Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 15, 2022 – 06:18 AM EST

PDB ID	:	1LUM
Title	:	NMR Structure of the Itk SH2 domain, Pro287trans, 20 low energy structures
Authors	:	Mallis, R.J.; Brazin, K.N.; Fulton, D.B.; Andreotti, A.H.
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:

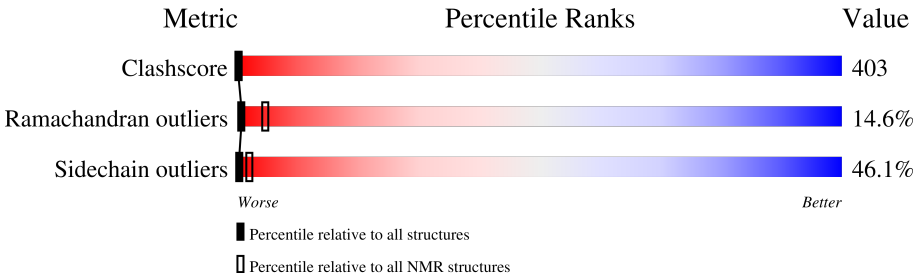
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal 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	45% 40% • 15%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 19 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:6-A:51, A:60-A:69, A:74-A:111 (94)	0.36	19

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

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

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

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

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: 45% 40% • 15%

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: • 36% 43% • 15%

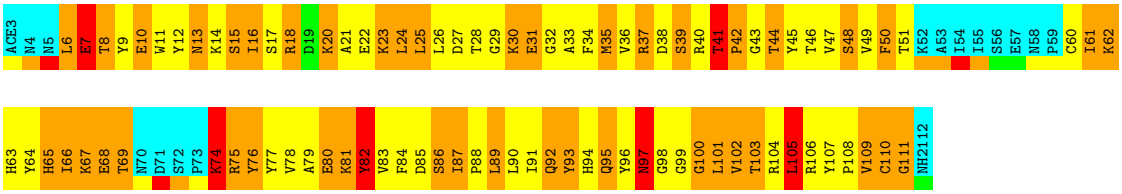
ACE3 N4 N5 L6 E7 T8 Y9 E10 W11 Y12 N13 K14 S15 I16 S17 R18 D19 K20 A21 E22 K23 L24 L25 L26 D27 T28 G29 K30 E31 G32 A33 F34 M35 V36 R37 D38 S39 R40 T41 P42 G43 T44 Y45 T46 V47 S48 V49 F50 T51 K52 A53 I54 I55 S56 E57 N58 P59 C60 I61 K62

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: • 39% 40% 5% 15%



4.2.3 Score per residue for model 3

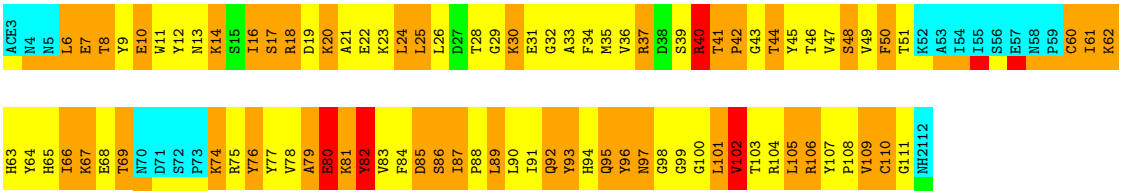
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 5% 39% 38% • 15%

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: • 41% 38% • 15%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: • 47% 35% • 15%

4.2.6 Score per residue for model 6

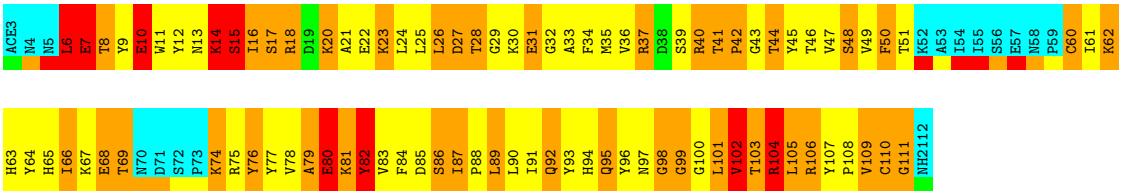
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 47% 32% 5% 15%

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

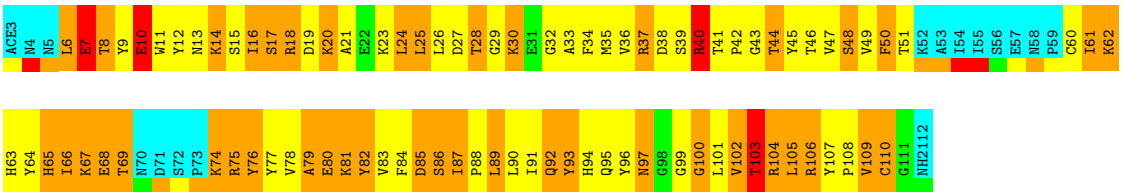
Chain A: 39% 36% 8% 15%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 39% 39% 15%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 47% 32% 15%

4.2.10 Score per residue for model 10

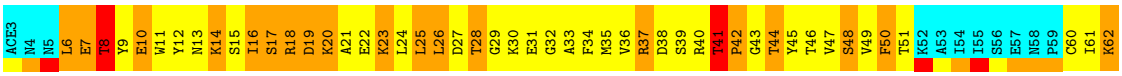
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

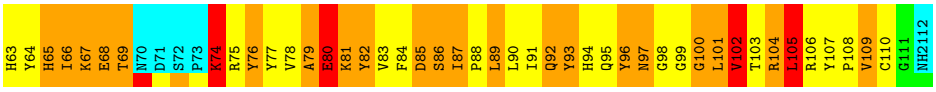
Chain A:

4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A:

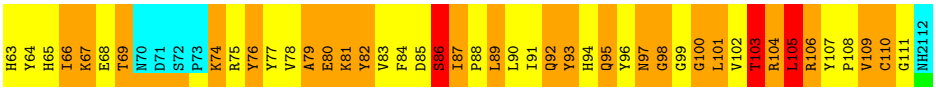




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

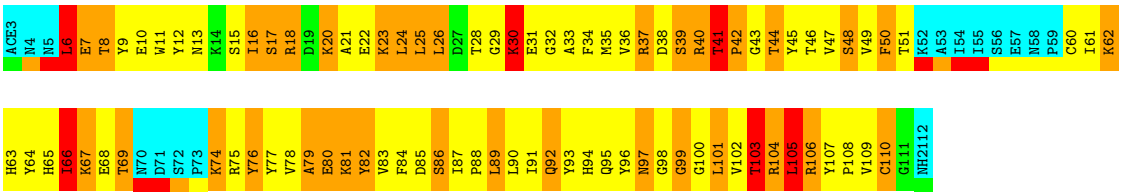
Chain A:



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

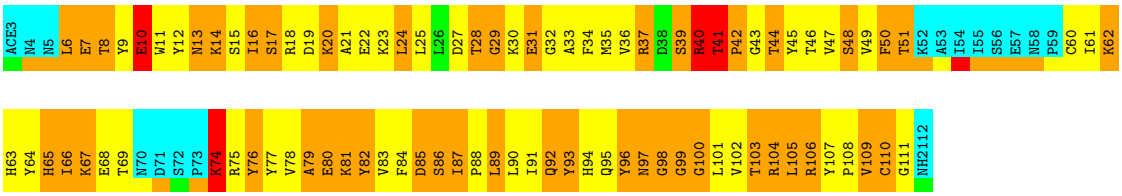
Chain A: • 45% 32% 5% 15%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

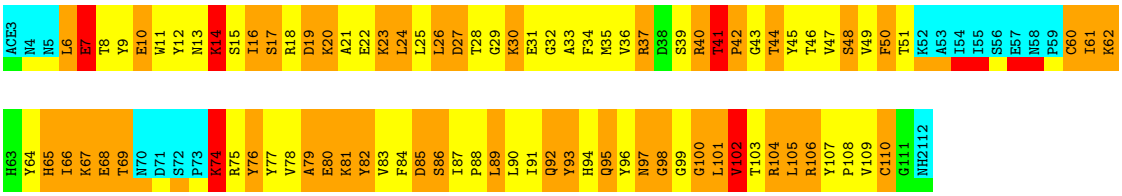
Chain A: • 39% 41% • 15%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: • 38% 40% 5% 15%



4.2.16 Score per residue for model 16

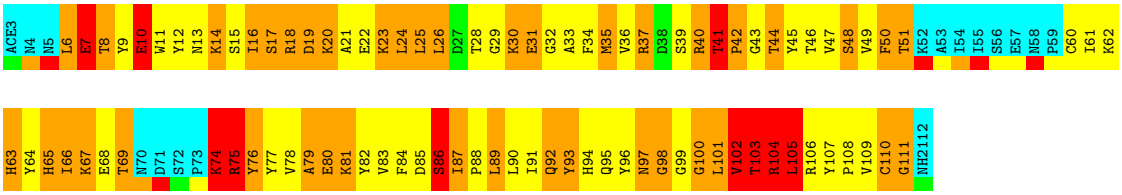
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: • 39% 40% 5% 15%

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

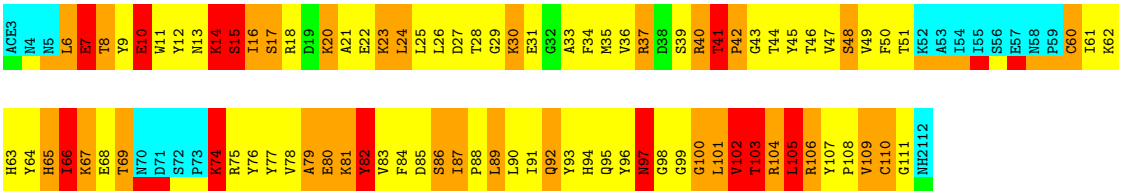
Chain A: 37% 37% 9% 15%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 45% 26% 11% 15%



4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 47% 35% 15%

4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 42% 35% 6% 15%

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	778	774	773	625±28
All	All	15560	15480	15460	12492

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 403.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD1	1.37	1.55	8	4
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CD	1.34	1.52	5	20
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD22	1.30	1.55	10	8
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD23	1.29	1.27	4	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CE2	1.21	1.68	7	13
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG23	1.20	1.64	15	14
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG11	1.19	1.65	13	3
1:A:90:LEU:HD22	1:A:93:TYR:CE1	1.19	1.71	7	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG21	1.18	1.66	12	8
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CD1	1.18	1.73	6	18
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG22	1.18	1.34	7	9
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:OG	1.18	1.37	1	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE1	1.17	2.27	20	2
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD13	1.17	1.40	8	5
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CE2	1.16	2.34	11	20
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG23	1.15	1.75	13	2
1:A:22:GLU:CG	1:A:61:ILE:HG21	1.15	1.70	16	7
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:HA	1.15	1.40	1	20
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CE1	1.15	1.99	18	4
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD13	1.14	1.72	17	18
1:A:78:VAL:HG22	1:A:82:TYR:OH	1.14	1.37	17	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG21	1.14	1.73	2	5
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:CD	1.14	2.26	5	20
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:N	1.13	1.82	17	20
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:HB	1.12	1.73	2	12
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:N	1.12	1.59	5	5
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD21	1.12	1.21	10	12
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD23	1.11	1.74	19	12
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD11	1.11	1.20	5	18
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:HD12	1.11	1.80	7	20
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:CB	1.11	1.75	14	8
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD23	1.11	1.18	4	12
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CD	1.11	1.74	8	15
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:HG23	1.11	1.22	15	9
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:OG	1.11	1.45	10	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CZ	1.11	1.80	7	14
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG13	1.11	1.43	1	12
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:CD1	1.10	2.34	9	20
1:A:25:LEU:HD13	1:A:50:PHE:CB	1.10	1.75	15	10
1:A:29:GLY:O	1:A:33:ALA:HB2	1.10	1.46	10	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD22	1.10	1.77	19	2
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG12	1.10	1.43	15	14
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD1	1.10	2.33	8	10
1:A:44:THR:HG22	1:A:66:ILE:O	1.10	1.46	8	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG13	1.10	1.59	5	5
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD2	1.09	2.38	1	18
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HD11	1.09	1.82	5	12
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:CD2	1.09	1.78	11	18
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD22	1.09	1.44	13	3
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:O	1.09	1.47	15	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD12	1.09	1.77	12	5
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CD2	1.09	1.82	3	10
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:N	1.09	1.58	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE1	1.09	1.11	15	5
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:HB	1.08	1.24	2	9
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:N	1.08	1.62	2	18
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:HD11	1.08	1.22	16	18
1:A:25:LEU:HD13	1:A:50:PHE:HB2	1.08	1.19	9	11
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG2	1.08	1.79	7	8
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HB3	1.07	1.21	3	20
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD2	1.07	1.14	12	9
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG13	1.07	1.83	14	18
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD3	1.07	1.49	5	16
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD12	1.07	1.49	17	15
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG23	1.07	1.24	5	6
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CE1	1.06	2.43	5	17
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD22	1.06	1.14	5	8
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CD2	1.06	1.80	13	5
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CD2	1.06	1.86	7	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE1	1.06	2.43	18	4
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD12	1.05	1.85	17	11
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HG12	1.05	1.47	9	20
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:CE1	1.05	2.09	20	20
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD12	1.05	1.13	8	5
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD1	1.05	1.81	15	18
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD13	1.05	1.87	9	12
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG13	1.05	1.11	4	3
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:HA	1.05	1.52	10	20
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:O	1.05	1.52	8	11
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HB3	1.05	1.15	14	12
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG12	1.04	1.18	3	4
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HD12	1.04	1.52	8	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG12	1.04	1.82	1	3
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD22	1.04	1.20	4	2
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD11	1.04	1.86	20	2
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:NZ	1.04	1.65	13	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:HD2	1.04	1.82	5	20
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD11	1.04	1.16	15	12
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG21	1.04	1.09	12	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE2	1.03	1.88	10	14
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:109:VAL:HG13	1.03	1.05	12	3
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:HG11	1.03	1.28	3	2
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CZ2	1.02	2.47	17	20
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG12	1.02	1.26	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:CE	1.02	1.83	15	10
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HZ2	1.02	1.08	13	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:NE2	1.02	1.68	13	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:HD3	1.02	1.25	12	16
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:CD2	1.02	1.85	16	11
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:C	1.01	1.76	8	5
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:HD11	1.01	1.85	18	12
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:HD21	1.01	1.27	7	2
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:HD2	1.01	1.28	8	20
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:HG23	1.01	1.85	1	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD22	1.01	1.29	10	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CE1	1.01	2.49	7	20
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ASP:N	1.01	1.71	11	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CE1	1.01	2.49	13	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE1	1.01	1.90	20	2
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD2	1.00	2.43	12	3
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:HD11	1.00	1.86	11	18
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HA	1.00	1.91	2	20
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE1	1.00	1.91	7	6
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:HB2	1.00	1.31	19	4
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:HG23	1.00	1.91	1	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:CB	1.00	1.86	2	8
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:HA	1.00	1.56	3	17
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG11	1.00	1.31	19	4
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG1	0.99	1.87	8	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG21	0.99	1.92	13	20
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:OH	0.99	2.15	12	3
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:HG12	0.99	1.54	13	20
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD1	0.99	2.11	3	18
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:HG22	0.99	1.31	2	18
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD1	0.99	2.51	13	5
1:A:16:ILE:HD12	1:A:35:MET:SD	0.98	1.98	12	12
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CE1	0.98	1.92	1	13
1:A:36:VAL:HG13	1:A:46:THR:O	0.98	1.58	2	20
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:HD12	0.98	1.31	10	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD13	0.98	1.94	11	16
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:CG2	0.98	1.88	6	7
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:CD1	0.98	2.46	15	20
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HD3	0.98	1.36	6	3
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:CD	0.98	1.89	12	7
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HG23	0.97	1.88	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE2	0.97	2.51	20	8
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD1	0.97	2.17	7	4
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG21	0.97	1.36	20	11
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:HD11	0.97	1.89	11	13
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD11	0.97	1.89	15	12
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:CD1	0.97	1.90	5	16
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE3	0.97	1.32	4	5
1:A:25:LEU:HD22	1:A:33:ALA:CB	0.96	1.88	16	8
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD2	0.96	2.13	19	2
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD21	0.96	1.89	14	12
1:A:44:THR:CB	1:A:66:ILE:O	0.96	2.13	9	18
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CE2	0.96	2.52	20	3
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:HB2	0.96	1.34	15	6
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD2	0.96	2.53	4	14
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CD2	0.96	2.44	10	18
1:A:69:THR:HG23	1:A:74:LYS:O	0.95	1.61	12	3
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CE1	0.95	2.19	2	6
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD12	0.95	1.39	14	18
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CG2	0.95	2.50	12	20
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD21	0.95	1.36	12	4
1:A:13:ASN:N	1:A:36:VAL:O	0.95	1.99	12	17
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD12	0.95	1.97	19	12
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD1	0.95	2.54	7	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:HB1	0.95	1.35	11	8
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG2	0.95	1.92	12	3
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CD	0.94	1.91	10	4
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD11	0.94	1.90	11	15
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG22	0.94	1.35	8	4
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HD13	0.94	1.40	5	18
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CE2	0.94	2.50	13	20
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	0.94	1.78	4	7
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG21	0.94	1.37	10	7
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG23	0.94	1.40	7	2
1:A:21:ALA:HB3	1:A:37:ARG:NH2	0.94	1.76	17	1
1:A:47:VAL:HG13	1:A:64:TYR:HB2	0.94	1.35	13	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:OH	0.94	2.18	9	11
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.94	1.63	17	5
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:NE2	0.94	1.98	18	4
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HB	0.94	1.39	2	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:N	0.93	2.00	15	11
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:HE2	0.93	1.23	13	1

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:CG2	0.93	2.52	13	20
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CD1	0.93	2.51	3	20
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:C	0.93	1.64	16	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HG	0.93	1.93	18	2
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HB3	0.93	1.99	16	19
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:CG2	0.93	2.51	13	4
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HA	0.92	1.99	17	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:61:ILE:HG21	0.92	1.35	14	3
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD13	0.92	1.40	17	6
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CE	0.92	2.32	11	16
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG3	0.92	1.40	14	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HG	0.92	1.19	10	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:O	0.92	1.65	17	15
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG3	0.92	1.65	20	10
1:A:13:ASN:O	1:A:14:LYS:O	0.92	1.86	7	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG2	0.92	1.38	20	5
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD11	0.92	1.41	11	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD13	0.92	1.64	2	5
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD11	0.92	1.80	14	14
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:HE1	0.92	1.36	8	4
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:HD22	0.91	1.80	17	6
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:HG12	0.91	1.40	1	3
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:NE2	0.91	2.04	18	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG22	0.91	1.39	15	4
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CZ	0.91	2.00	8	14
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CG	0.91	2.59	7	19
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CG1	0.91	1.95	10	17
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:CD2	0.91	2.24	13	6
1:A:94:HIS:CG	1:A:105:LEU:HD22	0.91	2.00	12	5
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CD1	0.91	2.00	20	7
1:A:90:LEU:HD22	1:A:93:TYR:HE1	0.91	1.15	7	2
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD2	0.90	2.58	17	2
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD22	0.90	1.42	4	14
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HG21	0.90	1.40	16	11
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD3	0.90	1.43	8	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD2	0.90	1.97	19	15
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE1	0.90	2.59	19	11
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD22	0.90	1.67	17	8
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CE2	0.90	2.02	11	5
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:N	0.90	2.04	8	4
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:HD12	0.90	1.40	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:N	0.90	2.05	3	20
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CD	0.90	2.49	10	7
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD2	0.90	1.67	9	18
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG12	0.90	1.27	18	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG21	0.89	1.43	2	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:O	0.89	2.06	8	20
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HG23	0.89	1.43	1	2
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:O	0.89	1.67	18	14
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG22	0.89	2.02	10	18
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:C	0.89	2.11	6	19
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:CB	0.89	1.98	8	17
1:A:25:LEU:HD22	1:A:33:ALA:HB3	0.89	1.43	16	9
1:A:94:HIS:ND1	1:A:101:LEU:HD13	0.89	1.82	11	9
1:A:78:VAL:HG22	1:A:82:TYR:HH	0.89	1.23	17	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG12	0.89	1.43	4	5
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:N	0.89	1.80	12	6
1:A:20:LYS:CD	1:A:24:LEU:HD23	0.89	1.98	14	3
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD12	0.89	1.68	11	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:37:ARG:HG2	0.89	1.43	15	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:HB3	0.89	1.44	18	20
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CZ	0.88	2.60	19	4
1:A:41:THR:O	1:A:43:GLY:N	0.88	2.07	6	18
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CG1	0.88	2.21	9	14
1:A:35:MET:CB	1:A:109:VAL:HG23	0.88	1.99	3	3
1:A:13:ASN:HB2	1:A:35:MET:SD	0.88	2.09	4	9
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:HD23	0.88	1.27	7	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:HB3	0.88	1.44	20	7
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG12	0.88	1.98	4	5
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD1	0.88	2.61	13	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:CG2	0.88	2.57	18	20
1:A:37:ARG:CZ	1:A:46:THR:HG22	0.88	1.98	16	3
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG11	0.88	1.42	20	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CZ3	0.88	2.04	2	12
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:HE2	0.88	1.84	20	20
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD2	0.88	2.03	18	4
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.88	2.41	14	3
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CE	0.87	1.98	12	4
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CZ	0.87	2.57	20	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE1	0.87	2.57	8	5
1:A:82:TYR:CD1	1:A:84:PHE:CE2	0.87	2.61	17	1
1:A:95:GLN:N	1:A:105:LEU:HB2	0.87	1.84	5	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CB	0.87	1.99	17	20
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:CD	0.87	2.23	12	18
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:CD1	0.87	2.57	5	8
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CZ	0.87	2.62	5	8
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HB3	0.87	1.85	5	6
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:CE	0.87	2.52	9	7
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:HB2	0.87	1.99	13	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD2	0.87	1.70	18	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD21	0.86	1.47	6	13
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD12	0.86	1.90	4	13
1:A:44:THR:OG1	1:A:66:ILE:O	0.86	1.92	18	19
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:CD1	0.86	2.58	7	12
1:A:26:LEU:HD22	1:A:26:LEU:C	0.86	1.89	11	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CE2	0.86	2.05	11	20
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE1	0.86	1.97	15	4
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD21	0.86	2.00	10	5
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE1	0.86	2.63	12	4
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:HB2	0.86	1.45	2	8
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:CE1	0.86	2.63	19	5
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:CG	0.86	2.58	16	2
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CE2	0.86	2.58	20	20
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:OG	0.86	2.24	20	7
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:HD3	0.86	1.99	5	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG13	0.86	1.47	8	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CG	0.86	2.00	6	13
1:A:67:LYS:HE2	1:A:68:GLU:O	0.86	1.70	2	1
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE1	0.86	2.28	2	9
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD11	0.86	2.05	12	15
1:A:77:TYR:CB	1:A:82:TYR:O	0.86	2.23	9	9
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG23	0.86	1.45	9	13
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:HG13	0.86	2.05	5	18
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG13	0.86	1.28	14	15
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:HD3	0.86	1.97	5	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE2	0.86	2.58	10	8
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CD2	0.86	2.06	5	13
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CD1	0.85	2.05	9	17
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CZ	0.85	2.63	12	11
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:HB3	0.85	1.45	17	4
1:A:47:VAL:HG12	1:A:64:TYR:O	0.85	1.71	13	2
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:NE2	0.85	2.43	5	14
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:O	0.85	1.70	18	19

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:CD	0.85	2.24	13	7
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG11	0.85	2.01	16	10
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE1	0.85	2.05	20	3
1:A:36:VAL:HA	1:A:46:THR:O	0.85	1.70	18	20
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG22	0.85	1.71	13	5
1:A:44:THR:HG21	1:A:66:ILE:O	0.85	1.71	20	7
1:A:83:VAL:O	1:A:84:PHE:CD1	0.85	2.29	17	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD12	0.85	2.01	10	11
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.85	2.42	3	18
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:CD1	0.85	2.39	6	20
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:CG1	0.85	1.83	18	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CD2	0.85	2.59	6	20
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD11	0.85	1.72	5	4
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG11	0.85	1.47	13	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CD1	0.85	2.60	13	1
1:A:44:THR:CB	1:A:68:GLU:OE1	0.85	2.25	4	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:CG1	0.84	2.01	6	3
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:CD2	0.84	2.60	3	3
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:HD12	0.84	1.45	5	2
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CZ2	0.84	2.65	12	20
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:CD1	0.84	2.58	9	11
1:A:94:HIS:CD2	1:A:105:LEU:CD2	0.84	2.60	17	5
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE2	0.84	2.60	13	2
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG21	0.84	2.01	20	1
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG23	0.84	1.28	13	2
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:O	0.84	2.24	1	12
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:CE	0.84	2.03	19	5
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD12	0.84	2.07	17	6
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CE1	0.84	2.60	10	4
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CD1	0.84	2.40	19	15
1:A:37:ARG:CZ	1:A:46:THR:CG2	0.84	2.55	16	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:NE2	0.84	2.45	18	3
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	0.84	1.48	11	10
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CE1	0.84	2.08	16	3
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HE21	0.84	1.32	13	2
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CG2	0.84	2.02	18	15
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:CG2	0.84	2.55	1	18
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CG	0.84	2.08	16	3
1:A:67:LYS:CE	1:A:68:GLU:O	0.84	2.24	2	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:OH	0.84	2.29	16	6
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:N	0.84	2.10	18	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CE2	0.84	2.06	9	3
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:O	0.83	1.73	6	5
1:A:101:LEU:HD21	1:A:105:LEU:CD2	0.83	2.03	20	1
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:N	0.83	2.11	20	20
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CE1	0.83	2.61	13	20
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CB	0.83	2.26	10	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CE	0.83	2.56	12	3
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:CG2	0.83	1.86	13	12
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD2	0.83	2.00	11	11
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.83	2.31	20	19
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CE	0.83	2.57	18	5
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CE	0.83	2.25	15	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:CD2	0.83	2.08	13	20
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CG	0.83	2.62	16	3
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:HE2	0.83	1.85	13	1
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:N	0.83	2.42	15	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE3	0.83	2.03	4	7
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD2	0.83	2.62	13	3
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CD	0.83	2.27	15	1
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB3	0.83	1.50	7	6
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD1	0.83	2.08	4	5
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD1	0.82	2.57	5	18
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE3	0.82	1.50	13	9
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:CE1	0.82	2.33	3	12
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CD1	0.82	2.08	16	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:CG	0.82	2.57	9	2
1:A:29:GLY:O	1:A:50:PHE:CD1	0.82	2.32	13	2
1:A:96:TYR:CG	1:A:97:ASN:N	0.82	2.47	11	2
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CE1	0.82	2.62	13	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:HB3	0.82	2.08	16	20
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:HD2	0.82	2.04	17	18
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG11	0.82	2.03	7	6
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:CE	0.82	2.04	15	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG21	0.82	2.09	2	20
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:NE2	0.82	2.42	14	13
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG12	0.82	2.08	4	4
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CB	0.82	2.04	11	11
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:CG1	0.82	2.62	9	18
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:CE1	0.82	2.10	16	14
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:CG2	0.82	2.05	8	3
1:A:85:ASP:OD2	1:A:89:LEU:HD21	0.82	1.74	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CE2	0.82	2.33	20	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HG3	0.82	2.09	4	8
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD2	0.82	2.03	4	12
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD3	0.82	2.04	6	6
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:O	0.82	2.28	1	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG12	0.82	2.04	3	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CE	0.82	2.05	17	3
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD1	0.82	1.35	10	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CE1	0.82	2.09	13	1
1:A:34:PHE:HE2	1:A:91:ILE:HG21	0.82	1.34	11	20
1:A:51:THR:HB	1:A:60:CYS:H	0.82	1.34	15	6
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CE	0.82	2.05	10	5
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:CG1	0.82	2.48	6	12
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE2	0.82	2.10	13	3
1:A:62:LYS:HG3	1:A:64:TYR:CE1	0.81	2.10	7	3
1:A:30:LYS:HE3	1:A:33:ALA:HB2	0.81	1.52	4	7
1:A:96:TYR:CZ	1:A:97:ASN:ND2	0.81	2.49	10	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CD1	0.81	2.63	19	11
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CD2	0.81	2.11	11	18
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HD3	0.81	1.52	10	4
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:CD	0.81	2.57	5	19
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:CA	0.81	2.26	10	20
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:CA	0.81	2.27	1	20
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CE1	0.81	2.09	2	20
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD12	0.81	1.52	13	12
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:N	0.81	1.89	8	2
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:HG22	0.81	1.76	9	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:HD1	0.81	1.89	2	6
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HD23	0.81	1.52	12	5
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:CB	0.81	2.05	11	8
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG11	0.81	1.52	3	6
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CD1	0.81	2.10	13	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CE2	0.81	2.11	18	12
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CB	0.81	2.05	12	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG1	0.81	2.05	3	6
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:CG2	0.81	2.44	16	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CG	0.81	2.48	7	3
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CD2	0.81	2.09	12	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CD	0.81	2.58	17	12
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG12	0.81	2.10	3	4
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.81	1.52	17	13

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:30:LYS:HA	0.81	2.05	8	3
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HG	0.80	1.36	4	5
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:H	0.80	1.35	5	5
1:A:26:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CE2	0.80	2.11	9	5
1:A:47:VAL:N	1:A:64:TYR:O	0.80	2.14	3	20
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.80	2.05	18	5
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD1	0.80	2.63	10	4
1:A:96:TYR:CD1	1:A:97:ASN:N	0.80	2.48	11	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:33:ALA:HB1	0.80	2.07	16	6
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:CD1	0.80	2.06	11	1
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CZ	0.80	2.12	20	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HG21	0.80	2.10	17	20
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CG1	0.80	2.07	10	12
1:A:44:THR:HG1	1:A:65:HIS:CD2	0.80	1.93	12	5
1:A:20:LYS:HD2	1:A:24:LEU:HD23	0.80	1.50	14	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG11	0.80	1.51	18	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE2	0.80	1.91	12	4
1:A:82:TYR:CE1	1:A:94:HIS:HE1	0.80	1.94	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:33:ALA:CB	0.80	2.59	7	5
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG12	0.80	1.91	18	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:89:LEU:HD22	0.80	1.75	1	1
1:A:51:THR:N	1:A:60:CYS:O	0.80	2.15	15	8
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CB	0.80	2.30	9	7
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.80	2.06	8	4
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HG3	0.80	1.75	9	8
1:A:44:THR:CG2	1:A:66:ILE:O	0.80	2.30	20	8
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.80	2.06	18	5
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:H	0.80	1.35	20	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HE2	0.80	1.34	12	6
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CD2	0.80	2.11	11	6
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD13	0.80	1.90	19	6
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:CG1	0.80	2.07	17	16
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:HB3	0.80	1.54	18	13
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD22	0.80	2.11	12	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CB	0.80	2.30	9	12
1:A:47:VAL:O	1:A:64:TYR:N	0.80	2.14	7	20
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HB2	0.80	1.53	5	3
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD13	0.80	1.76	11	1
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:CE	0.79	2.60	17	3
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD13	0.79	2.10	2	12
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HB	0.79	1.54	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:CD1	1:A:35:MET:SD	0.79	2.70	10	10
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CD1	0.79	2.13	14	7
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:CB	0.79	2.07	15	1
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:HG12	0.79	2.11	18	16
1:A:82:TYR:CD1	1:A:82:TYR:N	0.79	2.49	1	12
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CG	0.79	2.31	6	6
1:A:62:LYS:HB2	1:A:64:TYR:CE1	0.79	2.11	3	10
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:NE2	0.79	2.45	15	4
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HB	0.79	1.53	12	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CD2	0.79	2.50	11	7
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CD1	0.79	2.08	9	14
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CE2	0.79	2.69	17	20
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD12	0.79	1.76	10	13
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:CB	0.79	2.07	16	17
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:CB	0.79	2.31	16	17
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE3	0.79	1.53	5	2
1:A:37:ARG:HG3	1:A:46:THR:HB	0.79	1.55	2	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CD2	0.79	2.12	13	2
1:A:11:TRP:O	1:A:36:VAL:N	0.79	2.16	20	20
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:CB	0.79	2.06	2	5
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CE1	0.79	2.55	13	16
1:A:101:LEU:O	1:A:103:THR:N	0.79	2.15	5	15
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CG	0.79	2.13	13	3
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE2	0.79	2.12	13	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:H	0.79	1.37	19	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HD23	0.79	2.12	7	1
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:CE1	0.79	2.13	6	8
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:HD1	0.79	1.75	6	11
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CG	0.79	2.29	17	4
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:CD1	0.79	2.45	19	2
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:CE1	0.79	2.66	12	17
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CD1	0.79	2.51	7	2
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:CB	0.79	2.07	17	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CD	0.79	2.08	15	4
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:O	0.79	2.16	11	20
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG23	0.79	2.11	12	19
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HD22	0.79	1.98	13	2
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:N	0.79	2.46	14	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CE2	0.78	2.13	6	6
1:A:36:VAL:CG1	1:A:46:THR:O	0.78	2.31	16	18
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG21	0.78	1.55	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:CG1	0.78	2.09	1	17
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD1	0.78	2.08	17	9
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:HB3	0.78	2.08	10	7
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:O	0.78	2.32	5	8
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.78	1.99	8	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:NH1	0.78	2.45	13	1
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:O	0.78	2.01	4	10
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CE2	0.78	2.66	5	10
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:CE	0.78	2.08	5	1
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:CG2	0.78	2.67	1	2
1:A:62:LYS:CB	1:A:64:TYR:CE1	0.78	2.67	20	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:HD13	0.78	1.94	4	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:N	0.78	2.17	13	8
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:HB2	0.78	1.79	14	9
1:A:44:THR:HB	1:A:66:ILE:O	0.78	1.79	6	15
1:A:67:LYS:CE	1:A:68:GLU:H	0.78	1.92	2	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB2	0.78	2.09	19	11
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:SD	0.78	2.42	11	7
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HD12	0.78	1.99	10	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HB3	0.78	1.93	3	2
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG1	0.78	2.31	7	2
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:CD2	0.78	2.14	3	2
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CG2	0.78	2.09	12	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CH2	0.78	2.72	11	20
1:A:33:ALA:O	1:A:49:VAL:HA	0.78	1.79	15	17
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CB	0.78	2.08	13	14
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG13	0.78	1.56	18	12
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD22	0.78	2.08	4	8
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:N	0.78	2.16	3	9
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HG	0.78	1.56	17	8
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD11	0.78	1.56	9	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD13	0.78	1.56	13	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.77	1.94	9	12
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:82:TYR:HE1	0.77	1.22	4	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG23	0.77	2.07	18	7
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:SD	0.77	2.57	12	16
1:A:79:ALA:O	1:A:80:GLU:C	0.77	2.21	3	20
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD1	0.77	2.63	7	13
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:CA	0.77	2.67	11	5
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CD2	0.77	2.52	2	6
1:A:67:LYS:HD3	1:A:68:GLU:N	0.77	1.95	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG2	0.77	2.61	7	2
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD23	0.77	1.56	17	2
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:NE1	0.77	1.95	1	20
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE1	0.77	2.14	8	5
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:OG	0.77	1.78	4	11
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG23	0.77	1.55	3	2
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:HB3	0.77	2.10	14	20
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HG	0.77	1.79	20	13
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB2	0.77	1.78	17	18
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CD	0.77	2.62	16	4
1:A:22:GLU:CG	1:A:61:ILE:CG2	0.77	2.61	16	4
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:NE2	0.77	2.48	13	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:O	0.77	1.80	12	5
1:A:30:LYS:N	1:A:30:LYS:HD3	0.77	1.95	18	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:HB	0.77	2.10	12	6
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD11	0.77	2.15	16	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:30:LYS:N	0.77	2.47	1	2
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HG	0.77	2.15	7	14
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG23	0.77	1.57	10	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:33:ALA:HB1	0.77	2.10	11	2
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:N	0.76	2.18	7	20
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:CB	0.76	2.61	2	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:CB	0.76	2.48	15	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:84:PHE:CZ	0.76	2.73	17	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HG3	0.76	2.15	9	8
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG23	0.76	1.95	16	3
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG23	0.76	2.14	3	20
1:A:35:MET:N	1:A:48:SER:O	0.76	2.18	1	20
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:HG23	0.76	2.15	20	20
1:A:101:LEU:HD22	1:A:105:LEU:CD2	0.76	2.10	13	11
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:CG1	0.76	2.45	5	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG22	0.76	1.55	18	2
1:A:21:ALA:N	1:A:24:LEU:HD21	0.76	1.95	15	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CZ2	0.76	2.73	6	19
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:HD1	0.76	1.93	9	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:CB	0.76	2.34	14	3
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB3	0.76	1.55	2	5
1:A:32:GLY:CA	1:A:50:PHE:O	0.76	2.33	13	6
1:A:44:THR:OG1	1:A:45:TYR:N	0.76	2.18	15	12
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HA	0.76	2.14	15	15
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:CE1	0.76	2.38	4	5

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:107:TYR:CE1	0.76	2.69	13	1
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:CG1	0.76	1.94	11	18
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CD2	0.76	2.69	10	9
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CD2	0.76	2.15	7	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:HD2	0.76	1.89	12	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:HG23	0.76	1.57	19	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:50:PHE:CE2	0.76	2.15	15	5
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CZ	0.76	2.68	5	10
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CD1	0.76	2.33	11	4
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CD1	0.76	2.47	4	11
1:A:35:MET:SD	1:A:36:VAL:O	0.76	2.43	17	1
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CD1	0.76	2.16	2	20
1:A:85:ASP:C	1:A:89:LEU:HD11	0.76	2.01	12	6
1:A:90:LEU:CD2	1:A:93:TYR:CE1	0.76	2.65	7	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:CA	0.75	2.69	3	20
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HD3	0.75	1.95	19	9
1:A:101:LEU:HD22	1:A:105:LEU:HD21	0.75	1.56	13	8
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HE2	0.75	1.57	10	4
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:CE1	0.75	2.69	7	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CG	0.75	2.10	20	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:HB2	0.75	2.11	20	13
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:N	0.75	2.19	14	20
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HB	0.75	1.56	16	5
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:CG	0.75	2.16	3	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:33:ALA:CB	0.75	2.09	3	3
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:OE1	0.75	2.34	5	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CG	0.75	2.39	19	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:CG2	0.75	2.69	16	20
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:CB	0.75	2.65	11	8
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:O	0.75	2.35	2	10
1:A:104:ARG:CG	1:A:104:ARG:O	0.75	2.34	5	6
1:A:26:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HE2	0.75	1.41	8	6
1:A:26:LEU:CA	1:A:50:PHE:CE2	0.75	2.70	11	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.75	2.58	13	2
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD13	0.75	1.80	18	1
1:A:82:TYR:OH	1:A:100:GLY:N	0.75	2.18	20	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CB	0.75	2.11	16	5
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.75	2.16	19	2
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CD1	0.75	2.16	18	3
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD2	0.75	2.11	11	3
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:NZ	0.75	2.50	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CZ	0.75	2.39	1	6
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:CB	0.75	2.34	4	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:SD	0.75	2.74	10	4
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:O	0.75	2.05	10	2
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CZ	0.75	2.40	14	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG21	0.75	2.17	16	19
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HG21	0.75	1.56	18	14
1:A:43:GLY:CA	1:A:76:TYR:CZ	0.75	2.70	8	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:CE1	0.75	2.17	7	7
1:A:24:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG11	0.75	1.59	17	3
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HG3	0.75	2.12	15	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:OH	0.75	2.20	5	4
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:CE1	0.75	2.40	15	4
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:HA3	0.75	2.17	12	4
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CB	0.75	2.35	12	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:CG2	0.74	2.50	17	3
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:CD1	0.74	2.12	13	12
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE1	0.74	2.70	7	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CE1	0.74	2.75	17	1
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:CD1	0.74	2.50	11	13
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.74	2.35	14	5
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:N	0.74	2.19	6	20
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:N	0.74	2.20	2	11
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:HG13	0.74	1.58	15	1
1:A:35:MET:SD	1:A:36:VAL:N	0.74	2.61	17	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE1	0.74	2.41	7	5
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG1	0.74	2.34	11	5
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CG	0.74	2.36	9	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:O	0.74	2.20	18	2
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:CG2	0.74	2.70	9	15
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB2	0.74	1.57	8	14
1:A:33:ALA:N	1:A:50:PHE:O	0.74	2.20	3	20
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:CD1	0.74	2.13	3	16
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:SD	0.74	2.21	10	4
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CB	0.74	2.64	14	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CG2	0.74	2.12	6	5
1:A:12:TYR:CE2	1:A:45:TYR:CD2	0.74	2.75	12	1
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:HB2	0.74	2.11	12	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CD2	0.74	2.35	15	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:30:LYS:H	0.74	1.96	17	3
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:HD2	0.74	1.98	15	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.74	2.60	16	18
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:HD1	0.74	1.39	9	5
1:A:96:TYR:CD1	1:A:96:TYR:C	0.74	2.61	4	5
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CE2	0.74	2.17	20	1
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD2	0.74	2.40	20	11
1:A:110:CYS:SG	1:A:110:CYS:O	0.74	2.45	20	17
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:CG1	0.74	2.69	18	2
1:A:81:LYS:C	1:A:82:TYR:CD1	0.74	2.61	11	5
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:N	0.74	1.81	17	6
1:A:25:LEU:O	1:A:29:GLY:N	0.74	2.21	10	3
1:A:96:TYR:CE2	1:A:97:ASN:ND2	0.74	2.56	11	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CB	0.74	2.13	16	5
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HG3	0.74	2.12	9	2
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CZ	0.74	2.16	20	1
1:A:37:ARG:N	1:A:46:THR:O	0.73	2.21	18	20
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CE1	0.73	2.16	1	1
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:CG	0.73	2.17	16	2
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HG12	0.73	1.59	15	6
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HG	0.73	1.83	18	5
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:N	0.73	2.55	4	16
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HG	0.73	1.57	9	12
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:O	0.73	2.06	5	14
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CB	0.73	2.51	3	2
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD1	0.73	2.71	2	5
1:A:81:LYS:CE	1:A:99:GLY:O	0.73	2.36	3	1
1:A:42:PRO:HD2	1:A:44:THR:HG22	0.73	1.60	5	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HB2	0.73	2.17	20	1
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:CZ	0.73	2.70	12	1
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:HD11	0.73	1.98	11	7
1:A:78:VAL:HG21	1:A:101:LEU:HD11	0.73	1.60	10	4
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:NE2	0.73	1.98	6	10
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:CG1	0.73	2.67	13	20
1:A:13:ASN:HD21	1:A:24:LEU:HD13	0.73	1.40	4	1
1:A:102:VAL:CG1	1:A:103:THR:N	0.73	2.51	11	3
1:A:82:TYR:OH	1:A:101:LEU:CD1	0.73	2.36	20	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE1	0.73	1.98	2	10
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:CB	0.73	2.67	20	15
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE2	0.73	1.84	17	3
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:OG	0.73	2.37	17	2
1:A:64:TYR:HH	1:A:102:VAL:HG13	0.73	1.40	7	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:78:VAL:O	0.73	2.37	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG13	0.73	1.60	16	17
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG2	0.73	2.64	3	3
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.73	1.83	15	5
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:HZ2	0.73	1.44	15	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:SD	0.73	2.68	10	12
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:HG21	0.73	1.59	19	6
1:A:67:LYS:CD	1:A:77:TYR:CE1	0.73	2.71	2	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CB	0.73	2.36	5	3
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:HB3	0.73	2.04	4	5
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD21	0.73	2.14	15	3
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:NE	0.73	2.22	13	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CG	0.72	2.36	2	12
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CD1	0.72	2.66	19	9
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:109:VAL:HG23	0.72	1.44	11	2
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:CG2	0.72	2.37	10	3
1:A:36:VAL:CA	1:A:46:THR:O	0.72	2.37	3	20
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:CD2	0.72	2.43	2	3
1:A:44:THR:HG22	1:A:68:GLU:OE1	0.72	1.84	4	2
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:CD2	0.72	2.57	15	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:NZ	0.72	2.23	17	4
1:A:41:THR:HG1	1:A:42:PRO:HD3	0.72	1.43	5	1
1:A:81:LYS:C	1:A:82:TYR:HD1	0.72	1.87	8	4
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD1	0.72	2.19	7	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HB2	0.72	2.14	2	17
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG12	0.72	2.04	6	11
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:O	0.72	2.21	12	15
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CZ	0.72	2.42	12	4
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE1	0.72	2.20	10	12
1:A:62:LYS:HB2	1:A:64:TYR:CZ	0.72	2.19	5	11
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:OG1	0.72	2.22	4	9
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:N	0.72	2.22	9	6
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HG2	0.72	2.14	17	2
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CE2	0.72	2.20	7	4
1:A:69:THR:HG23	1:A:83:VAL:HG11	0.72	1.59	16	5
1:A:82:TYR:CE2	1:A:94:HIS:HE1	0.72	2.02	17	1
1:A:32:GLY:O	1:A:106:ARG:CB	0.72	2.38	19	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CD2	0.72	2.73	12	5
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:SD	0.72	2.25	10	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:CE2	0.72	2.78	16	20
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:HB2	0.72	2.14	2	10
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:NE2	0.72	1.99	20	9

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:CZ	0.72	2.19	18	17
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:HD1	0.72	1.80	3	19
1:A:34:PHE:HB2	1:A:105:LEU:HD12	0.72	1.60	12	8
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD1	0.72	2.37	6	2
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB2	0.72	1.60	9	3
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CG	0.72	2.20	11	10
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CD2	0.72	2.18	10	5
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:N	0.72	2.52	9	10
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:C	0.72	2.27	10	7
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:CB	0.72	2.15	13	4
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:HG2	0.72	1.85	3	1
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:HG3	0.72	1.85	16	7
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CE1	0.72	2.20	6	5
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CE1	0.72	2.20	18	3
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:H	0.72	1.98	8	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:82:TYR:O	0.72	1.85	9	3
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CG1	0.71	2.15	10	15
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:HD11	0.71	2.19	9	16
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HB3	0.71	1.85	2	2
1:A:67:LYS:CD	1:A:68:GLU:N	0.71	2.53	2	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:45:TYR:CD2	0.71	2.71	3	2
1:A:11:TRP:O	1:A:13:ASN:ND2	0.71	2.23	20	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CG	0.71	2.38	15	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG1	0.71	2.14	2	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:NE2	0.71	2.38	13	3
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:CE1	0.71	2.63	10	14
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:CD1	0.71	2.68	11	15
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HG12	0.71	2.20	20	9
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB3	0.71	2.15	18	6
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG23	0.71	2.15	11	3
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:CB	0.71	2.65	15	4
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HG2	0.71	2.14	19	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:SD	0.71	2.78	10	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CE2	0.71	2.19	20	20
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:NE2	0.71	2.23	7	7
1:A:30:LYS:HE2	1:A:33:ALA:HB2	0.71	1.62	5	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CZ	0.71	2.78	13	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:35:MET:SD	0.71	2.79	4	7
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:N	0.71	2.00	4	20
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.71	2.20	4	2
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:CG1	0.71	2.59	9	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG11	0.71	1.61	8	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:HA	0.71	1.61	14	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD2	0.71	2.20	17	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CE	0.71	2.38	20	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG21	0.71	1.63	20	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CE1	0.71	2.20	4	4
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HG11	0.71	1.86	9	5
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE2	0.71	2.79	13	2
1:A:95:GLN:HE22	1:A:105:LEU:CG	0.71	1.98	15	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CD	0.71	2.38	1	6
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CD2	0.71	2.74	7	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:CE1	0.71	2.58	8	2
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:CG2	0.71	2.69	12	6
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD1	0.71	2.16	13	12
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:NE2	0.71	1.99	20	11
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CE1	0.71	2.20	8	18
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CG2	0.71	2.16	16	8
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HA	0.71	1.85	12	20
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG2	0.71	1.85	6	10
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:O	0.71	1.85	8	16
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CD2	0.71	2.74	12	2
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:CD2	0.71	2.14	18	2
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE1	0.71	2.02	7	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG13	0.71	2.16	12	4
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.71	2.79	13	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HB2	0.71	2.21	20	1
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:HD12	0.71	1.86	6	12
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CB	0.71	2.13	18	9
1:A:90:LEU:CD2	1:A:93:TYR:HE1	0.71	1.97	7	2
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:HG13	0.71	1.61	18	2
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:N	0.70	2.23	18	20
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:OH	0.70	1.85	11	5
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CH2	0.70	2.21	16	7
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG22	0.70	1.87	2	2
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:CD	0.70	2.39	13	4
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HD12	0.70	2.15	19	9
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CE	0.70	2.39	5	4
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:CE	0.70	2.15	8	4
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD2	0.70	2.21	15	11
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:CD1	0.70	2.69	11	1
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:33:ALA:HB2	0.70	1.45	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:THR:HG23	1:A:65:HIS:CD2	0.70	2.21	18	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CE1	0.70	2.21	11	5
1:A:74:LYS:HG3	1:A:84:PHE:HA	0.70	1.63	6	1
1:A:22:GLU:CA	1:A:25:LEU:HD12	0.70	2.12	10	1
1:A:94:HIS:O	1:A:97:ASN:ND2	0.70	2.25	20	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CD	0.70	2.17	19	10
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:CG	0.70	2.40	12	3
1:A:43:GLY:HA3	1:A:68:GLU:OE2	0.70	1.86	8	1
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:CZ	0.70	2.40	11	2
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE2	0.70	2.75	13	2
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG12	0.70	2.17	18	20
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:CB	0.70	2.70	4	8
1:A:42:PRO:HD2	1:A:44:THR:CG2	0.70	2.17	5	1
1:A:98:GLY:O	1:A:100:GLY:N	0.70	2.24	13	4
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CD2	0.70	2.21	19	3
1:A:43:GLY:HA2	1:A:76:TYR:CZ	0.70	2.21	8	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HG	0.70	2.17	20	2
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:CB	0.70	2.70	17	2
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:HB	0.70	1.87	19	7
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG2	0.70	2.16	20	3
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:C	0.70	2.60	13	2
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:OG	0.70	1.86	11	6
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:CE1	0.70	2.22	13	2
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:CD1	0.70	2.45	15	8
1:A:35:MET:O	1:A:35:MET:HG3	0.70	1.85	20	3
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CA	0.70	2.40	1	9
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CD1	0.70	2.65	20	7
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CA	0.70	2.40	9	17
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CZ	0.70	2.22	13	1
1:A:39:SER:CB	1:A:44:THR:HG23	0.70	2.16	18	1
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:N	0.70	2.44	3	20
1:A:61:ILE:HD12	1:A:61:ILE:N	0.70	2.02	18	6
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CD	0.70	2.40	8	3
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:NZ	0.70	2.02	15	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:HB3	0.70	2.17	17	6
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:CD1	0.70	2.53	12	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:HE2	0.69	1.45	18	6
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:CA	0.69	2.36	3	12
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG3	0.69	1.86	13	10
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:N	0.69	2.24	16	8
1:A:43:GLY:CA	1:A:68:GLU:OE2	0.69	2.40	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:CYS:O	1:A:110:CYS:SG	0.69	2.50	9	2
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:OH	0.69	2.25	18	6
1:A:85:ASP:H	1:A:89:LEU:CD1	0.69	2.00	14	3
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:CD2	0.69	2.22	7	5
1:A:94:HIS:CD2	1:A:105:LEU:HD22	0.69	2.23	18	4
1:A:44:THR:CA	1:A:68:GLU:OE1	0.69	2.40	4	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:OE1	0.69	2.09	4	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CD1	0.69	2.22	10	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HD22	0.69	2.22	18	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CD1	0.69	2.39	11	6
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:HA	0.69	2.22	3	8
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB3	0.69	1.86	20	6
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:CD1	0.69	2.39	11	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CG	0.69	2.40	19	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG2	0.69	1.87	20	13
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:CD1	0.69	2.61	11	15
1:A:75:ARG:CG	1:A:84:PHE:O	0.69	2.40	7	3
1:A:94:HIS:CG	1:A:105:LEU:CD2	0.69	2.75	17	5
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD12	0.69	1.63	10	1
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:N	0.69	2.02	3	9
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:CE	0.69	2.61	12	3
1:A:10:GLU:CD	1:A:107:TYR:CZ	0.69	2.66	14	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CD	0.69	2.17	16	14
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HE2	0.69	2.18	15	3
1:A:45:TYR:O	1:A:65:HIS:ND1	0.69	2.25	10	13
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:HA	0.69	2.02	13	6
1:A:44:THR:CG2	1:A:68:GLU:OE1	0.69	2.40	4	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG12	0.69	2.03	15	9
1:A:25:LEU:HD13	1:A:50:PHE:HB3	0.69	1.65	15	3
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HG	0.69	2.21	7	3
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:O	0.69	2.10	16	14
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:O	0.69	2.10	5	11
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD2	0.69	2.70	4	4
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.69	2.18	16	12
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CB	0.69	2.17	14	8
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CB	0.69	2.40	11	3
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD2	0.69	2.17	9	2
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:H	0.69	2.00	15	1
1:A:37:ARG:HD2	1:A:46:THR:CG2	0.69	2.18	17	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CG	0.69	2.76	10	8
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HB3	0.69	2.22	2	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CG	0.69	2.41	10	7
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:HB2	0.69	1.64	11	9
1:A:39:SER:OG	1:A:40:ARG:N	0.69	2.26	3	5
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:CG	0.69	2.18	9	10
1:A:67:LYS:CE	1:A:68:GLU:N	0.69	2.56	2	1
1:A:44:THR:N	1:A:68:GLU:OE1	0.69	2.26	4	3
1:A:75:ARG:N	1:A:84:PHE:O	0.69	2.24	18	8
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:CG2	0.69	2.31	8	2
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LEU:CD2	0.69	2.71	20	7
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:CD1	0.69	2.55	14	5
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD21	0.69	1.64	18	2
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CE1	0.69	2.45	20	5
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD21	0.69	1.87	14	1
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:HG23	0.69	2.17	19	1
1:A:32:GLY:N	1:A:50:PHE:O	0.69	2.26	5	7
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:H	0.69	1.48	5	11
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:N	0.69	2.61	4	19
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:HB2	0.69	2.16	4	4
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:CD1	0.69	2.14	5	8
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HG2	0.69	1.87	17	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG12	0.69	1.65	8	16
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:O	0.69	2.41	17	7
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:CE	0.69	2.71	5	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HB2	0.69	2.18	5	3
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HB	0.69	2.18	12	6
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:N	0.69	2.03	20	1
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:HD13	0.68	1.48	19	5
1:A:97:ASN:O	1:A:99:GLY:N	0.68	2.26	7	3
1:A:82:TYR:OH	1:A:101:LEU:HD13	0.68	1.88	20	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:O	0.68	2.51	13	3
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CD1	0.68	2.41	9	6
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:HD12	0.68	2.19	3	8
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:CD1	0.68	2.76	15	7
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CD2	0.68	2.76	14	3
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE3	0.68	2.17	12	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CE2	0.68	2.22	18	1
1:A:30:LYS:N	1:A:30:LYS:HE3	0.68	2.03	1	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:HB2	0.68	2.04	13	2
1:A:34:PHE:CE1	1:A:91:ILE:HD12	0.68	2.24	7	20
1:A:82:TYR:CE2	1:A:99:GLY:HA2	0.68	2.23	1	4
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:O	0.68	2.27	2	2

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:HG13	0.68	2.17	2	3
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE2	0.68	2.82	10	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HB	0.68	1.64	13	2
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:C	0.68	2.32	2	6
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:HD12	0.68	2.08	4	13
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD2	0.68	2.23	16	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HG	0.68	1.65	10	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:HD2	0.68	1.41	7	2
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:HE2	0.68	1.44	14	4
1:A:106:ARG:HG3	1:A:107:TYR:N	0.68	2.02	20	2
1:A:21:ALA:HB3	1:A:37:ARG:CZ	0.68	2.18	17	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE1	0.68	2.06	20	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG13	0.68	1.87	3	6
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG2	0.68	2.18	4	2
1:A:74:LYS:NZ	1:A:83:VAL:O	0.68	2.26	2	1
1:A:104:ARG:O	1:A:106:ARG:N	0.68	2.25	17	5
1:A:90:LEU:HD23	1:A:94:HIS:CD2	0.68	2.23	13	3
1:A:37:ARG:NH1	1:A:39:SER:OG	0.68	2.27	11	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:CB	0.68	2.72	17	19
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CG2	0.68	2.02	1	20
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD11	0.68	1.64	15	8
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:CG1	0.68	2.72	2	2
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:NE	0.68	2.26	7	4
1:A:12:TYR:CE2	1:A:45:TYR:HD2	0.68	2.07	12	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:111:GLY:C	0.68	2.07	19	1
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:CG2	0.68	2.70	1	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:O	0.68	2.12	9	14
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.68	2.59	12	5
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:N	0.68	2.27	13	5
1:A:95:GLN:HE22	1:A:105:LEU:HD12	0.68	1.48	4	1
1:A:30:LYS:HA	1:A:30:LYS:HE2	0.68	1.66	9	3
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD2	0.68	2.81	20	2
1:A:6:LEU:HB2	1:A:11:TRP:CH2	0.68	2.24	12	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:46:THR:HG22	0.68	2.03	16	2
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG13	0.68	1.65	13	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:HA	0.68	1.88	18	17
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CG	0.68	2.42	13	2
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:109:VAL:CG1	0.68	1.93	12	3
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:CG1	0.68	2.41	9	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:36:VAL:O	0.68	2.12	10	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CZ	0.68	2.23	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HE2	0.68	2.04	15	1
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CD2	0.68	2.23	20	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:50:PHE:CB	0.68	2.72	11	7
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.68	2.18	7	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HG2	0.68	1.89	8	3
1:A:37:ARG:NH2	1:A:63:HIS:HB3	0.68	2.04	10	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG22	0.68	1.88	11	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:82:TYR:OH	0.68	2.30	17	1
1:A:34:PHE:CD2	1:A:95:GLN:NE2	0.68	2.62	9	6
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:NE2	0.68	2.27	14	4
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:HG21	0.68	2.04	2	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HB	0.68	1.66	18	8
1:A:43:GLY:CA	1:A:68:GLU:HG3	0.68	2.19	8	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:50:PHE:HB2	0.67	2.19	11	8
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:N	0.67	2.43	17	5
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:CD1	0.67	2.67	18	3
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:HG2	0.67	2.18	15	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:O	0.67	1.89	2	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HG13	0.67	2.09	14	5
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:HA	0.67	2.23	3	6
1:A:85:ASP:OD2	1:A:89:LEU:CD2	0.67	2.42	8	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:62:LYS:HG2	0.67	1.64	17	2
1:A:29:GLY:N	1:A:30:LYS:HZ2	0.67	1.86	13	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE3	0.67	1.88	15	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:94:HIS:CE1	0.67	2.82	20	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD1	0.67	2.71	5	15
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:HE1	0.67	1.49	17	3
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CD1	0.67	2.24	3	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:99:GLY:HA2	0.67	2.24	3	5
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.67	2.62	11	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:ND2	0.67	2.27	20	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CG	0.67	2.73	15	13
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD22	0.67	2.20	20	5
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:HG21	0.67	1.67	20	8
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:OE1	0.67	2.12	7	4
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HD22	0.67	2.24	18	2
1:A:14:LYS:HG3	1:A:15:SER:N	0.67	2.04	14	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG1	0.67	2.19	17	5
1:A:30:LYS:O	1:A:33:ALA:N	0.67	2.26	17	10
1:A:67:LYS:HE2	1:A:68:GLU:H	0.67	1.46	2	1
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HE2	0.67	1.65	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:HD23	0.67	1.89	11	5
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HG3	0.67	1.90	5	3
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HD11	0.67	2.20	10	2
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:HB	0.67	2.04	16	2
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:HD2	0.67	2.19	13	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE3	0.67	2.04	6	3
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:NE2	0.67	1.88	9	12
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CG1	0.67	2.42	7	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:HZ3	0.67	1.47	2	9
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:CG2	0.67	2.19	16	9
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CE2	0.67	2.24	10	4
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:HD22	0.67	1.50	6	3
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG2	0.67	2.72	18	5
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD21	0.67	2.10	15	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HA	0.67	2.23	17	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CB	0.67	2.43	1	5
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:O	0.67	2.42	2	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CZ	0.67	2.24	18	8
1:A:104:ARG:O	1:A:105:LEU:C	0.67	2.33	11	10
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:NE2	0.67	2.28	13	3
1:A:42:PRO:O	1:A:68:GLU:OE2	0.67	2.13	8	2
1:A:13:ASN:HD21	1:A:24:LEU:HD22	0.67	1.48	17	4
1:A:69:THR:HG22	1:A:75:ARG:O	0.67	1.90	12	5
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:C	0.67	2.33	12	13
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.67	2.58	20	12
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG2	0.67	2.19	6	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HB3	0.67	2.20	7	5
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:HB3	0.67	2.18	11	5
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.67	2.61	20	3
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CG	0.67	2.43	3	3
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HE2	0.67	1.89	17	2
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:HG22	0.67	1.88	12	1
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:CB	0.66	2.20	1	11
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CG	0.66	2.49	20	4
1:A:20:LYS:HD3	1:A:24:LEU:HD23	0.66	1.66	10	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE1	0.66	2.83	12	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE2	0.66	2.08	13	2
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:HB2	0.66	2.04	13	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:NE2	0.66	2.49	14	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CA	0.66	2.77	17	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CG	0.66	2.21	20	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:N	1:A:108:PRO:HB2	0.66	2.05	5	15
1:A:81:LYS:HE2	1:A:101:LEU:CD1	0.66	2.20	3	2
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:N	0.66	2.04	4	3
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CG	0.66	2.17	20	8
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:O	0.66	2.40	7	4
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.66	2.25	8	4
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:CG2	0.66	2.20	18	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD3	0.66	2.21	15	9
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:CG2	0.66	2.20	12	7
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG2	0.66	2.19	18	11
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CB	0.66	2.43	17	2
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:OH	0.66	2.43	20	4
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:N	0.66	2.04	20	3
1:A:37:ARG:NH2	1:A:47:VAL:C	0.66	2.48	16	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:CZ	0.66	2.73	13	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD22	0.66	2.10	19	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HD12	0.66	2.24	13	12
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:C	0.66	2.33	5	15
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD13	0.66	2.25	7	2
1:A:37:ARG:NH2	1:A:48:SER:N	0.66	2.43	16	2
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:CZ	0.66	2.20	13	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG22	0.66	2.19	4	7
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CG1	0.66	2.20	4	5
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:CD2	0.66	2.20	10	7
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:HG	0.66	1.91	4	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CD	0.66	2.20	13	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:CB	0.66	2.58	1	4
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:HG23	0.66	1.66	5	4
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.21	18	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:H	0.66	2.04	6	8
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:N	0.66	2.26	7	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:84:PHE:CE2	0.66	2.84	17	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:C	0.66	2.63	18	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:HD11	0.66	2.05	19	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:N	0.66	2.51	19	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD2	0.66	2.20	7	8
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HG23	0.66	1.66	15	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG2	0.66	1.90	12	4
1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CD	0.66	2.59	10	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CE	0.66	2.73	12	2
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:NH1	0.66	2.04	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:HG13	0.66	1.68	13	1
1:A:67:LYS:C	1:A:68:GLU:OE1	0.66	2.34	19	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CB	0.66	2.78	1	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:HA	0.66	2.06	2	3
1:A:81:LYS:HE3	1:A:93:TYR:OH	0.66	1.89	11	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:30:LYS:CA	0.66	2.21	9	2
1:A:93:TYR:HA	1:A:96:TYR:CE1	0.66	2.25	9	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HG	0.66	2.03	11	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.16	13	1
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:HG2	0.66	1.91	9	14
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HG	0.66	2.26	3	9
1:A:74:LYS:HA	1:A:83:VAL:O	0.66	1.91	4	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:CG2	0.66	2.21	8	3
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CE	0.66	2.20	12	3
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CZ	0.66	2.26	12	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:107:TYR:O	0.66	2.49	13	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HG	0.66	1.91	15	12
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:O	0.66	2.34	2	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CD2	0.66	2.26	7	11
1:A:74:LYS:CG	1:A:84:PHE:HA	0.66	2.20	6	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD12	0.66	1.66	7	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:HE2	0.66	1.51	10	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:74:LYS:O	0.66	2.40	12	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:OG	0.65	2.44	19	3
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:CE	0.65	2.74	5	4
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG2	0.65	2.68	4	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD3	0.65	1.90	13	5
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CE1	0.65	2.25	13	2
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:CG	0.65	2.42	16	3
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HB2	0.65	2.22	14	2
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:HD2	0.65	1.90	11	1
1:A:34:PHE:HZ	1:A:91:ILE:CD1	0.65	2.02	12	20
1:A:35:MET:HG3	1:A:36:VAL:N	0.65	2.06	13	7
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:CE	0.65	2.21	8	7
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HA	0.65	1.68	16	19
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:CB	0.65	2.74	2	7
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG13	0.65	1.67	3	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD13	0.65	2.26	10	4
1:A:13:ASN:CG	1:A:36:VAL:O	0.65	2.35	10	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:CD1	0.65	2.79	2	12
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HD1	0.65	1.50	10	13

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:CD2	0.65	2.85	9	12
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HA	0.65	1.90	5	7
1:A:93:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA3	0.65	1.92	8	3
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:HG3	0.65	2.11	8	1
1:A:62:LYS:HZ3	1:A:64:TYR:HE1	0.65	1.30	8	4
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CG2	0.65	2.43	9	2
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HG	0.65	1.65	18	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:HB3	0.65	2.22	18	12
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:HE1	0.65	2.04	7	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:CG	0.65	2.58	15	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE1	0.65	1.90	4	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HG21	0.65	1.69	6	4
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:HH	0.65	1.32	10	1
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA2	0.65	1.90	20	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:CE	0.65	2.05	3	10
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE2	0.65	2.07	1	7
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HB3	0.65	1.91	12	13
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:CE1	0.65	2.25	3	2
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG2	0.65	1.92	3	5
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB3	0.65	2.12	6	4
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HD3	0.65	1.69	19	4
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CE2	0.65	2.26	7	2
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:HA	0.65	1.92	9	5
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CB	0.65	2.22	12	3
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:CE	0.65	2.21	10	2
1:A:82:TYR:CZ	1:A:99:GLY:HA2	0.65	2.26	1	7
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:O	0.65	1.91	5	8
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:CD2	0.65	2.04	18	1
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CE1	0.65	2.80	19	20
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CB	0.65	2.22	4	4
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:OH	0.65	1.92	4	2
1:A:46:THR:HG23	1:A:65:HIS:HD2	0.65	1.51	18	1
1:A:101:LEU:HD21	1:A:105:LEU:HD23	0.65	1.68	20	1
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:CZ	0.65	2.80	18	5
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:CD1	0.65	2.72	16	8
1:A:34:PHE:CD2	1:A:95:GLN:OE1	0.65	2.50	5	2
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG12	0.65	1.69	8	5
1:A:13:ASN:C	1:A:14:LYS:HE2	0.65	2.11	7	1
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.65	2.60	8	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CE1	0.65	2.26	17	2
1:A:16:ILE:HG21	1:A:37:ARG:CG	0.65	2.22	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD2	0.65	2.19	10	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:HB2	0.65	2.22	18	2
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:N	0.65	2.06	9	18
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:CG1	0.65	2.80	9	18
1:A:49:VAL:O	1:A:62:LYS:N	0.65	2.30	15	13
1:A:37:ARG:HH21	1:A:47:VAL:C	0.65	1.95	16	2
1:A:9:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.64	2.31	6	13
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:CD	0.64	2.60	13	20
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CG	0.64	2.75	20	4
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:HG13	0.64	2.21	15	2
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG21	0.64	2.22	19	3
1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HE3	0.64	1.50	15	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CE	0.64	2.22	17	13
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CG	0.64	2.85	20	3
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.64	2.70	3	14
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB2	0.64	1.91	18	7
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:CE	0.64	2.75	10	1
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:CE1	0.64	2.69	18	2
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:CE	0.64	2.60	1	3
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:HG23	0.64	1.67	1	1
1:A:67:LYS:HE2	1:A:68:GLU:N	0.64	2.05	2	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CE1	0.64	2.28	16	10
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CZ	0.64	2.26	12	3
1:A:75:ARG:HG2	1:A:84:PHE:O	0.64	1.92	8	3
1:A:69:THR:HG22	1:A:83:VAL:HG11	0.64	1.67	10	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:HG11	0.64	1.62	13	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:HB	0.64	2.22	13	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD3	0.64	1.91	13	4
1:A:47:VAL:HG13	1:A:64:TYR:CB	0.64	2.20	13	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:NE2	0.64	2.06	7	3
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:CB	0.64	2.60	15	1
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CD1	0.64	2.71	19	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HB3	0.64	1.93	14	4
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:HE1	0.64	2.21	5	3
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:CG	0.64	2.45	4	1
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:HB3	0.64	1.93	10	2
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CE1	0.64	2.28	13	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CD1	0.64	2.21	10	4
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:CG2	0.64	2.20	2	4
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:C	0.64	2.48	16	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:33:ALA:HB1	0.64	1.67	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:CG	1:A:85:ASP:HA	0.64	2.23	15	4
1:A:30:LYS:CE	1:A:30:LYS:CA	0.64	2.75	19	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:35:MET:HE1	0.64	2.22	17	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:102:VAL:HG22	0.64	1.53	20	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:CG1	0.64	2.80	19	7
1:A:79:ALA:N	1:A:81:LYS:HD2	0.64	2.07	2	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG13	0.64	1.69	19	2
1:A:14:LYS:HE3	1:A:16:ILE:N	0.64	2.08	7	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:OG1	0.64	2.46	8	1
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:CG	0.64	2.45	10	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD1	0.64	2.50	19	1
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:OG1	0.64	2.14	2	11
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:CG2	0.64	2.65	13	6
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:HD11	0.64	2.21	11	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:OG	0.64	2.16	14	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:101:LEU:HD11	0.64	2.06	20	1
1:A:65:HIS:C	1:A:66:ILE:HD13	0.64	2.12	1	10
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:O	0.64	2.46	13	3
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:O	0.64	2.16	1	1
1:A:21:ALA:HB3	1:A:48:SER:OG	0.64	1.93	19	3
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CD	0.64	2.36	7	4
1:A:50:PHE:CA	1:A:61:ILE:HD12	0.64	2.22	5	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HG3	0.64	1.92	9	3
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:CD1	0.64	2.81	18	3
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HD3	0.64	1.69	13	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE2	0.64	2.27	17	2
1:A:44:THR:HG21	1:A:65:HIS:HD1	0.64	1.51	18	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:HB3	0.64	1.69	10	5
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:CA	0.64	2.46	5	2
1:A:75:ARG:HG3	1:A:84:PHE:O	0.64	1.92	7	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.63	2.09	17	4
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CD1	0.63	2.81	16	9
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.63	2.23	7	7
1:A:81:LYS:HE3	1:A:101:LEU:CD1	0.63	2.23	14	2
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:C	0.63	2.36	5	7
1:A:39:SER:HB3	1:A:44:THR:O	0.63	1.92	18	2
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG13	0.63	1.68	8	2
1:A:93:TYR:CZ	1:A:99:GLY:HA3	0.63	2.28	11	4
1:A:30:LYS:H	1:A:30:LYS:HE3	0.63	1.51	17	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE2	0.63	1.93	4	1
1:A:30:LYS:CA	1:A:30:LYS:HE2	0.63	2.23	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:OE1	1:A:108:PRO:HD3	0.63	1.94	12	5
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG12	0.63	1.70	16	5
1:A:29:GLY:O	1:A:33:ALA:CB	0.63	2.36	10	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG23	0.63	1.69	11	1
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:CE1	0.63	2.81	18	2
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG3	0.63	1.70	15	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:NZ	0.63	2.61	16	1
1:A:30:LYS:N	1:A:30:LYS:CD	0.63	2.61	18	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:102:VAL:HG21	0.63	2.23	20	1
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HB	0.63	1.92	12	14
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:HD1	0.63	1.50	6	4
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:OG1	0.63	2.16	5	4
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE3	0.63	2.08	11	2
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:CG2	0.63	2.21	12	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:CB	0.63	2.73	12	4
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:CD	0.63	2.46	11	1
1:A:33:ALA:O	1:A:50:PHE:N	0.63	2.29	19	20
1:A:39:SER:CB	1:A:44:THR:O	0.63	2.47	6	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG11	0.63	1.71	7	2
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.63	2.76	10	4
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:CB	0.63	2.47	5	13
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.63	2.40	13	19
1:A:43:GLY:HA3	1:A:68:GLU:CG	0.63	2.24	8	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:108:PRO:HB3	0.63	2.29	14	20
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:CD2	0.63	2.60	17	5
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CG	0.63	2.47	11	13
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HG3	0.63	1.94	3	7
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG23	0.63	1.93	11	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:45:TYR:CD2	0.63	2.11	12	1
1:A:97:ASN:O	1:A:98:GLY:O	0.63	2.15	17	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:C	0.63	2.14	13	3
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:O	0.63	1.94	20	5
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HA	0.63	1.71	20	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HB3	0.63	1.93	5	4
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CG	0.63	2.29	16	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE2	0.63	2.23	4	3
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CE2	0.63	2.81	12	5
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:CG2	0.63	2.77	6	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CD1	0.62	2.67	3	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:CG	0.62	2.24	20	7
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:HG2	0.62	1.94	8	1

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:HE3	0.62	2.23	12	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:O	0.62	2.32	18	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:99:GLY:O	0.62	1.94	3	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HB	0.62	1.93	11	3
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CD	0.62	2.15	12	3
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:OD1	0.62	2.32	11	2
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:HG23	0.62	2.23	6	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:CA	0.62	2.24	7	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:103:THR:O	0.62	2.14	19	3
1:A:44:THR:HG22	1:A:68:GLU:HG3	0.62	1.71	20	2
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CG	0.62	2.37	20	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:O	0.62	2.17	2	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:CD	0.62	2.25	3	3
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HB3	0.62	1.94	5	4
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ASP:H	0.62	1.54	11	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:31:GLU:O	0.62	2.47	16	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:O	0.62	2.17	13	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:CA	0.62	2.23	14	1
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:CD	0.62	2.58	16	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CB	0.62	2.82	10	10
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:HB2	0.62	2.24	3	9
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CD	0.62	2.20	6	5
1:A:49:VAL:O	1:A:61:ILE:HA	0.62	1.95	12	7
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HG13	0.62	1.72	9	11
1:A:81:LYS:HE2	1:A:101:LEU:HD12	0.62	1.72	3	1
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:C	0.62	2.36	16	8
1:A:51:THR:OG1	1:A:60:CYS:SG	0.62	2.56	5	2
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:CG1	0.62	2.25	2	4
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HB	0.62	1.70	8	12
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:CD	0.62	2.15	4	2
1:A:106:ARG:CZ	1:A:106:ARG:CB	0.62	2.77	13	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:HG22	0.62	1.72	18	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CE2	0.62	2.87	2	18
1:A:30:LYS:CD	1:A:30:LYS:H	0.62	2.08	1	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:HD1	0.62	1.43	1	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG13	0.62	1.72	12	6
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CB	0.62	2.25	19	5
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE3	0.62	1.70	6	3
1:A:12:TYR:O	1:A:13:ASN:OD1	0.62	2.17	7	2
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CE	0.62	2.25	19	2
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG3	0.62	2.13	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLN:OE1	1:A:95:GLN:OE1	0.62	2.18	18	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:HB2	0.62	2.25	13	13
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:CZ	0.62	2.30	2	1
1:A:103:THR:HG1	1:A:106:ARG:HB2	0.62	1.55	5	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HG2	0.62	1.71	6	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:HE2	0.62	2.15	12	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:HB1	0.62	2.10	17	2
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:OE2	0.62	2.17	1	6
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:NH1	0.62	2.33	4	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG2	0.62	2.24	6	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG11	0.62	2.23	7	2
1:A:35:MET:HG2	1:A:36:VAL:N	0.62	2.09	7	4
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:CD1	0.62	2.74	11	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CB	0.62	2.25	13	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HB2	0.62	2.25	14	3
1:A:39:SER:CB	1:A:44:THR:CG2	0.62	2.78	18	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.62	2.83	1	7
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG13	0.62	2.25	6	2
1:A:77:TYR:HB2	1:A:82:TYR:O	0.62	1.95	17	9
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CE1	0.62	2.53	10	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE2	0.62	2.87	10	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:CG1	0.62	2.25	18	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:SER:N	0.62	2.63	4	18
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:CD1	0.62	2.48	6	3
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HB2	0.62	1.95	7	10
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:CG1	0.62	2.77	20	5
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CE1	0.62	2.67	18	12
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:O	0.62	2.18	7	5
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CG	0.62	2.24	20	4
1:A:43:GLY:HA2	1:A:76:TYR:OH	0.62	1.94	8	1
1:A:29:GLY:O	1:A:50:PHE:CE1	0.62	2.53	13	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:C	0.61	2.37	8	15
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE1	0.61	2.24	5	4
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:HE1	0.61	2.15	17	2
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD1	0.61	1.73	10	1
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB2	0.61	1.94	2	4
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD1	0.61	2.30	2	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HB2	0.61	1.95	19	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:OG1	0.61	2.48	4	1
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:OD1	0.61	2.18	14	3
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HG2	0.61	1.70	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:HD2	0.61	1.95	13	1
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:CD	0.61	2.48	13	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HB2	0.61	1.96	17	3
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG13	0.61	2.25	14	11
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG1	0.61	2.78	5	2
1:A:41:THR:HB	1:A:44:THR:OG1	0.61	1.96	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG13	0.61	1.73	2	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HB3	0.61	1.73	11	7
1:A:30:LYS:HE2	1:A:33:ALA:CB	0.61	2.25	5	2
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CA	0.61	2.25	17	4
1:A:14:LYS:NZ	1:A:16:ILE:HG13	0.61	2.10	7	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CE1	0.61	2.83	13	1
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:O	0.61	2.45	18	16
1:A:26:LEU:HD23	1:A:50:PHE:CD2	0.61	2.30	16	1
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:OG	0.61	2.17	19	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:24:LEU:N	0.61	2.10	20	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE1	0.61	2.18	1	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CG	0.61	2.26	15	4
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG2	0.61	2.49	11	2
1:A:61:ILE:HD13	1:A:61:ILE:N	0.61	2.09	11	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG22	0.61	2.10	17	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:CB	0.61	2.84	15	20
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CB	0.61	2.83	19	7
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:CB	0.61	2.79	11	4
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG23	0.61	2.24	12	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CE2	0.61	2.83	16	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:35:MET:CE	0.61	2.25	17	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CE1	0.61	2.88	20	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG3	0.61	1.96	17	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:30:LYS:HB2	0.61	2.09	3	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CD	0.61	2.26	5	7
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:CG1	0.61	2.76	6	3
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.61	2.30	7	2
1:A:20:LYS:HD2	1:A:24:LEU:CD2	0.61	2.25	14	2
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD13	0.61	1.72	19	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CD2	0.61	2.84	6	7
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:CA	0.61	2.83	4	10
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:ND1	0.61	2.69	8	13
1:A:24:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HB	0.61	2.21	2	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:HB2	0.61	2.31	4	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.61	2.26	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:NH1	0.61	2.11	13	1
1:A:106:ARG:NH2	1:A:107:TYR:HB2	0.61	2.11	4	1
1:A:51:THR:CB	1:A:60:CYS:SG	0.61	2.88	5	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:CB	0.61	2.49	11	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CD	0.61	2.49	13	1
1:A:60:CYS:SG	1:A:62:LYS:HG2	0.61	2.36	15	1
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:H	0.60	1.98	9	18
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HB3	0.60	1.96	17	11
1:A:20:LYS:HG2	1:A:23:LYS:NZ	0.60	2.12	4	1
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:OE2	0.60	2.38	6	3
1:A:44:THR:N	1:A:68:GLU:CD	0.60	2.54	6	2
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HB2	0.60	1.73	14	7
1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:HG3	0.60	2.17	15	1
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:CE	0.60	2.26	11	2
1:A:20:LYS:CE	1:A:23:LYS:HE2	0.60	2.25	4	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD2	0.60	1.96	8	4
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CA	0.60	2.49	10	3
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:CB	0.60	2.64	16	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HG2	0.60	1.96	15	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CD2	0.60	2.84	16	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:93:TYR:CE1	0.60	2.30	18	1
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:HB3	0.60	1.74	6	8
1:A:96:TYR:C	1:A:96:TYR:HD1	0.60	1.98	4	1
1:A:97:ASN:O	1:A:98:GLY:C	0.60	2.40	10	4
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CA	0.60	2.50	10	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:HB2	0.60	1.97	12	6
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:HD2	0.60	2.12	12	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:CA	0.60	2.63	20	18
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:H	0.60	2.00	16	5
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD12	0.60	2.16	5	4
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:H	0.60	1.56	8	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:NE2	0.60	2.11	12	2
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CD2	0.60	2.89	16	6
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:HD2	0.60	2.12	5	6
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HG2	0.60	1.96	5	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG1	0.60	2.79	7	3
1:A:82:TYR:C	1:A:83:VAL:CG2	0.60	2.70	17	3
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:NE2	0.60	2.65	13	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB2	0.60	2.11	3	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:23:LYS:HE2	0.60	2.27	4	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:63:HIS:CG	0.60	2.70	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:HG12	0.60	2.27	4	16
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HD3	0.60	1.97	1	1
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:CB	0.60	2.50	5	2
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:HD13	0.60	1.56	10	2
1:A:37:ARG:HG2	1:A:37:ARG:O	0.60	1.96	12	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:CE1	0.60	2.75	16	1
1:A:42:PRO:C	1:A:68:GLU:OE1	0.60	2.40	16	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:CE1	0.60	2.29	20	4
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:O	0.60	2.18	2	2
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CB	0.60	2.50	5	3
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:CZ	0.60	2.50	9	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:102:VAL:HG13	0.60	2.27	17	2
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:HD22	0.60	2.12	1	11
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.60	2.12	16	7
1:A:86:SER:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.60	2.27	13	4
1:A:51:THR:HB	1:A:60:CYS:N	0.60	2.09	15	2
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CZ	0.60	2.15	8	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:OH	0.60	2.20	14	2
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HE3	0.60	2.27	19	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD13	0.60	2.27	13	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:HB3	0.60	2.11	13	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB3	0.60	1.74	14	9
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD1	0.60	2.70	3	8
1:A:76:TYR:CE2	1:A:86:SER:HA	0.60	2.32	14	5
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CD	0.60	2.40	11	2
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:NE2	0.60	2.34	14	2
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HG	0.59	2.17	15	11
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CD1	0.59	2.32	6	10
1:A:10:GLU:CA	1:A:110:CYS:HB3	0.59	2.27	6	7
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HE3	0.59	1.97	20	3
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HE2	0.59	2.27	20	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:HG21	0.59	1.73	20	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:88:PRO:HD3	0.59	2.27	19	9
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB3	0.59	1.71	6	9
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.59	2.12	2	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:77:TYR:CE1	0.59	2.84	3	5
1:A:11:TRP:CA	1:A:35:MET:HA	0.59	2.27	9	6
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:HG12	0.59	2.17	9	7
1:A:12:TYR:HD1	1:A:13:ASN:N	0.59	1.95	12	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:CB	0.59	2.27	18	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CD2	0.59	2.86	1	6

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:93:TYR:OH	0.59	1.96	11	2
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CG	0.59	2.50	15	3
1:A:82:TYR:OH	1:A:98:GLY:O	0.59	2.15	9	3
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:CE1	0.59	2.32	20	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD22	0.59	1.74	20	3
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:ND1	0.59	2.55	10	13
1:A:14:LYS:HD2	1:A:15:SER:N	0.59	2.13	7	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:81:LYS:HE3	0.59	1.73	19	1
1:A:41:THR:HG23	1:A:44:THR:HG23	0.59	1.70	20	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:50:PHE:HE2	0.59	1.56	4	1
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:HB2	0.59	2.27	10	2
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:HB3	0.59	1.97	12	1
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:HG22	0.59	2.12	12	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:CG2	0.59	2.78	20	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:102:VAL:HG22	0.59	2.32	20	1
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:O	0.59	1.98	20	7
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:HB3	0.59	1.73	2	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CG	0.59	2.51	15	4
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:HB3	0.59	2.13	6	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HB	0.59	2.28	10	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:C	0.59	2.39	10	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:CB	0.59	2.80	12	2
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:HD2	0.59	1.39	15	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:90:LEU:C	0.59	2.17	18	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:94:HIS:HE1	0.59	2.15	20	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HB	0.59	1.73	5	3
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:CG	0.59	2.40	14	4
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:CD	0.59	2.79	5	3
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB3	0.59	2.13	12	2
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:HD11	0.59	1.58	19	1
1:A:23:LYS:CG	1:A:24:LEU:N	0.59	2.66	4	15
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:HA	0.59	1.74	13	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:29:GLY:N	0.59	2.64	11	7
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG3	0.59	1.98	13	6
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:HD1	0.59	2.10	3	7
1:A:41:THR:HG23	1:A:44:THR:CG2	0.59	2.28	5	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:HA3	0.59	2.12	9	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:30:LYS:CA	0.59	2.25	1	2
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:109:VAL:CG2	0.59	2.09	17	3
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HG3	0.59	1.98	2	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CG	0.59	2.33	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CG1	0.59	2.20	19	2
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG22	0.59	2.18	12	4
1:A:78:VAL:HG13	1:A:90:LEU:HD21	0.59	1.74	17	1
1:A:94:HIS:HA	1:A:97:ASN:ND2	0.59	2.13	20	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD2	0.59	1.97	6	2
1:A:51:THR:HB	1:A:60:CYS:O	0.59	1.96	14	7
1:A:42:PRO:C	1:A:68:GLU:OE2	0.59	2.42	6	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:CG1	0.59	2.80	19	3
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:HB3	0.59	2.28	12	1
1:A:43:GLY:N	1:A:68:GLU:OE1	0.59	2.35	16	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:OD1	0.59	2.56	20	1
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:N	0.58	2.56	6	16
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HG12	0.58	1.74	16	5
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:CD	0.58	2.57	3	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:OE1	0.58	2.35	3	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HD2	0.58	2.10	11	3
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HD2	0.58	1.74	18	4
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:OH	0.58	1.97	18	7
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:NH1	0.58	2.36	9	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:NZ	0.58	2.65	11	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CD1	0.58	2.85	13	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:109:VAL:O	0.58	2.51	16	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:OG	0.58	2.50	17	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:OD1	0.58	2.36	20	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:NZ	0.58	2.12	17	2
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ALA:C	0.58	2.41	17	2
1:A:62:LYS:HE3	1:A:64:TYR:OH	0.58	1.97	20	5
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:HD23	0.58	2.28	18	7
1:A:104:ARG:HG2	1:A:104:ARG:O	0.58	1.98	17	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CG	0.58	2.28	8	5
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:CB	0.58	2.71	4	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:O	0.58	2.42	8	4
1:A:32:GLY:O	1:A:106:ARG:HB3	0.58	1.98	19	3
1:A:31:GLU:HG3	1:A:31:GLU:O	0.58	1.99	13	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:65:HIS:NE2	0.58	2.12	13	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CB	0.58	2.23	2	1
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:C	0.58	2.40	20	3
1:A:18:ARG:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.58	2.67	5	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HB2	0.58	1.99	5	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:NE2	0.58	2.66	11	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:HB2	0.58	1.99	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:HB2	0.58	1.74	12	1
1:A:77:TYR:HB2	1:A:81:LYS:O	0.58	1.96	4	6
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:CE1	0.58	2.87	7	5
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CG2	0.58	2.87	12	5
1:A:61:ILE:C	1:A:62:LYS:HG2	0.58	2.19	8	6
1:A:74:LYS:HG3	1:A:83:VAL:O	0.58	1.99	1	4
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CZ	0.58	2.16	18	2
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NE	0.58	2.36	10	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:HB3	0.58	2.20	12	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HG2	0.58	2.28	20	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CZ	0.58	2.86	2	5
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:HG22	0.58	1.98	14	3
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:O	0.58	2.22	7	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:NE2	0.58	2.36	15	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:CD1	0.58	2.09	19	1
1:A:79:ALA:H	1:A:81:LYS:HD2	0.58	1.59	2	2
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:HD2	0.58	1.98	2	6
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD13	0.58	2.18	11	2
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CG	0.58	2.82	16	3
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HG2	0.58	1.98	19	3
1:A:60:CYS:SG	1:A:62:LYS:CG	0.58	2.92	15	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:C	0.58	2.19	18	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:N	0.58	2.37	19	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:HE2	0.58	2.17	11	19
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD2	0.58	2.51	8	5
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CD1	0.58	2.34	1	6
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD1	0.58	2.34	9	4
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:HD12	0.58	2.19	15	8
1:A:14:LYS:HE2	1:A:14:LYS:C	0.58	2.18	7	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CE1	0.58	2.57	14	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:CB	0.58	2.67	15	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:HG2	0.57	2.19	20	11
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD2	0.57	2.78	4	4
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CG1	0.57	2.28	16	5
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HA	0.57	1.99	3	2
1:A:18:ARG:CZ	1:A:18:ARG:HB3	0.57	2.28	3	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:O	0.57	1.99	3	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE2	0.57	1.75	6	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD2	0.57	1.75	7	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG11	0.57	2.28	10	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:63:HIS:ND1	0.57	2.52	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:HE1	0.57	1.57	13	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HG	0.57	2.29	6	12
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:OH	0.57	2.00	9	12
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:CD1	0.57	2.79	12	14
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG11	0.57	1.76	2	1
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LEU:HD13	0.57	2.29	7	3
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HG2	0.57	1.98	20	2
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:CB	0.57	2.29	10	3
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:HB2	0.57	1.73	12	1
1:A:29:GLY:H	1:A:30:LYS:HZ2	0.57	1.41	13	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD2	0.57	2.71	19	2
1:A:14:LYS:HE2	1:A:14:LYS:N	0.57	2.14	7	1
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CG	0.57	2.29	11	3
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HE3	0.57	2.29	13	2
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:HG3	0.57	1.99	10	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG1	0.57	2.23	20	2
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HA	0.57	2.34	15	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:105:LEU:HG	0.57	1.59	15	1
1:A:95:GLN:CG	1:A:108:PRO:HD3	0.57	2.29	17	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:HE2	0.57	2.18	14	20
1:A:24:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG11	0.57	2.30	17	3
1:A:28:THR:HG23	1:A:29:GLY:N	0.57	2.15	2	6
1:A:81:LYS:CD	1:A:93:TYR:OH	0.57	2.52	4	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:ND2	0.57	2.14	5	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:CE	0.57	2.12	9	3
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:CA	0.57	2.29	13	1
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:NZ	0.57	2.15	15	1
1:A:32:GLY:C	1:A:106:ARG:HG2	0.57	2.20	20	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:HB2	0.57	1.75	18	9
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:CD	0.57	2.52	7	3
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:OG1	0.57	2.00	15	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CD1	0.57	2.82	10	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:HA2	0.57	2.14	17	2
1:A:38:ASP:C	1:A:38:ASP:OD1	0.57	2.42	16	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:OG	0.57	2.00	20	2
1:A:77:TYR:HA	1:A:82:TYR:CE1	0.57	2.33	17	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:HD1	0.57	2.12	18	1
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:CB	0.57	2.50	1	7
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:CE1	0.57	2.34	1	4
1:A:75:ARG:HG3	1:A:85:ASP:HA	0.57	1.75	7	4
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE2	0.57	2.34	18	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:NZ	0.57	2.57	13	2
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG3	0.57	1.98	16	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HG	0.57	2.14	15	1
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:HB3	0.57	1.54	16	13
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:33:ALA:HA	0.57	1.59	2	2
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:C	0.57	2.43	2	8
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:C	0.57	2.43	10	10
1:A:67:LYS:HG3	1:A:68:GLU:N	0.57	2.14	4	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:HH	0.57	1.60	4	1
1:A:10:GLU:O	1:A:10:GLU:HG3	0.57	2.00	14	6
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.57	2.13	13	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HG	0.57	1.76	11	5
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CB	0.57	2.68	20	2
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LEU:HD21	0.57	2.29	13	3
1:A:21:ALA:CB	1:A:37:ARG:NH2	0.57	2.61	17	1
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:HD1	0.57	2.04	1	12
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD3	0.57	2.00	18	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD3	0.57	2.00	19	4
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:HD3	0.57	2.00	7	2
1:A:94:HIS:CG	1:A:105:LEU:HD23	0.57	2.35	9	2
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:HE2	0.57	2.00	14	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:OD2	0.57	2.23	20	1
1:A:27:ASP:C	1:A:27:ASP:OD1	0.57	2.43	20	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:HG23	0.57	1.99	18	7
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:12:TYR:HB2	0.57	2.35	12	6
1:A:25:LEU:HD21	1:A:33:ALA:HB1	0.57	1.76	7	2
1:A:43:GLY:HA3	1:A:68:GLU:HG3	0.57	1.76	8	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG2	0.57	2.27	9	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:102:VAL:HB	0.57	2.35	11	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HD2	0.56	1.97	11	7
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HG2	0.56	2.30	3	4
1:A:64:TYR:CB	1:A:78:VAL:HG11	0.56	2.19	3	1
1:A:106:ARG:CZ	1:A:107:TYR:HB2	0.56	2.30	4	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE1	0.56	1.77	9	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:N	0.56	2.52	5	4
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:ND1	0.56	2.15	10	11
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:HD2	0.56	1.78	17	5
1:A:13:ASN:O	1:A:14:LYS:C	0.56	2.44	15	3
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG22	0.56	2.35	18	4
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:HD13	0.56	2.31	9	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:35:MET:SD	0.56	2.38	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:HD2	0.56	2.16	20	2
1:A:26:LEU:CD2	1:A:27:ASP:N	0.56	2.59	11	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HB	0.56	1.77	11	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HG13	0.56	2.30	15	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG13	0.56	1.76	7	13
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CZ	0.56	2.79	1	2
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CG	0.56	2.18	19	14
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CZ2	0.56	2.88	11	4
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:CA	0.56	2.13	19	17
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:HE1	0.56	1.58	20	4
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.56	1.59	19	3
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:O	0.56	2.00	16	6
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG2	0.56	2.19	6	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:99:GLY:HA2	0.56	1.76	7	1
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:CG2	0.56	2.81	19	2
1:A:35:MET:O	1:A:37:ARG:HD2	0.56	2.00	10	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:N	0.56	2.15	16	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:94:HIS:CE1	0.56	2.17	19	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD11	0.56	1.77	20	1
1:A:94:HIS:HA	1:A:97:ASN:HD21	0.56	1.59	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:HZ3	0.56	2.14	8	5
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HG3	0.56	2.01	2	3
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG12	0.56	1.75	18	3
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:HE1	0.56	2.18	20	4
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:HB2	0.56	1.76	15	14
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG2	0.56	2.01	17	4
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:C	0.56	2.73	8	4
1:A:30:LYS:HA	1:A:30:LYS:HE3	0.56	1.78	9	3
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:CZ	0.56	2.92	19	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:SD	0.56	2.63	10	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD1	0.56	2.35	20	15
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:C	0.56	2.21	5	7
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:HB2	0.56	2.01	8	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HD3	0.56	1.76	12	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HD2	0.56	2.00	13	1
1:A:15:SER:O	1:A:15:SER:OG	0.56	2.23	18	2
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CD1	0.56	2.58	17	1
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:CB	0.56	2.14	18	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:102:VAL:CG2	0.56	2.30	20	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HG	0.56	2.01	20	1
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:CD2	0.56	2.36	2	1

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:CG	0.56	2.54	10	1
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CD1	0.56	2.73	13	2
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CG	0.56	2.26	11	1
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:O	0.56	2.24	14	4
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD23	0.56	2.01	15	1
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:HB2	0.56	1.76	4	2
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:N	0.56	2.37	2	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:N	0.56	2.35	5	9
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HG13	0.56	2.36	8	6
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:O	0.56	2.54	8	10
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:CG	0.56	2.54	8	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:CA	0.56	2.31	17	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD2	0.56	2.29	10	3
1:A:79:ALA:C	1:A:80:GLU:HG3	0.56	2.21	4	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:HE1	0.56	1.98	19	2
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.01	10	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:11:TRP:CH2	0.56	2.89	12	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:23:LYS:C	0.56	2.74	17	1
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:HD23	0.56	1.99	18	1
1:A:34:PHE:HZ	1:A:36:VAL:CG2	0.56	2.14	20	14
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB2	0.56	1.77	4	2
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CB	0.56	2.54	10	6
1:A:95:GLN:CD	1:A:108:PRO:HD3	0.56	2.22	20	3
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:HG23	0.55	2.01	1	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:64:TYR:CD1	0.55	2.36	7	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE2	0.55	1.60	20	3
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:HG1	0.55	1.99	18	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:33:ALA:HB3	0.55	2.29	7	3
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CB	0.55	2.31	11	4
1:A:79:ALA:O	1:A:80:GLU:HG3	0.55	2.01	4	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:N	0.55	2.32	5	4
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD12	0.55	2.16	20	3
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:HG12	0.55	2.21	20	6
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD2	0.55	2.89	16	2
1:A:21:ALA:CB	1:A:37:ARG:CZ	0.55	2.83	17	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:HG13	0.55	2.31	18	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD1	0.55	2.54	20	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CG2	0.55	2.25	1	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:ND1	0.55	2.40	12	3
1:A:20:LYS:HG2	1:A:23:LYS:CE	0.55	2.31	4	1
1:A:74:LYS:O	1:A:75:ARG:HG3	0.55	2.01	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HG3	0.55	2.25	11	1
1:A:20:LYS:CE	1:A:24:LEU:HD23	0.55	2.31	14	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE3	0.55	1.79	19	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD2	0.55	2.00	20	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG23	0.55	1.77	1	2
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HD3	0.55	2.32	5	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CG	0.55	2.84	7	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:H	0.55	1.62	15	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG13	0.55	1.78	4	7
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:CG2	0.55	2.31	2	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:C	0.55	2.21	3	5
1:A:95:GLN:OE1	1:A:95:GLN:N	0.55	2.39	4	1
1:A:29:GLY:C	1:A:50:PHE:CE1	0.55	2.79	8	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG2	0.55	2.31	10	1
1:A:96:TYR:HA	1:A:104:ARG:CZ	0.55	2.31	13	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:HB3	0.55	1.78	17	2
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:CG2	0.55	2.32	1	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:HD22	0.55	2.32	4	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CG1	0.55	2.84	15	5
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:HA	0.55	1.78	17	1
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:HD13	0.55	2.17	19	12
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:HG2	0.55	2.01	13	13
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD2	0.55	2.37	6	6
1:A:37:ARG:CG	1:A:37:ARG:HH11	0.55	2.15	13	6
1:A:93:TYR:OH	1:A:99:GLY:CA	0.55	2.55	3	3
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG3	0.55	2.01	20	4
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:CB	0.55	2.14	16	17
1:A:85:ASP:OD1	1:A:89:LEU:CD2	0.55	2.53	1	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:CG2	0.55	2.90	2	2
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:OH	0.55	2.02	2	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:H	0.55	1.61	19	3
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD11	0.55	2.31	10	5
1:A:90:LEU:HD13	1:A:94:HIS:CD2	0.55	2.37	7	1
1:A:29:GLY:HA3	1:A:50:PHE:CE1	0.55	2.36	10	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CE2	0.55	2.90	12	1
1:A:76:TYR:HB2	1:A:90:LEU:CD1	0.55	2.32	13	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:C	0.55	2.46	1	3
1:A:74:LYS:HD2	1:A:74:LYS:N	0.55	2.18	1	2
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD12	0.55	2.32	7	7
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:HB3	0.55	1.59	3	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:N	0.55	2.58	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HB2	0.55	2.01	12	3
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:OG1	0.55	2.02	8	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD22	0.54	2.21	1	5
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CE1	0.54	2.37	1	6
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CD1	0.54	2.59	4	5
1:A:61:ILE:O	1:A:62:LYS:HG2	0.54	2.02	20	3
1:A:39:SER:OG	1:A:44:THR:O	0.54	2.23	6	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:HB3	0.54	2.01	6	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:CG2	0.54	2.31	20	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CE2	0.54	2.74	18	1
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NH1	0.54	2.40	2	6
1:A:16:ILE:CB	1:A:37:ARG:HB2	0.54	2.32	20	3
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:HE1	0.54	1.61	7	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:H	0.54	2.15	9	2
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CD1	0.54	2.60	9	1
1:A:103:THR:HG23	1:A:106:ARG:HD2	0.54	1.78	13	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:CA	0.54	2.56	15	15
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE2	0.54	1.80	18	4
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG22	0.54	1.61	18	5
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:H	0.54	2.14	18	6
1:A:41:THR:CB	1:A:44:THR:OG1	0.54	2.56	8	1
1:A:96:TYR:HA	1:A:104:ARG:NH1	0.54	2.17	11	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:C	0.54	2.60	18	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD12	0.54	1.80	20	1
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:CD2	0.54	2.90	20	1
1:A:29:GLY:N	1:A:30:LYS:HE2	0.54	2.17	1	2
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD3	0.54	2.27	8	2
1:A:93:TYR:HA	1:A:96:TYR:HE1	0.54	1.63	9	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:HG2	0.54	1.79	10	1
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:CD2	0.54	2.80	12	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG13	0.54	1.79	13	1
1:A:62:LYS:HE3	1:A:64:TYR:CE1	0.54	2.36	13	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:45:TYR:CE2	0.54	2.37	11	4
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:OD1	0.54	2.02	2	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CA	0.54	2.33	3	4
1:A:81:LYS:CB	1:A:81:LYS:NZ	0.54	2.71	3	2
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:CE2	0.54	2.90	7	2
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:HB3	0.54	2.03	19	3
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG2	0.54	2.02	10	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:45:TYR:CD2	0.54	2.38	11	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:HG23	0.54	1.78	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:O	0.54	2.03	18	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CG1	0.54	2.90	3	15
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:HB2	0.54	2.03	14	4
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG21	0.54	1.79	11	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HE1	0.54	2.01	7	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:CG	0.54	2.85	15	2
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:107:TYR:HD2	0.54	1.45	16	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:102:VAL:CG2	0.54	2.85	20	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:HE21	0.54	2.15	1	5
1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:ASP:OD2	0.54	2.03	2	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HG2	0.54	1.78	19	3
1:A:19:ASP:OD2	1:A:22:GLU:OE2	0.54	2.26	10	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:63:HIS:CB	0.54	2.71	10	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:110:CYS:HA	0.54	2.02	12	1
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:OD1	0.54	2.26	14	2
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:HD2	0.54	1.99	16	1
1:A:18:ARG:NE	1:A:63:HIS:HB2	0.54	2.18	16	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:103:THR:HG21	0.54	1.80	17	1
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:CG1	0.54	2.56	20	1
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:CE2	0.54	2.91	20	1
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:HB3	0.54	2.03	20	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:HD3	0.54	1.63	9	3
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HD2	0.54	1.79	3	4
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HB	0.54	2.03	3	5
1:A:66:ILE:CA	1:A:78:VAL:HG12	0.54	2.33	16	2
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:O	0.54	2.03	8	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:61:ILE:CG2	0.54	2.22	14	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:35:MET:HE1	0.54	1.80	17	1
1:A:17:SER:O	1:A:37:ARG:NH1	0.54	2.40	17	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CB	0.54	2.91	20	1
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.54	2.18	3	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:C	0.54	2.22	18	3
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:OD1	0.54	2.46	9	2
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:CG2	0.54	2.76	7	3
1:A:23:LYS:HD2	1:A:23:LYS:C	0.54	2.23	7	2
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CD1	0.54	2.87	10	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:OH	0.54	2.24	14	1
1:A:67:LYS:CE	1:A:67:LYS:CA	0.54	2.86	8	3
1:A:51:THR:HB	1:A:60:CYS:SG	0.54	2.43	10	2
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CD1	0.54	2.38	13	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:HE22	0.54	2.00	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ARG:HD2	1:A:46:THR:HG21	0.54	1.78	17	1
1:A:44:THR:HG1	1:A:66:ILE:C	0.54	1.99	18	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG3	0.53	2.22	10	6
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HG	0.53	2.02	10	2
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HZ1	0.53	1.63	4	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD12	0.53	1.79	19	5
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:33:ALA:CB	0.53	2.15	1	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:108:PRO:HG3	0.53	2.23	17	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CD2	0.53	2.90	17	17
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG23	0.53	2.02	20	6
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE2	0.53	2.21	11	4
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:O	0.53	2.01	6	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:33:ALA:CB	0.53	2.82	11	2
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG21	0.53	1.78	12	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:OG1	0.53	2.25	15	2
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:CB	0.53	2.71	13	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:HB2	0.53	2.02	17	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:OE1	0.53	2.04	1	4
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:CG1	0.53	2.86	18	4
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:CG1	0.53	2.34	13	4
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:CD2	0.53	2.90	12	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:68:GLU:HG3	0.53	2.34	20	2
1:A:37:ARG:HH21	1:A:48:SER:N	0.53	2.00	16	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CZ	0.53	2.39	17	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:C	0.53	2.24	2	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CE1	0.53	2.38	6	12
1:A:95:GLN:N	1:A:105:LEU:CB	0.53	2.68	5	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:GLN:OE1	0.53	2.57	7	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CB	0.53	2.33	8	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:CD1	0.53	2.77	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CD2	0.53	2.61	12	1
1:A:93:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA2	0.53	2.04	17	2
1:A:84:PHE:CG	1:A:90:LEU:HA	0.53	2.37	6	3
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:CE	0.53	2.87	4	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:14:LYS:N	0.53	2.77	7	1
1:A:14:LYS:C	1:A:14:LYS:CE	0.53	2.77	7	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ASP:CA	0.53	2.32	11	1
1:A:79:ALA:C	1:A:80:GLU:HG2	0.53	2.24	17	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:93:TYR:HE1	0.53	1.64	18	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CD2	0.53	2.39	9	3
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG13	0.53	1.80	7	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:CE1	1:A:14:LYS:HA	0.53	2.39	7	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:HD3	0.53	2.04	14	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:82:TYR:CB	0.53	2.16	18	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:C	0.53	2.24	1	3
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:CB	0.53	2.77	15	4
1:A:13:ASN:HD21	1:A:24:LEU:CD1	0.53	2.14	4	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CB	0.53	2.87	10	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD3	0.53	1.76	15	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:CD	0.53	2.56	8	2
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:N	0.53	2.41	7	1
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CE1	0.53	2.39	12	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:CD	0.53	2.71	19	2
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:O	0.53	2.51	18	1
1:A:34:PHE:N	1:A:107:TYR:O	0.53	2.38	17	9
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG23	0.53	1.79	2	2
1:A:10:GLU:OE2	1:A:108:PRO:HG2	0.53	2.03	11	3
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HB2	0.53	2.04	4	2
1:A:101:LEU:HD22	1:A:105:LEU:HD13	0.53	1.81	7	3
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:N	0.53	2.01	19	8
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG22	0.53	2.03	7	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:NH2	0.53	2.57	15	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG2	0.53	2.34	18	1
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:N	0.52	2.19	2	1
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB2	0.52	2.24	3	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.52	2.95	5	3
1:A:74:LYS:H	1:A:83:VAL:HB	0.52	1.65	6	1
1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:HD3	0.52	2.18	10	1
1:A:11:TRP:C	1:A:36:VAL:H	0.52	2.06	12	2
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE2	0.52	1.81	20	2
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:HD2	0.52	2.25	17	1
1:A:67:LYS:HD3	1:A:67:LYS:C	0.52	2.25	2	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HG2	0.52	1.81	5	5
1:A:94:HIS:HB3	1:A:101:LEU:HD22	0.52	1.80	11	1
1:A:41:THR:HG1	1:A:42:PRO:HD2	0.52	1.63	13	1
1:A:91:ILE:HG23	1:A:95:GLN:HE22	0.52	1.63	15	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG11	0.52	2.34	20	1
1:A:40:ARG:CB	1:A:40:ARG:CZ	0.52	2.87	1	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:O	0.52	2.43	2	2
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.52	2.18	11	9
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE3	0.52	2.35	13	3
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CG	0.52	2.91	7	1

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	0.52	2.87	11	3
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:NH1	0.52	2.42	13	1
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:HD3	0.52	2.04	15	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE3	0.52	1.82	1	9
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE2	0.52	2.39	16	3
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CE	0.52	2.32	18	4
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:NZ	0.52	2.19	4	2
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:HA	0.52	2.02	5	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:HA3	0.52	1.64	9	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:CG	0.52	2.33	10	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:HD2	0.52	2.16	12	2
1:A:23:LYS:CE	1:A:24:LEU:HA	0.52	2.34	17	1
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:CD1	0.52	2.78	11	5
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:HB	0.52	2.25	20	5
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:C	0.52	2.48	4	4
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CG	0.52	2.34	14	5
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:HG21	0.52	2.20	15	2
1:A:96:TYR:C	1:A:104:ARG:HD3	0.52	2.25	7	1
1:A:67:LYS:CD	1:A:77:TYR:HE1	0.52	2.16	2	1
1:A:87:ILE:C	1:A:91:ILE:HG12	0.52	2.25	12	9
1:A:74:LYS:HA	1:A:83:VAL:C	0.52	2.24	7	4
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:CG	0.52	2.78	8	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:46:THR:HB	0.52	1.65	12	2
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE2	0.52	1.80	9	4
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD2	0.52	1.88	9	4
1:A:62:LYS:CD	1:A:63:HIS:N	0.52	2.73	7	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HB3	0.52	2.05	7	2
1:A:82:TYR:C	1:A:83:VAL:HG23	0.52	2.25	10	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:90:LEU:HG	0.52	2.40	17	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CE2	0.52	2.97	17	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:HG2	0.52	1.63	18	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:CG1	0.52	2.34	1	2
1:A:37:ARG:HH22	1:A:48:SER:CA	0.52	2.17	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:HE1	0.52	2.18	19	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:C	0.52	2.22	5	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD2	0.52	2.58	2	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HD1	0.52	2.02	3	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CZ	0.52	2.33	7	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB3	0.52	2.04	10	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG22	0.52	1.81	18	2
1:A:46:THR:HG1	1:A:65:HIS:CD2	0.52	2.19	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:HD2	0.52	2.18	6	4
1:A:79:ALA:CA	1:A:81:LYS:HD2	0.52	2.35	2	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:H	0.52	2.18	6	2
1:A:95:GLN:OE1	1:A:108:PRO:HG3	0.52	2.05	7	2
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:94:HIS:CE1	0.52	2.23	8	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CB	0.52	2.88	9	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HE3	0.52	1.81	10	2
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG23	0.52	1.81	11	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:CG2	0.52	2.35	12	2
1:A:67:LYS:HB2	1:A:67:LYS:NZ	0.52	2.19	13	1
1:A:85:ASP:C	1:A:86:SER:OG	0.52	2.46	14	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:CE1	0.51	2.92	20	3
1:A:29:GLY:O	1:A:50:PHE:HE1	0.51	1.88	1	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:62:LYS:NZ	0.51	2.20	1	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:CD1	0.51	2.79	3	4
1:A:79:ALA:H	1:A:81:LYS:CD	0.51	2.18	2	2
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:CA	0.51	2.92	14	4
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG3	0.51	2.40	5	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:HG13	0.51	1.80	7	3
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:CD1	0.51	2.88	19	5
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG12	0.51	2.04	9	2
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:CD1	0.51	2.75	15	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:HA2	0.51	1.65	15	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:105:LEU:HD23	0.51	2.37	17	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HG3	0.51	2.06	17	1
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD1	0.51	2.79	18	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:HB3	0.51	2.41	1	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD3	0.51	1.82	5	8
1:A:34:PHE:CD2	1:A:108:PRO:HB3	0.51	2.40	11	4
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:CB	0.51	2.35	7	2
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:O	0.51	2.06	10	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CG	0.51	2.64	12	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HD12	0.51	2.32	13	1
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:HB2	0.51	2.20	1	1
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:N	0.51	2.61	18	16
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HE2	0.51	1.82	4	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:HB1	0.51	2.34	6	2
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CZ	0.51	2.41	1	4
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:CD1	0.51	2.73	16	8
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:CD1	0.51	2.78	3	6
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:ND2	0.51	2.58	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ILE:HG21	1:A:90:LEU:HD13	0.51	1.78	5	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:95:GLN:OE1	0.51	2.64	7	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CD2	0.51	2.23	10	3
1:A:75:ARG:H	1:A:83:VAL:HG12	0.51	1.64	10	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:O	0.51	2.04	16	1
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:N	0.51	2.62	16	7
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:HD1	0.51	2.19	10	2
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:N	0.51	2.73	17	5
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CZ	0.51	2.86	8	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CE1	0.51	2.79	6	2
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:HA3	0.51	1.80	7	2
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CG	0.51	2.59	20	1
1:A:45:TYR:C	1:A:66:ILE:HG12	0.51	2.25	2	7
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:HB2	0.51	1.81	8	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:77:TYR:CD1	0.51	2.93	4	2
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE1	0.51	1.65	5	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CB	0.51	2.88	20	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:CG1	0.51	2.36	2	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HD3	0.51	1.83	5	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:88:PRO:HD2	0.51	1.83	13	3
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:NH1	0.51	2.44	5	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:CA	0.51	2.36	6	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:37:ARG:NH1	0.51	2.73	13	2
1:A:86:SER:C	1:A:88:PRO:HD2	0.51	2.26	13	2
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:CD2	0.51	2.94	7	2
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:O	0.51	2.06	3	7
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:O	0.51	2.05	16	4
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:O	0.51	2.06	4	2
1:A:97:ASN:C	1:A:99:GLY:N	0.51	2.63	7	1
1:A:94:HIS:CA	1:A:97:ASN:ND2	0.51	2.74	20	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.51	2.93	8	5
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CG	0.51	2.34	17	3
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:HB2	0.51	1.82	11	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:CA	0.51	2.74	15	3
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:HD2	0.51	2.13	17	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:TYR:HB3	0.51	2.05	17	3
1:A:77:TYR:HD2	1:A:80:GLU:N	0.51	1.98	4	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HD2	0.51	1.83	5	2
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:HG2	0.51	2.04	5	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:37:ARG:HG3	0.51	2.06	10	1
1:A:35:MET:CB	1:A:109:VAL:O	0.51	2.59	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:HB3	1:A:37:ARG:HH22	0.51	1.58	17	1
1:A:44:THR:HA	1:A:68:GLU:CG	0.51	2.36	18	1
1:A:101:LEU:O	1:A:101:LEU:HD22	0.51	2.06	20	1
1:A:18:ARG:CD	1:A:63:HIS:CD2	0.50	2.93	3	1
1:A:62:LYS:HD2	1:A:63:HIS:C	0.50	2.26	7	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:HD2	0.50	2.18	12	2
1:A:44:THR:CA	1:A:68:GLU:HG3	0.50	2.36	13	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HG	0.50	2.41	13	2
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:HE1	0.50	2.03	18	3
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CE1	0.50	2.93	17	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HG3	0.50	2.05	4	1
1:A:37:ARG:CZ	1:A:46:THR:HG21	0.50	2.36	7	2
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:N	0.50	2.20	8	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:CD	0.50	2.75	12	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:SD	0.50	2.44	15	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HB	0.50	1.83	20	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:HB3	0.50	2.06	20	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HB3	0.50	1.81	3	2
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE2	0.50	1.82	16	2
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:OE1	0.50	2.07	11	2
1:A:10:GLU:OE1	1:A:108:PRO:HG2	0.50	2.07	17	3
1:A:51:THR:OG1	1:A:102:VAL:HB	0.50	2.06	12	2
1:A:36:VAL:HA	1:A:47:VAL:HA	0.50	1.83	2	13
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CE1	0.50	2.19	1	2
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:N	0.50	2.64	20	10
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HG23	0.50	1.83	2	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:CG	0.50	2.80	20	2
1:A:43:GLY:CA	1:A:68:GLU:CG	0.50	2.88	8	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:HB2	0.50	2.35	8	2
1:A:102:VAL:HG12	1:A:103:THR:N	0.50	2.19	11	2
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HB3	0.50	2.06	19	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA3	0.50	1.81	12	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:94:HIS:NE2	0.50	2.79	17	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CE1	0.50	2.84	1	4
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:N	0.50	2.64	5	7
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:HD2	0.50	2.07	12	3
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:H	0.50	2.08	17	6
1:A:14:LYS:HE2	1:A:14:LYS:CA	0.50	2.35	7	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:CD1	0.50	2.95	7	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG23	0.50	2.04	9	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:HG11	0.50	1.84	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:CG	0.50	2.65	20	1
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LEU:HD22	0.50	2.37	20	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:OH	0.50	2.55	8	2
1:A:32:GLY:HA2	1:A:50:PHE:O	0.50	2.06	13	2
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:CD1	0.50	2.18	15	6
1:A:76:TYR:C	1:A:83:VAL:HG13	0.50	2.27	20	2
1:A:10:GLU:CD	1:A:107:TYR:OH	0.50	2.50	14	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:61:ILE:HD11	0.50	2.41	19	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG1	0.50	2.36	18	3
1:A:62:LYS:CB	1:A:64:TYR:HE1	0.50	2.20	8	6
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HD2	0.50	2.36	4	1
1:A:42:PRO:CD	1:A:44:THR:HG22	0.50	2.36	5	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:CB	0.50	2.89	5	3
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:ASP:OD2	0.50	2.07	8	2
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:HG12	0.50	2.07	13	1
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:CE	0.50	2.86	15	1
1:A:45:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HG12	0.50	2.42	18	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:CG	0.50	2.19	1	2
1:A:37:ARG:HG2	1:A:37:ARG:HH11	0.50	1.65	14	8
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CE	0.50	2.60	4	2
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE2	0.50	2.30	5	1
1:A:75:ARG:O	1:A:83:VAL:CG1	0.50	2.60	6	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:CG	0.50	2.27	10	3
1:A:66:ILE:H	1:A:66:ILE:CD1	0.50	2.14	12	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:HD2	0.50	1.65	14	1
1:A:11:TRP:C	1:A:35:MET:HA	0.50	2.26	9	4
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG23	0.50	2.27	9	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CZ3	0.50	2.90	16	4
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:CD	0.50	2.19	12	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CD1	0.50	2.37	13	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:HG2	0.50	2.21	18	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HB3	0.50	2.37	20	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG22	0.49	2.38	16	7
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE2	0.49	2.64	1	2
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:ND1	0.49	2.22	16	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:22:GLU:OE2	0.49	2.07	5	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG21	0.49	1.83	6	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:CD1	0.49	2.89	18	2
1:A:67:LYS:CA	1:A:67:LYS:HE3	0.49	2.37	8	2
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG23	0.49	1.61	12	3
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG2	0.49	2.42	10	1

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:ND1	0.49	2.79	18	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:CE	0.49	2.60	20	2
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:CG2	0.49	2.60	19	2
1:A:35:MET:CG	1:A:36:VAL:N	0.49	2.75	8	9
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:OD2	0.49	2.45	2	2
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:OE1	0.49	2.05	5	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:CD2	0.49	2.20	11	4
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD11	0.49	2.22	7	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HG3	0.49	1.83	8	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:62:LYS:HG3	0.49	1.84	9	1
1:A:18:ARG:HG3	1:A:19:ASP:OD1	0.49	2.08	12	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:OD2	0.49	2.07	17	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CB	0.49	2.60	18	1
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CD	0.49	2.76	6	2
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:CG1	0.49	2.19	19	6
1:A:82:TYR:HD1	1:A:82:TYR:N	0.49	2.04	2	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HG2	0.49	2.42	3	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:HD22	0.49	1.85	4	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD1	0.49	2.36	4	1
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:NH1	0.49	2.65	6	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HB	0.49	1.84	11	3
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:N	0.49	2.22	11	1
1:A:98:GLY:C	1:A:100:GLY:N	0.49	2.66	13	1
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:CB	0.49	2.20	17	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:98:GLY:N	0.49	2.64	20	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:37:ARG:HB2	0.49	1.83	20	3
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HB	0.49	2.38	13	3
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG23	0.49	1.67	15	1
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HD3	0.49	2.27	18	1
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:HD3	0.49	1.67	17	7
1:A:81:LYS:HE3	1:A:94:HIS:HE1	0.49	1.67	1	1
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:CD1	0.49	2.60	3	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HD2	0.49	2.38	4	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:OG1	0.49	2.26	7	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:61:ILE:HG13	0.49	2.36	7	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:45:TYR:CE2	0.49	2.25	12	1
1:A:44:THR:HA	1:A:68:GLU:HG3	0.49	1.85	13	2
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:H	0.49	2.20	13	1
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:H	0.49	2.19	14	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:CB	0.49	2.61	14	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:N	0.49	2.75	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG13	0.49	2.07	2	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HB	0.49	2.07	6	2
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:N	0.49	2.45	4	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HB	0.49	2.37	5	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HE3	0.49	1.65	6	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG3	0.49	2.07	12	3
1:A:78:VAL:HG22	1:A:101:LEU:HD11	0.49	1.79	11	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:101:LEU:HD22	0.49	2.22	12	1
1:A:60:CYS:SG	1:A:62:LYS:HG3	0.49	2.47	18	1
1:A:30:LYS:O	1:A:31:GLU:C	0.49	2.51	16	10
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:H	0.49	2.09	4	4
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.49	2.96	7	3
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:NE2	0.49	2.23	11	2
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:NE2	0.49	2.60	12	2
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:N	0.49	2.81	15	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG22	0.49	2.25	1	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:O	0.49	2.06	4	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CA	0.49	2.94	15	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HB2	0.49	1.84	9	3
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:HD2	0.49	1.68	17	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.49	2.66	20	1
1:A:20:LYS:HE2	1:A:23:LYS:HE2	0.49	1.82	4	1
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:HG23	0.49	2.07	4	1
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:N	0.49	2.67	5	10
1:A:10:GLU:C	1:A:108:PRO:HB2	0.49	2.28	14	2
1:A:35:MET:HG3	1:A:109:VAL:O	0.49	2.08	15	1
1:A:39:SER:O	1:A:41:THR:N	0.49	2.46	16	1
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG22	0.49	1.84	18	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CB	0.49	2.96	12	10
1:A:89:LEU:O	1:A:93:TYR:N	0.49	2.46	17	3
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:HG23	0.49	2.28	4	1
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:HE1	0.49	2.18	18	4
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CG	0.49	2.36	7	2
1:A:104:ARG:NH1	1:A:105:LEU:O	0.49	2.45	20	1
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:CD	0.48	2.76	1	2
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:H	0.48	1.48	19	7
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:OE1	0.48	2.31	4	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:111:GLY:H	0.48	1.68	6	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:CD1	0.48	2.36	7	2
1:A:62:LYS:HG3	1:A:64:TYR:HE1	0.48	1.64	9	1
1:A:37:ARG:NE	1:A:48:SER:HB2	0.48	2.23	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:NZ	1:A:82:TYR:CD2	0.48	2.81	18	2
1:A:20:LYS:O	1:A:20:LYS:HD3	0.48	2.08	14	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CD2	0.48	2.20	17	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:19:ASP:OD2	0.48	2.07	4	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:50:PHE:CE2	0.48	2.96	13	3
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:HG2	0.48	2.06	6	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CB	0.48	2.38	16	1
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:OE1	0.48	2.52	16	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HD3	0.48	2.37	3	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:CG	0.48	2.21	5	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:HB2	0.48	2.22	15	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CE2	0.48	2.97	17	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CG	0.48	2.42	20	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:13:ASN:N	0.48	2.81	12	2
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:CD	0.48	2.27	10	1
1:A:80:GLU:N	1:A:80:GLU:OE1	0.48	2.45	13	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:94:HIS:HE1	0.48	1.68	19	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HD3	0.48	2.23	17	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:102:VAL:HB	0.48	2.44	11	1
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:HD11	0.48	2.29	13	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:HA2	0.48	1.83	18	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CD2	0.48	2.64	18	1
1:A:18:ARG:NH1	1:A:18:ARG:HG3	0.48	2.24	1	1
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:CA	0.48	2.36	1	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:45:TYR:N	0.48	2.81	16	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HB2	0.48	1.84	12	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:HB3	0.48	2.08	12	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB3	0.48	2.32	15	1
1:A:11:TRP:HA	1:A:109:VAL:N	0.48	2.23	17	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:C	0.48	2.23	19	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:C	0.48	2.52	2	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:30:LYS:H	0.48	1.69	16	2
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.48	1.84	6	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:N	0.48	2.82	9	5
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HG21	0.48	1.84	10	1
1:A:102:VAL:HG12	1:A:103:THR:H	0.48	1.67	11	1
1:A:29:GLY:N	1:A:30:LYS:NZ	0.48	2.61	13	1
1:A:101:LEU:HD22	1:A:105:LEU:HD22	0.48	1.84	17	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD3	0.48	2.38	4	2
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CZ	0.48	2.82	15	5
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG13	0.48	2.35	4	2

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:HD23	0.48	2.39	11	3
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:HG2	0.48	2.07	10	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HG2	0.48	2.23	10	1
1:A:90:LEU:HD23	1:A:94:HIS:HD2	0.48	1.69	10	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:CD1	0.48	2.38	13	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:CA	0.48	2.39	15	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:14:LYS:H	0.48	2.21	12	2
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:ND1	0.48	2.76	10	2
1:A:40:ARG:HD2	1:A:40:ARG:N	0.48	2.24	16	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:110:CYS:HA	0.48	1.85	18	1
1:A:92:GLN:CD	1:A:95:GLN:OE1	0.48	2.52	18	1
1:A:46:THR:HG1	1:A:65:HIS:CE1	0.48	2.26	12	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HA	0.48	2.43	15	4
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:CB	0.48	2.92	14	4
1:A:7:GLU:HB2	1:A:14:LYS:NZ	0.48	2.22	11	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:H	0.48	2.07	13	1
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:HG3	0.48	2.09	14	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:37:ARG:HB3	0.48	1.85	15	1
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CD2	0.48	3.01	18	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG21	0.48	2.38	19	1
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:CD2	0.48	2.87	20	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:HB2	0.47	1.86	13	8
1:A:67:LYS:HE2	1:A:68:GLU:C	0.47	2.29	2	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:C	0.47	2.67	2	1
1:A:34:PHE:C	1:A:108:PRO:HA	0.47	2.27	7	4
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:CE1	0.47	2.44	5	2
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:HA2	0.47	2.43	16	2
1:A:16:ILE:HG21	1:A:37:ARG:HG3	0.47	1.86	10	1
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG2	0.47	2.29	1	5
1:A:35:MET:C	1:A:48:SER:H	0.47	2.13	11	4
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:NH1	0.47	2.62	6	2
1:A:88:PRO:C	1:A:92:GLN:OE1	0.47	2.52	7	1
1:A:106:ARG:HB2	1:A:106:ARG:CZ	0.47	2.38	13	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CG	0.47	2.39	19	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:66:ILE:CD1	0.47	2.39	1	1
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CZ	0.47	2.97	2	2
1:A:7:GLU:C	1:A:9:TYR:N	0.47	2.68	2	3
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CD1	0.47	2.94	13	7
1:A:43:GLY:O	1:A:76:TYR:CD2	0.47	2.67	8	1
1:A:46:THR:N	1:A:65:HIS:CE1	0.47	2.82	10	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.76	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:N	1:A:50:PHE:CE1	0.47	2.82	14	2
1:A:41:THR:HB	1:A:65:HIS:NE2	0.47	2.24	20	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:100:GLY:N	0.47	2.77	7	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:37:ARG:N	0.47	2.23	12	1
1:A:45:TYR:CE1	1:A:76:TYR:CE2	0.47	3.02	18	2
1:A:66:ILE:N	1:A:78:VAL:HG12	0.47	2.25	16	1
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:CB	0.47	2.40	3	3
1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CD1	0.47	2.81	3	7
1:A:13:ASN:CB	1:A:36:VAL:O	0.47	2.62	10	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:CD2	0.47	2.67	14	1
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:HD11	0.47	2.25	14	1
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HB2	0.47	2.09	14	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:108:PRO:O	0.47	2.68	14	1
1:A:18:ARG:HG2	1:A:19:ASP:N	0.47	2.24	20	1
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HA	0.47	1.85	5	7
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:HD11	0.47	1.86	2	2
1:A:92:GLN:HE22	1:A:95:GLN:NE2	0.47	2.07	13	2
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:O	0.47	2.62	8	1
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:CD1	0.47	2.23	10	5
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CD2	0.47	2.98	12	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:CA	0.47	2.92	14	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:HA	0.47	1.87	15	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:CA	0.47	2.93	18	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:HE1	0.47	2.23	1	2
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:HB	0.47	1.86	7	13
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:HA	0.47	2.40	3	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CD1	0.47	2.98	13	2
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:HG13	0.47	1.86	17	8
1:A:20:LYS:H	1:A:20:LYS:HD2	0.47	1.70	6	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE2	0.47	1.87	8	1
1:A:49:VAL:O	1:A:61:ILE:HG23	0.47	2.10	9	3
1:A:36:VAL:CG1	1:A:45:TYR:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:104:ARG:NH1	1:A:104:ARG:HG2	0.47	2.24	11	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:9:TYR:CD2	0.47	2.45	12	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HB2	0.47	2.24	12	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:95:GLN:NE2	0.47	2.82	14	2
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:HD1	0.47	1.61	14	1
1:A:96:TYR:CD1	1:A:96:TYR:O	0.47	2.67	14	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:99:GLY:HA3	0.47	2.25	17	1
1:A:46:THR:CG2	1:A:65:HIS:CD2	0.47	2.95	18	1
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:ND1	0.47	2.46	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:HA	0.47	2.09	20	1
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:CA	0.47	2.39	20	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:94:HIS:CE1	0.47	2.45	11	3
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CE2	0.47	2.97	18	5
1:A:44:THR:C	1:A:45:TYR:CD1	0.47	2.88	3	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HB	0.47	2.45	9	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:HB2	0.47	2.44	12	1
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:33:ALA:CB	0.47	2.19	13	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HD2	0.47	1.83	1	1
1:A:7:GLU:O	1:A:9:TYR:N	0.47	2.47	16	3
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:H	0.47	2.05	2	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CD1	0.47	2.45	4	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.47	2.05	13	3
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HB	0.47	1.86	9	1
1:A:77:TYR:OH	1:A:80:GLU:OE1	0.47	2.20	9	1
1:A:50:PHE:C	1:A:50:PHE:HD1	0.47	2.11	11	1
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.47	2.28	18	2
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:HG13	0.47	2.10	20	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:30:LYS:N	0.47	2.77	1	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:102:VAL:CG1	0.47	2.93	2	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:33:ALA:CB	0.47	2.39	7	1
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:HB3	0.47	1.87	13	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:37:ARG:HH11	0.47	1.69	16	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:OH	0.47	2.63	18	1
1:A:62:LYS:CB	1:A:64:TYR:CZ	0.46	2.98	1	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:N	0.46	2.48	1	1
1:A:75:ARG:HH21	1:A:85:ASP:CB	0.46	2.19	3	1
1:A:79:ALA:HB1	1:A:81:LYS:HD2	0.46	1.87	5	2
1:A:62:LYS:HZ1	1:A:64:TYR:HE1	0.46	1.51	11	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:CB	0.46	2.90	15	2
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE2	0.46	1.85	19	1
1:A:29:GLY:O	1:A:31:GLU:N	0.46	2.49	1	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:62:LYS:N	0.46	2.77	1	2
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CD1	0.46	3.01	2	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CG1	0.46	2.98	3	5
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:HA	0.46	1.87	5	2
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:HD1	0.46	2.14	7	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:CD1	0.46	2.77	7	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CG	0.46	2.45	8	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:102:VAL:CG1	0.46	2.94	17	2
1:A:14:LYS:H	1:A:14:LYS:CD	0.46	2.23	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HD11	0.46	1.87	17	2
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HG	0.46	2.10	16	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:ND1	0.46	2.77	18	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HG2	0.46	1.85	18	2
1:A:37:ARG:HG3	1:A:46:THR:CB	0.46	2.32	2	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:84:PHE:HA	0.46	1.88	2	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:94:HIS:N	0.46	2.83	3	6
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.46	2.33	11	3
1:A:94:HIS:C	1:A:105:LEU:HB2	0.46	2.30	5	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CE2	0.46	2.94	8	2
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HB3	0.46	2.31	15	1
1:A:100:GLY:O	1:A:104:ARG:N	0.46	2.48	17	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.46	2.44	18	1
1:A:9:TYR:O	1:A:12:TYR:N	0.46	2.48	1	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:111:GLY:O	0.46	2.48	5	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:15:SER:N	0.46	2.79	7	1
1:A:43:GLY:HA3	1:A:68:GLU:CD	0.46	2.30	8	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:CG	0.46	2.24	14	3
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.46	1.85	12	2
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:H	0.46	2.14	7	5
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:HE2	0.46	2.28	7	2
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:O	0.46	2.53	8	3
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG12	0.46	1.86	15	2
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:OH	0.46	1.84	10	1
1:A:93:TYR:HE1	1:A:99:GLY:CA	0.46	2.22	12	3
1:A:95:GLN:HE22	1:A:105:LEU:CD1	0.46	2.23	15	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:108:PRO:CD	0.46	2.83	17	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:CA	0.46	2.40	18	1
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:HG2	0.46	2.26	20	1
1:A:88:PRO:HA	1:A:92:GLN:OE1	0.46	2.10	4	3
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:HE21	0.46	2.09	6	4
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:HD1	0.46	2.23	18	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HG	0.46	2.40	10	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HD12	0.46	1.87	11	1
1:A:16:ILE:CB	1:A:37:ARG:HB3	0.46	2.40	15	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HB2	0.46	2.25	15	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:HB2	0.46	2.25	17	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CB	0.46	2.63	7	2
1:A:93:TYR:CE1	1:A:94:HIS:CD2	0.46	3.04	10	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG21	0.46	1.86	8	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:24:LEU:HD21	0.46	2.40	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:C	0.46	2.53	14	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:ND1	0.46	2.78	16	1
1:A:97:ASN:HD22	1:A:97:ASN:N	0.46	2.09	20	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CA	0.46	2.24	1	2
1:A:34:PHE:C	1:A:109:VAL:HG22	0.46	2.30	14	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HB	0.46	2.25	6	1
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:CD	0.46	2.83	7	2
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:HD21	0.46	2.19	7	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:NE2	0.46	2.79	7	2
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CG	0.46	2.89	9	3
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ASP:N	0.46	2.25	11	1
1:A:93:TYR:CZ	1:A:99:GLY:CA	0.46	2.99	14	1
1:A:82:TYR:HE1	1:A:90:LEU:CD1	0.46	2.24	17	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.46	2	1
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:99:GLY:C	0.46	2.84	3	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:37:ARG:HH12	0.46	2.23	5	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB3	0.46	2.38	14	1
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:CG	0.46	2.64	15	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:CG1	0.46	2.95	3	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:94:HIS:CE1	0.46	3.04	10	1
1:A:104:ARG:CG	1:A:104:ARG:HH11	0.45	2.24	6	2
1:A:96:TYR:HE1	1:A:97:ASN:ND2	0.45	2.09	4	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:CD	0.45	2.41	6	4
1:A:62:LYS:HD3	1:A:63:HIS:N	0.45	2.26	7	1
1:A:81:LYS:HD2	1:A:94:HIS:HE1	0.45	1.71	7	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:C	0.45	2.54	8	6
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CG	0.45	2.62	9	1
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:HE3	0.45	1.88	11	3
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CD	0.45	2.64	18	2
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:HA	0.45	1.88	2	2
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HG	0.45	2.46	7	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:64:TYR:CD2	0.45	2.45	10	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:HA	0.45	2.46	11	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:85:ASP:HA	0.45	2.41	15	1
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:82:TYR:HE1	0.45	1.51	15	1
1:A:14:LYS:C	1:A:15:SER:OG	0.45	2.55	19	1
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:HD1	0.45	1.95	17	4
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:O	0.45	2.63	4	1
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:CA	0.45	2.64	13	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CG	0.45	2.46	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:CA	0.45	2.24	17	1
1:A:28:THR:C	1:A:30:LYS:HE2	0.45	2.32	1	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG23	0.45	1.88	14	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:30:LYS:CB	0.45	2.79	3	2
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:HB	0.45	2.42	14	4
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HD2	0.45	2.12	7	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:N	0.45	2.22	8	1
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD12	0.45	1.82	10	1
1:A:26:LEU:CA	1:A:50:PHE:HE2	0.45	2.19	11	1
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:OH	0.45	1.85	12	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:C	0.45	2.84	1	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:C	0.45	2.14	8	4
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CG	0.45	2.79	4	6
1:A:96:TYR:HD1	1:A:97:ASN:N	0.45	2.05	4	1
1:A:75:ARG:C	1:A:76:TYR:HD1	0.45	2.14	7	2
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:N	0.45	2.27	18	2
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:CG	0.45	2.85	1	1
1:A:67:LYS:NZ	1:A:68:GLU:O	0.45	2.49	2	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:HE1	0.45	1.72	3	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:95:GLN:OE1	0.45	2.70	5	1
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HB	0.45	1.71	6	1
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HD2	0.45	1.89	10	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:H	0.45	1.72	10	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:HH21	0.45	2.08	15	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CG	0.45	2.85	15	1
1:A:35:MET:CG	1:A:109:VAL:O	0.45	2.65	15	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HE2	0.45	1.70	16	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:HG3	0.45	1.88	17	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:HB3	0.45	1.88	7	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:107:TYR:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE3	0.45	1.88	16	1
1:A:14:LYS:H	1:A:14:LYS:CE	0.45	2.25	12	2
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:CD1	0.45	3.00	2	2
1:A:16:ILE:HD11	1:A:20:LYS:HD2	0.45	1.89	4	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:60:CYS:O	0.45	2.12	15	2
1:A:20:LYS:CD	1:A:24:LEU:CD2	0.45	2.85	10	1
1:A:94:HIS:HA	1:A:99:GLY:HA3	0.45	1.88	10	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:N	0.45	2.84	11	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:46:THR:CB	0.45	2.24	12	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:81:LYS:CE	0.45	2.41	19	1
1:A:43:GLY:N	1:A:68:GLU:OE2	0.45	2.50	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CB	0.45	2.41	9	2
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CD2	0.45	2.24	19	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:CA	0.45	2.80	9	1
1:A:93:TYR:C	1:A:97:ASN:HB2	0.45	2.32	10	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CG	0.45	2.64	10	2
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB3	0.45	2.10	14	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:48:SER:HB2	0.45	2.26	17	1
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:CA	0.45	2.23	17	1
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:HE3	0.45	2.11	19	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE1	0.44	1.67	2	2
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HG21	0.44	2.34	18	2
1:A:94:HIS:C	1:A:96:TYR:N	0.44	2.68	5	3
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HB3	0.44	2.42	8	1
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:HD1	0.44	1.94	12	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:C	0.44	2.33	14	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:46:THR:CB	0.44	2.25	15	1
1:A:93:TYR:HE1	1:A:99:GLY:HA2	0.44	1.72	16	1
1:A:82:TYR:HH	1:A:101:LEU:HD13	0.44	1.71	20	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:O	0.44	2.69	1	2
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:HD2	0.44	2.26	2	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:H	0.44	2.10	7	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HD2	0.44	1.88	1	3
1:A:104:ARG:CG	1:A:104:ARG:NH1	0.44	2.80	6	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:CA	0.44	2.79	2	2
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HE2	0.44	1.72	18	5
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:HG13	0.44	2.48	17	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HG2	0.44	1.89	3	2
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CE2	0.44	2.28	18	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD2	0.44	2.69	19	1
1:A:12:TYR:HE1	1:A:45:TYR:CD2	0.44	2.25	20	1
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LEU:CD1	0.44	2.96	7	2
1:A:34:PHE:HD2	1:A:95:GLN:NE2	0.44	2.07	9	2
1:A:39:SER:HB3	1:A:44:THR:CG2	0.44	2.42	18	1
1:A:76:TYR:N	1:A:83:VAL:HG12	0.44	2.28	20	1
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:CA	0.44	2.63	20	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:CD1	0.44	2.66	2	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:74:LYS:O	0.44	2.32	2	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:48:SER:N	0.44	2.09	10	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HG3	0.44	2.27	17	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HE2	0.44	2.10	18	1
1:A:67:LYS:HE2	1:A:68:GLU:CA	0.44	2.42	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:HE2	0.44	1.69	4	2
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:100:GLY:N	0.44	2.08	10	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:HD13	0.44	2.33	11	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:29:GLY:N	0.44	2.27	11	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:CG1	0.44	2.96	15	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:CD	0.44	2.66	16	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:NZ	0.44	2.27	18	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:C	0.44	2.33	6	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:CA	0.44	3.01	15	1
1:A:10:GLU:CA	1:A:110:CYS:HB2	0.44	2.42	4	2
1:A:37:ARG:HH21	1:A:63:HIS:CB	0.44	2.25	2	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:O	0.44	2.56	12	4
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG3	0.44	2.32	6	1
1:A:43:GLY:O	1:A:76:TYR:CG	0.44	2.71	8	1
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:HB	0.44	1.90	10	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:CD	0.44	2.94	13	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:SD	0.44	2.52	2	1
1:A:101:LEU:HD23	1:A:105:LEU:HD13	0.44	1.89	3	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:81:LYS:O	0.44	2.64	4	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:CB	0.44	3.00	4	1
1:A:64:TYR:HD2	1:A:101:LEU:CD2	0.44	2.25	7	2
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:HE1	0.44	2.11	8	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:CG1	0.44	3.01	11	1
1:A:34:PHE:CD1	1:A:35:MET:N	0.44	2.86	11	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:94:HIS:HE1	0.44	2.26	14	2
1:A:36:VAL:CG1	1:A:37:ARG:N	0.44	2.81	17	2
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HE3	0.44	2.16	15	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:50:PHE:HD2	0.44	1.71	16	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD2	0.44	1.69	17	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:HG	0.43	1.66	13	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HD3	0.43	2.13	1	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:HE21	0.43	1.73	4	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:C	0.43	2.32	6	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HD2	0.43	2.12	8	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:9:TYR:HD2	0.43	1.72	12	1
1:A:76:TYR:CB	1:A:90:LEU:CD1	0.43	2.96	13	1
1:A:33:ALA:O	1:A:49:VAL:CA	0.43	2.62	15	1
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:N	0.43	2.81	2	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CG	0.43	2.66	11	5
1:A:34:PHE:HD2	1:A:108:PRO:HB3	0.43	1.73	11	3
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CD2	0.43	3.06	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:H	1:A:66:ILE:HG12	0.43	1.73	10	2
1:A:49:VAL:HG21	1:A:62:LYS:CG	0.43	2.39	9	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HD12	0.43	2.27	9	1
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:HH11	0.43	2.26	13	1
1:A:11:TRP:N	1:A:108:PRO:CB	0.43	2.81	14	1
1:A:39:SER:HB2	1:A:44:THR:HG23	0.43	1.86	18	1
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:HA	0.43	1.65	20	2
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:H	0.43	1.55	5	1
1:A:64:TYR:HD2	1:A:101:LEU:HG	0.43	1.74	12	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:C	0.43	2.30	16	1
1:A:82:TYR:HH	1:A:101:LEU:CD1	0.43	2.25	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HB3	0.43	2.43	2	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:HE	0.43	2.12	3	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CA	0.43	2.64	7	2
1:A:106:ARG:NH2	1:A:107:TYR:CB	0.43	2.81	4	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CB	0.43	2.66	9	2
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:H	0.43	1.72	8	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:48:SER:CB	0.43	2.26	10	1
1:A:26:LEU:CB	1:A:50:PHE:HE2	0.43	2.25	11	1
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:CE1	0.43	3.02	12	1
1:A:94:HIS:HD2	1:A:105:LEU:CD2	0.43	2.24	18	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HD12	0.43	2.40	19	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:CE1	0.43	3.01	1	2
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HB2	0.43	1.90	12	2
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:HD2	0.43	2.26	12	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:CB	0.43	2.65	20	2
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:CB	0.43	2.97	19	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:28:THR:N	0.43	2.51	20	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CB	0.43	3.00	20	1
1:A:105:LEU:HD22	1:A:105:LEU:H	0.43	1.73	20	3
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:CD2	0.43	3.02	7	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:26:LEU:N	0.43	2.82	9	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CE2	0.43	2.85	12	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:HB	0.43	1.88	13	1
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:HA	0.43	1.89	19	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:HE1	0.43	2.26	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HD1	0.43	2.27	9	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:CA	0.43	2.27	9	2
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:H	0.43	1.72	9	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:HZ1	0.43	2.26	11	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:CG	0.43	2.82	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HG2	0.43	2.42	14	1
1:A:95:GLN:HG3	1:A:108:PRO:HD3	0.43	1.90	17	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:24:LEU:N	0.43	2.79	20	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HE2	0.43	2.25	13	2
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:NZ	0.43	2.29	8	1
1:A:40:ARG:HH11	1:A:40:ARG:CG	0.43	2.27	8	1
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:HE1	0.43	1.97	18	2
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:HG22	0.43	2.13	17	3
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG22	0.43	2.34	2	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:96:TYR:CZ	0.43	2.49	4	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:CZ	0.43	2.82	5	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.43	7	1
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:CG	0.43	3.02	7	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:CA	0.43	2.44	12	1
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:HG12	0.43	2.13	12	1
1:A:9:TYR:O	1:A:110:CYS:HB2	0.43	2.14	15	1
1:A:92:GLN:CA	1:A:92:GLN:HE21	0.43	2.23	20	1
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:CB	0.43	2.43	20	1
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:CG2	0.43	2.66	4	1
1:A:12:TYR:HE1	1:A:14:LYS:HA	0.43	1.74	7	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HG22	0.43	2.14	7	1
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD22	0.43	1.89	10	1
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:CG	0.43	2.67	10	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:HE1	0.43	1.73	19	2
1:A:79:ALA:HB2	1:A:81:LYS:HE3	0.43	1.89	12	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:HA	0.43	1.91	17	2
1:A:30:LYS:H	1:A:30:LYS:HE2	0.43	1.71	17	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG3	0.43	2.42	20	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:48:SER:HG	0.43	1.74	20	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:62:LYS:N	0.43	2.29	20	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HD3	0.42	1.90	3	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:111:GLY:N	0.42	2.29	4	1
1:A:40:ARG:O	1:A:43:GLY:N	0.42	2.52	4	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:HB3	0.42	2.44	5	2
1:A:37:ARG:HB2	1:A:37:ARG:HH11	0.42	1.74	15	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD2	0.42	1.91	16	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HA	0.42	2.50	2	1
1:A:67:LYS:HD2	1:A:77:TYR:CE1	0.42	2.45	2	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:OG	0.42	2.67	3	1
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:CG2	0.42	2.66	5	1
1:A:85:ASP:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.42	2.44	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:CA	1:A:93:TYR:HE1	0.42	2.24	18	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:99:GLY:CA	0.42	3.00	1	1
1:A:77:TYR:O	1:A:77:TYR:CG	0.42	2.72	2	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CG2	0.42	3.01	7	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.42	2.44	7	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CG	0.42	2.89	13	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:O	0.42	2.67	2	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:CE2	0.42	2.86	8	1
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:HE3	0.42	1.86	15	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:CB	0.42	2.40	17	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:99:GLY:H	0.42	2.11	20	1
1:A:40:ARG:CZ	1:A:40:ARG:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:CG2	0.42	2.45	2	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CA	0.42	2.44	8	1
1:A:29:GLY:O	1:A:50:PHE:HD1	0.42	1.96	10	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:48:SER:CA	0.42	2.27	10	1
1:A:14:LYS:CE	1:A:14:LYS:H	0.42	2.27	11	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:HD22	0.42	1.90	11	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:11:TRP:HH2	0.42	2.25	12	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:93:TYR:HE2	0.42	2.31	17	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CG2	0.42	2.68	19	1
1:A:99:GLY:CA	1:A:104:ARG:CB	0.42	2.97	20	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HD1	0.42	2.27	3	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HD3	0.42	2.14	3	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:HD12	0.42	1.92	20	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:LYS:N	0.42	2.29	10	1
1:A:26:LEU:N	1:A:50:PHE:CD2	0.42	2.88	11	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:HD2	0.42	1.73	12	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:C	0.42	2.88	14	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CD2	0.42	3.00	15	1
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:CB	0.42	2.87	15	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:CG1	0.42	2.66	16	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:NE2	0.42	2.48	18	1
1:A:62:LYS:HB2	1:A:64:TYR:HE1	0.42	1.74	2	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:CG1	0.42	2.87	3	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:HB2	0.42	1.89	13	2
1:A:19:ASP:CA	1:A:22:GLU:HG2	0.42	2.43	10	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:CB	0.42	2.27	10	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:CD2	0.42	2.95	10	1
1:A:32:GLY:C	1:A:106:ARG:CG	0.42	2.86	20	1
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:CB	0.42	2.27	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ARG:C	1:A:41:THR:O	0.42	2.58	10	8
1:A:12:TYR:HD1	1:A:36:VAL:CG1	0.42	2.27	11	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:81:LYS:HZ3	0.42	2.27	11	1
1:A:14:LYS:HG2	1:A:15:SER:H	0.42	1.75	14	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:46:THR:HB	0.42	1.75	15	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HD2	0.42	2.12	18	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HG3	0.42	1.91	20	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:CD	0.42	2.27	19	2
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:H	0.42	1.72	5	2
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:CA	0.42	2.65	7	1
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:CB	0.42	2.29	9	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CE1	0.42	3.03	10	1
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:CE	0.42	2.67	14	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HZ2	0.42	1.71	16	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:HE2	0.42	1.75	20	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CD	0.42	2.45	6	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:49:VAL:O	0.42	2.67	6	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:HD2	0.42	2.22	10	1
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:NZ	0.42	2.28	11	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CD2	0.42	3.03	12	1
1:A:106:ARG:HD3	1:A:106:ARG:C	0.42	2.35	14	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:H	0.42	1.73	17	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:GLU:C	0.41	2.57	1	6
1:A:62:LYS:HB3	1:A:62:LYS:HZ3	0.41	1.75	1	1
1:A:99:GLY:H	1:A:104:ARG:CB	0.41	2.28	6	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:14:LYS:CA	0.41	3.03	7	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CD2	0.41	2.50	7	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:C	0.41	2.57	8	1
1:A:18:ARG:C	1:A:63:HIS:NE2	0.41	2.73	11	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:H	0.41	2.27	19	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:81:LYS:NZ	0.41	2.30	3	1
1:A:35:MET:CE	1:A:111:GLY:H	0.41	2.27	6	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:OD1	0.41	2.14	7	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:CE	0.41	2.45	8	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	3.03	13	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	0.41	1.92	20	1
1:A:94:HIS:C	1:A:97:ASN:ND2	0.41	2.73	20	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:30:LYS:N	0.41	2.30	16	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HE2	0.41	1.85	15	1
1:A:39:SER:OG	1:A:46:THR:OG1	0.41	2.38	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:HE1	1:A:90:LEU:HG	0.41	1.73	17	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.41	2.51	19	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:HD12	0.41	2.45	20	1
1:A:94:HIS:O	1:A:96:TYR:N	0.41	2.53	5	1
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HB2	0.41	2.34	5	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:HE2	0.41	2.12	8	1
1:A:95:GLN:C	1:A:104:ARG:CD	0.41	2.89	13	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:C	0.41	2.34	18	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:HG3	0.41	2.15	20	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CD	0.41	2.68	20	1
1:A:34:PHE:HD1	1:A:47:VAL:CG2	0.41	2.20	1	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CD2	0.41	2.45	9	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:107:TYR:CD2	0.41	3.03	10	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:99:GLY:HA3	0.41	1.75	13	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.41	2.99	16	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CG	0.41	2.97	20	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:N	0.41	2.75	20	1
1:A:84:PHE:HB2	1:A:90:LEU:HB2	0.41	1.92	6	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:HD2	0.41	2.18	12	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CE	0.41	2.96	12	1
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:HE2	0.41	1.56	13	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HD2	0.41	2.27	16	1
1:A:97:ASN:H	1:A:97:ASN:ND2	0.41	2.13	16	1
1:A:35:MET:SD	1:A:48:SER:OG	0.41	2.78	7	1
1:A:40:ARG:HG2	1:A:41:THR:N	0.41	2.31	7	1
1:A:62:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HG12	0.41	1.91	9	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE1	0.41	2.29	10	1
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:CG2	0.41	2.67	12	1
1:A:48:SER:HB2	1:A:63:HIS:CE1	0.41	2.51	13	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CB	0.41	2.69	20	1
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:CD1	0.41	2.18	5	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:HD2	0.41	1.72	6	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:NZ	0.41	2.30	6	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HE3	0.41	1.93	13	1
1:A:48:SER:HB2	1:A:63:HIS:ND1	0.41	2.30	13	1
1:A:104:ARG:HG2	1:A:104:ARG:NH1	0.41	2.31	16	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:19:ASP:OD1	0.41	2.15	17	1
1:A:82:TYR:HE1	1:A:90:LEU:CG	0.41	2.29	17	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:CA	0.41	2.69	19	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:81:LYS:HE2	0.41	2.46	1	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HD3	0.41	1.93	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:HD2	0.41	1.73	15	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CD	0.41	2.69	10	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:66:ILE:HB	0.41	2.16	11	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG11	0.41	1.92	11	1
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:HD2	0.41	1.74	12	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:HG3	0.41	1.93	12	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:49:VAL:O	0.41	2.16	13	1
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CE1	0.41	2.51	15	1
1:A:91:ILE:HG23	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.22	15	1
1:A:66:ILE:CA	1:A:78:VAL:CG1	0.41	2.95	16	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:37:ARG:HB3	0.41	1.88	17	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HG2	0.41	1.92	17	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:66:ILE:HG12	0.41	2.45	18	1
1:A:20:LYS:HZ3	1:A:20:LYS:N	0.41	2.13	19	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:C	0.41	2.88	19	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:C	0.41	2.33	19	1
1:A:32:GLY:C	1:A:50:PHE:O	0.41	2.59	3	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:100:GLY:HA3	0.41	1.93	7	1
1:A:95:GLN:HE21	1:A:105:LEU:HD12	0.41	1.75	9	1
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:HE3	0.41	1.74	20	2
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:C	0.41	2.36	16	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:77:TYR:O	0.40	2.15	9	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:CB	0.40	2.97	13	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:HE1	0.40	1.75	13	1
1:A:17:SER:CA	1:A:20:LYS:HD3	0.40	2.46	17	1
1:A:18:ARG:HH11	1:A:18:ARG:CG	0.40	2.30	1	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:CG	0.40	2.69	3	1
1:A:14:LYS:HZ1	1:A:16:ILE:HG13	0.40	1.77	7	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:30:LYS:HB3	0.40	1.63	7	1
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:HD11	0.40	1.93	8	1
1:A:35:MET:HB3	1:A:109:VAL:HG23	0.40	1.92	10	1
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:HZ	0.40	2.25	18	1
1:A:23:LYS:HE3	1:A:24:LEU:HD23	0.40	1.93	20	1
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:H	0.40	1.76	20	1
1:A:37:ARG:HH21	1:A:63:HIS:HB3	0.40	1.77	2	1
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:CD	0.40	2.74	4	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG21	0.40	2.47	6	1
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:HD13	0.40	2.31	6	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:HB3	0.40	2.47	7	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:88:PRO:HA	0.40	2.52	8	1
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CG	0.40	3.09	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ARG:NH1	1:A:19:ASP:OD1	0.40	2.55	10	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:94:HIS:CD2	0.40	3.04	10	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:45:TYR:HD2	0.40	2.33	12	1
1:A:62:LYS:HE3	1:A:64:TYR:CZ	0.40	2.51	13	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CB	0.40	3.00	15	1
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:CE	0.40	2.25	1	1
1:A:40:ARG:CB	1:A:40:ARG:NH1	0.40	2.84	1	1
1:A:37:ARG:HH22	1:A:48:SER:N	0.40	2.15	2	1
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:CE	0.40	2.46	6	1
1:A:92:GLN:HE21	1:A:95:GLN:NE2	0.40	2.14	7	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:N	0.40	2.32	11	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:14:LYS:H	0.40	1.74	12	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NH2	0.40	2.54	13	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:HD2	0.40	1.74	14	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:HE2	0.40	2.18	14	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:CD2	0.40	2.90	17	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:81:LYS:HZ1	0.40	1.75	19	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:95:GLN:CA	0.40	2.70	4	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD1	0.40	3.04	7	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HG3	0.40	2.30	13	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:87:ILE:HG21	0.40	1.94	16	1
1:A:37:ARG:HH21	1:A:48:SER:HB2	0.40	1.77	17	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG22	0.40	2.46	18	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:O	0.40	2.39	19	1
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:HE2	0.40	1.67	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	94/110 (85%)	65±2 (69±2%)	15±3 (16±3%)	14±3 (15±3%)	0 4
All	All	1880/2200 (85%)	1302 (69%)	304 (16%)	274 (15%)	0 4

All 29 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	80	GLU	20
1	A	41	THR	19
1	A	7	GLU	18
1	A	42	PRO	18
1	A	79	ALA	18
1	A	74	LYS	15
1	A	101	LEU	15
1	A	102	VAL	15
1	A	100	GLY	14
1	A	97	ASN	13
1	A	15	SER	10
1	A	40	ARG	10
1	A	98	GLY	10
1	A	105	LEU	10
1	A	8	THR	9
1	A	10	GLU	9
1	A	14	LYS	7
1	A	99	GLY	7
1	A	103	THR	7
1	A	6	LEU	6
1	A	82	TYR	6
1	A	111	GLY	5
1	A	30	LYS	3
1	A	104	ARG	3
1	A	86	SER	2
1	A	66	ILE	2
1	A	78	VAL	1
1	A	29	GLY	1
1	A	75	ARG	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	84/97 (87%)	45±3 (54±4%)	39±3 (46±4%)	0 2
All	All	1680/1940 (87%)	906 (54%)	774 (46%)	0 2

All 66 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	89	LEU	20
1	A	92	GLN	20
1	A	105	LEU	20
1	A	17	SER	19
1	A	20	LYS	19
1	A	44	THR	19
1	A	48	SER	19
1	A	76	TYR	19
1	A	62	LYS	18
1	A	86	SER	18
1	A	10	GLU	17
1	A	24	LEU	17
1	A	30	LYS	17
1	A	67	LYS	17
1	A	81	LYS	17
1	A	93	TYR	17
1	A	14	LYS	16
1	A	50	PHE	16
1	A	82	TYR	16
1	A	87	ILE	16
1	A	74	LYS	15
1	A	103	THR	15
1	A	110	CYS	15
1	A	6	LEU	15
1	A	109	VAL	15
1	A	23	LYS	14
1	A	40	ARG	14
1	A	65	HIS	14
1	A	106	ARG	14
1	A	69	THR	14
1	A	18	ARG	13
1	A	104	ARG	13
1	A	41	THR	13
1	A	15	SER	11
1	A	26	LEU	11
1	A	8	THR	10
1	A	7	GLU	9
1	A	31	GLU	9
1	A	97	ASN	9
1	A	27	ASP	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	25	LEU	8
1	A	60	CYS	8
1	A	68	GLU	8
1	A	28	THR	8
1	A	102	VAL	8
1	A	61	ILE	7
1	A	85	ASP	7
1	A	75	ARG	6
1	A	39	SER	5
1	A	13	ASN	5
1	A	35	MET	5
1	A	95	GLN	5
1	A	80	GLU	5
1	A	96	TYR	5
1	A	19	ASP	5
1	A	51	THR	3
1	A	47	VAL	1
1	A	12	TYR	1
1	A	38	ASP	1
1	A	63	HIS	1
1	A	84	PHE	1
1	A	90	LEU	1
1	A	101	LEU	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided