Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Mar 6, 2022 – 02:51 PM EST

PDB ID	:	2TBD
Title	:	SV40 T ANTIGEN DNA-BINDING DOMAIN, NMR, 30 STRUCTURES
Authors	:	Luo, X.; Sanford, D.G.; Bullock, P.A.; Bachovchin, W.W.
Deposited on	:	1997-01-09

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

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

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

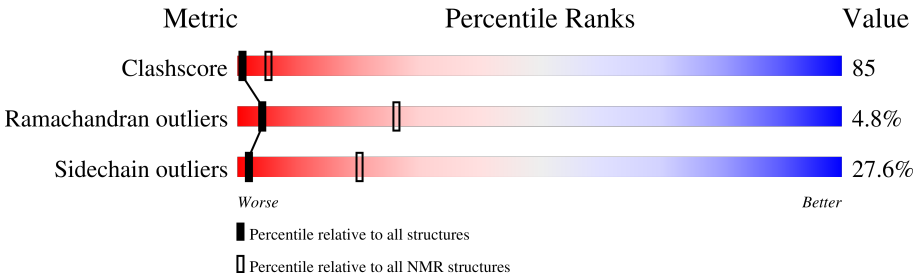
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.27
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.27

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	134	12% 59% 17% • 11%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 30 models. Model 25 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:124 (119)	0.41	25

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, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 24, 25, 26, 27
2	20, 21, 22
3	6, 19, 29
4	4, 23
Single-model clusters	9; 17; 28; 30

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2163 atoms, of which 1076 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SV40 T ANTIGEN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	134	2163	702	1076	181	199	5	0

4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 12% 59% 17% • 11%

G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 L18 S19 H20 S24 N25 R26 T27 L28 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 A41 L42 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60 S61 Y62

M63 H64 M65 I66 L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 S78 A79 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 C88 T89 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 N99 K100 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 A107 L108 T109 R110 D111 P112 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 G123

L124 K125 E126 H127 D128 F129 N130 P131 E132 S133 S134

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: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 17% 49% 20% • 11%

G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 L18 S19 H20 A21 S24 N25 R26 T27 L28 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 A41 L42 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60 S61

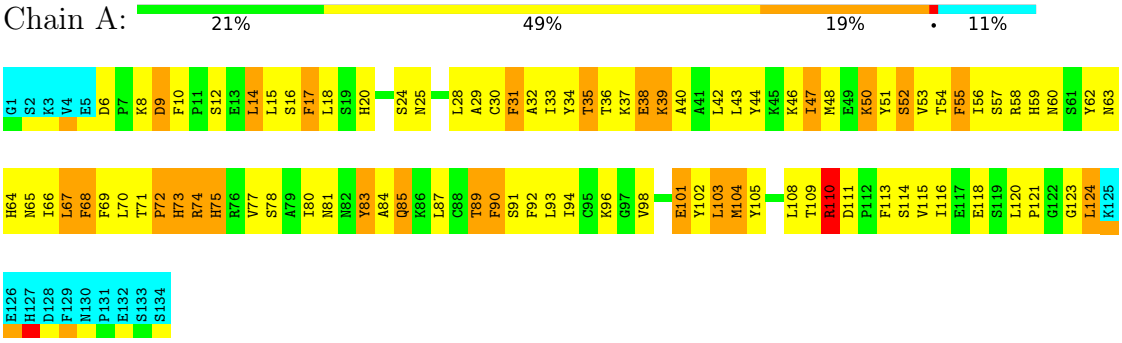
Y62 H64 M65 I66 L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 N99 K100 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 A107 L108 T109 R110 D111 P112 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 G123 L124

K125 E126 H127 D128 F129 N130 P131 E132 S133 S134

4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

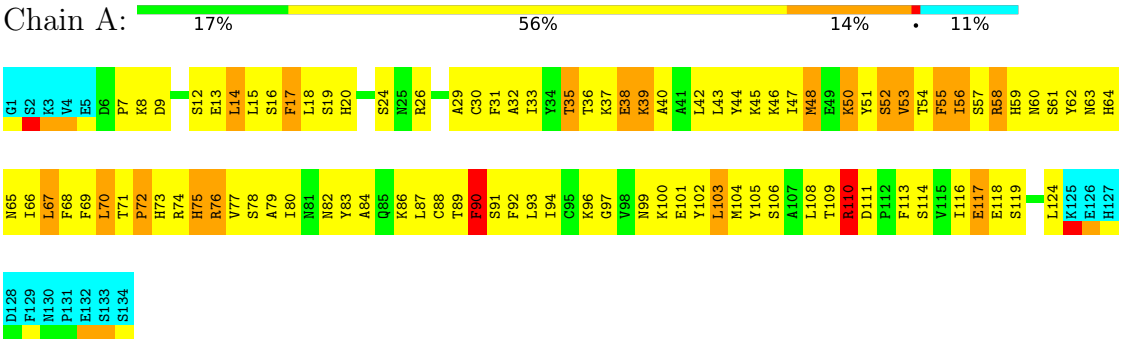
Chain A:



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

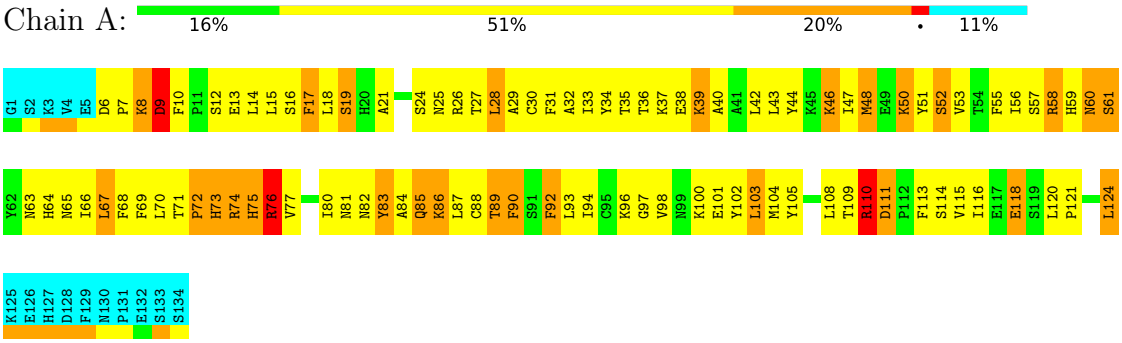
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

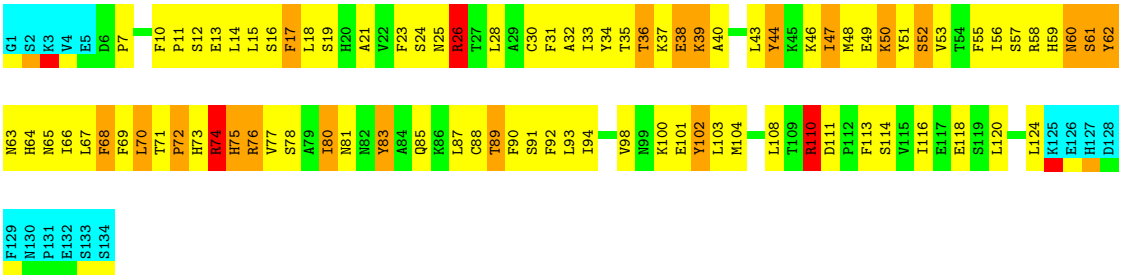
Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

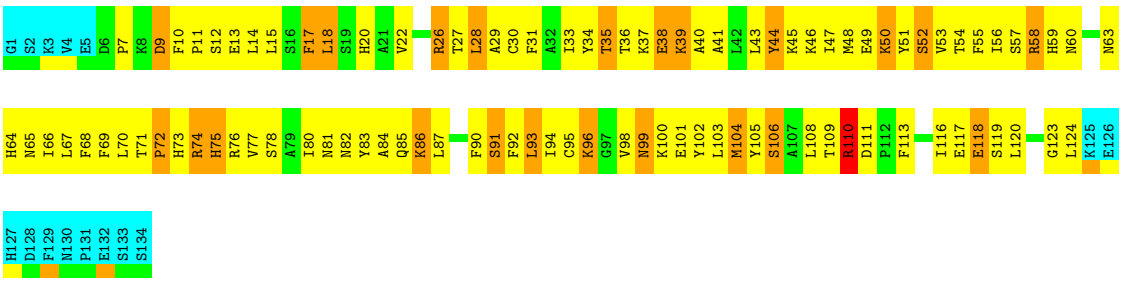
Chain A: 22% 49% 15% • 11%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

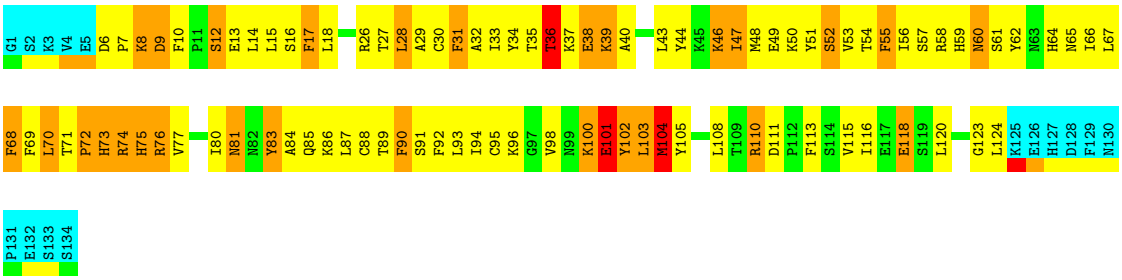
Chain A: 16% 54% 17% • 11%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

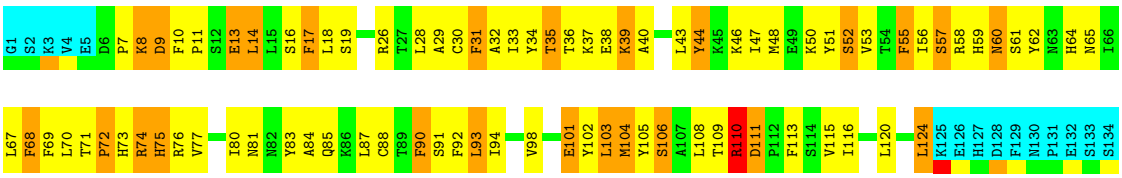
Chain A: 19% 46% 21% • 11%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

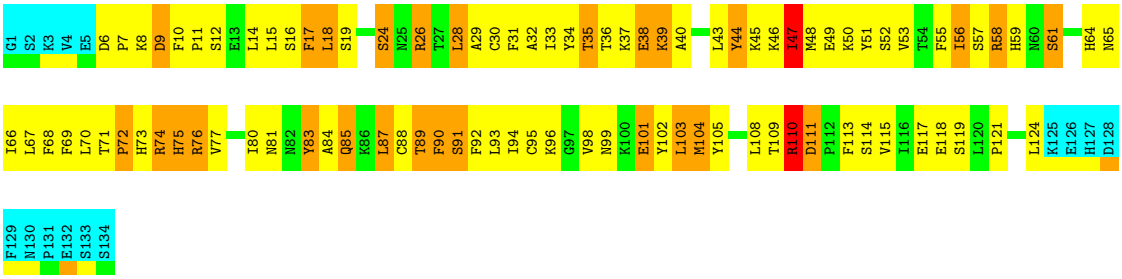
Chain A: 27% 43% 19% • 11%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

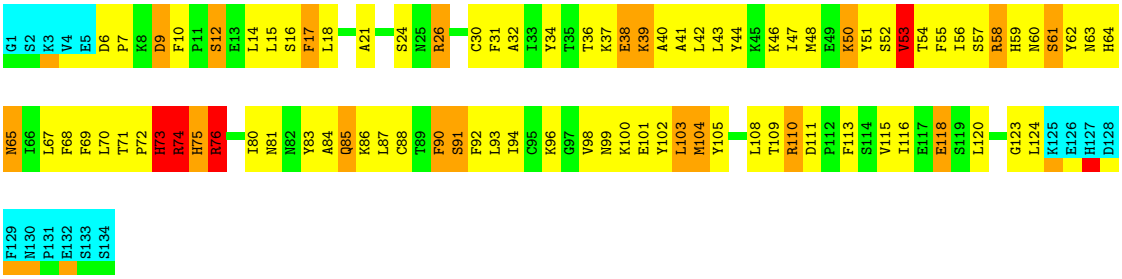
Chain A: 19% 48% 20% • 11%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

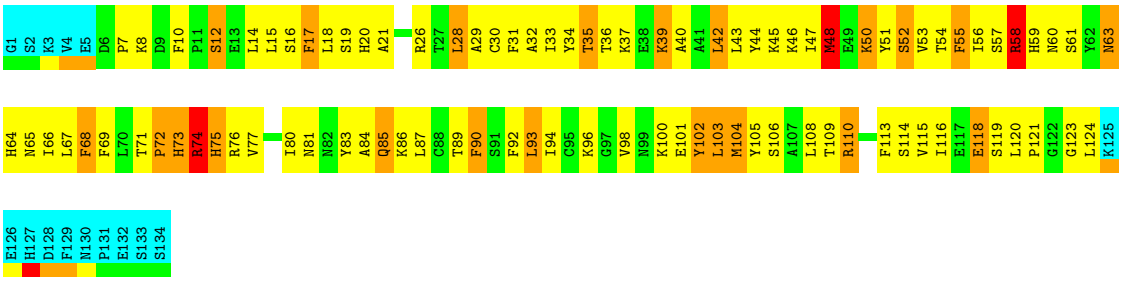
Chain A: 23% 49% 13% • 11%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

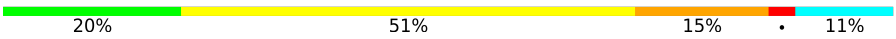
Chain A: 20% 50% 16% • 11%

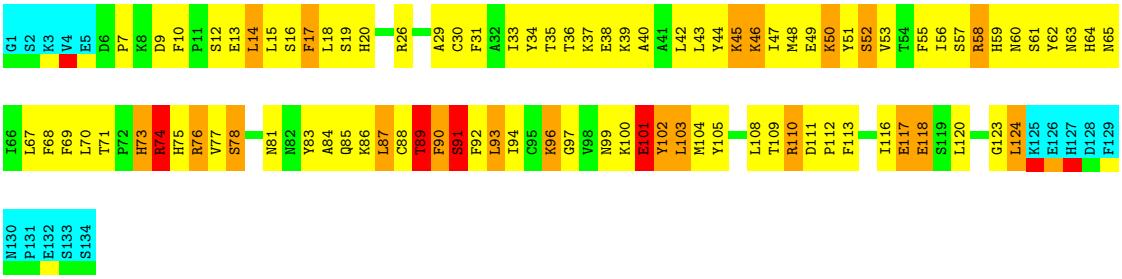


4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A:

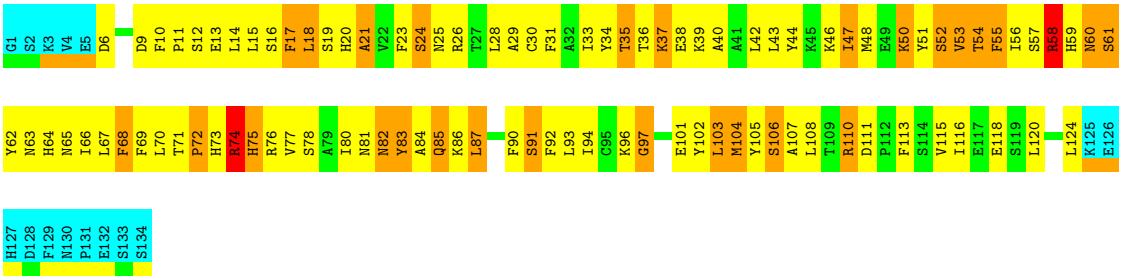




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

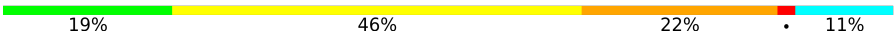
Chain A:



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A:



N63 H64 N65 I66 L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 S78 A79 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 T109 R110 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 G123 L124 K125 E126 H127

D128 F129 N130 P131 E132 S133 S134

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 17% 49% 20% • 11%

G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 L18 R26 T27 L28 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 A41 L42 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60 S61 Y62 N63 H64 N65 I66

L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 C88 T89 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 N99 K100 E101 Y102 L103 M104 Y105 L108 T109 R110 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 P121 G122 G123 L124 K125 E126 H127 D128 F129 N130 P131

E132 S133 S134

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 20% 45% 22% • 11%

G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 L18 S19 H20 A21 V22 R26 T27 L28 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 A41 L42 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60 S61 Y62

N63 H64 N65 I66 L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 S78 A79 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 C88 T89 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 N99 K100 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 A107 L108 T109 R110 D111 P112 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 L124

K125 E126 H127 D128 F129 N130 P131 E132 S133 S134

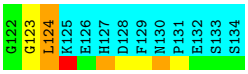
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 14% 51% 22% • 11%

G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 L18 S19 H20 A21 V22 F23 S24 N25 R26 T27 L28 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 A41 L42 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60

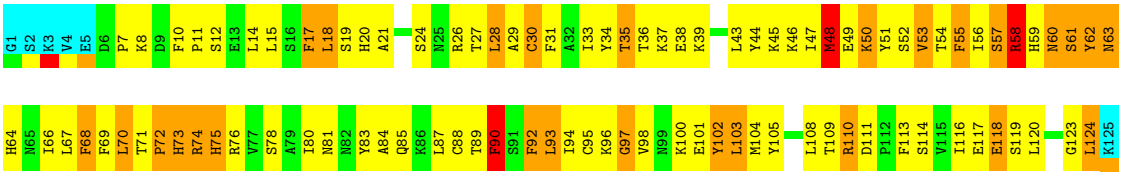
S61 Y62 N63 H64 N65 I66 L67 F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 S78 A79 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 C88 T89 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 G97 V98 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 A107 L108 T109 R110 D111 P112 F113 S114 V115 I116 E117 E118 S119 L120 P121



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

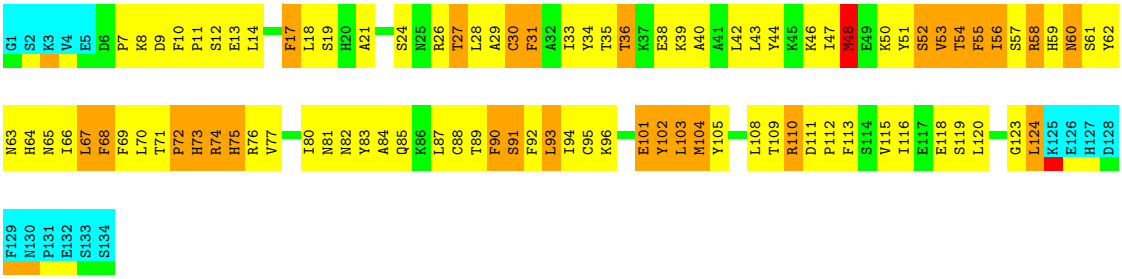
Chain A:



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

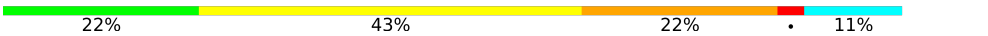
Chain A:

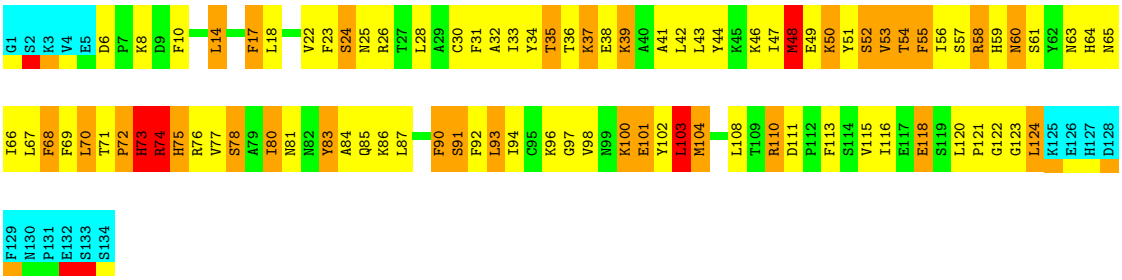


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A:

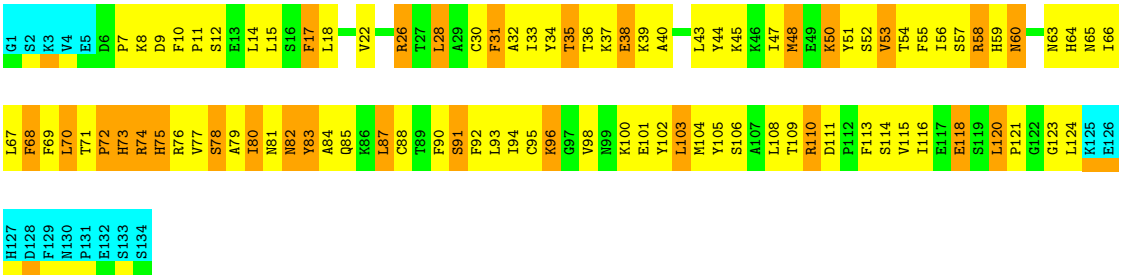




4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

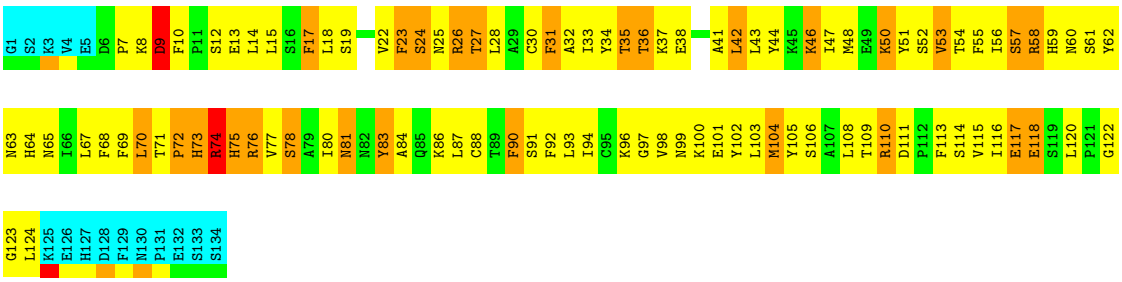
Chain A: 19% 49% 21% 11%



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

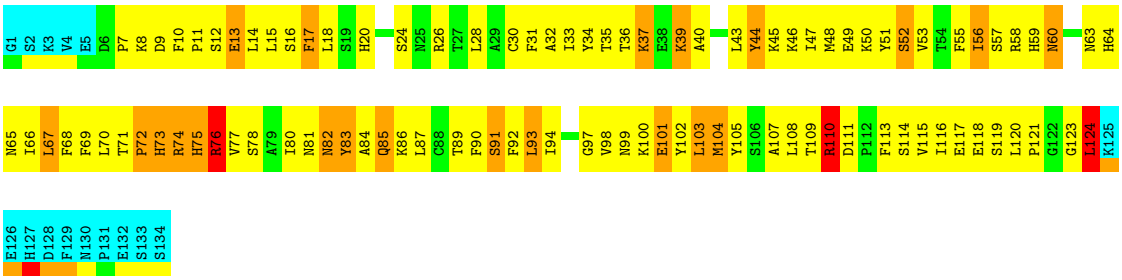
Chain A: 15% 52% 20% • 11%



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

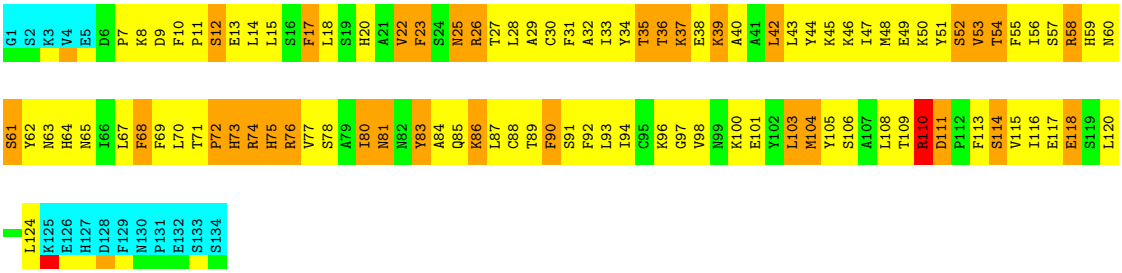
Chain A: 16% 55% 16% • 11%



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

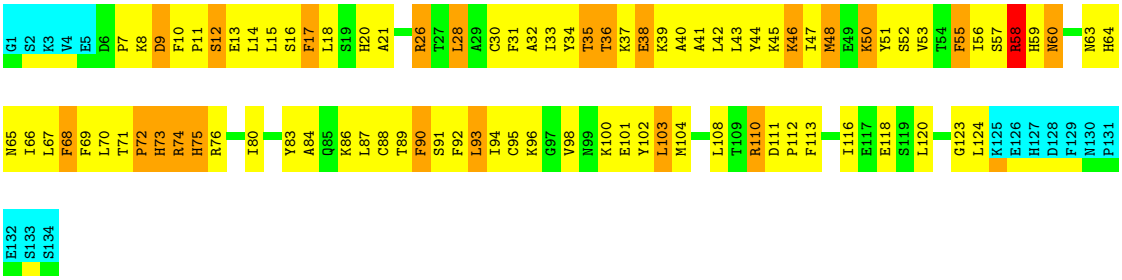
Chain A: 13% 51% 24% • 11%



4.2.25 Score per residue for model 25 (medoid)

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

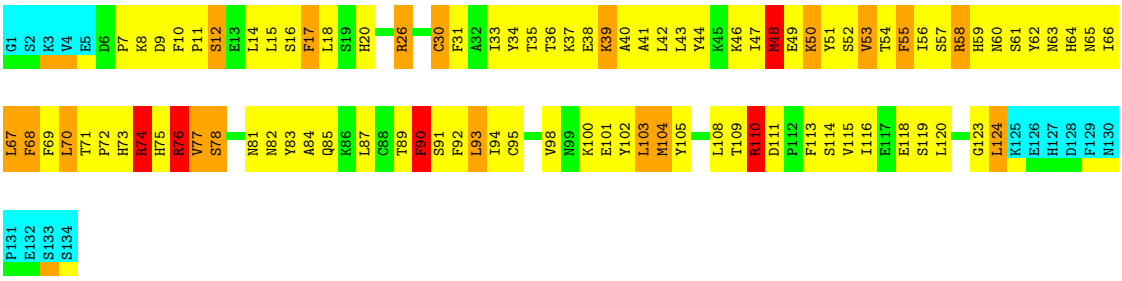
Chain A: 22% 49% 16% • 11%



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

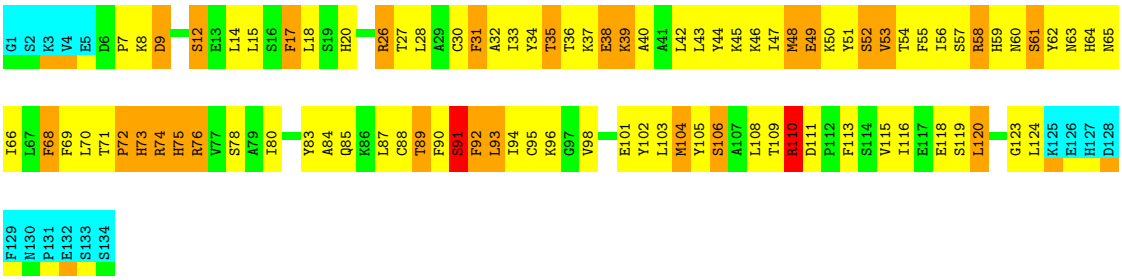
Chain A: 19% 52% 13% • 11%



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

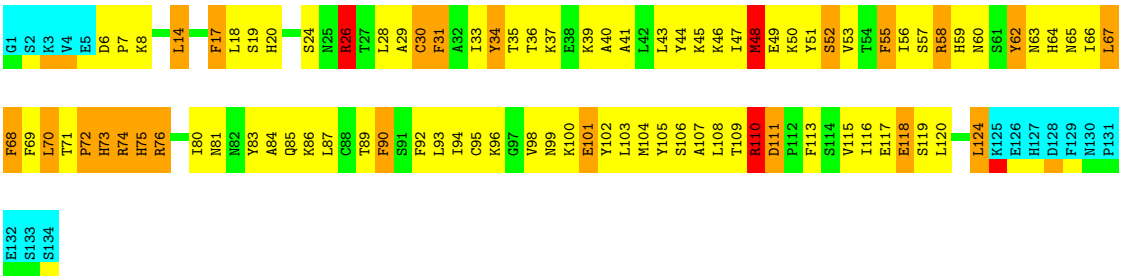
Chain A: 21% 47% 19% • 11%



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

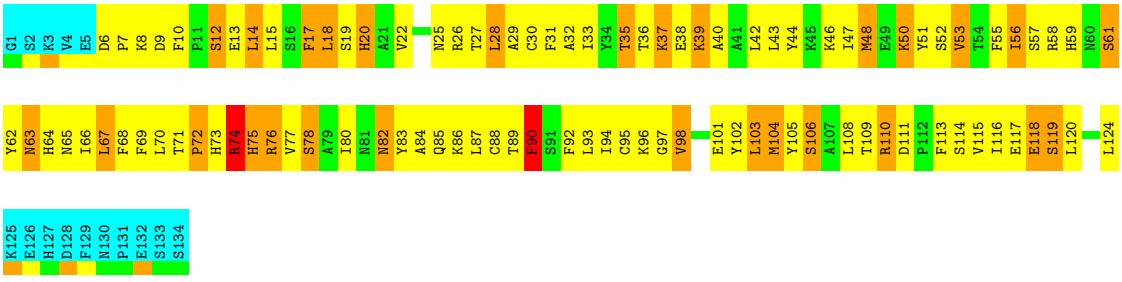
Chain A: 22% 49% 16% • 11%



4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

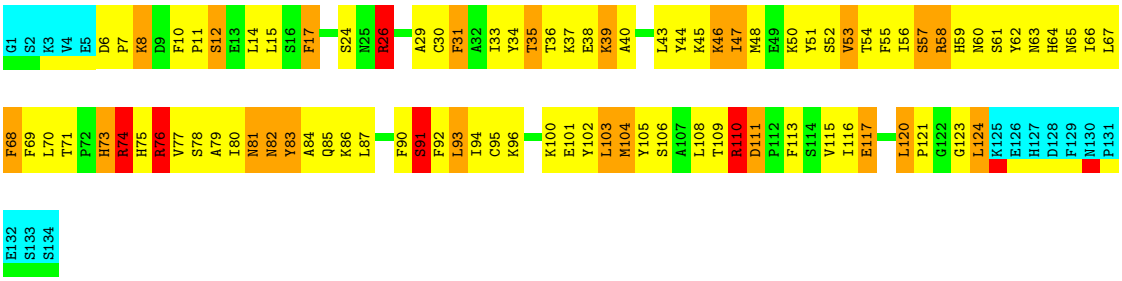
Chain A: 16% 51% 21% • 11%



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: SV40 T ANTIGEN

Chain A: 21% 47% 17% • 11%


G1 S2 K3 V4 E5 D6 P7 K8 D9 F10 P11 S12 E13 L14 L15 S16 F17 S24 N25 R26 A29 C30 F31 A32 I33 Y34 T35 T36 K37 E38 K39 A40 L43 Y44 K45 K46 I47 M48 E49 K50 Y51 S52 V53 T54 F55 I56 S57 R58 H59 N60 S61 Y62 N63 H64 N65 I66 L67
F68 F69 L70 T71 P72 H73 R74 H75 R76 V77 S78 A79 I80 N81 N82 Y83 A84 Q85 K86 L87 F90 S91 F92 L93 I94 C95 K96 K100 E101 Y102 L103 M104 Y105 S106 A107 L108 T109 R110 D111 P112 F113 S114 V115 I116 E117 L120 P121 G122 G123 L124 K125 E126 H127 D128 F129 N130 P131
E132 S133 S134

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 30 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *?*.

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.9±0.4
All	All	0	146

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	74	ARG	Sidechain	30
1	A	110	ARG	Sidechain	30
1	A	26	ARG	Sidechain	29
1	A	76	ARG	Sidechain	29
1	A	58	ARG	Sidechain	28

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	968	970	970	165±15
All	All	29040	29100	29100	4953

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 85.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:THR:HG22	1:A:92:PHE:CE2	1.07	1.85	19	8
1:A:83:TYR:CZ	1:A:87:LEU:HD11	1.06	1.84	29	7
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:HD11	1.05	1.87	5	7
1:A:68:PHE:CZ	1:A:108:LEU:HD12	1.05	1.86	6	7
1:A:14:LEU:HD13	1:A:113:PHE:CE2	1.04	1.86	26	10
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:HD12	1.02	1.88	30	11
1:A:43:LEU:CD2	1:A:87:LEU:HD22	1.02	1.85	1	11
1:A:43:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD22	1.02	1.30	5	10
1:A:17:PHE:CD2	1:A:103:LEU:HD12	1.01	1.90	4	16
1:A:43:LEU:HD11	1:A:87:LEU:HD13	1.00	1.33	3	8
1:A:17:PHE:CE2	1:A:103:LEU:HD12	0.99	1.92	8	18
1:A:43:LEU:CD2	1:A:87:LEU:HD13	0.97	1.88	22	16
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:HG23	0.96	1.95	10	12
1:A:44:TYR:HA	1:A:56:ILE:HD11	0.96	1.38	20	14
1:A:92:PHE:CE1	1:A:94:ILE:HD12	0.95	1.97	27	9
1:A:17:PHE:O	1:A:18:LEU:HD22	0.95	1.62	28	1
1:A:56:ILE:HD11	1:A:67:LEU:HD11	0.94	1.34	15	11
1:A:14:LEU:HD21	1:A:113:PHE:CZ	0.94	1.98	1	2
1:A:120:LEU:HD21	1:A:123:GLY:O	0.92	1.64	21	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:69:PHE:HB3	0.90	1.43	9	2
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:HD13	0.90	2.00	14	3
1:A:43:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD13	0.89	1.45	18	9
1:A:48:MET:CE	1:A:56:ILE:HG21	0.87	1.99	28	5
1:A:43:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD13	0.87	1.43	23	17
1:A:60:ASN:ND2	1:A:116:ILE:HD11	0.87	1.84	27	10
1:A:98:VAL:HG11	1:A:104:MET:CG	0.87	2.00	4	1
1:A:105:TYR:O	1:A:109:THR:HG23	0.87	1.68	22	20
1:A:11:PRO:HG2	1:A:14:LEU:HD23	0.86	1.46	23	1
1:A:12:SER:HA	1:A:15:LEU:HD12	0.86	1.46	4	24
1:A:31:PHE:CD2	1:A:77:VAL:HG22	0.85	2.05	22	8
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:OE1	0.85	1.70	16	3
1:A:53:VAL:HG11	1:A:69:PHE:HB2	0.85	1.49	6	10
1:A:14:LEU:HD21	1:A:108:LEU:HD21	0.85	1.48	22	3
1:A:65:ASN:OD1	1:A:116:ILE:HD11	0.85	1.71	5	5
1:A:55:PHE:CD2	1:A:120:LEU:HD23	0.85	2.07	6	1
1:A:93:LEU:C	1:A:94:ILE:HD12	0.85	1.92	13	4
1:A:105:TYR:CE1	1:A:109:THR:HG21	0.84	2.07	2	14
1:A:68:PHE:CE2	1:A:108:LEU:HD12	0.83	2.08	4	7
1:A:102:TYR:CD2	1:A:124:LEU:HD23	0.83	2.09	2	3
1:A:32:ALA:HB2	1:A:98:VAL:HG21	0.83	1.50	4	13
1:A:55:PHE:CG	1:A:120:LEU:HD12	0.83	2.09	30	13
1:A:102:TYR:N	1:A:124:LEU:HD12	0.83	1.88	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:TYR:CE1	1:A:87:LEU:HD11	0.83	2.08	9	20
1:A:75:HIS:CD2	1:A:80:ILE:HD11	0.83	2.09	23	14
1:A:60:ASN:CG	1:A:116:ILE:HD11	0.82	1.94	27	7
1:A:31:PHE:CE2	1:A:77:VAL:HG22	0.81	2.09	24	8
1:A:59:HIS:CE1	1:A:115:VAL:HG13	0.81	2.11	4	12
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:HD12	0.81	2.10	26	2
1:A:120:LEU:HD13	1:A:123:GLY:O	0.80	1.75	11	10
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:HD21	0.80	2.12	11	7
1:A:47:ILE:HG22	1:A:53:VAL:CG1	0.80	2.07	1	27
1:A:32:ALA:HB2	1:A:98:VAL:HG22	0.80	1.53	5	2
1:A:53:VAL:HG12	1:A:70:LEU:O	0.80	1.75	6	6
1:A:66:ILE:HG21	1:A:108:LEU:HD11	0.79	1.52	30	6
1:A:102:TYR:HA	1:A:124:LEU:HD22	0.79	1.52	2	3
1:A:92:PHE:CE2	1:A:94:ILE:HD12	0.79	2.13	9	9
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:CB	0.78	2.08	12	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:69:PHE:CB	0.78	2.07	23	3
1:A:102:TYR:CA	1:A:124:LEU:HD12	0.78	2.07	21	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	0.78	1.55	20	20
1:A:42:LEU:HD11	1:A:87:LEU:HD22	0.78	1.54	22	5
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:CD	0.78	1.99	24	4
1:A:60:ASN:OD1	1:A:116:ILE:HD11	0.77	1.79	30	2
1:A:124:LEU:N	1:A:124:LEU:HD12	0.77	1.93	12	2
1:A:36:THR:HG23	1:A:92:PHE:CE1	0.77	2.14	5	12
1:A:33:ILE:HG22	1:A:35:THR:HG23	0.77	1.56	23	16
1:A:40:ALA:HB1	1:A:67:LEU:HB2	0.77	1.56	4	12
1:A:43:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD22	0.77	1.56	1	3
1:A:29:ALA:HB1	1:A:71:THR:O	0.77	1.80	13	8
1:A:47:ILE:HG22	1:A:53:VAL:HG13	0.76	1.55	12	17
1:A:32:ALA:HB2	1:A:98:VAL:CG2	0.76	2.10	22	11
1:A:47:ILE:HG22	1:A:53:VAL:HG12	0.76	1.57	19	6
1:A:94:ILE:O	1:A:94:ILE:HG22	0.76	1.79	29	17
1:A:51:TYR:HB3	1:A:71:THR:HG22	0.76	1.57	2	16
1:A:43:LEU:CD1	1:A:87:LEU:HD13	0.76	2.10	28	5
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HD22	0.75	2.17	18	1
1:A:32:ALA:HB2	1:A:68:PHE:CE1	0.75	2.17	8	8
1:A:73:HIS:CE1	1:A:75:HIS:CE1	0.75	2.75	16	27
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:HD23	0.75	2.16	21	1
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:HD22	0.75	1.95	6	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:PHE:N	0.75	1.96	18	2
1:A:90:PHE:CD1	1:A:90:PHE:N	0.74	2.54	18	18
1:A:47:ILE:HG21	1:A:69:PHE:CD2	0.74	2.17	19	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:VAL:HG11	1:A:104:MET:HG3	0.74	1.58	4	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HD11	0.74	2.17	28	3
1:A:33:ILE:HD12	1:A:69:PHE:CE1	0.74	2.16	12	3
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:HB2	0.74	1.59	12	3
1:A:102:TYR:HA	1:A:124:LEU:HD12	0.74	1.60	21	3
1:A:55:PHE:CB	1:A:124:LEU:HD21	0.74	2.13	30	4
1:A:59:HIS:HD1	1:A:115:VAL:HG22	0.73	1.43	19	9
1:A:36:THR:CG2	1:A:92:PHE:CE2	0.73	2.71	10	12
1:A:84:ALA:HB1	1:A:93:LEU:HD11	0.73	1.58	17	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:92:PHE:CE2	0.73	2.19	20	7
1:A:14:LEU:CD2	1:A:108:LEU:HD21	0.73	2.14	22	3
1:A:70:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HD21	0.73	1.59	17	2
1:A:13:GLU:C	1:A:14:LEU:HD22	0.73	2.04	23	1
1:A:33:ILE:HD12	1:A:67:LEU:HD23	0.73	1.59	24	6
1:A:32:ALA:CB	1:A:98:VAL:HG21	0.73	2.14	23	3
1:A:59:HIS:ND1	1:A:115:VAL:HG22	0.72	1.99	19	11
1:A:44:TYR:CA	1:A:56:ILE:HD11	0.72	2.14	22	9
1:A:105:TYR:CE2	1:A:109:THR:HG21	0.72	2.18	1	5
1:A:55:PHE:CG	1:A:120:LEU:HD23	0.72	2.19	21	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:70:LEU:HD23	0.72	2.25	10	2
1:A:22:VAL:HG12	1:A:23:PHE:CD1	0.72	2.20	17	1
1:A:48:MET:HE1	1:A:56:ILE:HG21	0.72	1.60	14	2
1:A:47:ILE:HG21	1:A:69:PHE:CD1	0.72	2.19	29	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:113:PHE:CZ	0.72	2.20	18	3
1:A:64:HIS:CE1	1:A:92:PHE:CE1	0.72	2.78	9	13
1:A:36:THR:HG22	1:A:92:PHE:CZ	0.72	2.19	14	2
1:A:14:LEU:HD21	1:A:108:LEU:CD2	0.71	2.15	16	4
1:A:123:GLY:C	1:A:124:LEU:HD23	0.71	2.06	21	1
1:A:48:MET:HE3	1:A:56:ILE:HG21	0.71	1.62	28	2
1:A:14:LEU:HD12	1:A:104:MET:SD	0.71	2.24	23	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:113:PHE:CE2	0.70	2.21	1	1
1:A:102:TYR:HD2	1:A:124:LEU:HD23	0.70	1.46	2	3
1:A:64:HIS:CD2	1:A:92:PHE:CE1	0.70	2.80	15	1
1:A:92:PHE:HE2	1:A:94:ILE:HD12	0.70	1.45	9	9
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:PHE:H	0.70	1.43	18	1
1:A:22:VAL:HG12	1:A:23:PHE:HD1	0.70	1.47	17	1
1:A:31:PHE:HA	1:A:98:VAL:HG23	0.70	1.64	15	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:108:LEU:HD21	0.70	2.16	17	2
1:A:65:ASN:ND2	1:A:116:ILE:HD11	0.70	2.01	29	2
1:A:64:HIS:CE1	1:A:92:PHE:CE2	0.70	2.80	21	8
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:HG2	0.70	1.61	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:HIS:CD2	1:A:92:PHE:CZ	0.70	2.80	7	2
1:A:43:LEU:HB3	1:A:67:LEU:HD22	0.69	1.64	14	8
1:A:53:VAL:HG21	1:A:56:ILE:CG2	0.69	2.17	9	6
1:A:35:THR:HG21	1:A:93:LEU:CD2	0.69	2.18	9	1
1:A:73:HIS:CG	1:A:75:HIS:NE2	0.69	2.60	12	2
1:A:44:TYR:CE1	1:A:48:MET:CE	0.69	2.75	23	3
1:A:73:HIS:CE1	1:A:75:HIS:CD2	0.69	2.80	30	1
1:A:33:ILE:HG22	1:A:35:THR:CG2	0.69	2.17	30	12
1:A:51:TYR:CZ	1:A:80:ILE:HD13	0.69	2.23	29	15
1:A:44:TYR:CE2	1:A:56:ILE:CG1	0.69	2.76	3	2
1:A:9:ASP:HA	1:A:94:ILE:HG21	0.69	1.65	23	6
1:A:14:LEU:HD11	1:A:113:PHE:CE1	0.69	2.23	27	3
1:A:56:ILE:CD1	1:A:67:LEU:HD21	0.69	2.17	3	2
1:A:73:HIS:CE1	1:A:75:HIS:NE2	0.69	2.61	26	3
1:A:55:PHE:CG	1:A:120:LEU:HD22	0.68	2.23	27	1
1:A:71:THR:CB	1:A:75:HIS:NE2	0.68	2.56	29	27
1:A:64:HIS:CD2	1:A:92:PHE:CE2	0.68	2.81	7	3
1:A:55:PHE:CD2	1:A:120:LEU:CD2	0.68	2.77	6	1
1:A:83:TYR:O	1:A:87:LEU:HD12	0.68	1.89	1	7
1:A:39:LYS:HD3	1:A:93:LEU:HD12	0.68	1.64	21	2
1:A:53:VAL:HG21	1:A:56:ILE:HB	0.68	1.64	30	4
1:A:98:VAL:HG12	1:A:100:LYS:H	0.67	1.49	26	2
1:A:14:LEU:HD11	1:A:108:LEU:HD21	0.67	1.67	11	5
1:A:73:HIS:ND1	1:A:75:HIS:CE1	0.67	2.63	12	22
1:A:44:TYR:CE1	1:A:56:ILE:HG23	0.67	2.25	5	5
1:A:44:TYR:CE2	1:A:48:MET:CE	0.66	2.78	7	7
1:A:108:LEU:HD23	1:A:113:PHE:CD2	0.66	2.24	4	4
1:A:55:PHE:CG	1:A:124:LEU:HD21	0.66	2.25	6	2
1:A:43:LEU:HD11	1:A:87:LEU:CD1	0.66	2.20	21	7
1:A:31:PHE:CB	1:A:69:PHE:CZ	0.66	2.78	22	6
1:A:38:GLU:O	1:A:42:LEU:HD12	0.66	1.90	14	5
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:HD13	0.66	1.89	10	13
1:A:17:PHE:HE2	1:A:103:LEU:HD12	0.66	1.42	19	12
1:A:61:SER:CB	1:A:113:PHE:CE1	0.66	2.79	4	2
1:A:33:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HD12	0.66	1.65	6	4
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:CD1	0.66	2.79	11	7
1:A:75:HIS:O	1:A:76:ARG:CB	0.66	2.43	10	1
1:A:61:SER:HB3	1:A:66:ILE:HD11	0.66	1.67	13	1
1:A:47:ILE:CG1	1:A:83:TYR:CZ	0.66	2.79	27	5
1:A:70:LEU:O	1:A:71:THR:HG23	0.66	1.89	25	16
1:A:59:HIS:CE1	1:A:105:TYR:CE2	0.66	2.84	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:PHE:CB	1:A:69:PHE:CE1	0.66	2.79	17	6
1:A:39:LYS:CG	1:A:90:PHE:CZ	0.66	2.79	9	4
1:A:55:PHE:CG	1:A:124:LEU:HD13	0.66	2.26	14	2
1:A:7:PRO:O	1:A:94:ILE:HD11	0.66	1.91	11	12
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:HD12	0.66	2.06	15	12
1:A:48:MET:CE	1:A:56:ILE:HD13	0.65	2.21	14	2
1:A:70:LEU:CD1	1:A:124:LEU:HD21	0.65	2.21	17	2
1:A:46:LYS:CG	1:A:83:TYR:CZ	0.65	2.79	22	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:14:LEU:N	0.65	2.06	1	2
1:A:55:PHE:HB2	1:A:120:LEU:HD12	0.65	1.67	17	3
1:A:26:ARG:O	1:A:28:LEU:HD23	0.65	1.91	25	1
1:A:73:HIS:ND1	1:A:75:HIS:CD2	0.65	2.65	30	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:77:VAL:HA	0.65	2.27	20	8
1:A:43:LEU:HB2	1:A:67:LEU:HD22	0.65	1.66	8	3
1:A:73:HIS:O	1:A:73:HIS:CG	0.65	2.49	5	9
1:A:20:HIS:O	1:A:21:ALA:HB3	0.65	1.92	11	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:34:TYR:CB	0.65	2.80	23	11
1:A:18:LEU:CB	1:A:20:HIS:CE1	0.65	2.80	13	7
1:A:46:LYS:HD3	1:A:87:LEU:HD21	0.65	1.68	12	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:CD1	0.65	2.80	19	2
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:N	0.65	2.65	19	27
1:A:34:TYR:C	1:A:35:THR:HG22	0.64	2.12	22	9
1:A:73:HIS:CE1	1:A:75:HIS:ND1	0.64	2.65	10	24
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:CD1	0.64	2.80	18	13
1:A:34:TYR:CD2	1:A:94:ILE:HD13	0.64	2.27	30	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:104:MET:CE	0.64	2.23	27	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:69:PHE:CE1	0.64	2.80	14	12
1:A:46:LYS:CE	1:A:83:TYR:CE1	0.64	2.81	22	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:98:VAL:HG22	0.64	2.22	24	3
1:A:11:PRO:CB	1:A:62:TYR:CE2	0.64	2.81	5	1
1:A:35:THR:HB	1:A:93:LEU:HD22	0.64	1.68	9	1
1:A:44:TYR:CD2	1:A:48:MET:CE	0.64	2.81	14	5
1:A:55:PHE:CZ	1:A:57:SER:CB	0.64	2.80	22	3
1:A:17:PHE:CD1	1:A:17:PHE:N	0.64	2.66	13	27
1:A:105:TYR:CE1	1:A:109:THR:CG2	0.64	2.80	23	10
1:A:31:PHE:N	1:A:31:PHE:CD1	0.64	2.66	4	2
1:A:105:TYR:CB	1:A:124:LEU:HD22	0.64	2.23	7	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:64:HIS:CD2	0.64	2.26	13	10
1:A:92:PHE:HE1	1:A:94:ILE:HD12	0.64	1.51	8	5
1:A:105:TYR:CZ	1:A:109:THR:HG21	0.64	2.28	29	7
1:A:39:LYS:CE	1:A:90:PHE:CZ	0.64	2.81	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:PHE:CB	1:A:120:LEU:HD22	0.64	2.22	27	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:62:TYR:N	0.63	2.62	5	8
1:A:93:LEU:O	1:A:94:ILE:HD12	0.63	1.92	13	1
1:A:120:LEU:HD12	1:A:120:LEU:C	0.63	2.13	21	1
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:CG2	0.63	2.80	1	3
1:A:57:SER:O	1:A:67:LEU:HD12	0.63	1.94	6	1
1:A:105:TYR:CE2	1:A:123:GLY:CA	0.63	2.80	22	1
1:A:44:TYR:CD2	1:A:48:MET:HE3	0.63	2.28	25	2
1:A:12:SER:CA	1:A:15:LEU:HD12	0.63	2.21	29	12
1:A:14:LEU:CD2	1:A:113:PHE:CZ	0.63	2.82	23	2
1:A:108:LEU:CD2	1:A:113:PHE:CD2	0.63	2.82	9	1
1:A:60:ASN:HD22	1:A:116:ILE:HD11	0.63	1.51	19	1
1:A:51:TYR:CB	1:A:71:THR:HG22	0.63	2.24	19	7
1:A:64:HIS:ND1	1:A:92:PHE:CZ	0.63	2.67	1	16
1:A:73:HIS:ND1	1:A:75:HIS:NE2	0.63	2.46	12	3
1:A:39:LYS:NZ	1:A:90:PHE:CE2	0.63	2.67	17	1
1:A:40:ALA:HB3	1:A:58:ARG:HD3	0.63	1.70	23	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:N	0.63	2.08	18	4
1:A:14:LEU:HD13	1:A:108:LEU:HD21	0.63	1.70	17	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:101:GLU:OE1	0.63	1.94	17	1
1:A:17:PHE:O	1:A:98:VAL:HG13	0.63	1.94	28	1
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:HG23	0.62	1.93	18	9
1:A:83:TYR:CE2	1:A:87:LEU:HD11	0.62	2.29	29	7
1:A:43:LEU:CB	1:A:67:LEU:HD22	0.62	2.24	28	7
1:A:33:ILE:HG22	1:A:33:ILE:O	0.62	1.95	26	4
1:A:70:LEU:HD11	1:A:124:LEU:CD2	0.62	2.24	17	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:90:PHE:N	0.62	2.10	9	1
1:A:23:PHE:CD1	1:A:23:PHE:N	0.62	2.67	22	1
1:A:73:HIS:O	1:A:73:HIS:CD2	0.62	2.52	10	1
1:A:35:THR:HG21	1:A:93:LEU:HD21	0.62	1.72	9	1
1:A:48:MET:HE2	1:A:56:ILE:HG21	0.62	1.70	25	1
1:A:10:PHE:CD2	1:A:18:LEU:HD13	0.62	2.30	19	1
1:A:73:HIS:O	1:A:75:HIS:CE1	0.62	2.53	3	23
1:A:53:VAL:HG21	1:A:56:ILE:HG21	0.62	1.72	23	3
1:A:21:ALA:HB1	1:A:24:SER:HB3	0.62	1.71	18	2
1:A:44:TYR:CG	1:A:48:MET:HE3	0.62	2.30	25	2
1:A:46:LYS:CG	1:A:83:TYR:OH	0.62	2.48	22	5
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:N	0.62	2.09	1	2
1:A:64:HIS:ND1	1:A:92:PHE:CE1	0.62	2.68	18	8
1:A:68:PHE:CD2	1:A:101:GLU:OE2	0.62	2.52	17	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:97:GLY:O	0.61	1.94	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ILE:HG22	1:A:53:VAL:HG11	0.61	1.72	26	1
1:A:87:LEU:O	1:A:90:PHE:CZ	0.61	2.53	28	12
1:A:28:LEU:O	1:A:31:PHE:CZ	0.61	2.53	9	6
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:O	0.61	2.54	8	11
1:A:43:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD22	0.61	1.69	12	4
1:A:14:LEU:CD1	1:A:113:PHE:CZ	0.61	2.83	27	4
1:A:31:PHE:CB	1:A:69:PHE:CE2	0.61	2.83	22	2
1:A:65:ASN:C	1:A:66:ILE:HD12	0.61	2.15	1	1
1:A:10:PHE:CD2	1:A:18:LEU:HD11	0.61	2.30	18	6
1:A:18:LEU:HD21	1:A:104:MET:CE	0.61	2.25	7	1
1:A:32:ALA:CB	1:A:98:VAL:HG22	0.61	2.23	5	2
1:A:58:ARG:CG	1:A:67:LEU:HD12	0.61	2.25	28	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:104:MET:HE1	0.61	1.72	27	1
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:CG	0.61	2.84	28	1
1:A:31:PHE:HB2	1:A:69:PHE:CE1	0.61	2.30	5	26
1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CD1	0.61	2.66	5	2
1:A:92:PHE:CE1	1:A:94:ILE:HD13	0.61	2.29	21	2
1:A:71:THR:HG21	1:A:75:HIS:NE2	0.61	2.11	29	8
1:A:14:LEU:HD22	1:A:104:MET:CE	0.61	2.25	8	1
1:A:55:PHE:HB3	1:A:70:LEU:HD12	0.61	1.72	24	5
1:A:31:PHE:HB2	1:A:69:PHE:CE2	0.61	2.31	29	2
1:A:50:LYS:CE	1:A:83:TYR:CE2	0.61	2.83	14	9
1:A:92:PHE:CE1	1:A:94:ILE:CD1	0.61	2.80	27	5
1:A:47:ILE:HG12	1:A:83:TYR:CE2	0.61	2.31	1	5
1:A:32:ALA:HB2	1:A:68:PHE:HE1	0.60	1.55	1	7
1:A:44:TYR:CE2	1:A:56:ILE:HG12	0.60	2.31	3	15
1:A:14:LEU:CD1	1:A:113:PHE:CE2	0.60	2.81	3	7
1:A:55:PHE:CD2	1:A:120:LEU:CG	0.60	2.83	6	1
1:A:85:GLN:HA	1:A:93:LEU:HD22	0.60	1.71	30	6
1:A:29:ALA:HB2	1:A:74:ARG:CG	0.60	2.26	9	2
1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CD2	0.60	2.68	12	1
1:A:105:TYR:CZ	1:A:109:THR:CG2	0.60	2.84	1	5
1:A:65:ASN:OD1	1:A:116:ILE:HD12	0.60	1.95	6	2
1:A:47:ILE:CG2	1:A:53:VAL:HG13	0.60	2.25	10	2
1:A:44:TYR:CE2	1:A:48:MET:HE1	0.60	2.31	26	5
1:A:36:THR:HG22	1:A:92:PHE:CD2	0.60	2.32	19	2
1:A:39:LYS:CD	1:A:90:PHE:CZ	0.60	2.85	14	1
1:A:31:PHE:HB2	1:A:69:PHE:CZ	0.60	2.32	6	22
1:A:92:PHE:CD1	1:A:94:ILE:HD12	0.60	2.31	26	2
1:A:92:PHE:CD1	1:A:94:ILE:CD1	0.60	2.85	26	3
1:A:55:PHE:HB2	1:A:120:LEU:HD22	0.60	1.74	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:HIS:O	1:A:75:HIS:ND1	0.60	2.34	24	9
1:A:71:THR:CB	1:A:75:HIS:HE2	0.60	2.09	10	1
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:CG	0.60	2.32	12	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:116:ILE:N	0.60	2.65	20	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:56:ILE:O	0.60	2.55	16	9
1:A:39:LYS:CG	1:A:90:PHE:CE1	0.60	2.85	18	3
1:A:55:PHE:CG	1:A:124:LEU:HD11	0.60	2.32	5	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:101:GLU:OE1	0.60	2.54	27	5
1:A:109:THR:HA	1:A:115:VAL:HG23	0.60	1.73	27	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:113:PHE:CE2	0.59	2.31	2	2
1:A:18:LEU:HD21	1:A:98:VAL:HG22	0.59	1.74	6	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:56:ILE:HG23	0.59	2.31	10	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:94:ILE:HG22	0.59	2.32	30	1
1:A:40:ALA:O	1:A:67:LEU:HD13	0.59	1.97	8	5
1:A:59:HIS:HB2	1:A:108:LEU:HD13	0.59	1.72	4	2
1:A:39:LYS:CD	1:A:90:PHE:CE1	0.59	2.85	26	3
1:A:89:THR:O	1:A:90:PHE:CG	0.59	2.54	9	1
1:A:44:TYR:CD2	1:A:56:ILE:CG1	0.59	2.85	3	2
1:A:32:ALA:CB	1:A:98:VAL:CG2	0.59	2.80	9	9
1:A:31:PHE:CZ	1:A:77:VAL:HG22	0.59	2.33	5	5
1:A:35:THR:CB	1:A:93:LEU:CD2	0.59	2.80	9	1
1:A:39:LYS:CE	1:A:90:PHE:CE2	0.59	2.86	17	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:113:PHE:CZ	0.59	2.32	3	5
1:A:7:PRO:CG	1:A:92:PHE:CZ	0.59	2.85	10	4
1:A:33:ILE:HG13	1:A:67:LEU:HD23	0.59	1.75	17	1
1:A:54:THR:O	1:A:55:PHE:CB	0.59	2.51	15	9
1:A:63:ASN:O	1:A:64:HIS:CD2	0.59	2.56	10	23
1:A:124:LEU:H	1:A:124:LEU:HD12	0.59	1.58	5	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:76:ARG:HD3	0.59	1.73	7	2
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:HG23	0.59	1.98	20	8
1:A:70:LEU:CD1	1:A:124:LEU:CD2	0.59	2.80	17	1
1:A:61:SER:OG	1:A:62:TYR:CD2	0.59	2.54	26	2
1:A:55:PHE:HB3	1:A:124:LEU:HD21	0.59	1.72	5	5
1:A:10:PHE:CZ	1:A:94:ILE:HG22	0.59	2.33	13	4
1:A:42:LEU:N	1:A:42:LEU:CD2	0.59	2.65	27	1
1:A:69:PHE:O	1:A:69:PHE:CG	0.59	2.56	6	13
1:A:92:PHE:CD1	1:A:92:PHE:C	0.59	2.76	28	14
1:A:46:LYS:HG3	1:A:83:TYR:CZ	0.59	2.32	22	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:90:PHE:CD1	0.58	2.33	4	2
1:A:59:HIS:CE1	1:A:109:THR:HG22	0.58	2.32	15	1
1:A:50:LYS:HE2	1:A:83:TYR:CZ	0.58	2.34	25	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:TYR:CD1	1:A:83:TYR:C	0.58	2.75	5	22
1:A:74:ARG:O	1:A:75:HIS:CG	0.58	2.56	26	3
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:CD2	0.58	2.33	22	1
1:A:53:VAL:O	1:A:54:THR:CB	0.58	2.49	24	4
1:A:17:PHE:HD2	1:A:103:LEU:HD13	0.58	1.59	6	7
1:A:65:ASN:ND2	1:A:116:ILE:CD1	0.58	2.66	12	5
1:A:92:PHE:HE1	1:A:94:ILE:HD13	0.58	1.57	21	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:56:ILE:HG13	0.58	2.33	3	3
1:A:44:TYR:CE1	1:A:48:MET:SD	0.58	2.97	9	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CZ	0.58	2.34	21	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:108:LEU:CD1	0.58	2.28	2	4
1:A:94:ILE:O	1:A:94:ILE:CG2	0.58	2.52	29	13
1:A:10:PHE:CE1	1:A:34:TYR:HB3	0.58	2.34	25	9
1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:O	0.58	2.56	22	2
1:A:11:PRO:HB3	1:A:62:TYR:CE2	0.58	2.33	5	2
1:A:89:THR:O	1:A:90:PHE:CD1	0.58	2.56	9	1
1:A:55:PHE:CZ	1:A:57:SER:HB2	0.58	2.34	22	19
1:A:48:MET:CE	1:A:56:ILE:CG2	0.58	2.80	28	4
1:A:44:TYR:CD2	1:A:48:MET:SD	0.58	2.97	14	2
1:A:70:LEU:HD13	1:A:124:LEU:HD21	0.57	1.75	1	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:124:LEU:HD11	0.57	1.75	3	1
1:A:40:ALA:HB3	1:A:58:ARG:HD2	0.57	1.76	17	3
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD2	0.57	2.67	6	4
1:A:36:THR:HG23	1:A:92:PHE:HE1	0.57	1.59	22	4
1:A:50:LYS:HD2	1:A:83:TYR:CE2	0.57	2.34	19	7
1:A:39:LYS:HD2	1:A:90:PHE:CZ	0.57	2.34	14	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:65:ASN:ND2	0.57	2.52	19	3
1:A:19:SER:O	1:A:20:HIS:CD2	0.57	2.58	1	2
1:A:120:LEU:HD23	1:A:121:PRO:HD2	0.57	1.73	30	5
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:HD2	0.57	1.60	22	1
1:A:30:CYS:C	1:A:31:PHE:CD1	0.57	2.78	10	26
1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:HIS:CE1	0.57	2.34	28	10
1:A:51:TYR:CE2	1:A:80:ILE:HD11	0.57	2.34	27	6
1:A:87:LEU:O	1:A:90:PHE:CE2	0.57	2.57	4	7
1:A:98:VAL:HG11	1:A:104:MET:HG2	0.57	1.74	4	1
1:A:47:ILE:HG12	1:A:83:TYR:CZ	0.57	2.35	27	5
1:A:18:LEU:HB2	1:A:20:HIS:CE1	0.57	2.35	13	8
1:A:35:THR:CG2	1:A:93:LEU:CD2	0.57	2.83	9	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:43:LEU:HD22	0.57	2.29	3	2
1:A:55:PHE:CZ	1:A:57:SER:HB3	0.57	2.34	29	4
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CD2	0.57	2.67	28	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CE2	1:A:101:GLU:OE1	0.57	2.57	20	3
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HB3	0.57	1.76	22	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:77:VAL:HG23	0.57	1.76	14	3
1:A:10:PHE:CE1	1:A:34:TYR:HB2	0.57	2.34	24	7
1:A:102:TYR:CD2	1:A:124:LEU:O	0.57	2.58	21	2
1:A:50:LYS:HE2	1:A:83:TYR:CE2	0.57	2.35	13	4
1:A:105:TYR:C	1:A:105:TYR:CD1	0.57	2.78	29	8
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD12	0.57	2.15	20	2
1:A:44:TYR:CE1	1:A:48:MET:HE2	0.57	2.34	23	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:70:LEU:HD11	0.57	2.40	18	1
1:A:50:LYS:HE3	1:A:83:TYR:CE2	0.57	2.35	14	8
1:A:87:LEU:O	1:A:90:PHE:CE1	0.57	2.57	27	3
1:A:61:SER:HB2	1:A:113:PHE:CE1	0.57	2.34	10	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:SD	0.57	2.98	28	2
1:A:51:TYR:CE2	1:A:80:ILE:CD1	0.56	2.88	2	15
1:A:44:TYR:O	1:A:56:ILE:CD1	0.56	2.53	22	4
1:A:68:PHE:HZ	1:A:108:LEU:HD12	0.56	1.52	23	2
1:A:16:SER:OG	1:A:17:PHE:CE2	0.56	2.57	8	1
1:A:105:TYR:CZ	1:A:123:GLY:CA	0.56	2.88	17	2
1:A:51:TYR:O	1:A:72:PRO:CD	0.56	2.53	24	25
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:CD1	0.56	2.54	26	14
1:A:105:TYR:CE2	1:A:109:THR:CG2	0.56	2.87	1	1
1:A:10:PHE:HE1	1:A:94:ILE:HG22	0.56	1.61	10	2
1:A:102:TYR:CE2	1:A:124:LEU:O	0.56	2.58	21	2
1:A:108:LEU:HD23	1:A:113:PHE:CG	0.56	2.35	22	3
1:A:68:PHE:HE1	1:A:98:VAL:HG21	0.56	1.60	8	1
1:A:33:ILE:HG12	1:A:69:PHE:CE1	0.56	2.35	28	4
1:A:50:LYS:CD	1:A:83:TYR:CE2	0.56	2.87	19	2
1:A:115:VAL:HG11	1:A:118:GLU:OE1	0.56	2.00	20	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:69:PHE:CE1	0.56	2.36	4	9
1:A:31:PHE:HB3	1:A:69:PHE:CE1	0.56	2.36	17	2
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HD13	0.56	2.36	18	2
1:A:60:ASN:ND2	1:A:116:ILE:CD1	0.56	2.67	7	7
1:A:55:PHE:CZ	1:A:57:SER:OG	0.56	2.57	8	2
1:A:31:PHE:CA	1:A:98:VAL:HG23	0.56	2.29	15	1
1:A:47:ILE:HG13	1:A:83:TYR:CZ	0.56	2.35	1	4
1:A:77:VAL:O	1:A:81:ASN:CB	0.56	2.54	26	13
1:A:92:PHE:CD2	1:A:94:ILE:HD12	0.56	2.35	5	2
1:A:58:ARG:HG2	1:A:67:LEU:HD12	0.56	1.75	24	3
1:A:101:GLU:C	1:A:124:LEU:HD12	0.56	2.20	21	1
1:A:71:THR:HB	1:A:75:HIS:NE2	0.56	2.15	17	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:HIS:NE2	0.56	2.37	6	24
1:A:55:PHE:CG	1:A:120:LEU:CD1	0.56	2.85	30	6
1:A:102:TYR:CA	1:A:124:LEU:HD22	0.56	2.30	4	3
1:A:56:ILE:HG23	1:A:56:ILE:O	0.56	2.01	4	3
1:A:39:LYS:HG3	1:A:90:PHE:CZ	0.56	2.36	20	3
1:A:51:TYR:CD2	1:A:73:HIS:CE1	0.56	2.94	12	1
1:A:52:SER:O	1:A:54:THR:N	0.56	2.39	19	4
1:A:39:LYS:HG3	1:A:90:PHE:CE1	0.56	2.36	18	2
1:A:50:LYS:HE3	1:A:83:TYR:CZ	0.56	2.36	13	11
1:A:18:LEU:CD2	1:A:98:VAL:HG22	0.56	2.30	26	4
1:A:10:PHE:CD1	1:A:34:TYR:HB2	0.56	2.36	19	4
1:A:105:TYR:HB2	1:A:124:LEU:HD22	0.56	1.78	7	1
1:A:101:GLU:OE1	1:A:101:GLU:CA	0.56	2.52	10	1
1:A:56:ILE:HD11	1:A:67:LEU:HD21	0.56	1.78	23	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:57:SER:OG	0.56	2.57	29	1
1:A:13:GLU:O	1:A:14:LEU:HD12	0.56	2.00	4	1
1:A:39:LYS:HG2	1:A:90:PHE:CE1	0.56	2.36	9	1
1:A:124:LEU:N	1:A:124:LEU:CD1	0.56	2.65	12	2
1:A:55:PHE:HE2	1:A:124:LEU:HD22	0.56	1.58	18	1
1:A:61:SER:O	1:A:62:TYR:CD1	0.56	2.59	24	1
1:A:59:HIS:CE1	1:A:105:TYR:CE1	0.56	2.94	1	1
1:A:92:PHE:CD1	1:A:93:LEU:N	0.56	2.74	27	5
1:A:55:PHE:HD2	1:A:124:LEU:HD21	0.56	1.61	28	1
1:A:44:TYR:CD2	1:A:56:ILE:HG12	0.55	2.35	3	11
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:HG12	0.55	2.36	19	3
1:A:7:PRO:HG2	1:A:92:PHE:CZ	0.55	2.36	10	7
1:A:29:ALA:HB1	1:A:71:THR:OG1	0.55	2.00	4	3
1:A:83:TYR:CE1	1:A:87:LEU:CD1	0.55	2.87	9	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:92:PHE:CE1	0.55	2.36	15	1
1:A:22:VAL:CG2	1:A:96:LYS:CE	0.55	2.84	21	1
1:A:19:SER:O	1:A:20:HIS:CB	0.55	2.53	18	5
1:A:101:GLU:O	1:A:102:TYR:C	0.55	2.45	18	25
1:A:37:LYS:CG	1:A:38:GLU:N	0.55	2.69	15	19
1:A:69:PHE:CD1	1:A:69:PHE:O	0.55	2.59	29	1
1:A:70:LEU:O	1:A:71:THR:CG2	0.55	2.55	6	18
1:A:39:LYS:CD	1:A:93:LEU:HD12	0.55	2.31	2	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.55	2.80	13	9
1:A:75:HIS:CD2	1:A:80:ILE:CD1	0.55	2.89	3	7
1:A:33:ILE:HD12	1:A:69:PHE:CD1	0.55	2.36	14	8
1:A:44:TYR:CE1	1:A:56:ILE:CG2	0.55	2.88	5	4
1:A:55:PHE:CE2	1:A:120:LEU:HD23	0.55	2.36	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:C	1:A:75:HIS:CG	0.55	2.79	12	3
1:A:84:ALA:HB3	1:A:95:CYS:SG	0.55	2.41	30	2
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:CB	0.55	2.55	30	17
1:A:61:SER:HB3	1:A:113:PHE:CE1	0.55	2.35	4	1
1:A:29:ALA:HB2	1:A:74:ARG:HG3	0.55	1.77	29	2
1:A:115:VAL:HG12	1:A:118:GLU:OE2	0.55	2.01	13	1
1:A:120:LEU:HD12	1:A:121:PRO:N	0.55	2.17	21	1
1:A:48:MET:HE1	1:A:56:ILE:HD13	0.55	1.76	28	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:CB	0.55	2.54	3	13
1:A:84:ALA:CA	1:A:87:LEU:HD12	0.55	2.31	15	6
1:A:18:LEU:HD11	1:A:98:VAL:HG22	0.55	1.79	4	2
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:CG	0.55	2.32	24	2
1:A:46:LYS:CB	1:A:83:TYR:OH	0.55	2.55	23	7
1:A:44:TYR:CE1	1:A:56:ILE:HG12	0.55	2.36	6	13
1:A:68:PHE:CE2	1:A:101:GLU:CD	0.55	2.80	19	6
1:A:89:THR:C	1:A:90:PHE:CD1	0.55	2.80	25	4
1:A:39:LYS:CD	1:A:92:PHE:O	0.55	2.55	12	2
1:A:33:ILE:HG13	1:A:69:PHE:CE1	0.55	2.37	25	2
1:A:55:PHE:HA	1:A:120:LEU:HD13	0.55	1.77	27	1
1:A:35:THR:CB	1:A:93:LEU:HD22	0.55	2.32	9	1
1:A:61:SER:C	1:A:62:TYR:CD1	0.55	2.80	1	7
1:A:39:LYS:CE	1:A:87:LEU:O	0.55	2.55	28	6
1:A:60:ASN:HD21	1:A:116:ILE:HD11	0.55	1.61	27	1
1:A:11:PRO:CG	1:A:14:LEU:HD12	0.55	2.32	30	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:87:LEU:CD1	0.55	2.32	7	7
1:A:108:LEU:CD2	1:A:113:PHE:CD1	0.55	2.90	23	2
1:A:7:PRO:HG2	1:A:92:PHE:CE1	0.54	2.38	16	4
1:A:44:TYR:CZ	1:A:48:MET:HE2	0.54	2.37	5	1
1:A:7:PRO:HG3	1:A:92:PHE:CD2	0.54	2.37	7	1
1:A:102:TYR:HA	1:A:124:LEU:HD23	0.54	1.80	7	2
1:A:33:ILE:HD13	1:A:95:CYS:SG	0.54	2.42	17	2
1:A:10:PHE:CZ	1:A:34:TYR:HB2	0.54	2.38	25	14
1:A:102:TYR:CD2	1:A:124:LEU:CD2	0.54	2.89	2	1
1:A:87:LEU:C	1:A:90:PHE:CZ	0.54	2.80	22	9
1:A:120:LEU:CD1	1:A:123:GLY:O	0.54	2.54	18	3
1:A:123:GLY:C	1:A:124:LEU:HD12	0.54	2.23	12	1
1:A:120:LEU:HD13	1:A:123:GLY:C	0.54	2.22	25	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:87:LEU:CD2	0.54	2.81	14	4
1:A:89:THR:O	1:A:90:PHE:C	0.54	2.46	18	5
1:A:55:PHE:C	1:A:55:PHE:CD1	0.54	2.81	6	1
1:A:102:TYR:C	1:A:102:TYR:CD1	0.54	2.81	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:TYR:CZ	1:A:123:GLY:HA3	0.54	2.37	17	2
1:A:90:PHE:O	1:A:91:SER:CB	0.54	2.56	13	8
1:A:22:VAL:O	1:A:78:SER:CB	0.54	2.56	17	4
1:A:68:PHE:CZ	1:A:104:MET:HG2	0.54	2.37	17	3
1:A:8:LYS:C	1:A:94:ILE:HD11	0.54	2.23	30	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:94:ILE:CG2	0.54	2.91	30	1
1:A:39:LYS:CE	1:A:92:PHE:O	0.54	2.56	1	6
1:A:56:ILE:HA	1:A:68:PHE:O	0.54	2.03	9	22
1:A:108:LEU:O	1:A:113:PHE:CB	0.54	2.55	23	15
1:A:31:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HB	0.54	2.38	22	6
1:A:39:LYS:NZ	1:A:87:LEU:O	0.54	2.41	16	3
1:A:55:PHE:HD2	1:A:124:LEU:HD11	0.54	1.61	30	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:124:LEU:HB3	0.54	2.38	23	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:108:LEU:CD1	0.54	2.84	9	5
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD13	0.54	2.23	9	1
1:A:14:LEU:HG	1:A:113:PHE:CE2	0.54	2.38	14	2
1:A:83:TYR:O	1:A:86:LYS:CG	0.54	2.56	16	1
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:HD12	0.54	2.03	27	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:HB3	0.54	2.38	4	4
1:A:50:LYS:HG2	1:A:51:TYR:CE2	0.54	2.37	22	8
1:A:14:LEU:HG	1:A:113:PHE:CZ	0.54	2.38	17	7
1:A:64:HIS:NE2	1:A:92:PHE:CE2	0.54	2.76	7	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:101:GLU:CD	0.54	2.81	25	4
1:A:46:LYS:HE3	1:A:83:TYR:CE1	0.54	2.37	22	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:HB2	0.54	2.38	26	7
1:A:59:HIS:O	1:A:65:ASN:CB	0.54	2.56	2	4
1:A:7:PRO:CG	1:A:34:TYR:OH	0.54	2.56	25	10
1:A:65:ASN:OD1	1:A:116:ILE:CD1	0.54	2.56	16	7
1:A:90:PHE:CG	1:A:90:PHE:O	0.54	2.61	5	2
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:CD	0.54	2.56	6	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CE1	0.54	2.38	23	3
1:A:46:LYS:HG2	1:A:83:TYR:OH	0.54	2.03	22	3
1:A:47:ILE:CG2	1:A:51:TYR:HB2	0.54	2.31	12	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:93:LEU:HD12	0.54	1.80	13	1
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:CD2	0.54	2.56	24	1
1:A:37:LYS:CB	1:A:65:ASN:OD1	0.53	2.57	3	7
1:A:44:TYR:O	1:A:48:MET:CG	0.53	2.56	7	2
1:A:17:PHE:CE2	1:A:103:LEU:CD1	0.53	2.83	8	1
1:A:71:THR:CG2	1:A:75:HIS:NE2	0.53	2.71	29	6
1:A:36:THR:HG21	1:A:91:SER:OG	0.53	2.02	20	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:104:MET:HB3	0.53	2.38	19	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:CB	0.53	2.92	4	1
1:A:105:TYR:CD1	1:A:105:TYR:C	0.53	2.82	22	5
1:A:47:ILE:CD1	1:A:83:TYR:CE2	0.53	2.92	4	3
1:A:30:CYS:SG	1:A:70:LEU:CD1	0.53	2.97	18	1
1:A:41:ALA:HB2	1:A:58:ARG:NH2	0.53	2.18	20	1
1:A:72:PRO:O	1:A:74:ARG:N	0.53	2.42	24	3
1:A:83:TYR:O	1:A:87:LEU:CD1	0.53	2.56	1	6
1:A:60:ASN:OD1	1:A:116:ILE:CG1	0.53	2.55	18	9
1:A:61:SER:OG	1:A:66:ILE:CD1	0.53	2.56	30	4
1:A:51:TYR:CE1	1:A:80:ILE:CD1	0.53	2.91	5	7
1:A:7:PRO:HG3	1:A:92:PHE:CZ	0.53	2.38	14	1
1:A:39:LYS:HD3	1:A:90:PHE:CE2	0.53	2.38	15	2
1:A:68:PHE:HE2	1:A:124:LEU:HD11	0.53	1.63	21	1
1:A:73:HIS:O	1:A:73:HIS:ND1	0.53	2.42	23	9
1:A:82:ASN:O	1:A:86:LYS:CG	0.53	2.57	13	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:70:LEU:CD2	0.53	2.97	30	5
1:A:50:LYS:CE	1:A:83:TYR:CZ	0.53	2.91	14	11
1:A:102:TYR:CB	1:A:124:LEU:CD2	0.53	2.86	2	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:92:PHE:O	0.53	2.41	18	6
1:A:84:ALA:CB	1:A:95:CYS:SG	0.53	2.97	6	5
1:A:39:LYS:HZ1	1:A:88:CYS:HA	0.53	1.62	17	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:CG	0.53	2.91	2	6
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LYS:CG	0.53	2.57	26	6
1:A:71:THR:HB	1:A:75:HIS:CE1	0.53	2.39	9	4
1:A:68:PHE:CE2	1:A:105:TYR:HA	0.53	2.39	9	5
1:A:44:TYR:CZ	1:A:48:MET:CE	0.53	2.92	7	1
1:A:11:PRO:HG2	1:A:14:LEU:HD12	0.53	1.81	30	3
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:HG3	0.53	2.39	14	1
1:A:71:THR:HB	1:A:73:HIS:CE1	0.53	2.39	30	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:CG	0.53	2.97	22	8
1:A:65:ASN:N	1:A:65:ASN:OD1	0.53	2.41	14	4
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:HG3	0.53	1.79	8	1
1:A:57:SER:HB3	1:A:59:HIS:HE2	0.53	1.63	11	1
1:A:69:PHE:O	1:A:69:PHE:CD1	0.53	2.61	22	1
1:A:61:SER:OG	1:A:66:ILE:HD12	0.53	2.04	29	1
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:OD1	0.53	2.42	5	4
1:A:7:PRO:CB	1:A:34:TYR:OH	0.53	2.57	17	3
1:A:54:THR:O	1:A:55:PHE:HB2	0.53	2.04	19	3
1:A:55:PHE:HD1	1:A:120:LEU:HD12	0.53	1.63	14	1
1:A:46:LYS:CG	1:A:47:ILE:N	0.53	2.71	22	1
1:A:17:PHE:C	1:A:18:LEU:HD22	0.53	2.24	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HD11	1:A:101:GLU:HG3	0.53	1.81	28	1
1:A:19:SER:C	1:A:20:HIS:CG	0.52	2.82	18	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:105:TYR:HB2	0.52	2.39	27	8
1:A:57:SER:OG	1:A:59:HIS:NE2	0.52	2.42	20	8
1:A:60:ASN:OD1	1:A:60:ASN:N	0.52	2.42	18	4
1:A:43:LEU:CA	1:A:46:LYS:HD2	0.52	2.34	22	1
1:A:35:THR:HA	1:A:92:PHE:CZ	0.52	2.39	22	10
1:A:50:LYS:HG2	1:A:51:TYR:CE1	0.52	2.39	15	10
1:A:61:SER:HB3	1:A:113:PHE:CD1	0.52	2.39	4	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:113:PHE:CE1	0.52	2.97	18	2
1:A:60:ASN:ND2	1:A:65:ASN:OD1	0.52	2.42	13	3
1:A:60:ASN:OD1	1:A:116:ILE:CD1	0.52	2.56	27	2
1:A:47:ILE:CG2	1:A:53:VAL:CG1	0.52	2.85	3	11
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CE2	0.52	2.39	28	3
1:A:17:PHE:CD2	1:A:103:LEU:HD13	0.52	2.38	6	5
1:A:13:GLU:HB2	1:A:113:PHE:CE1	0.52	2.39	8	1
1:A:53:VAL:O	1:A:70:LEU:CB	0.52	2.57	13	3
1:A:34:TYR:CD1	1:A:34:TYR:C	0.52	2.78	28	6
1:A:106:SER:OG	1:A:107:ALA:N	0.52	2.42	13	2
1:A:119:SER:C	1:A:120:LEU:HD22	0.52	2.25	6	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:95:CYS:SG	0.52	2.98	27	8
1:A:53:VAL:HA	1:A:70:LEU:O	0.52	2.04	15	4
1:A:43:LEU:CD2	1:A:87:LEU:CD1	0.52	2.83	25	7
1:A:15:LEU:HD23	1:A:18:LEU:HD12	0.52	1.82	26	4
1:A:44:TYR:CD1	1:A:56:ILE:HG12	0.52	2.39	5	5
1:A:63:ASN:O	1:A:64:HIS:ND1	0.52	2.43	19	2
1:A:47:ILE:HG13	1:A:83:TYR:CE1	0.52	2.39	8	2
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HD21	0.52	2.39	11	1
1:A:51:TYR:CE1	1:A:83:TYR:CD2	0.52	2.98	12	1
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:CG	0.52	2.72	12	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:113:PHE:CD1	0.52	2.39	23	1
1:A:30:CYS:C	1:A:31:PHE:CG	0.52	2.83	30	2
1:A:34:TYR:CE2	1:A:94:ILE:HD13	0.52	2.40	30	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:103:LEU:HB3	0.52	2.40	27	24
1:A:31:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HG13	0.52	2.40	24	9
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:HG2	0.52	2.40	17	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:98:VAL:HG13	0.52	1.82	4	1
1:A:41:ALA:HB2	1:A:58:ARG:NH1	0.52	2.20	6	2
1:A:10:PHE:CE1	1:A:94:ILE:HG22	0.52	2.40	10	2
1:A:53:VAL:HG21	1:A:56:ILE:CB	0.52	2.35	30	3
1:A:55:PHE:CB	1:A:120:LEU:HD12	0.52	2.35	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:TYR:O	1:A:94:ILE:CG1	0.52	2.57	20	1
1:A:94:ILE:HG23	1:A:96:LYS:HE3	0.52	1.80	29	1
1:A:50:LYS:HG3	1:A:51:TYR:CD1	0.51	2.40	4	2
1:A:11:PRO:HB2	1:A:62:TYR:CE2	0.51	2.40	5	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:87:LEU:CD2	0.51	2.19	5	5
1:A:85:GLN:NE2	1:A:93:LEU:CD2	0.51	2.73	8	1
1:A:26:ARG:O	1:A:76:ARG:NE	0.51	2.44	17	1
1:A:14:LEU:HD23	1:A:107:ALA:HB3	0.51	1.83	28	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:43:LEU:HD12	0.51	2.34	29	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:94:ILE:O	0.51	2.62	30	1
1:A:51:TYR:HB3	1:A:71:THR:CG2	0.51	2.35	15	7
1:A:63:ASN:OD1	1:A:63:ASN:N	0.51	2.43	18	2
1:A:70:LEU:CG	1:A:101:GLU:OE2	0.51	2.59	24	1
1:A:47:ILE:CG2	1:A:69:PHE:CD1	0.51	2.92	29	1
1:A:74:ARG:C	1:A:75:HIS:ND1	0.51	2.64	10	18
1:A:61:SER:HA	1:A:113:PHE:CD1	0.51	2.41	4	1
1:A:74:ARG:O	1:A:75:HIS:ND1	0.51	2.43	12	1
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:HG	0.51	2.40	27	5
1:A:34:TYR:CD1	1:A:66:ILE:HD13	0.51	2.41	18	2
1:A:33:ILE:CD1	1:A:69:PHE:CE2	0.51	2.93	22	1
1:A:8:LYS:O	1:A:9:ASP:CB	0.51	2.57	7	5
1:A:55:PHE:HA	1:A:120:LEU:HD21	0.51	1.81	6	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:O	0.51	2.62	21	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:104:MET:HE1	0.51	1.83	7	1
1:A:48:MET:SD	1:A:56:ILE:HG21	0.51	2.46	11	2
1:A:77:VAL:HG11	1:A:97:GLY:CA	0.51	2.35	20	3
1:A:93:LEU:HD21	1:A:95:CYS:HB2	0.51	1.81	21	1
1:A:39:LYS:CE	1:A:90:PHE:CE1	0.51	2.94	26	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:48:MET:HE3	0.51	2.41	5	1
1:A:101:GLU:O	1:A:103:LEU:N	0.51	2.43	19	5
1:A:73:HIS:O	1:A:74:ARG:O	0.51	2.28	10	3
1:A:55:PHE:CD2	1:A:124:LEU:CD2	0.51	2.92	28	3
1:A:115:VAL:CG1	1:A:118:GLU:OE2	0.51	2.59	13	3
1:A:105:TYR:CE2	1:A:123:GLY:HA3	0.51	2.40	22	3
1:A:10:PHE:CE2	1:A:96:LYS:HB2	0.51	2.41	30	4
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HG2	0.51	2.21	12	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CZ	0.51	2.40	21	1
1:A:102:TYR:HA	1:A:124:LEU:CD1	0.51	2.36	11	3
1:A:47:ILE:O	1:A:51:TYR:HB2	0.51	2.06	12	1
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:OE2	0.51	2.04	24	1
1:A:40:ALA:O	1:A:67:LEU:CD1	0.51	2.59	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LYS:O	1:A:50:LYS:CD	0.51	2.59	10	3
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:CG	0.51	2.59	6	4
1:A:44:TYR:CG	1:A:56:ILE:HD13	0.51	2.41	18	2
1:A:60:ASN:OD1	1:A:65:ASN:ND2	0.51	2.43	1	4
1:A:29:ALA:HB2	1:A:74:ARG:HA	0.51	1.82	4	2
1:A:48:MET:HA	1:A:53:VAL:HG22	0.51	1.82	10	2
1:A:41:ALA:HB2	1:A:58:ARG:HH11	0.51	1.66	6	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CE2	0.51	2.41	7	3
1:A:20:HIS:O	1:A:21:ALA:CB	0.51	2.57	11	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:36:THR:N	0.51	2.44	9	4
1:A:44:TYR:CD2	1:A:56:ILE:CD1	0.51	2.94	18	2
1:A:36:THR:HA	1:A:64:HIS:CD2	0.51	2.40	12	5
1:A:35:THR:HB	1:A:39:LYS:CB	0.51	2.36	23	5
1:A:66:ILE:HD13	1:A:108:LEU:HD21	0.51	1.83	4	1
1:A:44:TYR:CZ	1:A:48:MET:HE1	0.51	2.41	26	3
1:A:48:MET:HE3	1:A:56:ILE:CG2	0.51	2.36	15	2
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HG	0.51	2.41	15	1
1:A:56:ILE:HD11	1:A:67:LEU:CD1	0.51	2.22	15	1
1:A:11:PRO:CG	1:A:62:TYR:OH	0.51	2.59	18	1
1:A:97:GLY:O	1:A:98:VAL:CG2	0.51	2.59	18	1
1:A:7:PRO:HD2	1:A:92:PHE:CD2	0.51	2.41	19	1
1:A:44:TYR:OH	1:A:56:ILE:HG23	0.50	2.05	1	3
1:A:56:ILE:HD12	1:A:67:LEU:HD21	0.50	1.84	3	1
1:A:50:LYS:HB2	1:A:51:TYR:CD1	0.50	2.41	6	1
1:A:7:PRO:HG3	1:A:92:PHE:CE2	0.50	2.41	7	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:MET:HA	0.50	2.41	8	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:77:VAL:CG2	0.50	2.36	8	2
1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CD	0.50	2.64	10	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:43:LEU:HD12	0.50	2.37	12	1
1:A:64:HIS:ND1	1:A:92:PHE:CE2	0.50	2.80	21	2
1:A:103:LEU:O	1:A:104:MET:C	0.50	2.50	27	24
1:A:42:LEU:CD1	1:A:87:LEU:HD22	0.50	2.35	3	1
1:A:39:LYS:HZ3	1:A:91:SER:CB	0.50	2.19	10	1
1:A:10:PHE:CD2	1:A:18:LEU:CD1	0.50	2.94	12	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:118:GLU:OE1	0.50	2.59	17	2
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:HD12	0.50	2.41	19	1
1:A:70:LEU:CD1	1:A:101:GLU:CD	0.50	2.80	19	2
1:A:57:SER:OG	1:A:59:HIS:CD2	0.50	2.65	22	1
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:HG13	0.50	2.41	29	1
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:OD1	0.50	2.43	6	2
1:A:43:LEU:HB3	1:A:67:LEU:CD2	0.50	2.37	28	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HB2	0.50	2.21	13	3
1:A:68:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HG3	0.50	2.41	26	1
1:A:31:PHE:CZ	1:A:80:ILE:HG13	0.50	2.41	30	15
1:A:61:SER:HA	1:A:113:PHE:CD2	0.50	2.41	8	2
1:A:13:GLU:OE1	1:A:112:PRO:CD	0.50	2.59	12	1
1:A:94:ILE:HD12	1:A:94:ILE:N	0.50	2.21	29	4
1:A:55:PHE:O	1:A:68:PHE:O	0.50	2.28	22	2
1:A:51:TYR:O	1:A:72:PRO:HD3	0.50	2.06	2	16
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:LEU:N	0.50	2.85	4	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:67:LEU:HD23	0.50	2.37	8	4
1:A:55:PHE:CD1	1:A:56:ILE:N	0.50	2.80	27	3
1:A:76:ARG:O	1:A:78:SER:N	0.50	2.43	26	6
1:A:10:PHE:CD1	1:A:34:TYR:CB	0.50	2.94	19	4
1:A:34:TYR:C	1:A:35:THR:CG2	0.50	2.80	30	9
1:A:17:PHE:CZ	1:A:104:MET:HA	0.50	2.42	24	10
1:A:68:PHE:CZ	1:A:101:GLU:HG2	0.50	2.42	17	2
1:A:120:LEU:CD2	1:A:121:PRO:HD2	0.50	2.37	4	5
1:A:18:LEU:CD1	1:A:104:MET:SD	0.50	3.00	24	3
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CD2	0.50	2.42	4	3
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:CG	0.50	2.60	6	1
1:A:59:HIS:CE1	1:A:115:VAL:HG22	0.50	2.41	14	3
1:A:57:SER:CB	1:A:59:HIS:NE2	0.50	2.75	10	7
1:A:33:ILE:CG1	1:A:69:PHE:CE1	0.50	2.95	25	3
1:A:29:ALA:HB2	1:A:74:ARG:HG2	0.50	1.81	16	1
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:HD11	0.50	2.06	16	1
1:A:35:THR:CB	1:A:39:LYS:CB	0.50	2.90	28	2
1:A:39:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CE1	0.50	2.42	6	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:95:CYS:CB	0.50	2.89	6	2
1:A:29:ALA:CB	1:A:71:THR:O	0.50	2.60	9	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:124:LEU:HB2	0.50	2.41	10	1
1:A:38:GLU:O	1:A:42:LEU:CD1	0.50	2.60	26	2
1:A:57:SER:HB2	1:A:59:HIS:CE1	0.50	2.41	18	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:LEU:HD23	0.50	2.06	21	1
1:A:46:LYS:HG2	1:A:47:ILE:N	0.50	2.22	22	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:101:GLU:OE2	0.50	2.59	27	2
1:A:63:ASN:O	1:A:64:HIS:CG	0.50	2.65	10	6
1:A:44:TYR:CD1	1:A:48:MET:HE2	0.50	2.42	9	1
1:A:51:TYR:CE2	1:A:80:ILE:HD13	0.50	2.42	30	3
1:A:19:SER:C	1:A:20:HIS:CD2	0.49	2.86	1	1
1:A:46:LYS:O	1:A:48:MET:N	0.49	2.46	15	7
1:A:68:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HG2	0.49	2.42	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ALA:HB1	1:A:67:LEU:HD12	0.49	1.84	19	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:95:CYS:CB	0.49	2.37	21	1
1:A:37:LYS:HG3	1:A:38:GLU:N	0.49	2.22	14	14
1:A:33:ILE:CG2	1:A:35:THR:HG23	0.49	2.37	14	5
1:A:27:THR:O	1:A:28:LEU:HD12	0.49	2.07	6	2
1:A:10:PHE:CZ	1:A:34:TYR:CB	0.49	2.95	10	2
1:A:44:TYR:HA	1:A:56:ILE:CD1	0.49	2.36	18	6
1:A:59:HIS:C	1:A:116:ILE:CD1	0.49	2.81	2	1
1:A:13:GLU:CB	1:A:62:TYR:OH	0.49	2.61	5	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:113:PHE:CE1	0.49	2.94	27	1
1:A:29:ALA:O	1:A:71:THR:OG1	0.49	2.30	11	13
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CD1	0.49	2.42	3	3
1:A:51:TYR:CE1	1:A:80:ILE:HD11	0.49	2.42	22	3
1:A:105:TYR:CD2	1:A:124:LEU:HB2	0.49	2.42	7	2
1:A:32:ALA:HB2	1:A:68:PHE:CD1	0.49	2.42	8	1
1:A:89:THR:C	1:A:90:PHE:CG	0.49	2.86	9	2
1:A:90:PHE:O	1:A:91:SER:O	0.49	2.31	9	2
1:A:22:VAL:CG2	1:A:96:LYS:HE3	0.49	2.37	21	2
1:A:29:ALA:CA	1:A:71:THR:OG1	0.49	2.61	13	1
1:A:82:ASN:ND2	1:A:82:ASN:C	0.49	2.66	30	1
1:A:61:SER:HB3	1:A:66:ILE:CD1	0.49	2.38	29	3
1:A:89:THR:C	1:A:90:PHE:CD2	0.49	2.86	27	3
1:A:103:LEU:O	1:A:105:TYR:N	0.49	2.46	7	4
1:A:14:LEU:HD13	1:A:113:PHE:HE2	0.49	1.64	20	2
1:A:48:MET:HE1	1:A:56:ILE:CG2	0.49	2.33	14	1
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:CG2	0.49	2.60	18	1
1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:HD1	0.49	2.05	20	1
1:A:46:LYS:HE2	1:A:83:TYR:CE1	0.49	2.41	22	1
1:A:52:SER:O	1:A:53:VAL:C	0.49	2.51	19	27
1:A:39:LYS:HD3	1:A:90:PHE:CZ	0.49	2.43	5	2
1:A:32:ALA:N	1:A:98:VAL:CG2	0.49	2.76	10	2
1:A:56:ILE:HG13	1:A:67:LEU:HD11	0.49	1.85	18	4
1:A:64:HIS:NE2	1:A:92:PHE:CE1	0.49	2.80	15	1
1:A:25:ASN:C	1:A:26:ARG:CG	0.49	2.81	24	1
1:A:120:LEU:C	1:A:120:LEU:CD1	0.49	2.80	21	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:96:LYS:HG3	0.49	2.43	29	1
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CD1	0.49	2.75	28	7
1:A:98:VAL:HG12	1:A:99:ASN:N	0.49	2.22	9	3
1:A:14:LEU:HD23	1:A:17:PHE:HE1	0.49	1.68	8	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:108:LEU:CD2	0.49	2.37	30	3
1:A:55:PHE:HB2	1:A:120:LEU:CD2	0.49	2.37	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:HD22	0.49	2.43	27	1
1:A:61:SER:CB	1:A:66:ILE:CD1	0.49	2.90	29	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:LEU:HD22	0.49	2.48	5	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:104:MET:SD	0.49	3.01	23	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:35:THR:CG2	0.48	2.90	8	3
1:A:13:GLU:HB3	1:A:113:PHE:CE2	0.48	2.43	6	2
1:A:55:PHE:HB2	1:A:120:LEU:CD1	0.48	2.38	7	6
1:A:13:GLU:HB2	1:A:113:PHE:CZ	0.48	2.42	8	1
1:A:14:LEU:CD2	1:A:108:LEU:CD2	0.48	2.90	16	1
1:A:26:ARG:O	1:A:28:LEU:CD2	0.48	2.60	25	1
1:A:102:TYR:HB2	1:A:124:LEU:CD2	0.48	2.38	2	1
1:A:7:PRO:CG	1:A:64:HIS:CE1	0.48	2.96	8	3
1:A:117:GLU:C	1:A:118:GLU:CG	0.48	2.81	12	2
1:A:39:LYS:HB2	1:A:90:PHE:CZ	0.48	2.42	13	1
1:A:19:SER:O	1:A:20:HIS:CG	0.48	2.67	18	2
1:A:92:PHE:CD2	1:A:94:ILE:CD1	0.48	2.96	6	4
1:A:57:SER:OG	1:A:118:GLU:CB	0.48	2.61	6	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:N	0.48	2.23	17	2
1:A:27:THR:C	1:A:28:LEU:HD12	0.48	2.28	19	1
1:A:124:LEU:HD23	1:A:124:LEU:N	0.48	2.20	21	1
1:A:57:SER:HB3	1:A:59:HIS:NE2	0.48	2.23	11	11
1:A:102:TYR:HA	1:A:124:LEU:CD2	0.48	2.34	2	2
1:A:44:TYR:O	1:A:48:MET:HG3	0.48	2.08	9	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:66:ILE:O	0.48	2.08	25	2
1:A:49:GLU:O	1:A:51:TYR:N	0.48	2.46	12	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:MET:SD	0.48	3.06	18	1
1:A:39:LYS:HG2	1:A:90:PHE:CZ	0.48	2.43	18	1
1:A:58:ARG:CZ	1:A:58:ARG:CB	0.48	2.91	18	1
1:A:51:TYR:O	1:A:52:SER:C	0.48	2.51	24	28
1:A:72:PRO:O	1:A:73:HIS:O	0.48	2.31	15	13
1:A:108:LEU:O	1:A:113:PHE:HB3	0.48	2.09	6	13
1:A:19:SER:CB	1:A:97:GLY:O	0.48	2.62	4	1
1:A:61:SER:HB2	1:A:62:TYR:CD1	0.48	2.44	17	5
1:A:57:SER:HB3	1:A:118:GLU:CG	0.48	2.38	13	1
1:A:105:TYR:CE1	1:A:123:GLY:HA3	0.48	2.43	21	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:HB2	0.48	2.09	23	12
1:A:48:MET:HG3	1:A:56:ILE:HD13	0.48	1.86	4	1
1:A:87:LEU:CA	1:A:90:PHE:CZ	0.48	2.97	4	4
1:A:55:PHE:CE1	1:A:120:LEU:HB2	0.48	2.42	23	6
1:A:89:THR:OG1	1:A:90:PHE:N	0.48	2.46	12	1
1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CD2	0.48	2.82	27	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PHE:CD1	1:A:103:LEU:HB3	0.48	2.44	28	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:104:MET:HA	0.48	2.43	28	1
1:A:47:ILE:HG21	1:A:69:PHE:CG	0.48	2.43	29	1
1:A:118:GLU:OE1	1:A:120:LEU:O	0.48	2.31	11	4
1:A:83:TYR:CD1	1:A:87:LEU:HD11	0.48	2.43	9	2
1:A:61:SER:HG	1:A:62:TYR:HD2	0.48	1.52	13	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:C	0.48	2.83	27	2
1:A:10:PHE:CD1	1:A:18:LEU:HG	0.48	2.44	29	1
1:A:46:LYS:HB3	1:A:83:TYR:OH	0.48	2.09	14	22
1:A:47:ILE:HD12	1:A:69:PHE:CE2	0.48	2.43	21	4
1:A:14:LEU:CG	1:A:113:PHE:CE2	0.48	2.97	14	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:68:PHE:N	0.48	2.74	18	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:48:MET:HE2	0.48	2.43	7	1
1:A:118:GLU:CD	1:A:118:GLU:N	0.48	2.67	14	1
1:A:35:THR:HA	1:A:92:PHE:CE2	0.48	2.44	1	3
1:A:108:LEU:HA	1:A:113:PHE:CB	0.48	2.39	23	2
1:A:51:TYR:CE1	1:A:83:TYR:CE2	0.48	3.02	12	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:34:TYR:HB2	0.48	2.43	15	1
1:A:118:GLU:N	1:A:118:GLU:CD	0.48	2.67	18	1
1:A:35:THR:HA	1:A:92:PHE:CE1	0.48	2.44	20	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:104:MET:CG	0.47	2.97	17	3
1:A:123:GLY:O	1:A:124:LEU:O	0.47	2.32	15	3
1:A:57:SER:HG	1:A:59:HIS:CE1	0.47	2.26	9	4
1:A:55:PHE:CZ	1:A:123:GLY:HA2	0.47	2.44	27	2
1:A:120:LEU:CD1	1:A:124:LEU:HG	0.47	2.39	26	2
1:A:92:PHE:CE2	1:A:94:ILE:HD13	0.47	2.43	29	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:SER:N	0.47	2.24	4	1
1:A:8:LYS:O	1:A:9:ASP:OD2	0.47	2.32	8	1
1:A:57:SER:HB2	1:A:59:HIS:NE2	0.47	2.24	18	7
1:A:36:THR:CG2	1:A:92:PHE:CD2	0.47	2.97	26	3
1:A:39:LYS:CE	1:A:93:LEU:HD12	0.47	2.39	13	2
1:A:70:LEU:CD1	1:A:101:GLU:OE1	0.47	2.63	19	1
1:A:46:LYS:HG3	1:A:83:TYR:OH	0.47	2.09	22	1
1:A:61:SER:C	1:A:62:TYR:CG	0.47	2.86	22	3
1:A:15:LEU:HA	1:A:18:LEU:HD12	0.47	1.84	10	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:84:ALA:HB2	0.47	2.39	22	1
1:A:46:LYS:HG3	1:A:83:TYR:CE1	0.47	2.44	22	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:90:PHE:HE2	0.47	1.69	26	1
1:A:55:PHE:CB	1:A:124:LEU:CD2	0.47	2.91	8	2
1:A:77:VAL:CG2	1:A:97:GLY:HA3	0.47	2.39	12	1
1:A:20:HIS:O	1:A:21:ALA:HB2	0.47	2.10	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ILE:CD1	1:A:67:LEU:HD11	0.47	2.24	15	2
1:A:34:TYR:O	1:A:94:ILE:CB	0.47	2.63	20	1
1:A:53:VAL:O	1:A:70:LEU:O	0.47	2.33	24	1
1:A:7:PRO:HG3	1:A:34:TYR:OH	0.47	2.10	5	12
1:A:56:ILE:HG13	1:A:68:PHE:O	0.47	2.10	9	7
1:A:30:CYS:CB	1:A:101:GLU:HG2	0.47	2.40	2	2
1:A:76:ARG:O	1:A:77:VAL:C	0.47	2.53	26	6
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:HB2	0.47	2.08	7	15
1:A:61:SER:O	1:A:62:TYR:CG	0.47	2.68	24	4
1:A:42:LEU:CD1	1:A:43:LEU:HD23	0.47	2.38	22	3
1:A:60:ASN:ND2	1:A:116:ILE:HG12	0.47	2.25	20	6
1:A:44:TYR:O	1:A:48:MET:SD	0.47	2.73	11	5
1:A:65:ASN:ND2	1:A:116:ILE:HD13	0.47	2.25	15	2
1:A:14:LEU:HD21	1:A:108:LEU:CG	0.47	2.39	16	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:104:MET:SD	0.47	2.50	21	2
1:A:79:ALA:O	1:A:82:ASN:OD1	0.47	2.32	21	2
1:A:57:SER:CB	1:A:118:GLU:HB3	0.47	2.40	11	6
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:OE2	0.47	2.73	6	2
1:A:46:LYS:O	1:A:50:LYS:HD2	0.47	2.10	25	3
1:A:31:PHE:CZ	1:A:77:VAL:CG2	0.47	2.98	5	4
1:A:44:TYR:CE1	1:A:48:MET:CG	0.47	2.97	5	1
1:A:13:GLU:HB3	1:A:113:PHE:CZ	0.47	2.45	6	4
1:A:69:PHE:CD2	1:A:69:PHE:O	0.47	2.68	6	2
1:A:61:SER:OG	1:A:62:TYR:N	0.47	2.48	24	3
1:A:39:LYS:HE2	1:A:90:PHE:CG	0.47	2.45	9	1
1:A:39:LYS:HD3	1:A:90:PHE:CE1	0.47	2.44	18	3
1:A:39:LYS:HG2	1:A:90:PHE:CE2	0.47	2.44	12	1
1:A:51:TYR:O	1:A:72:PRO:HD2	0.47	2.10	24	7
1:A:52:SER:CB	1:A:72:PRO:HG3	0.47	2.40	19	4
1:A:81:ASN:O	1:A:81:ASN:ND2	0.47	2.48	16	4
1:A:83:TYR:O	1:A:86:LYS:HG2	0.47	2.10	16	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:SER:O	0.47	2.33	22	1
1:A:46:LYS:HE2	1:A:83:TYR:CD1	0.47	2.45	22	1
1:A:47:ILE:CG1	1:A:83:TYR:CE2	0.47	2.98	22	1
1:A:9:ASP:CA	1:A:94:ILE:HG12	0.47	2.40	29	1
1:A:59:HIS:O	1:A:65:ASN:OD1	0.47	2.33	8	3
1:A:46:LYS:O	1:A:47:ILE:C	0.47	2.52	5	10
1:A:55:PHE:CG	1:A:124:LEU:CD1	0.47	2.97	16	2
1:A:28:LEU:HB3	1:A:77:VAL:HG23	0.47	1.86	29	2
1:A:31:PHE:HB3	1:A:69:PHE:CE2	0.47	2.45	22	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:HB3	0.47	2.10	25	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:O	1:A:20:HIS:CD2	0.47	2.67	6	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:ILE:CG1	0.47	2.63	6	1
1:A:9:ASP:O	1:A:34:TYR:CE2	0.47	2.68	8	2
1:A:108:LEU:HD23	1:A:113:PHE:HD2	0.47	1.70	10	1
1:A:120:LEU:HD23	1:A:121:PRO:CD	0.47	2.40	30	2
1:A:46:LYS:CE	1:A:83:TYR:CD1	0.47	2.97	22	1
1:A:58:ARG:CZ	1:A:117:GLU:OE2	0.47	2.63	30	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD2	0.47	2.78	18	4
1:A:59:HIS:ND1	1:A:115:VAL:HG13	0.47	2.24	4	2
1:A:35:THR:CB	1:A:39:LYS:HG2	0.47	2.40	15	2
1:A:57:SER:CB	1:A:59:HIS:HE2	0.47	2.23	11	1
1:A:51:TYR:HB2	1:A:71:THR:HG22	0.47	1.87	19	2
1:A:10:PHE:HA	1:A:34:TYR:CD2	0.47	2.45	19	2
1:A:9:ASP:O	1:A:10:PHE:O	0.46	2.33	6	5
1:A:35:THR:O	1:A:36:THR:O	0.46	2.33	15	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:88:CYS:O	0.46	2.73	18	4
1:A:66:ILE:CG2	1:A:67:LEU:N	0.46	2.78	29	3
1:A:58:ARG:O	1:A:116:ILE:CG1	0.46	2.63	19	4
1:A:29:ALA:C	1:A:31:PHE:CE1	0.46	2.88	30	2
1:A:92:PHE:CD1	1:A:94:ILE:HD11	0.46	2.44	20	1
1:A:13:GLU:HB3	1:A:62:TYR:OH	0.46	2.10	5	1
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:CB	0.46	2.40	6	1
1:A:32:ALA:N	1:A:98:VAL:HG23	0.46	2.24	11	4
1:A:44:TYR:O	1:A:48:MET:HG2	0.46	2.11	7	1
1:A:35:THR:HB	1:A:93:LEU:CD2	0.46	2.40	27	2
1:A:39:LYS:HD3	1:A:90:PHE:CD1	0.46	2.45	9	1
1:A:96:LYS:O	1:A:97:GLY:O	0.46	2.33	18	2
1:A:93:LEU:HD23	1:A:95:CYS:H	0.46	1.70	21	1
1:A:22:VAL:C	1:A:23:PHE:CD1	0.46	2.89	22	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:95:CYS:CB	0.46	2.40	26	1
1:A:70:LEU:CD1	1:A:101:GLU:HG3	0.46	2.40	28	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:95:CYS:HB2	0.46	1.86	28	3
1:A:34:TYR:O	1:A:94:ILE:O	0.46	2.33	9	1
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:O	0.46	2.33	9	2
1:A:13:GLU:HG3	1:A:113:PHE:CZ	0.46	2.46	13	1
1:A:34:TYR:O	1:A:94:ILE:HG12	0.46	2.11	20	1
1:A:77:VAL:O	1:A:81:ASN:HB2	0.46	2.11	12	12
1:A:37:LYS:HB3	1:A:65:ASN:ND2	0.46	2.25	5	9
1:A:55:PHE:CD2	1:A:120:LEU:HG	0.46	2.45	6	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:OE1	0.46	2.72	10	7
1:A:100:LYS:O	1:A:101:GLU:C	0.46	2.54	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:TYR:CE2	1:A:48:MET:SD	0.46	3.09	14	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:108:LEU:CD2	0.46	2.93	17	1
1:A:46:LYS:CD	1:A:47:ILE:HG13	0.46	2.41	22	1
1:A:57:SER:OG	1:A:117:GLU:O	0.46	2.33	23	2
1:A:85:GLN:O	1:A:85:GLN:OE1	0.46	2.34	23	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:98:VAL:HG22	0.46	1.87	26	1
1:A:10:PHE:CD2	1:A:94:ILE:CG2	0.46	2.98	30	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:94:ILE:CD1	0.46	2.98	6	4
1:A:30:CYS:HB2	1:A:70:LEU:CD2	0.46	2.41	2	1
1:A:50:LYS:HB2	1:A:51:TYR:CE1	0.46	2.46	6	1
1:A:37:LYS:CB	1:A:65:ASN:ND2	0.46	2.79	7	2
1:A:117:GLU:OE2	1:A:118:GLU:O	0.46	2.34	9	1
1:A:118:GLU:OE2	1:A:120:LEU:O	0.46	2.33	10	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:104:MET:CG	0.46	2.99	14	1
1:A:14:LEU:CD2	1:A:108:LEU:HG	0.46	2.41	18	2
1:A:33:ILE:O	1:A:66:ILE:HG23	0.46	2.09	17	1
1:A:55:PHE:HB3	1:A:124:LEU:HD23	0.46	1.88	1	1
1:A:44:TYR:OH	1:A:56:ILE:O	0.46	2.31	8	8
1:A:108:LEU:O	1:A:113:PHE:O	0.46	2.33	4	4
1:A:14:LEU:HD21	1:A:108:LEU:HG	0.46	1.87	18	2
1:A:97:GLY:C	1:A:98:VAL:HG23	0.46	2.31	18	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:104:MET:HA	0.46	2.46	28	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:HG3	0.46	2.51	28	5
1:A:68:PHE:CZ	1:A:105:TYR:HA	0.46	2.46	23	3
1:A:60:ASN:OD1	1:A:116:ILE:HG12	0.46	2.10	21	6
1:A:25:ASN:OD1	1:A:25:ASN:O	0.46	2.33	22	1
1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CD2	0.46	2.79	1	1
1:A:47:ILE:O	1:A:48:MET:C	0.46	2.54	3	21
1:A:102:TYR:CA	1:A:124:LEU:CD2	0.46	2.94	2	2
1:A:57:SER:OG	1:A:118:GLU:HB3	0.46	2.10	6	2
1:A:46:LYS:C	1:A:83:TYR:OH	0.46	2.54	17	2
1:A:39:LYS:CE	1:A:91:SER:HB3	0.46	2.41	30	1
1:A:37:LYS:HB3	1:A:65:ASN:OD1	0.46	2.11	20	5
1:A:47:ILE:O	1:A:49:GLU:N	0.46	2.49	1	2
1:A:58:ARG:O	1:A:116:ILE:HB	0.46	2.11	28	15
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:HB3	0.46	2.11	13	3
1:A:40:ALA:CB	1:A:58:ARG:HD2	0.46	2.41	9	3
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:HG2	0.46	2.11	20	4
1:A:33:ILE:HD12	1:A:95:CYS:SG	0.46	2.51	27	4
1:A:27:THR:C	1:A:28:LEU:HD23	0.46	2.31	18	1
1:A:47:ILE:CG2	1:A:53:VAL:HG12	0.46	2.36	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:TYR:CD1	1:A:83:TYR:O	0.46	2.68	20	1
1:A:42:LEU:N	1:A:42:LEU:HD22	0.46	2.26	27	1
1:A:104:MET:SD	1:A:108:LEU:CD1	0.46	3.04	27	1
1:A:43:LEU:HD22	1:A:87:LEU:CD2	0.46	2.36	1	2
1:A:73:HIS:ND1	1:A:75:HIS:ND1	0.46	2.64	27	10
1:A:73:HIS:CE1	1:A:75:HIS:HD1	0.46	2.28	5	4
1:A:60:ASN:OD1	1:A:116:ILE:HG13	0.46	2.11	4	3
1:A:115:VAL:HG12	1:A:116:ILE:N	0.46	2.26	8	2
1:A:39:LYS:HE2	1:A:87:LEU:O	0.46	2.11	28	4
1:A:85:GLN:O	1:A:88:CYS:SG	0.46	2.74	9	3
1:A:50:LYS:HG2	1:A:51:TYR:CD1	0.46	2.46	30	2
1:A:93:LEU:HG	1:A:94:ILE:N	0.46	2.25	26	3
1:A:108:LEU:O	1:A:113:PHE:HB2	0.46	2.11	27	3
1:A:53:VAL:O	1:A:54:THR:OG1	0.46	2.34	19	2
1:A:46:LYS:HB2	1:A:83:TYR:OH	0.46	2.11	23	1
1:A:39:LYS:HZ1	1:A:39:LYS:N	0.46	2.08	24	1
1:A:40:ALA:CA	1:A:67:LEU:HD13	0.46	2.41	26	2
1:A:44:TYR:CD2	1:A:56:ILE:HG13	0.46	2.45	29	1
1:A:44:TYR:CG	1:A:56:ILE:HG12	0.45	2.46	3	2
1:A:98:VAL:CG1	1:A:104:MET:CG	0.45	2.87	4	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:56:ILE:CD1	0.45	2.99	5	2
1:A:61:SER:HB2	1:A:113:PHE:CD1	0.45	2.45	10	1
1:A:43:LEU:CA	1:A:46:LYS:HB3	0.45	2.40	22	1
1:A:75:HIS:O	1:A:76:ARG:HB2	0.45	2.08	10	1
1:A:39:LYS:HD3	1:A:92:PHE:O	0.45	2.09	12	1
1:A:28:LEU:O	1:A:31:PHE:CE1	0.45	2.69	17	2
1:A:18:LEU:HD12	1:A:98:VAL:HG22	0.45	1.87	2	1
1:A:50:LYS:NZ	1:A:50:LYS:HB3	0.45	2.25	25	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:69:PHE:HB2	0.45	2.42	4	6
1:A:61:SER:CB	1:A:113:PHE:CD1	0.45	2.99	4	1
1:A:47:ILE:CG2	1:A:69:PHE:CD2	0.45	2.97	19	2
1:A:56:ILE:CG1	1:A:68:PHE:O	0.45	2.64	9	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:PHE:O	0.45	2.34	26	2
1:A:101:GLU:CG	1:A:124:LEU:HD13	0.45	2.41	24	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:14:LEU:H	0.45	1.69	1	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:67:LEU:HB2	0.45	2.41	28	14
1:A:102:TYR:O	1:A:103:LEU:C	0.45	2.55	2	7
1:A:82:ASN:O	1:A:86:LYS:HB2	0.45	2.11	23	2
1:A:9:ASP:O	1:A:10:PHE:C	0.45	2.54	29	5
1:A:9:ASP:OD1	1:A:9:ASP:N	0.45	2.48	7	1
1:A:46:LYS:HE3	1:A:87:LEU:HD21	0.45	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:THR:CG2	1:A:90:PHE:N	0.45	2.78	9	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LYS:HG3	0.45	2.12	13	4
1:A:73:HIS:CG	1:A:75:HIS:CE1	0.45	3.05	10	5
1:A:70:LEU:C	1:A:71:THR:HG23	0.45	2.32	23	8
1:A:44:TYR:CD1	1:A:48:MET:HG3	0.45	2.47	5	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:44:TYR:C	0.45	2.89	9	4
1:A:10:PHE:CZ	1:A:96:LYS:HB2	0.45	2.47	30	3
1:A:53:VAL:C	1:A:54:THR:OG1	0.45	2.55	19	2
1:A:52:SER:OG	1:A:72:PRO:CG	0.45	2.64	24	1
1:A:74:ARG:O	1:A:75:HIS:CD2	0.45	2.70	26	1
1:A:51:TYR:CE1	1:A:80:ILE:HD13	0.45	2.47	24	4
1:A:70:LEU:HD21	1:A:101:GLU:HB2	0.45	1.89	6	1
1:A:35:THR:O	1:A:36:THR:C	0.45	2.55	7	9
1:A:14:LEU:HD11	1:A:113:PHE:CE2	0.45	2.46	10	2
1:A:55:PHE:CE1	1:A:57:SER:HB2	0.45	2.47	20	2
1:A:36:THR:HA	1:A:64:HIS:ND1	0.45	2.25	15	1
1:A:28:LEU:O	1:A:75:HIS:O	0.45	2.35	22	2
1:A:7:PRO:HD2	1:A:92:PHE:CE2	0.45	2.46	19	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:96:LYS:CE	0.45	2.42	20	1
1:A:47:ILE:HG13	1:A:83:TYR:CE2	0.45	2.46	22	1
1:A:104:MET:SD	1:A:104:MET:O	0.45	2.74	27	1
1:A:73:HIS:O	1:A:74:ARG:C	0.45	2.55	5	7
1:A:83:TYR:HE1	1:A:87:LEU:HD11	0.45	1.57	9	2
1:A:42:LEU:O	1:A:43:LEU:C	0.45	2.55	14	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:97:GLY:O	0.45	2.64	15	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:101:GLU:OE2	0.45	2.70	17	1
1:A:33:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	0.45	1.89	19	1
1:A:52:SER:OG	1:A:72:PRO:HG3	0.45	2.12	24	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:OD1	0.45	2.34	28	1
1:A:110:ARG:O	1:A:111:ASP:C	0.45	2.55	4	23
1:A:44:TYR:HB2	1:A:67:LEU:CD1	0.45	2.42	9	2
1:A:44:TYR:OH	1:A:118:GLU:C	0.45	2.55	19	2
1:A:35:THR:OG1	1:A:40:ALA:N	0.45	2.49	12	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:43:LEU:N	0.45	2.80	14	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:101:GLU:OE1	0.45	2.12	19	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:90:PHE:CE1	0.45	2.46	26	2
1:A:97:GLY:O	1:A:98:VAL:HG23	0.45	2.12	23	1
1:A:10:PHE:HB2	1:A:15:LEU:HD21	0.45	1.88	30	2
1:A:47:ILE:HD12	1:A:69:PHE:CE1	0.45	2.47	29	1
1:A:117:GLU:O	1:A:118:GLU:OE1	0.45	2.35	3	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:57:SER:HA	0.45	2.47	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:LEU:O	1:A:106:SER:N	0.45	2.50	6	3
1:A:14:LEU:HB2	1:A:113:PHE:CE2	0.45	2.47	7	1
1:A:17:PHE:HD2	1:A:103:LEU:HD12	0.45	1.66	10	1
1:A:31:PHE:N	1:A:31:PHE:HD1	0.45	2.09	22	2
1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:OD1	0.45	2.47	17	1
1:A:62:TYR:CE2	1:A:112:PRO:HG2	0.45	2.46	17	1
1:A:114:SER:OG	1:A:115:VAL:N	0.45	2.50	24	1
1:A:50:LYS:HE2	1:A:83:TYR:CE1	0.45	2.46	28	1
1:A:66:ILE:O	1:A:66:ILE:HG22	0.45	2.11	16	3
1:A:42:LEU:HD23	1:A:46:LYS:NZ	0.45	2.27	11	1
1:A:33:ILE:HG22	1:A:35:THR:HG21	0.45	1.86	30	2
1:A:29:ALA:O	1:A:71:THR:N	0.44	2.49	13	1
1:A:59:HIS:HE1	1:A:109:THR:HG22	0.44	1.70	15	1
1:A:70:LEU:CD1	1:A:101:GLU:HG2	0.44	2.42	26	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:87:LEU:O	0.44	2.13	15	1
1:A:58:ARG:HG3	1:A:67:LEU:HD12	0.44	1.88	15	1
1:A:87:LEU:HA	1:A:90:PHE:CZ	0.44	2.48	23	1
1:A:44:TYR:OH	1:A:119:SER:N	0.44	2.50	29	2
1:A:25:ASN:OD1	1:A:25:ASN:C	0.44	2.56	5	1
1:A:51:TYR:O	1:A:72:PRO:CG	0.44	2.65	5	2
1:A:104:MET:O	1:A:105:TYR:C	0.44	2.55	8	2
1:A:39:LYS:HZ3	1:A:91:SER:HB3	0.44	1.72	10	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:92:PHE:O	0.44	2.12	18	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:73:HIS:CE1	0.44	3.05	26	1
1:A:118:GLU:OE2	1:A:123:GLY:N	0.44	2.50	26	1
1:A:44:TYR:O	1:A:48:MET:HB2	0.44	2.13	1	5
1:A:64:HIS:CE1	1:A:92:PHE:CZ	0.44	3.06	8	2
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:HD22	0.44	2.28	28	3
1:A:51:TYR:CD2	1:A:73:HIS:HE1	0.44	2.29	12	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:101:GLU:OE1	0.44	2.60	17	1
1:A:85:GLN:NE2	1:A:93:LEU:HD23	0.44	2.27	17	1
1:A:81:ASN:ND2	1:A:81:ASN:O	0.44	2.50	22	1
1:A:14:LEU:CG	1:A:113:PHE:CZ	0.44	3.00	27	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:HG2	0.44	2.52	19	5
1:A:58:ARG:O	1:A:116:ILE:CB	0.44	2.66	25	4
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LYS:HG2	0.44	2.12	17	1
1:A:98:VAL:CG1	1:A:99:ASN:N	0.44	2.80	9	1
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:CB	0.44	2.81	13	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:104:MET:CE	0.44	3.00	24	1
1:A:84:ALA:O	1:A:93:LEU:HD22	0.44	2.11	24	1
1:A:12:SER:N	1:A:15:LEU:HD12	0.44	2.28	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ILE:HD11	1:A:69:PHE:CE2	0.44	2.47	29	1
1:A:83:TYR:O	1:A:84:ALA:C	0.44	2.56	10	5
1:A:64:HIS:C	1:A:65:ASN:OD1	0.44	2.56	7	4
1:A:70:LEU:HG	1:A:101:GLU:OE2	0.44	2.11	24	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:97:GLY:HA3	0.44	1.90	24	1
1:A:86:LYS:O	1:A:86:LYS:CD	0.44	2.66	24	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:120:LEU:CB	0.44	3.01	26	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:67:LEU:CD2	0.44	2.95	3	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:116:ILE:CG1	0.44	2.81	3	2
1:A:39:LYS:HZ2	1:A:39:LYS:HB3	0.44	1.73	12	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:104:MET:SD	0.44	2.53	3	1
1:A:101:GLU:OE1	1:A:101:GLU:HA	0.44	2.12	10	2
1:A:22:VAL:O	1:A:78:SER:HB2	0.44	2.13	21	4
1:A:21:ALA:HB1	1:A:24:SER:OG	0.44	2.12	19	1
1:A:32:ALA:HB3	1:A:98:VAL:CG2	0.44	2.43	23	1
1:A:34:TYR:O	1:A:35:THR:HG22	0.43	2.13	27	5
1:A:71:THR:CB	1:A:75:HIS:CE1	0.43	3.00	9	1
1:A:50:LYS:HG3	1:A:51:TYR:CE1	0.43	2.48	4	1
1:A:104:MET:O	1:A:106:SER:N	0.43	2.51	8	2
1:A:35:THR:O	1:A:65:ASN:O	0.43	2.36	14	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:87:LEU:O	0.43	2.13	14	2
1:A:43:LEU:O	1:A:47:ILE:HB	0.43	2.13	26	3
1:A:58:ARG:CZ	1:A:58:ARG:HA	0.43	2.43	18	1
1:A:12:SER:HA	1:A:15:LEU:CD1	0.43	2.43	24	1
1:A:39:LYS:CD	1:A:91:SER:HB3	0.43	2.43	24	1
1:A:19:SER:HB2	1:A:97:GLY:O	0.43	2.13	29	1
1:A:34:TYR:CD2	1:A:94:ILE:CD1	0.43	3.01	30	1
1:A:90:PHE:O	1:A:91:SER:HB2	0.43	2.14	21	2
1:A:59:HIS:O	1:A:65:ASN:CA	0.43	2.67	2	1
1:A:102:TYR:HB2	1:A:124:LEU:HD23	0.43	1.91	4	3
1:A:66:ILE:HG22	1:A:67:LEU:N	0.43	2.27	9	3
1:A:53:VAL:O	1:A:70:LEU:C	0.43	2.56	13	2
1:A:27:THR:HG22	1:A:76:ARG:HG2	0.43	1.88	14	1
1:A:22:VAL:HG23	1:A:96:LYS:CE	0.43	2.42	21	1
1:A:43:LEU:O	1:A:46:LYS:HD2	0.43	2.13	22	1
1:A:55:PHE:HA	1:A:120:LEU:CD1	0.43	2.42	27	1
1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:HD2	0.43	2.28	29	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:92:PHE:O	0.43	2.13	1	1
1:A:33:ILE:O	1:A:66:ILE:HA	0.43	2.13	3	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:103:LEU:HB3	0.43	2.49	6	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:101:GLU:OE1	0.43	2.65	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ALA:O	1:A:41:ALA:C	0.43	2.56	28	4
1:A:51:TYR:C	1:A:52:SER:OG	0.43	2.57	12	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:97:GLY:N	0.43	2.29	17	1
1:A:39:LYS:HZ2	1:A:88:CYS:HA	0.43	1.73	25	1
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:CG	0.43	2.67	29	1
1:A:44:TYR:HB2	1:A:67:LEU:HD13	0.43	1.88	5	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:101:GLU:OE2	0.43	2.71	19	1
1:A:101:GLU:HG3	1:A:102:TYR:N	0.43	2.28	20	1
1:A:122:GLY:O	1:A:123:GLY:C	0.43	2.57	22	2
1:A:11:PRO:O	1:A:13:GLU:N	0.43	2.52	25	2
1:A:59:HIS:O	1:A:65:ASN:HB3	0.43	2.14	25	4
1:A:53:VAL:CB	1:A:70:LEU:O	0.43	2.67	5	1
1:A:81:ASN:OD1	1:A:85:GLN:HG3	0.43	2.13	6	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:92:PHE:O	0.43	2.14	28	2
1:A:44:TYR:CE2	1:A:48:MET:HE3	0.43	2.49	7	2
1:A:49:GLU:O	1:A:50:LYS:C	0.43	2.56	12	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:39:LYS:HG3	0.43	2.13	23	2
1:A:82:ASN:O	1:A:83:TYR:C	0.43	2.56	17	1
1:A:49:GLU:O	1:A:49:GLU:CD	0.43	2.57	15	1
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:LEU:HD12	0.43	1.88	15	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:18:LEU:HD21	0.43	2.48	21	1
1:A:83:TYR:O	1:A:85:GLN:N	0.43	2.52	26	1
1:A:39:LYS:O	1:A:40:ALA:C	0.43	2.57	25	9
1:A:124:LEU:HD12	1:A:124:LEU:N	0.43	2.27	5	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:70:LEU:HD23	0.43	2.44	6	1
1:A:55:PHE:CD2	1:A:120:LEU:HB2	0.43	2.49	6	1
1:A:72:PRO:O	1:A:73:HIS:HB3	0.43	2.14	10	1
1:A:51:TYR:CB	1:A:71:THR:CG2	0.43	2.96	19	2
1:A:57:SER:HB2	1:A:118:GLU:CB	0.43	2.44	23	1
1:A:118:GLU:OE1	1:A:118:GLU:O	0.43	2.37	27	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LYS:HB2	0.43	2.14	3	2
1:A:94:ILE:HG22	1:A:94:ILE:O	0.43	2.13	10	1
1:A:70:LEU:C	1:A:71:THR:CG2	0.43	2.86	30	3
1:A:33:ILE:HG12	1:A:95:CYS:SG	0.43	2.54	14	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:124:LEU:CD2	0.43	2.99	18	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:77:VAL:CG2	0.43	2.95	24	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:93:LEU:HD12	0.43	1.90	2	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LYS:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:10:PHE:HB3	1:A:11:PRO:HD2	0.43	1.90	19	5
1:A:26:ARG:HG3	1:A:28:LEU:CD2	0.43	2.44	9	1
1:A:111:ASP:N	1:A:111:ASP:OD1	0.43	2.48	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ILE:HD12	1:A:69:PHE:HB2	0.43	1.87	23	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:90:PHE:CE1	0.42	2.49	2	1
1:A:51:TYR:CZ	1:A:83:TYR:CD2	0.42	3.07	12	1
1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CD1	0.42	2.82	13	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HD11	0.42	1.91	25	1
1:A:36:THR:O	1:A:37:LYS:C	0.42	2.57	28	1
1:A:80:ILE:C	1:A:82:ASN:N	0.42	2.73	29	1
1:A:57:SER:OG	1:A:118:GLU:OE1	0.42	2.37	1	1
1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CD1	0.42	2.86	12	2
1:A:23:PHE:O	1:A:24:SER:C	0.42	2.57	13	1
1:A:90:PHE:O	1:A:91:SER:HB3	0.42	2.14	13	1
1:A:13:GLU:OE2	1:A:112:PRO:HD2	0.42	2.13	19	1
1:A:35:THR:CB	1:A:39:LYS:HB2	0.42	2.45	23	2
1:A:44:TYR:CD1	1:A:48:MET:SD	0.42	3.12	23	1
1:A:92:PHE:HE2	1:A:94:ILE:HD13	0.42	1.72	29	1
1:A:38:GLU:HG3	1:A:39:LYS:N	0.42	2.29	5	1
1:A:46:LYS:HB3	1:A:50:LYS:NZ	0.42	2.29	6	1
1:A:60:ASN:O	1:A:113:PHE:HA	0.42	2.14	10	1
1:A:43:LEU:HD22	1:A:43:LEU:N	0.42	2.30	14	1
1:A:32:ALA:CB	1:A:98:VAL:HG23	0.42	2.44	17	1
1:A:39:LYS:HD3	1:A:87:LEU:O	0.42	2.14	18	1
1:A:92:PHE:CD2	1:A:93:LEU:N	0.42	2.88	18	1
1:A:50:LYS:HD2	1:A:83:TYR:CD2	0.42	2.49	16	3
1:A:68:PHE:HE2	1:A:108:LEU:HD12	0.42	1.66	4	1
1:A:120:LEU:HD22	1:A:121:PRO:HD2	0.42	1.92	4	1
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HG3	0.42	2.29	6	1
1:A:104:MET:O	1:A:108:LEU:HG	0.42	2.14	26	7
1:A:73:HIS:CD2	1:A:75:HIS:NE2	0.42	2.87	12	1
1:A:19:SER:O	1:A:20:HIS:C	0.42	2.56	13	2
1:A:48:MET:HE2	1:A:56:ILE:CG2	0.42	2.44	15	1
1:A:38:GLU:OE2	1:A:91:SER:OG	0.42	2.35	19	1
1:A:120:LEU:O	1:A:120:LEU:HG	0.42	2.15	21	1
1:A:107:ALA:O	1:A:113:PHE:CD2	0.42	2.73	23	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:91:SER:HB2	0.42	2.45	26	1
1:A:47:ILE:HA	1:A:50:LYS:CG	0.42	2.45	25	2
1:A:13:GLU:OE2	1:A:112:PRO:CD	0.42	2.67	17	1
1:A:35:THR:HB	1:A:39:LYS:HD3	0.42	1.91	28	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:101:GLU:CD	0.42	2.98	4	5
1:A:34:TYR:O	1:A:94:ILE:HB	0.42	2.15	20	3
1:A:94:ILE:HG23	1:A:96:LYS:NZ	0.42	2.29	6	1
1:A:35:THR:CB	1:A:39:LYS:HB3	0.42	2.44	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:THR:HG23	1:A:92:PHE:CD2	0.42	2.50	20	1
1:A:33:ILE:O	1:A:33:ILE:CG2	0.42	2.66	26	1
1:A:14:LEU:HA	1:A:17:PHE:CE2	0.42	2.49	28	1
1:A:20:HIS:O	1:A:21:ALA:C	0.42	2.57	1	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.42	2.13	9	1
1:A:90:PHE:C	1:A:91:SER:OG	0.42	2.57	12	1
1:A:105:TYR:O	1:A:106:SER:C	0.42	2.57	17	2
1:A:98:VAL:CG1	1:A:101:GLU:OE1	0.42	2.67	18	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:112:PRO:HA	0.42	2.13	25	1
1:A:86:LYS:O	1:A:86:LYS:CG	0.42	2.68	6	2
1:A:55:PHE:CE2	1:A:120:LEU:HB2	0.42	2.49	6	1
1:A:95:CYS:SG	1:A:96:LYS:N	0.42	2.93	17	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:95:CYS:N	0.42	2.29	21	1
1:A:67:LEU:C	1:A:67:LEU:HD12	0.42	2.35	22	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:91:SER:CB	0.42	2.44	27	1
1:A:6:ASP:C	1:A:6:ASP:OD1	0.42	2.57	29	1
1:A:59:HIS:CD2	1:A:59:HIS:N	0.42	2.87	8	2
1:A:39:LYS:CD	1:A:90:PHE:CE2	0.42	3.03	14	1
1:A:19:SER:O	1:A:20:HIS:HB2	0.42	2.14	18	1
1:A:120:LEU:CD1	1:A:124:LEU:CD1	0.42	2.98	18	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:38:GLU:HG2	0.42	2.14	19	1
1:A:28:LEU:HB3	1:A:77:VAL:CG2	0.42	2.45	29	2
1:A:39:LYS:NZ	1:A:91:SER:O	0.42	2.52	21	1
1:A:13:GLU:HB2	1:A:62:TYR:OH	0.42	2.14	29	1
1:A:103:LEU:O	1:A:106:SER:HB2	0.42	2.15	29	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:LEU:HD22	0.42	1.90	3	1
1:A:47:ILE:N	1:A:83:TYR:OH	0.42	2.53	12	1
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:C	0.42	2.57	12	1
1:A:37:LYS:HB2	1:A:65:ASN:OD1	0.42	2.15	22	1
1:A:80:ILE:O	1:A:83:TYR:HB3	0.42	2.15	27	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:39:LYS:CA	0.41	2.45	3	1
1:A:59:HIS:NE2	1:A:105:TYR:CE2	0.41	2.88	4	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:48:MET:CE	0.41	3.03	9	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:LEU:CD2	0.41	2.45	13	2
1:A:42:LEU:HG	1:A:43:LEU:N	0.41	2.29	19	2
1:A:117:GLU:O	1:A:118:GLU:CB	0.41	2.68	22	1
1:A:53:VAL:HG23	1:A:54:THR:N	0.41	2.30	24	1
1:A:51:TYR:O	1:A:72:PRO:HG3	0.41	2.15	25	1
1:A:7:PRO:CG	1:A:63:ASN:HB2	0.41	2.45	30	1
1:A:59:HIS:O	1:A:65:ASN:HA	0.41	2.15	2	4
1:A:57:SER:O	1:A:67:LEU:HA	0.41	2.15	23	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:SER:HA	1:A:15:LEU:CG	0.41	2.45	10	1
1:A:51:TYR:CZ	1:A:80:ILE:CD1	0.41	3.04	17	1
1:A:28:LEU:HB2	1:A:77:VAL:HG23	0.41	1.92	24	1
1:A:95:CYS:O	1:A:96:LYS:HG3	0.41	2.15	25	1
1:A:35:THR:CG2	1:A:93:LEU:HD22	0.41	2.45	27	1
1:A:101:GLU:HB2	1:A:124:LEU:CD1	0.41	2.45	1	1
1:A:47:ILE:CG2	1:A:53:VAL:HG11	0.41	2.45	5	1
1:A:90:PHE:O	1:A:90:PHE:CD1	0.41	2.74	12	2
1:A:7:PRO:HB3	1:A:64:HIS:CD2	0.41	2.50	7	1
1:A:36:THR:HA	1:A:64:HIS:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:11:PRO:O	1:A:12:SER:C	0.41	2.58	9	2
1:A:8:LYS:O	1:A:9:ASP:HB2	0.41	2.16	16	3
1:A:58:ARG:CG	1:A:116:ILE:HD12	0.41	2.45	18	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:39:LYS:HD2	0.41	2.15	25	1
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:HG3	0.41	2.15	29	1
1:A:44:TYR:CG	1:A:56:ILE:CD1	0.41	3.04	1	1
1:A:79:ALA:HA	1:A:82:ASN:ND2	0.41	2.30	3	1
1:A:43:LEU:O	1:A:44:TYR:C	0.41	2.57	5	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:HA	0.41	1.76	11	1
1:A:56:ILE:O	1:A:118:GLU:HA	0.41	2.15	11	1
1:A:35:THR:HB	1:A:39:LYS:HB3	0.41	1.93	12	1
1:A:40:ALA:HB1	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.44	19	1
1:A:46:LYS:HG2	1:A:83:TYR:CZ	0.41	2.47	22	1
1:A:10:PHE:CE2	1:A:104:MET:HE1	0.41	2.51	24	1
1:A:17:PHE:CB	1:A:104:MET:HB2	0.41	2.45	28	1
1:A:59:HIS:CA	1:A:116:ILE:HD13	0.41	2.45	2	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:93:LEU:CD1	0.41	2.46	6	1
1:A:39:LYS:HB3	1:A:39:LYS:NZ	0.41	2.30	12	1
1:A:98:VAL:HB	1:A:101:GLU:OE1	0.41	2.16	18	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:56:ILE:CG2	0.41	2.96	23	1
1:A:85:GLN:HA	1:A:93:LEU:CD2	0.41	2.44	30	2
1:A:70:LEU:HD12	1:A:101:GLU:OE2	0.41	2.16	26	1
1:A:55:PHE:O	1:A:69:PHE:HA	0.41	2.16	1	3
1:A:50:LYS:CG	1:A:51:TYR:CD1	0.41	3.04	4	1
1:A:25:ASN:O	1:A:26:ARG:O	0.41	2.38	5	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CD2	0.41	2.50	8	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:105:TYR:CA	0.41	3.03	9	3
1:A:37:LYS:O	1:A:38:GLU:C	0.41	2.57	17	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:LEU:HB3	0.41	2.55	19	3
1:A:31:PHE:CE1	1:A:75:HIS:CD2	0.41	3.08	25	1
1:A:61:SER:C	1:A:62:TYR:CD2	0.41	2.93	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:VAL:CG2	1:A:56:ILE:HB	0.41	2.45	4	1
1:A:85:GLN:HE22	1:A:93:LEU:HD23	0.41	1.75	8	1
1:A:75:HIS:O	1:A:76:ARG:C	0.41	2.57	29	2
1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:NZ	0.41	2.30	29	1
1:A:59:HIS:C	1:A:116:ILE:HD13	0.41	2.35	2	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:67:LEU:CD2	0.41	2.46	3	1
1:A:70:LEU:HD22	1:A:124:LEU:HD21	0.41	1.92	3	1
1:A:55:PHE:CD2	1:A:123:GLY:O	0.41	2.73	6	1
1:A:17:PHE:CD1	1:A:17:PHE:O	0.41	2.74	23	2
1:A:71:THR:HB	1:A:73:HIS:NE2	0.41	2.30	12	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:18:LEU:HA	0.41	1.70	13	1
1:A:39:LYS:HB2	1:A:39:LYS:HZ3	0.41	1.74	15	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:104:MET:CE	0.41	2.46	16	1
1:A:76:ARG:C	1:A:78:SER:N	0.41	2.74	30	2
1:A:40:ALA:HB1	1:A:58:ARG:CG	0.41	2.45	25	1
1:A:117:GLU:C	1:A:118:GLU:HG2	0.41	2.35	28	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:PHE:CD2	0.41	2.73	29	1
1:A:58:ARG:O	1:A:116:ILE:HG13	0.41	2.16	1	1
1:A:33:ILE:O	1:A:67:LEU:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:14:LEU:HD13	1:A:113:PHE:CD2	0.41	2.51	7	1
1:A:101:GLU:OE1	1:A:101:GLU:C	0.41	2.59	8	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:91:SER:HB3	0.41	2.31	10	1
1:A:118:GLU:CD	1:A:120:LEU:O	0.41	2.58	11	1
1:A:45:LYS:HD2	1:A:48:MET:CE	0.41	2.46	12	1
1:A:7:PRO:HB3	1:A:34:TYR:OH	0.41	2.16	14	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:98:VAL:HG21	0.41	2.51	16	1
1:A:14:LEU:O	1:A:18:LEU:HD12	0.41	2.16	17	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:96:LYS:NZ	0.41	2.84	20	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:113:PHE:CZ	0.41	2.51	22	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:76:ARG:N	0.41	2.30	22	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:80:ILE:CG1	0.41	3.03	22	1
1:A:25:ASN:C	1:A:26:ARG:HG3	0.41	2.36	24	1
1:A:14:LEU:O	1:A:17:PHE:CD1	0.41	2.74	27	1
1:A:74:ARG:HG3	1:A:75:HIS:N	0.41	2.31	5	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:108:LEU:HA	0.41	1.75	19	6
1:A:102:TYR:CA	1:A:124:LEU:HD23	0.41	2.46	7	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:56:ILE:HG22	0.41	1.91	9	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:92:PHE:HE2	0.41	2.34	10	1
1:A:47:ILE:HG23	1:A:51:TYR:CD1	0.41	2.51	13	1
1:A:22:VAL:O	1:A:78:SER:HB3	0.41	2.16	17	1
1:A:9:ASP:HA	1:A:94:ILE:HG12	0.41	1.93	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:SER:HB3	1:A:118:GLU:HB3	0.41	1.92	21	1
1:A:61:SER:HB2	1:A:62:TYR:CD2	0.41	2.51	27	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:103:LEU:HB3	0.41	2.51	28	1
1:A:14:LEU:O	1:A:18:LEU:HD23	0.41	2.16	29	1
1:A:39:LYS:HE3	1:A:91:SER:HB3	0.41	1.93	30	1
1:A:61:SER:CB	1:A:66:ILE:HD13	0.41	2.45	30	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:LEU:C	0.40	2.58	1	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:87:LEU:CB	0.40	2.46	12	1
1:A:48:MET:O	1:A:48:MET:CG	0.40	2.69	17	1
1:A:31:PHE:CG	1:A:77:VAL:HG22	0.40	2.47	22	1
1:A:87:LEU:HB3	1:A:90:PHE:CZ	0.40	2.52	23	1
1:A:88:CYS:O	1:A:88:CYS:SG	0.40	2.78	24	1
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:H	0.40	2.33	26	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:65:ASN:N	0.40	2.53	28	1
1:A:7:PRO:HG3	1:A:64:HIS:CE1	0.40	2.51	29	1
1:A:39:LYS:HG3	1:A:90:PHE:CE2	0.40	2.51	30	1
1:A:39:LYS:CE	1:A:90:PHE:CD1	0.40	3.04	3	1
1:A:50:LYS:HE3	1:A:83:TYR:CE1	0.40	2.51	3	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HB2	0.40	2.51	9	1
1:A:11:PRO:O	1:A:15:LEU:HG	0.40	2.17	13	2
1:A:49:GLU:O	1:A:49:GLU:OE1	0.40	2.39	15	1
1:A:117:GLU:O	1:A:118:GLU:HB3	0.40	2.16	22	1
1:A:104:MET:SD	1:A:108:LEU:HD11	0.40	2.56	27	1
1:A:54:THR:CB	1:A:70:LEU:HB3	0.40	2.45	1	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:HD12	0.40	2.37	3	1
1:A:101:GLU:HA	1:A:101:GLU:OE1	0.40	2.16	4	1
1:A:111:ASP:HA	1:A:113:PHE:N	0.40	2.31	9	2
1:A:43:LEU:CD2	1:A:43:LEU:H	0.40	2.29	14	1
1:A:120:LEU:HB3	1:A:123:GLY:O	0.40	2.17	17	2
1:A:44:TYR:CZ	1:A:56:ILE:CG1	0.40	3.03	19	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:SER:HB2	0.40	2.16	20	1
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:CG2	0.40	2.69	20	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:101:GLU:CD	0.40	2.81	24	1
1:A:86:LYS:O	1:A:86:LYS:HD2	0.40	2.17	24	1
1:A:55:PHE:CB	1:A:120:LEU:CD1	0.40	3.00	26	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:LEU:HB2	0.40	2.57	27	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:96:LYS:HG3	0.40	2.50	29	1
1:A:33:ILE:HD12	1:A:84:ALA:CB	0.40	2.47	30	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:LEU:CB	0.40	3.09	3	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:C	0.40	2.59	7	1
1:A:9:ASP:N	1:A:9:ASP:OD1	0.40	2.55	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD11	1:A:104:MET:HE1	0.40	1.93	16	1
1:A:35:THR:CG2	1:A:93:LEU:HG	0.40	2.47	21	1
1:A:57:SER:HB3	1:A:118:GLU:CB	0.40	2.47	21	1
1:A:7:PRO:CD	1:A:63:ASN:HB2	0.40	2.46	30	1
1:A:115:VAL:C	1:A:116:ILE:HD12	0.40	2.37	2	1
1:A:19:SER:OG	1:A:97:GLY:C	0.40	2.60	3	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:98:VAL:HB	0.40	2.57	5	1
1:A:92:PHE:HD2	1:A:94:ILE:HD12	0.40	1.72	5	1
1:A:81:ASN:CG	1:A:85:GLN:HG3	0.40	2.37	6	1
1:A:118:GLU:C	1:A:118:GLU:CD	0.40	2.80	6	1
1:A:8:LYS:CG	1:A:9:ASP:OD1	0.40	2.70	7	1
1:A:67:LEU:O	1:A:67:LEU:HG	0.40	2.16	12	1
1:A:120:LEU:HD23	1:A:120:LEU:HA	0.40	1.76	12	1
1:A:52:SER:O	1:A:54:THR:OG1	0.40	2.36	13	1
1:A:57:SER:HB3	1:A:118:GLU:HG2	0.40	1.94	15	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:39:LYS:CG	0.40	2.70	16	1
1:A:39:LYS:HG3	1:A:90:PHE:CD1	0.40	2.51	18	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HD2	0.40	1.94	22	1
1:A:73:HIS:HD1	1:A:75:HIS:CE1	0.40	2.34	26	1
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:HD23	0.40	2.30	27	1
1:A:46:LYS:C	1:A:48:MET:N	0.40	2.75	28	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	119/134 (89%)	90±4 (75±3%)	24±4 (20±3%)	6±2 (5±2%)	4 26
All	All	3570/4020 (89%)	2688 (75%)	710 (20%)	172 (5%)	4 26

All 30 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	72	PRO	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	HIS	19
1	A	53	VAL	17
1	A	55	PHE	16
1	A	91	SER	11
1	A	48	MET	10
1	A	9	ASP	9
1	A	102	TYR	8
1	A	74	ARG	6
1	A	24	SER	6
1	A	101	GLU	5
1	A	90	PHE	5
1	A	124	LEU	4
1	A	21	ALA	4
1	A	26	ARG	3
1	A	47	ILE	3
1	A	89	THR	3
1	A	104	MET	2
1	A	36	THR	2
1	A	121	PRO	2
1	A	97	GLY	2
1	A	22	VAL	1
1	A	16	SER	1
1	A	76	ARG	1
1	A	50	LYS	1
1	A	92	PHE	1
1	A	103	LEU	1
1	A	118	GLU	1
1	A	77	VAL	1
1	A	20	HIS	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	108/122 (89%)	78±3 (72±3%)	30±3 (28±3%)	2 20
All	All	3240/3660 (89%)	2345 (72%)	895 (28%)	2 20

All 81 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the

frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	PHE	30
1	A	75	HIS	27
1	A	103	LEU	23
1	A	8	LYS	22
1	A	110	ARG	21
1	A	68	PHE	20
1	A	90	PHE	20
1	A	39	LYS	20
1	A	52	SER	19
1	A	91	SER	19
1	A	118	GLU	19
1	A	35	THR	18
1	A	96	LYS	18
1	A	28	LEU	18
1	A	104	MET	18
1	A	86	LYS	17
1	A	50	LYS	17
1	A	93	LEU	16
1	A	114	SER	16
1	A	100	LYS	15
1	A	45	LYS	15
1	A	9	ASP	14
1	A	16	SER	14
1	A	61	SER	14
1	A	78	SER	14
1	A	83	TYR	14
1	A	124	LEU	14
1	A	49	GLU	13
1	A	31	PHE	13
1	A	38	GLU	13
1	A	60	ASN	13
1	A	26	ARG	12
1	A	70	LEU	12
1	A	117	GLU	12
1	A	106	SER	12
1	A	48	MET	12
1	A	42	LEU	11
1	A	54	THR	11
1	A	67	LEU	11
1	A	85	GLN	11
1	A	12	SER	11
1	A	37	LYS	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	74	ARG	10
1	A	89	THR	10
1	A	119	SER	10
1	A	76	ARG	10
1	A	82	ASN	10
1	A	24	SER	9
1	A	111	ASP	9
1	A	101	GLU	9
1	A	6	ASP	8
1	A	19	SER	8
1	A	46	LYS	8
1	A	36	THR	8
1	A	13	GLU	7
1	A	14	LEU	7
1	A	47	ILE	7
1	A	58	ARG	7
1	A	18	LEU	7
1	A	27	THR	7
1	A	25	ASN	6
1	A	62	TYR	5
1	A	87	LEU	5
1	A	56	ILE	5
1	A	99	ASN	5
1	A	73	HIS	5
1	A	44	TYR	5
1	A	80	ILE	5
1	A	81	ASN	5
1	A	63	ASN	4
1	A	120	LEU	4
1	A	57	SER	4
1	A	30	CYS	4
1	A	92	PHE	2
1	A	88	CYS	2
1	A	53	VAL	2
1	A	65	ASN	2
1	A	23	PHE	2
1	A	22	VAL	1
1	A	34	TYR	1
1	A	98	VAL	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided