:HG3	0.43	1.71	18	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:94:HIS:NE2	0.43	2.28	12	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CG1	0.43	2.43	14	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:49:VAL:HG12	0.43	2.42	14	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:NE	0.43	2.28	1	2
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CD2	0.43	3.01	11	4
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.43	2.47	12	1
1:A:60:CYS:O	1:A:60:CYS:SG	0.43	2.76	15	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD2	0.43	2.27	15	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CD	0.43	2.65	17	1
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB3	0.43	2.33	19	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:20:LYS:H	0.43	1.73	16	2
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD12	0.43	1.72	7	2
1:A:75:ARG:HH21	1:A:85:ASP:CB	0.43	2.26	15	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:23:LYS:NZ	0.43	2.81	20	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:CZ	0.43	2.65	1	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:SD	0.43	2.54	6	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.41	8	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.42	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:82:TYR:O	0.43	2.10	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG13	0.43	1.90	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG13	0.43	2.28	15	1
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CE2	0.43	2.86	20	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:NZ	0.43	2.67	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG12	0.43	2.44	1	2
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:CG2	0.43	2.19	2	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:HA	0.43	1.89	20	2
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:H	0.43	2.17	5	1
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:NH1	0.43	2.81	6	1
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:ND1	0.43	2.81	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HG2	0.43	1.73	12	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CZ	0.43	2.49	16	1
1:A:70:ASN:ND2	1:A:70:ASN:H	0.43	2.09	16	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:111:GLY:H	0.43	1.74	18	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:35:MET:HE3	0.43	1.91	20	1
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD23	0.43	2.31	2	1
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:HZ1	0.43	1.68	2	1
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:109:VAL:HG23	0.43	1.69	3	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:HE21	0.43	1.74	19	3
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG11	0.43	1.87	13	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD11	0.43	1.91	16	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:NE2	0.43	2.82	18	1
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CZ	0.43	2.30	12	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CA	0.43	2.66	16	2
1:A:11:TRP:HB2	1:A:35:MET:CA	0.43	2.43	17	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:48:SER:OG	0.43	2.11	6	1
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HE3	0.43	2.43	14	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:C	0.43	2.71	19	1
1:A:14:LYS:HE2	1:A:38:ASP:HB2	0.43	1.89	20	1
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:CE	0.43	2.96	3	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:CD2	0.43	3.02	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HB3	0.43	1.89	5	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:HB2	0.43	2.28	12	1
1:A:96:TYR:N	1:A:96:TYR:CD1	0.43	2.86	13	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG12	0.43	1.90	14	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:CB	0.43	2.97	16	2
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:HD1	0.43	2.15	19	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD11	0.43	2.48	19	1
1:A:20:LYS:HZ3	1:A:20:LYS:N	0.43	2.12	4	1
1:A:74:LYS:CG	1:A:85:ASP:HB2	0.43	2.44	6	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CG	0.43	2.96	7	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:N	0.43	2.82	7	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:HA2	0.43	2.44	19	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB3	0.42	1.87	7	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:HE1	0.42	2.25	10	1
1:A:104:ARG:NH1	1:A:105:LEU:O	0.42	2.52	12	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD2	0.42	2.67	15	1
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:ND1	0.42	2.52	18	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CB	0.42	2.44	20	1
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CG	0.42	2.48	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD11	0.42	2.11	8	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:50:PHE:CD1	0.42	2.99	8	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:86:SER:HB2	0.42	2.14	11	1
1:A:74:LYS:N	1:A:85:ASP:OD1	0.42	2.52	15	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:HD11	0.42	2.13	16	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:51:THR:HG23	0.42	2.43	19	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:HD11	0.42	2.45	20	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:HD23	0.42	2.43	6	3
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB2	0.42	2.35	11	3
1:A:40:ARG:CG	1:A:40:ARG:NH1	0.42	2.82	3	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:CD1	0.42	2.96	4	1
1:A:109:VAL:HG12	1:A:110:CYS:N	0.42	2.28	9	1
1:A:26:LEU:N	1:A:61:ILE:CD1	0.42	2.82	15	2
1:A:67:LYS:CB	1:A:67:LYS:NZ	0.42	2.83	14	1
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG12	0.42	2.13	20	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG22	0.42	2.49	3	3
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:CD1	0.42	2.42	7	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:HB3	0.42	2.41	7	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CG	0.42	2.97	10	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:NE	0.42	2.50	11	1
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB3	0.42	2.13	12	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:ASP:OD2	0.42	2.14	17	1
1:A:10:GLU:C	1:A:108:PRO:HB2	0.42	2.34	4	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD23	0.42	1.70	15	1
1:A:41:THR:HG1	1:A:42:PRO:HD2	0.42	1.74	6	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:NE1	0.42	2.87	14	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:C	0.42	2.93	17	1
1:A:14:LYS:HG2	1:A:15:SER:H	0.42	1.75	6	5
1:A:98:GLY:C	1:A:100:GLY:H	0.42	2.18	5	1
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:CD1	0.42	2.61	5	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG2	0.42	2.45	6	3
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HG2	0.42	1.90	8	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CG	0.42	2.68	11	1
1:A:85:ASP:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.42	2.44	1	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HB	0.42	2.45	4	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:N	0.42	2.30	4	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CA	0.42	3.01	11	1
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:HG3	0.42	2.29	14	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:52:LYS:CB	0.42	2.81	17	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:CA	0.42	2.44	19	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:96:TYR:CE1	0.42	2.50	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:CE	0.42	2.96	11	2
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD2	0.42	3.07	5	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE3	0.42	2.45	5	1
1:A:104:ARG:C	1:A:106:ARG:N	0.42	2.73	7	1
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:CD1	0.42	2.28	9	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG23	0.42	2.14	12	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD12	0.42	1.90	4	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:HD2	0.42	2.17	1	1
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:C	0.42	2.36	1	1
1:A:68:GLU:C	1:A:75:ARG:O	0.42	2.55	3	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:CG	0.42	2.93	3	1
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:C	0.42	2.59	5	2
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CE	0.42	2.45	6	2
1:A:34:PHE:CA	1:A:108:PRO:HA	0.42	2.45	6	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB2	0.42	2.44	13	2
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HB3	0.41	1.92	3	1
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:C	0.41	2.58	12	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:84:PHE:HA	0.41	2.45	6	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	3.03	12	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:101:LEU:CD1	0.41	2.79	12	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CG	0.41	2.45	15	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG2	0.41	2.45	18	1
1:A:18:ARG:H	1:A:37:ARG:CZ	0.41	2.28	2	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HB	0.41	1.91	2	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:O	0.41	2.68	3	3
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HD2	0.41	1.91	5	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:O	0.41	2.59	7	3
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:HA2	0.41	1.90	6	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:HE2	0.41	2.28	6	1
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:HG23	0.41	2.14	9	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HZ3	0.41	1.75	10	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE2	0.41	2.50	11	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:HD2	0.41	2.28	12	1
1:A:40:ARG:HA	1:A:40:ARG:NE	0.41	2.31	13	1
1:A:103:THR:CB	1:A:106:ARG:HG3	0.41	2.45	13	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:HB3	0.41	1.92	18	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:61:ILE:HG23	0.41	2.45	19	1
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:HE2	0.41	1.91	2	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CB	0.41	2.28	10	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CG2	0.41	2.45	7	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.69	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:CG1	0.41	2.66	11	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:HD3	0.41	1.88	12	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:HE2	0.41	1.74	14	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:14:LYS:HG2	0.41	2.50	16	2
1:A:18:ARG:C	1:A:63:HIS:NE2	0.41	2.72	18	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CE2	0.41	3.08	19	1
1:A:34:PHE:HD2	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.11	20	1
1:A:40:ARG:C	1:A:41:THR:O	0.41	2.58	2	3
1:A:89:LEU:O	1:A:93:TYR:N	0.41	2.51	3	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:HE1	0.41	2.22	4	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	2.90	5	2
1:A:45:TYR:CA	1:A:66:ILE:HG12	0.41	2.45	7	1
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:C	0.41	2.58	9	3
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:CE1	0.41	2.50	12	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:HD22	0.41	2.13	12	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CZ	0.41	3.03	16	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:84:PHE:HA	0.41	1.91	17	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:38:ASP:HB2	0.41	2.45	20	1
1:A:52:LYS:O	1:A:53:ALA:CB	0.41	2.67	1	1
1:A:34:PHE:HD2	1:A:108:PRO:HB3	0.41	1.75	13	6
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG22	0.41	1.75	3	3
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:HE2	0.41	2.29	5	1
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:CG	0.41	2.62	8	1
1:A:25:LEU:C	1:A:50:PHE:CE2	0.41	2.94	10	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:50:PHE:CE2	0.41	2.49	10	1
1:A:42:PRO:HB2	1:A:68:GLU:HB2	0.41	1.91	10	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HZ1	0.41	2.29	15	1
1:A:89:LEU:CA	1:A:92:GLN:HG2	0.41	2.46	17	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD23	0.41	2.35	19	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HD1	0.41	2.28	5	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HB	0.41	1.92	13	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HG	0.41	1.93	15	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HB3	0.41	2.45	18	1
1:A:12:TYR:HD1	1:A:36:VAL:CG1	0.41	2.28	19	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:N	0.41	2.88	20	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG13	0.41	2.38	8	1
1:A:20:LYS:H	1:A:20:LYS:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:O	0.41	2.15	11	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CB	0.41	2.69	16	2
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:HB2	0.41	1.92	12	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:63:HIS:HB3	0.41	2.31	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:H	1:A:30:LYS:HD2	0.41	1.74	13	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:108:PRO:CA	0.41	2.46	15	1
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CG	0.41	2.90	16	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:HD2	0.41	1.99	1	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CD2	0.41	3.03	2	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.41	3.00	3	1
1:A:11:TRP:CE2	1:A:91:ILE:HG21	0.41	2.50	6	2
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:OD1	0.41	2.69	8	1
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:HD2	0.41	2.30	13	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CZ	0.41	2.72	15	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:63:HIS:HE2	0.41	1.75	15	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:102:VAL:HG13	0.41	2.51	17	1
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:HD22	0.41	2.29	18	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:OD1	0.41	2.53	1	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:14:LYS:HD3	0.41	2.44	5	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:HD2	0.41	1.76	6	1
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:HE1	0.41	2.17	6	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	2.28	12	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:83:VAL:O	0.41	2.67	12	2
1:A:29:GLY:HA3	1:A:52:LYS:HZ1	0.41	1.74	15	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CD	0.41	2.68	16	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:HB2	0.41	2.50	19	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:11:TRP:CE2	0.41	2.49	8	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:HE1	0.41	1.76	12	1
1:A:14:LYS:HZ3	1:A:38:ASP:CG	0.41	2.16	20	1
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:HD12	0.40	2.28	1	1
1:A:40:ARG:CG	1:A:41:THR:H	0.40	2.27	4	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:GLN:OE1	0.40	2.69	5	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CG2	0.40	2.45	6	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HA	0.40	1.75	7	1
1:A:96:TYR:C	1:A:97:ASN:O	0.40	2.59	8	1
1:A:8:THR:O	1:A:8:THR:OG1	0.40	2.38	10	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD12	0.40	1.92	14	1
1:A:44:THR:HG21	1:A:67:LYS:NZ	0.40	2.31	15	1
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:HE1	0.40	2.28	17	1
1:A:101:LEU:HB2	1:A:104:ARG:HA	0.40	1.93	17	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG23	0.40	1.92	18	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:24:LEU:N	0.40	2.84	7	1
1:A:40:ARG:O	1:A:43:GLY:N	0.40	2.54	10	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG23	0.40	1.92	10	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HB	0.40	1.93	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CD1	0.40	2.74	16	1
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:OH	0.40	1.96	17	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CE	0.40	2.70	20	1
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:HG22	0.40	1.61	2	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:CE1	0.40	2.89	4	1
1:A:92:GLN:HE21	1:A:95:GLN:CD	0.40	2.19	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:N	0.40	2.31	8	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:100:GLY:N	0.40	2.84	16	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:N	0.40	2.69	17	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:O	0.40	2.60	2	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CB	0.40	2.97	3	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:CA	0.40	2.99	6	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ARG:HG3	0.40	2.16	7	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:51:THR:HG23	0.40	1.92	17	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:HB3	0.40	1.92	18	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HG23	0.40	2.47	19	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:HE2	0.40	1.68	4	1
1:A:74:LYS:CD	1:A:83:VAL:HB	0.40	2.46	7	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HG	0.40	2.52	7	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:33:ALA:HB2	0.40	2.44	15	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:O	0.40	2.15	17	1
1:A:88:PRO:HA	1:A:91:ILE:HB	0.40	1.93	17	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:CD1	0.40	2.22	20	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	97/110 (88%)	67±2 (69±2%)	14±2 (15±3%)	16±2 (17±2%)	0 3
All	All	1940/2200 (88%)	1333 (69%)	283 (15%)	324 (17%)	0 3

All 31 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	41	THR	20
1	A	42	PRO	20
1	A	52	LYS	20
1	A	104	ARG	19
1	A	105	LEU	19
1	A	80	GLU	19
1	A	7	GLU	18
1	A	103	THR	17
1	A	15	SER	14
1	A	70	ASN	14
1	A	97	ASN	14
1	A	10	GLU	13
1	A	99	GLY	13
1	A	79	ALA	12
1	A	74	LYS	11
1	A	102	VAL	10
1	A	100	GLY	10
1	A	101	LEU	9
1	A	14	LYS	8
1	A	53	ALA	7
1	A	6	LEU	6
1	A	82	TYR	6
1	A	8	THR	5
1	A	86	SER	3
1	A	111	GLY	3
1	A	40	ARG	3
1	A	98	GLY	3
1	A	30	LYS	3
1	A	75	ARG	2
1	A	44	THR	2
1	A	29	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	86/97 (89%)	44±3 (52±3%)	42±3 (48±3%)	0 1
All	All	1720/1940 (89%)	890 (52%)	830 (48%)	0 1

All 68 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	16	ILE	20
1	A	37	ARG	20
1	A	66	ILE	20
1	A	76	TYR	20
1	A	89	LEU	20
1	A	92	GLN	20
1	A	10	GLU	19
1	A	61	ILE	19
1	A	82	TYR	19
1	A	105	LEU	19
1	A	14	LYS	18
1	A	20	LYS	18
1	A	44	THR	18
1	A	50	PHE	18
1	A	106	ARG	18
1	A	41	THR	18
1	A	6	LEU	17
1	A	17	SER	17
1	A	67	LYS	17
1	A	48	SER	16
1	A	18	ARG	15
1	A	24	LEU	15
1	A	69	THR	15
1	A	94	HIS	15
1	A	110	CYS	15
1	A	74	LYS	15
1	A	93	TYR	15
1	A	7	GLU	14
1	A	81	LYS	14
1	A	86	SER	14
1	A	87	ILE	14
1	A	103	THR	14
1	A	52	LYS	14
1	A	104	ARG	14
1	A	30	LYS	13
1	A	65	HIS	13
1	A	70	ASN	13
1	A	101	LEU	13
1	A	15	SER	13
1	A	25	LEU	12
1	A	40	ARG	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	8	THR	11
1	A	23	LYS	11
1	A	26	LEU	11
1	A	75	ARG	11
1	A	28	THR	11
1	A	27	ASP	10
1	A	109	VAL	9
1	A	68	GLU	9
1	A	60	CYS	8
1	A	95	GLN	8
1	A	85	ASP	8
1	A	31	GLU	7
1	A	102	VAL	7
1	A	97	ASN	6
1	A	39	SER	5
1	A	62	LYS	5
1	A	45	TYR	4
1	A	51	THR	3
1	A	22	GLU	3
1	A	49	VAL	3
1	A	19	ASP	3
1	A	38	ASP	3
1	A	83	VAL	3
1	A	78	VAL	2
1	A	80	GLU	2
1	A	84	PHE	2
1	A	13	ASN	2

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains (i)

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided