Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 19, 2022 – 11:46 PM EST

PDB ID	:	1TVC
Title	:	FAD and NADH binding domain of methane monooxygenase reductase from Methylococcus capsulatus (Bath)
Authors	:	Chatwood, L.L.; Mueller, J.; Gross, J.D.; Wagner, G.; Lippard, S.J.
Deposited on	:	2004-06-29

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:

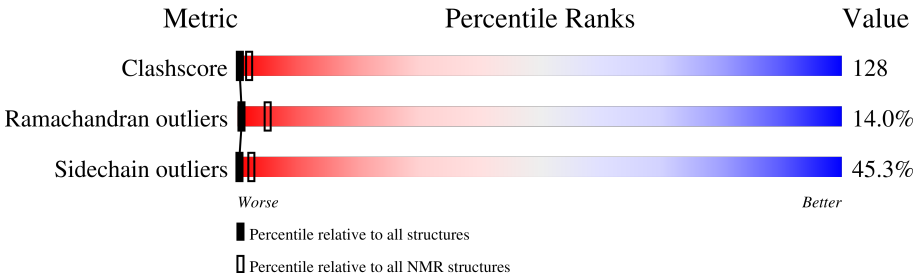
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
buster-report	:	1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

1 Overall quality at a glance

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	250	11% 45% 37% • 6%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:10-A:34, A:43-A:251 (234)	0.83	4

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 1 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

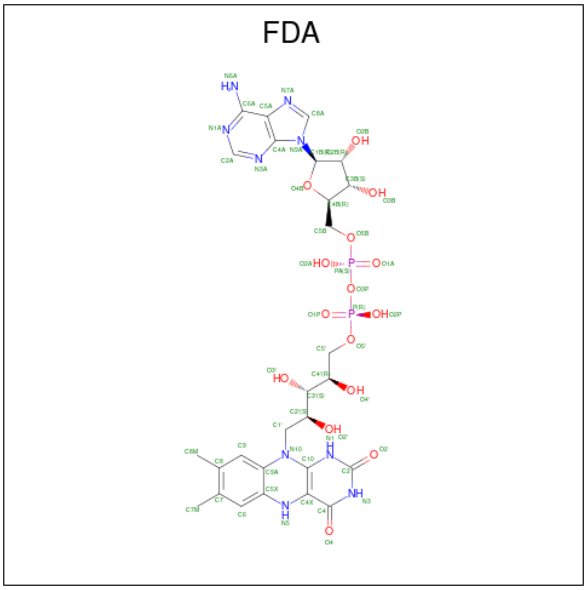
3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3925 atoms, of which 1928 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	250	3839	1229	1895	335	369	11	0

- Molecule 2 is DIHYDROFLAVINE-ADENINE DINUCLEOTIDE (three-letter code: FDA) (formula: $C_{27}H_{35}N_9O_{15}P_2$).



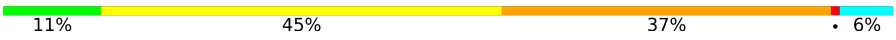
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
2	A	1	86	27	33	9	15	2

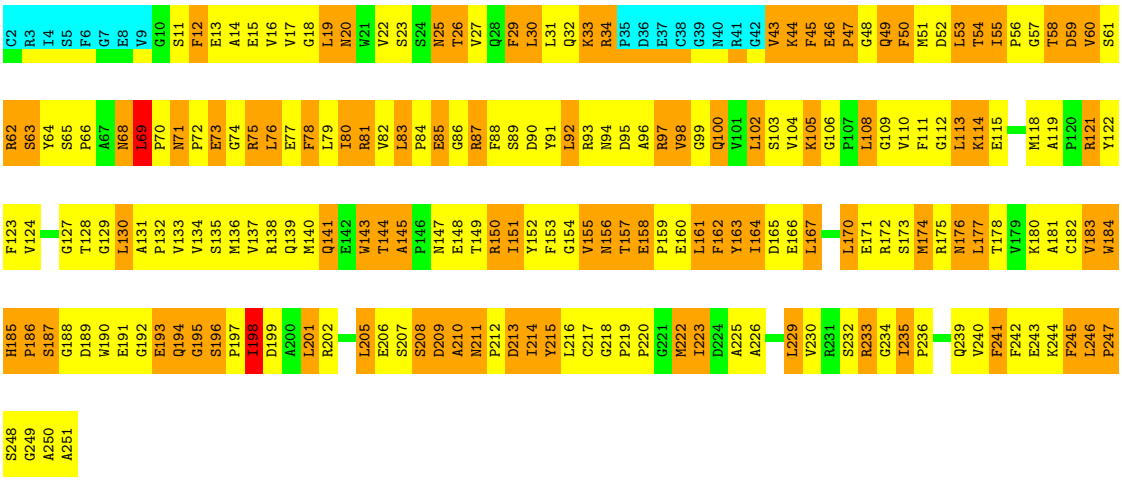
4 Residue-property plots (i)

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: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

Chain A: 



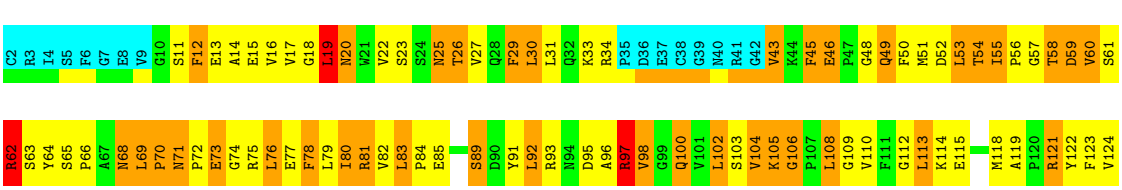
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

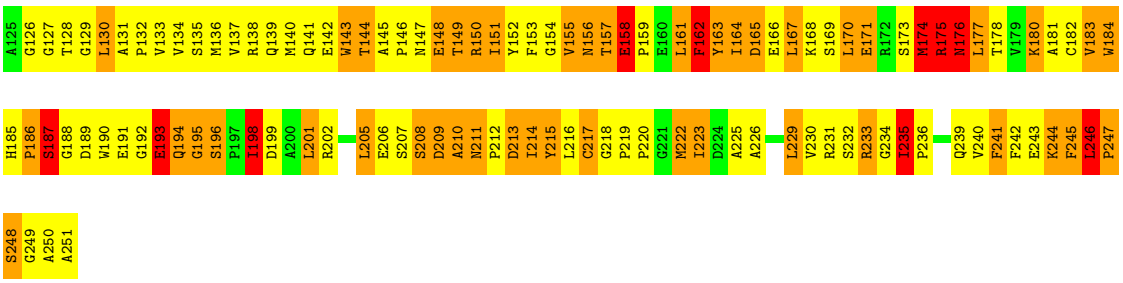
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

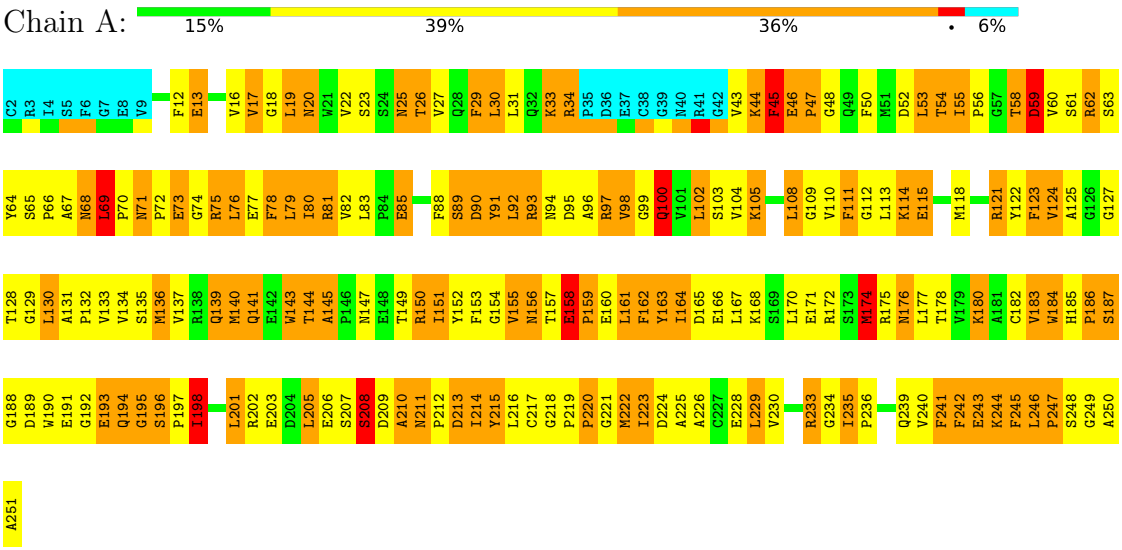
Chain A:





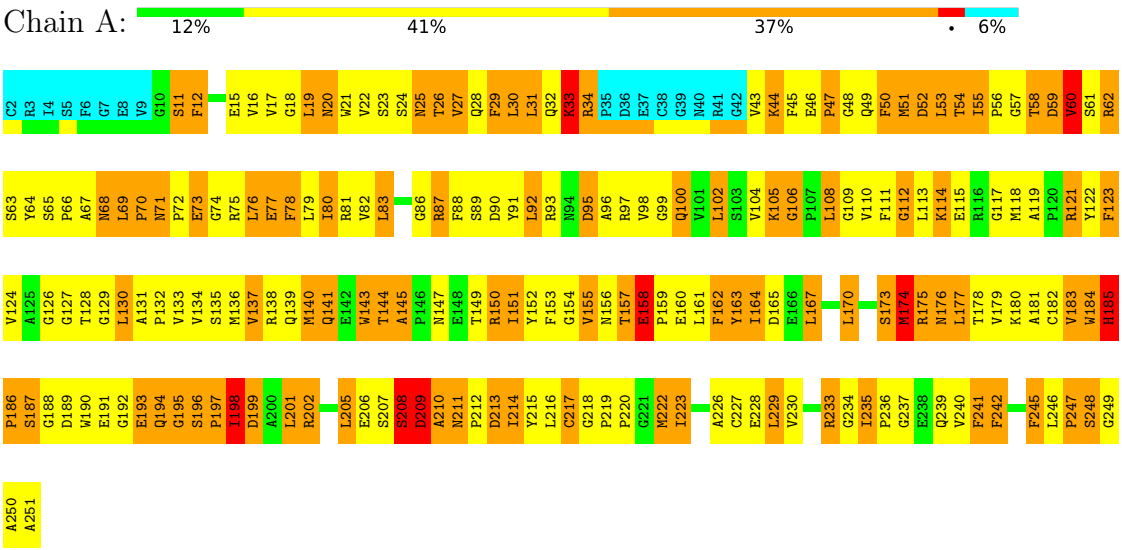
4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C



4.2.5 Score per residue for model 5

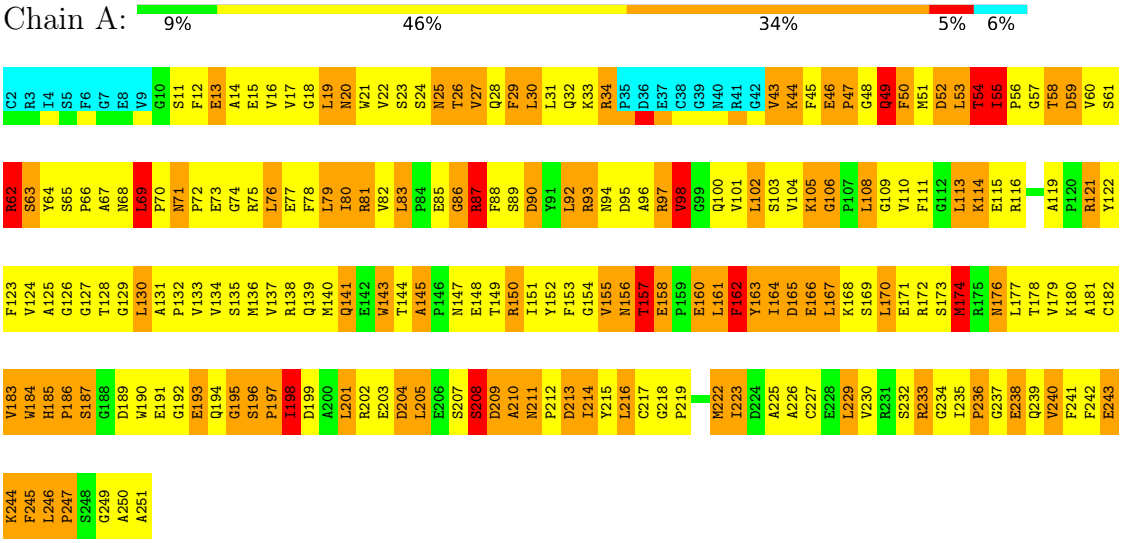
• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

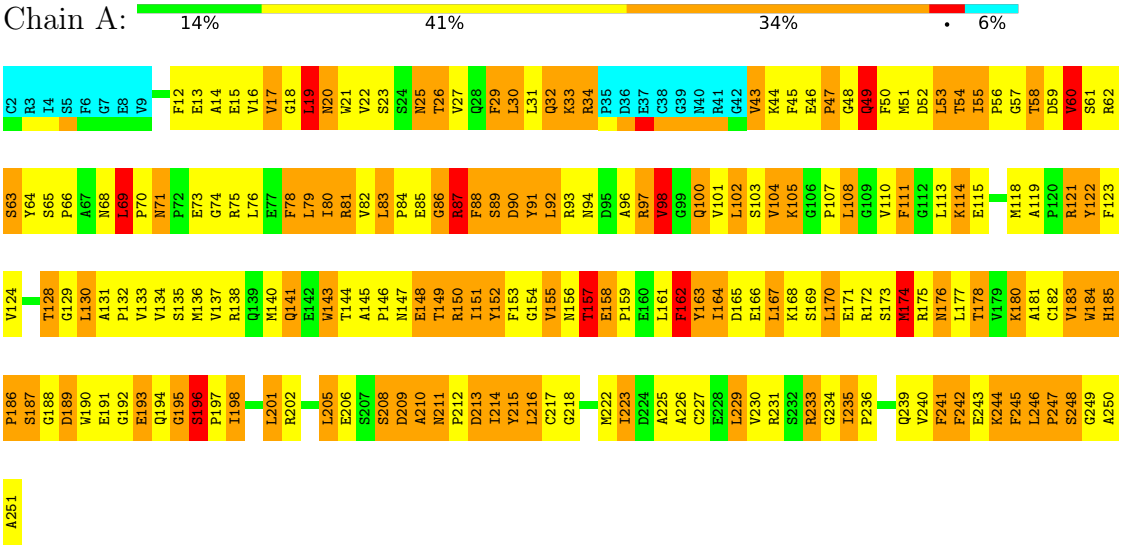
Chain A:



4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

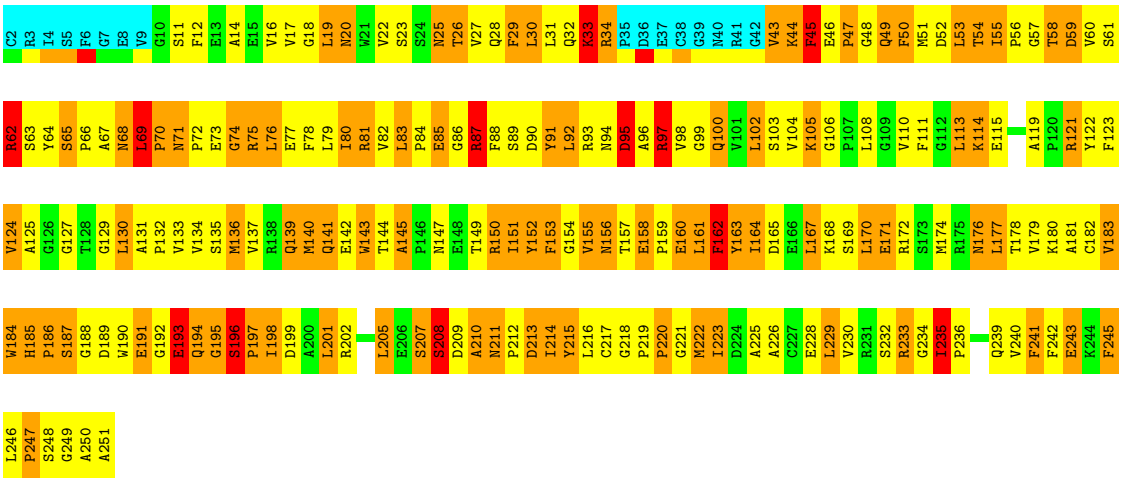
Chain A:



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

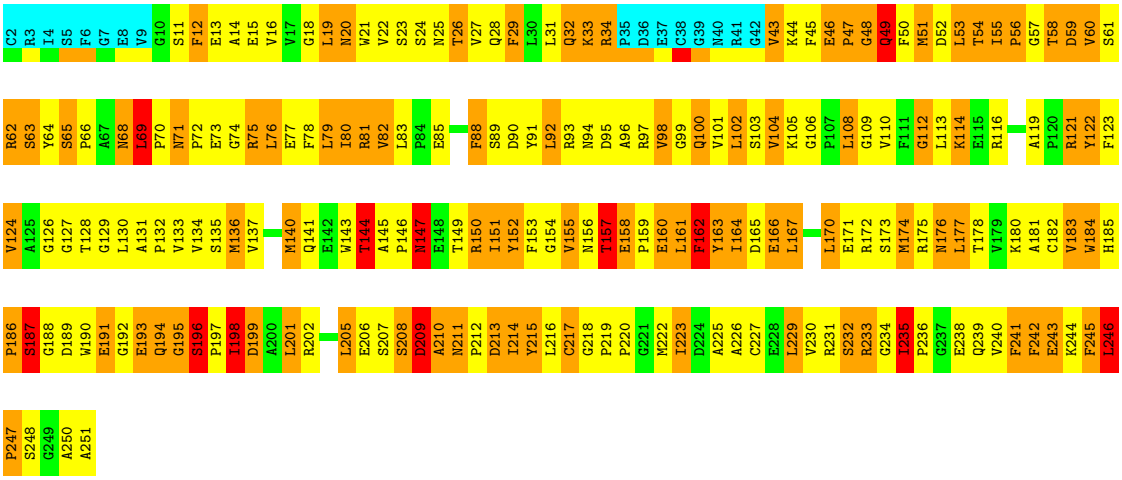
Chain A:



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

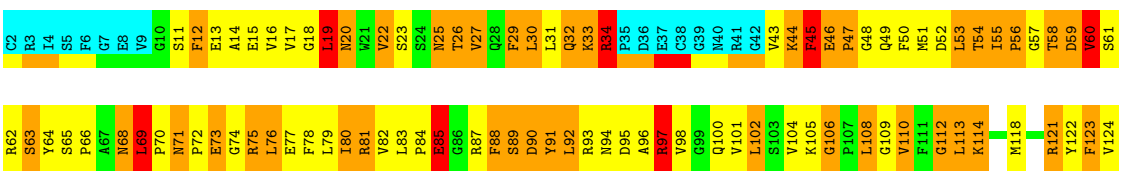
Chain A: 12% 43% 34% 5% 6%

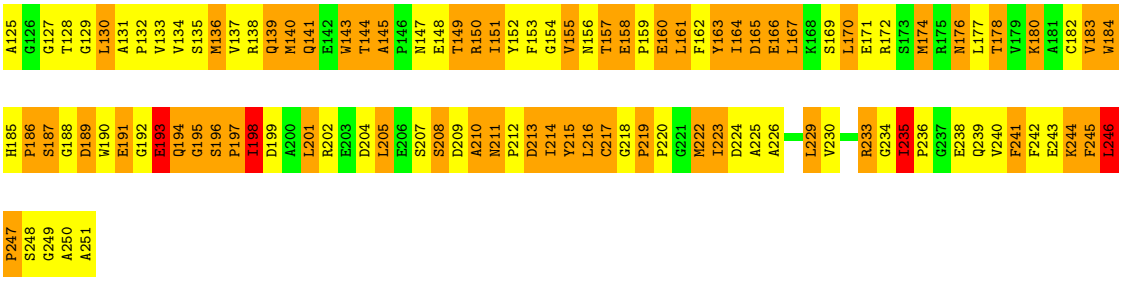


4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT C

Chain A: 13% 38% 38% • 6%




A125 G126 G127 T128 G129 L130 A131 P132 V133 V134 S135 M136 V137 R138 Q139 M140 Q141 E142 W143 T144 A145 P146 N147 E148 T149 R150 I151 Y152 F153 G154 V155 N156 T157 E158 P159 E160 L161 F162 Y163 I164 D165 E166 L167 K168 S169 L170 E171 R172 S173 M174 R175 N176 L177 T178 V179 K180 A181 C182 V183 W184
H185 P186 S187 G188 D189 W190 E191 G192 E193 Q194 G195 S196 P197 I198 D199 A200 L201 R202 E203 D204 L205 E206 S207 S208 D209 A210 N211 P212 D213 I214 Y215 L216 C217 G218 P219 P220 G221 M222 I223 D224 A225 A226 L229 V230 R233 G234 I235 P236 G237 E238 Q239 V240 F241 F242 E243 K244 F245 L246
P247 S248 G249 A250 A251

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 50 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *target function.*

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
X-PLOR	refinement	3.84

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.53±3.72	0±1/1870 (0.0± 0.0%)	0.56±0.44	1±2/2537 (0.0± 0.1%)
All	All	4.02	3/18700 (0.0%)	0.71	6/25370 (0.0%)

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	0.3±0.9
All	All	0	3

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	55	ILE	CA-CB	368.85	10.03	1.54	6	1
1	A	55	ILE	N-CA	311.24	7.68	1.46	6	1
1	A	55	ILE	CA-C	260.64	8.30	1.52	6	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	55	ILE	CB-CA-C	-49.91	11.77	111.60	6	1
1	A	55	ILE	N-CA-CB	-45.85	5.34	110.80	6	1
1	A	54	THR	C-N-CA	-44.22	11.14	121.70	6	1
1	A	55	ILE	N-CA-C	-34.79	17.06	111.00	6	1
1	A	55	ILE	CA-C-O	-24.43	68.81	120.10	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	55	ILE	CA-CB-CG2	6.57	124.04	110.90	6	1

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	54	THR	Peptide	1
1	A	55	ILE	Peptide,Mainchain	1

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	1825	1785	1784	472±32
2	A	53	33	33	19±5
All	All	18780	18180	18170	4731

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 128.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:VAL:HG21	1:A:161:LEU:HD13	1.12	1.17	10	8
1:A:53:LEU:HD12	1:A:102:LEU:HD11	1.12	1.22	1	7
1:A:31:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD11	1.10	1.20	7	2
1:A:79:LEU:HD12	1:A:131:ALA:HB2	1.06	1.28	2	5
1:A:155:VAL:HG21	1:A:161:LEU:HD22	1.06	1.28	3	4
1:A:123:PHE:CE2	1:A:137:VAL:HG21	1.04	1.87	5	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:133:VAL:HG13	1.03	1.87	3	6
1:A:55:ILE:CA	1:A:103:SER:O	1.01	2.09	6	1
1:A:210:ALA:HB1	1:A:214:ILE:HD11	1.01	1.27	6	8
1:A:123:PHE:CZ	1:A:133:VAL:HG22	1.00	1.91	10	6
1:A:198:ILE:HD12	1:A:201:LEU:HD21	1.00	1.28	9	2
1:A:230:VAL:HG13	1:A:235:ILE:HG23	0.99	1.28	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD23	0.99	1.31	8	4
1:A:31:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HD21	0.99	1.29	4	4
1:A:43:VAL:CG1	1:A:76:LEU:HD23	0.98	1.89	10	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD11	0.97	1.88	5	6
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:N	0.97	1.73	5	2
1:A:133:VAL:O	1:A:137:VAL:HG23	0.96	1.60	7	7
1:A:16:VAL:HG22	1:A:100:GLN:O	0.95	1.60	10	6
1:A:43:VAL:HG13	1:A:76:LEU:HD23	0.95	1.36	10	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:108:LEU:HD21	0.95	1.96	1	3
1:A:164:ILE:HD13	1:A:165:ASP:N	0.94	1.77	7	9
1:A:205:LEU:CD2	1:A:235:ILE:HD11	0.93	1.92	4	3
1:A:191:GLU:C	1:A:251:ALA:HB3	0.93	1.82	7	2
1:A:124:VAL:HG13	1:A:152:TYR:CB	0.93	1.93	2	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:131:ALA:HB2	0.93	1.36	9	3
1:A:79:LEU:HD22	1:A:128:THR:CG2	0.93	1.93	1	5
1:A:198:ILE:HG13	1:A:251:ALA:HB1	0.93	1.41	1	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:80:ILE:HG22	0.93	1.99	4	3
1:A:56:PRO:HD2	1:A:58:THR:HG23	0.93	1.37	1	5
1:A:50:PHE:CD2	2:A:252:FDA:HM72	0.92	1.99	9	8
1:A:174:MET:O	1:A:177:LEU:HD12	0.92	1.64	1	1
1:A:205:LEU:HD23	1:A:235:ILE:HD11	0.92	1.39	4	1
1:A:55:ILE:O	1:A:102:LEU:HD23	0.92	1.63	10	1
1:A:141:GLN:CG	1:A:170:LEU:HD21	0.91	1.94	10	1
1:A:226:ALA:O	1:A:230:VAL:HG23	0.91	1.65	6	9
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HD11	0.91	1.65	5	2
1:A:26:THR:CG2	1:A:128:THR:HG21	0.91	1.96	9	2
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:HD23	0.91	1.96	1	4
1:A:55:ILE:H	1:A:55:ILE:CB	0.91	1.79	6	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:108:LEU:HD21	0.91	2.01	2	3
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:HD22	0.91	1.65	3	2
1:A:54:THR:HG23	1:A:60:VAL:C	0.90	1.87	5	4
1:A:174:MET:HB2	1:A:177:LEU:HD23	0.89	1.44	2	2
1:A:153:PHE:CE2	1:A:161:LEU:HD11	0.89	2.03	5	1
1:A:216:LEU:HD12	1:A:242:PHE:CD1	0.89	2.03	1	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:HD21	0.88	1.98	9	2
1:A:92:LEU:O	1:A:96:ALA:HB3	0.88	1.69	9	9
1:A:126:GLY:O	1:A:246:LEU:HD21	0.88	1.68	1	2
1:A:155:VAL:CG2	1:A:161:LEU:HD13	0.88	1.99	4	8
1:A:29:PHE:CE1	1:A:31:LEU:HD21	0.88	2.04	5	4
1:A:124:VAL:HG12	1:A:216:LEU:HD23	0.88	1.42	1	4
1:A:55:ILE:CG2	1:A:96:ALA:HB2	0.87	2.00	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:246:LEU:HD21	2:A:252:FDA:H51A	0.87	1.45	10	1
1:A:110:VAL:HG11	2:A:252:FDA:C7M	0.87	2.00	10	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:133:VAL:HG11	0.87	2.04	6	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:92:LEU:CD2	0.87	2.00	5	1
1:A:55:ILE:HG23	1:A:56:PRO:HD3	0.86	1.46	9	7
1:A:69:LEU:HD13	1:A:135:SER:CB	0.86	2.00	4	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:14:ALA:HB2	0.86	2.04	3	4
1:A:47:PRO:O	1:A:110:VAL:HG23	0.86	1.70	10	1
1:A:138:ARG:CG	1:A:170:LEU:HD21	0.86	2.01	3	1
1:A:43:VAL:HG22	1:A:73:GLU:CA	0.86	2.00	2	1
1:A:110:VAL:HG21	2:A:252:FDA:HM73	0.86	1.47	5	1
1:A:155:VAL:CG2	1:A:161:LEU:HD22	0.85	2.01	5	10
1:A:50:PHE:CZ	2:A:252:FDA:HM82	0.85	2.06	1	3
1:A:56:PRO:CG	1:A:58:THR:HG23	0.85	1.99	2	8
1:A:69:LEU:HD13	1:A:135:SER:HB3	0.85	1.47	4	1
1:A:205:LEU:O	1:A:235:ILE:HG21	0.85	1.72	4	3
1:A:53:LEU:HD12	1:A:104:VAL:HG12	0.85	1.46	7	2
1:A:43:VAL:HG23	1:A:71:ASN:O	0.85	1.72	2	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:92:LEU:HD22	0.84	1.45	5	2
1:A:198:ILE:CG1	1:A:251:ALA:HB1	0.84	2.01	1	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:O	0.84	1.73	8	2
1:A:56:PRO:CD	1:A:58:THR:HG23	0.84	2.02	4	10
1:A:50:PHE:CG	2:A:252:FDA:HM72	0.83	2.08	3	4
1:A:154:GLY:O	1:A:155:VAL:HG13	0.83	1.72	4	10
1:A:47:PRO:HD2	1:A:110:VAL:HG21	0.83	1.51	6	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:CG	0.83	1.94	9	1
1:A:43:VAL:HG22	1:A:68:ASN:HB3	0.83	1.50	10	1
1:A:26:THR:HG21	1:A:128:THR:HG21	0.83	1.49	9	1
1:A:151:ILE:HD12	1:A:152:TYR:N	0.83	1.88	10	4
1:A:14:ALA:O	1:A:102:LEU:HD12	0.83	1.72	10	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CE2	0.83	2.08	9	2
1:A:66:PRO:HB2	1:A:76:LEU:HD13	0.83	1.49	7	3
1:A:198:ILE:HG13	1:A:201:LEU:HD23	0.83	1.48	10	1
1:A:222:MET:O	1:A:226:ALA:HB3	0.82	1.73	5	4
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:O	0.82	1.74	5	9
1:A:235:ILE:O	1:A:235:ILE:HD12	0.82	1.73	5	4
1:A:198:ILE:HD11	1:A:229:LEU:CD1	0.82	2.04	3	2
1:A:230:VAL:HG13	1:A:235:ILE:HD11	0.82	1.49	5	2
1:A:82:VAL:HG11	1:A:92:LEU:HD11	0.82	1.51	10	1
1:A:155:VAL:HG21	1:A:161:LEU:CD1	0.82	2.04	9	4
1:A:12:PHE:CE2	1:A:14:ALA:HB2	0.82	2.08	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:230:VAL:HG21	1:A:239:GLN:HG2	0.82	1.51	6	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:108:LEU:HD23	0.82	1.50	3	2
1:A:123:PHE:CE2	1:A:133:VAL:HG22	0.82	2.08	10	3
1:A:214:ILE:HB	1:A:240:VAL:HG22	0.82	1.49	1	8
1:A:14:ALA:O	1:A:101:VAL:HG13	0.82	1.74	7	2
1:A:170:LEU:HB2	1:A:177:LEU:HD23	0.82	1.51	6	1
1:A:143:TRP:CE2	1:A:145:ALA:HB2	0.82	2.09	5	6
1:A:198:ILE:HD11	1:A:229:LEU:HD11	0.82	1.51	3	2
1:A:141:GLN:CD	1:A:170:LEU:HD22	0.81	1.96	4	3
2:A:252:FDA:N1	2:A:252:FDA:H3'	0.81	1.89	1	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:92:LEU:HD22	0.81	2.05	4	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:105:LYS:N	0.81	1.89	6	1
1:A:171:GLU:OE2	1:A:179:VAL:HG12	0.81	1.75	6	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:201:LEU:CD2	0.81	2.04	9	2
1:A:43:VAL:HG11	1:A:68:ASN:ND2	0.81	1.90	8	1
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:O	0.81	1.74	1	1
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:HD23	0.81	2.11	1	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:105:LYS:HG3	0.81	1.53	6	1
1:A:156:ASN:O	1:A:183:VAL:HG21	0.81	1.75	8	9
1:A:113:LEU:HD11	1:A:136:MET:HG2	0.81	1.51	4	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:80:ILE:HG23	0.80	2.11	4	3
1:A:79:LEU:HD22	1:A:128:THR:HG21	0.80	1.53	1	5
1:A:43:VAL:HG22	1:A:71:ASN:O	0.80	1.77	8	1
1:A:127:GLY:HA2	1:A:155:VAL:HG12	0.80	1.52	4	9
1:A:171:GLU:HG2	1:A:177:LEU:HD11	0.80	1.52	9	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:161:LEU:HD11	0.80	2.12	5	2
1:A:123:PHE:O	1:A:151:ILE:HD13	0.80	1.77	7	4
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:LEU:CD1	0.80	2.07	8	2
1:A:14:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HB3	0.80	1.50	2	7
1:A:230:VAL:HG13	1:A:235:ILE:CG2	0.80	2.06	1	2
1:A:31:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD21	0.80	2.05	4	5
1:A:31:LEU:HD13	1:A:102:LEU:CD2	0.80	2.06	8	4
1:A:58:THR:HG21	1:A:91:TYR:OH	0.80	1.77	5	3
1:A:123:PHE:CD2	1:A:137:VAL:HG21	0.80	2.12	5	1
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HD22	0.79	1.77	8	3
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:HD23	0.79	1.93	4	4
1:A:43:VAL:HG11	1:A:68:ASN:OD1	0.79	1.77	9	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HD22	0.79	1.53	3	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:91:TYR:HB2	0.79	1.53	9	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:27:VAL:HG21	0.78	2.07	10	5
1:A:98:VAL:HG13	1:A:100:GLN:HG3	0.78	1.53	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:HA	1:A:96:ALA:HB3	0.78	1.55	10	3
1:A:16:VAL:HG12	1:A:31:LEU:HD22	0.78	1.54	5	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:179:VAL:HG21	0.78	1.56	6	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:110:VAL:HG12	0.78	2.14	9	1
1:A:45:PHE:CB	1:A:69:LEU:HD12	0.78	2.09	3	1
1:A:192:GLY:CA	1:A:251:ALA:HB2	0.77	2.08	8	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:152:TYR:HB3	0.77	1.54	2	1
1:A:54:THR:HG21	1:A:59:ASP:N	0.77	1.93	6	6
1:A:193:GLU:OE2	1:A:198:ILE:HD11	0.77	1.79	8	1
1:A:155:VAL:HG11	1:A:161:LEU:CD2	0.77	2.10	1	2
1:A:155:VAL:HG21	1:A:161:LEU:CD2	0.77	2.09	3	3
1:A:55:ILE:CB	1:A:55:ILE:N	0.77	2.48	6	1
1:A:123:PHE:CD2	1:A:133:VAL:HG13	0.77	2.15	10	4
1:A:56:PRO:HG2	1:A:58:THR:HG23	0.77	1.55	7	6
1:A:219:PRO:CB	1:A:250:ALA:HB3	0.77	2.10	9	2
1:A:14:ALA:HB1	1:A:31:LEU:CB	0.76	2.10	1	5
1:A:55:ILE:CA	1:A:104:VAL:HA	0.76	2.09	6	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:87:ARG:HB2	0.76	1.58	8	2
1:A:79:LEU:HD23	1:A:128:THR:O	0.76	1.79	9	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:131:ALA:CB	0.76	2.09	9	1
1:A:210:ALA:CB	1:A:214:ILE:HD11	0.76	2.09	6	6
1:A:66:PRO:CB	1:A:76:LEU:HD13	0.76	2.11	1	5
1:A:174:MET:HB2	1:A:177:LEU:HD13	0.76	1.57	7	2
1:A:130:LEU:O	1:A:134:VAL:HG22	0.76	1.80	3	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:141:GLN:OE1	0.75	1.80	6	2
1:A:113:LEU:HD11	1:A:136:MET:SD	0.75	2.21	3	1
1:A:204:ASP:HB3	1:A:210:ALA:HB3	0.75	1.58	10	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:201:LEU:HB2	0.75	1.57	3	2
1:A:47:PRO:HA	1:A:69:LEU:HD23	0.75	1.58	3	1
1:A:205:LEU:HD23	1:A:235:ILE:CD1	0.75	2.10	4	1
1:A:43:VAL:HA	1:A:72:PRO:N	0.75	1.96	6	1
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD12	0.74	2.03	3	6
1:A:55:ILE:CB	1:A:55:ILE:C	0.74	2.55	6	1
1:A:170:LEU:CB	1:A:177:LEU:HD23	0.74	2.12	6	1
1:A:43:VAL:HG13	1:A:73:GLU:CG	0.74	2.12	2	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:201:LEU:CB	0.74	2.13	3	1
1:A:235:ILE:HG23	1:A:235:ILE:O	0.74	1.81	1	2
1:A:174:MET:HB3	1:A:177:LEU:HD13	0.74	1.58	4	3
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CD2	0.74	2.75	2	2
1:A:230:VAL:HG12	1:A:236:PRO:HG3	0.74	1.57	3	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:152:TYR:HB2	0.74	1.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:THR:HG23	1:A:61:SER:N	0.74	1.98	2	4
1:A:184:TRP:N	1:A:184:TRP:CD1	0.74	2.56	8	10
1:A:53:LEU:HD12	1:A:104:VAL:HG23	0.74	1.60	8	2
1:A:193:GLU:OE2	1:A:250:ALA:HB1	0.74	1.82	9	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD12	0.74	2.04	9	2
1:A:130:LEU:HG	1:A:134:VAL:HG13	0.73	1.60	6	8
1:A:26:THR:HG23	1:A:81:ARG:HG2	0.73	1.57	10	2
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:ND2	0.73	1.97	7	2
1:A:66:PRO:HB3	1:A:76:LEU:HD13	0.73	1.59	9	3
1:A:54:THR:HG22	1:A:61:SER:HB2	0.73	1.58	3	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:108:LEU:HD21	0.73	1.58	7	2
1:A:29:PHE:C	1:A:30:LEU:HD23	0.73	2.03	4	4
1:A:12:PHE:CZ	1:A:104:VAL:HG11	0.73	2.19	8	1
1:A:240:VAL:HG12	1:A:241:PHE:N	0.73	1.98	6	2
1:A:155:VAL:O	1:A:183:VAL:HG22	0.73	1.82	7	3
1:A:221:GLY:N	1:A:250:ALA:HB1	0.73	1.99	4	3
1:A:113:LEU:HD22	1:A:123:PHE:CZ	0.73	2.19	8	1
1:A:43:VAL:HG13	1:A:73:GLU:HG3	0.73	1.61	2	1
1:A:192:GLY:HA2	1:A:251:ALA:HB3	0.73	1.61	5	2
1:A:157:THR:HG23	1:A:187:SER:CA	0.72	2.14	4	4
1:A:230:VAL:HG21	1:A:239:GLN:CG	0.72	2.14	6	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:104:VAL:HG12	0.72	2.14	10	1
1:A:156:ASN:O	1:A:183:VAL:HG11	0.72	1.84	5	8
1:A:219:PRO:HG3	1:A:250:ALA:HB3	0.72	1.59	9	1
2:A:252:FDA:H3'	2:A:252:FDA:HN1	0.72	1.43	2	2
1:A:79:LEU:CD2	1:A:131:ALA:HB2	0.72	2.12	9	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:128:THR:O	0.72	1.85	2	2
1:A:29:PHE:CD1	1:A:31:LEU:HD21	0.72	2.20	6	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:104:VAL:HG13	0.72	2.19	5	3
1:A:124:VAL:HG23	1:A:152:TYR:CB	0.72	2.14	6	3
1:A:127:GLY:HA3	1:A:246:LEU:HD21	0.72	1.61	9	2
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:HD23	0.72	2.05	6	3
1:A:192:GLY:HA3	1:A:251:ALA:HB2	0.72	1.62	8	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:198:ILE:O	0.72	1.84	10	1
1:A:219:PRO:CG	1:A:250:ALA:HB3	0.72	2.14	9	2
1:A:79:LEU:CD1	1:A:131:ALA:HB2	0.72	2.13	2	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:100:GLN:CG	0.72	2.15	4	2
1:A:55:ILE:HB	1:A:56:PRO:HD3	0.72	1.62	6	3
1:A:246:LEU:C	1:A:246:LEU:HD12	0.71	2.05	1	2
1:A:53:LEU:HB2	1:A:55:ILE:CA	0.71	2.14	6	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:68:ASN:HD22	0.71	1.44	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	0.71	2.06	5	2
1:A:55:ILE:HD13	1:A:91:TYR:CD1	0.71	2.20	10	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:76:LEU:HD21	0.71	1.62	6	3
1:A:143:TRP:CD1	1:A:145:ALA:HB2	0.71	2.20	7	1
1:A:213:ASP:HA	1:A:240:VAL:HG21	0.71	1.61	2	2
1:A:220:PRO:CD	1:A:250:ALA:HB2	0.71	2.16	4	3
1:A:81:ARG:O	2:A:252:FDA:H52A	0.71	1.86	10	6
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	0.70	2.06	8	9
1:A:17:VAL:HG22	1:A:17:VAL:O	0.70	1.86	8	7
1:A:124:VAL:HG23	1:A:152:TYR:HB2	0.70	1.61	6	2
1:A:29:PHE:CD2	1:A:78:PHE:CD1	0.70	2.80	2	2
1:A:221:GLY:H	1:A:250:ALA:HB1	0.70	1.46	8	3
1:A:240:VAL:HG12	1:A:241:PHE:CG	0.70	2.21	6	2
1:A:170:LEU:O	1:A:177:LEU:HD13	0.70	1.86	1	1
1:A:155:VAL:HG22	1:A:161:LEU:HD22	0.70	1.62	5	3
1:A:55:ILE:N	1:A:55:ILE:C	0.70	2.45	6	1
1:A:29:PHE:CD2	1:A:78:PHE:CE1	0.70	2.80	2	2
1:A:219:PRO:HB3	1:A:250:ALA:HB3	0.70	1.61	9	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:C	0.70	2.07	4	5
1:A:220:PRO:HD2	1:A:250:ALA:HB2	0.70	1.63	8	3
1:A:201:LEU:HD13	1:A:201:LEU:N	0.70	2.01	5	2
1:A:157:THR:HG23	1:A:187:SER:HA	0.70	1.62	4	5
1:A:83:LEU:HD22	1:A:84:PRO:N	0.70	2.02	1	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CE2	0.70	2.80	5	2
1:A:211:ASN:HB2	1:A:235:ILE:HD13	0.70	1.64	4	4
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:LEU:HD12	0.70	1.61	8	2
1:A:205:LEU:HB2	1:A:235:ILE:HG21	0.69	1.63	3	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD23	0.69	2.11	8	4
1:A:198:ILE:HG23	1:A:198:ILE:O	0.69	1.87	5	7
1:A:79:LEU:HD12	1:A:131:ALA:CB	0.69	2.14	2	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:65:SER:CB	0.69	2.75	7	3
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:OD1	0.69	1.86	9	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:60:VAL:O	0.69	1.86	6	3
1:A:83:LEU:CD2	2:A:252:FDA:H4B	0.69	2.16	8	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:87:ARG:CB	0.69	2.17	8	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:96:ALA:CB	0.69	2.17	9	1
1:A:141:GLN:CD	1:A:170:LEU:HD11	0.69	2.07	10	1
1:A:196:SER:O	1:A:198:ILE:N	0.69	2.25	8	3
1:A:66:PRO:HB2	1:A:76:LEU:HD22	0.69	1.65	2	1
1:A:215:TYR:CE1	1:A:241:PHE:CD2	0.69	2.81	2	1
1:A:43:VAL:HG23	1:A:71:ASN:C	0.69	2.08	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HD13	0.69	1.87	4	2
1:A:98:VAL:HG12	1:A:98:VAL:O	0.69	1.87	2	3
1:A:78:PHE:CD1	1:A:80:ILE:CG2	0.69	2.76	6	3
1:A:55:ILE:C	1:A:55:ILE:HD12	0.69	2.08	2	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:104:VAL:HG23	0.69	2.17	3	1
1:A:12:PHE:HE1	1:A:14:ALA:HB2	0.68	1.43	3	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:PHE:HE1	0.68	1.48	4	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:78:PHE:CD2	0.68	2.81	5	1
1:A:143:TRP:O	1:A:144:THR:HG23	0.68	1.89	7	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:63:SER:CB	0.68	2.77	5	4
1:A:202:ARG:HG2	1:A:229:LEU:HD13	0.68	1.65	3	5
1:A:230:VAL:HG22	1:A:238:GLU:CG	0.68	2.18	2	1
1:A:79:LEU:HB3	1:A:128:THR:HG22	0.68	1.64	9	3
1:A:138:ARG:HG2	1:A:170:LEU:HD21	0.68	1.64	3	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:PHE:CE1	0.68	2.23	4	2
1:A:123:PHE:CE1	1:A:125:ALA:HB2	0.68	2.24	6	1
1:A:174:MET:CB	1:A:177:LEU:HD13	0.68	2.19	6	3
1:A:191:GLU:N	1:A:251:ALA:HB2	0.68	2.04	3	1
1:A:246:LEU:HD23	1:A:247:PRO:HD2	0.68	1.65	4	2
1:A:12:PHE:CE2	1:A:104:VAL:HG22	0.68	2.23	5	2
1:A:30:LEU:HD13	1:A:30:LEU:N	0.68	2.03	10	3
1:A:43:VAL:HG22	1:A:73:GLU:CB	0.68	2.19	2	1
1:A:170:LEU:O	1:A:177:LEU:HD21	0.68	1.89	2	1
1:A:44:LYS:N	1:A:69:LEU:O	0.68	2.27	3	2
1:A:55:ILE:HG23	1:A:96:ALA:HB2	0.68	1.64	8	1
1:A:27:VAL:HG11	1:A:92:LEU:HD13	0.68	1.63	5	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:136:MET:HB3	0.68	1.65	10	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:83:LEU:C	0.68	2.08	1	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:14:ALA:HB2	0.68	2.23	9	3
1:A:50:PHE:O	1:A:108:LEU:HD23	0.68	1.88	2	2
1:A:127:GLY:CA	1:A:155:VAL:HG12	0.68	2.19	4	8
1:A:55:ILE:CG2	1:A:56:PRO:HD3	0.67	2.19	9	9
1:A:202:ARG:CD	1:A:229:LEU:HD22	0.67	2.20	9	2
1:A:123:PHE:CZ	1:A:133:VAL:HG13	0.67	2.23	8	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:65:SER:CB	0.67	2.78	9	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:108:LEU:CD2	0.67	2.78	10	4
1:A:55:ILE:HD11	1:A:91:TYR:O	0.67	1.89	4	2
1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:GLU:N	0.67	2.05	1	6
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:CD	0.67	2.78	2	10
1:A:157:THR:HG23	1:A:187:SER:N	0.67	2.04	8	4
1:A:29:PHE:CB	1:A:78:PHE:CZ	0.67	2.78	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:GLU:N	1:A:159:PRO:CD	0.67	2.58	10	7
1:A:246:LEU:HD12	2:A:252:FDA:N3	0.67	2.04	4	1
1:A:198:ILE:O	1:A:198:ILE:CG2	0.67	2.43	5	7
1:A:29:PHE:CD2	1:A:78:PHE:CZ	0.67	2.82	4	3
1:A:29:PHE:C	1:A:30:LEU:HD13	0.67	2.10	2	2
1:A:124:VAL:HG23	1:A:152:TYR:HB3	0.67	1.66	1	1
1:A:235:ILE:N	1:A:236:PRO:CD	0.67	2.58	3	1
1:A:143:TRP:C	1:A:144:THR:HG23	0.67	2.10	7	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:102:LEU:CD1	0.66	2.10	6	4
1:A:164:ILE:HD13	1:A:165:ASP:H	0.66	1.48	3	9
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:CD2	0.66	2.79	1	1
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:HD12	0.66	1.90	4	4
1:A:171:GLU:HA	1:A:177:LEU:HD11	0.66	1.68	2	2
1:A:48:GLY:O	1:A:110:VAL:HG21	0.66	1.89	10	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:128:THR:CG2	0.66	2.20	10	4
1:A:122:TYR:CD2	1:A:150:ARG:CB	0.66	2.78	7	8
1:A:43:VAL:HG22	1:A:73:GLU:HA	0.66	1.68	2	1
1:A:50:PHE:CE2	2:A:252:FDA:HM72	0.66	2.25	9	1
1:A:185:HIS:N	1:A:186:PRO:HD3	0.66	2.06	6	9
1:A:143:TRP:CE2	1:A:145:ALA:CB	0.66	2.79	10	6
1:A:143:TRP:CZ2	1:A:145:ALA:CB	0.66	2.79	5	6
1:A:50:PHE:CE2	1:A:65:SER:CB	0.66	2.79	9	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CD2	0.66	2.25	9	2
1:A:122:TYR:CZ	1:A:150:ARG:CD	0.66	2.79	9	7
1:A:16:VAL:HG23	1:A:100:GLN:O	0.66	1.90	7	2
1:A:50:PHE:CD2	1:A:108:LEU:HD22	0.66	2.26	5	1
1:A:122:TYR:HB3	1:A:152:TYR:CE1	0.66	2.25	7	2
1:A:124:VAL:HG21	1:A:222:MET:CE	0.66	2.20	7	1
1:A:183:VAL:N	1:A:193:GLU:O	0.66	2.29	1	6
1:A:184:TRP:CD1	1:A:195:GLY:CA	0.66	2.78	9	7
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CZ	0.66	2.84	5	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:133:VAL:CG1	0.66	2.79	5	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:104:VAL:HG13	0.66	2.25	2	2
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CG	0.66	2.84	2	2
1:A:78:PHE:CZ	1:A:80:ILE:CD1	0.66	2.79	5	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:102:LEU:CD1	0.66	2.12	7	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:104:VAL:CG2	0.65	2.80	5	1
1:A:124:VAL:HG23	1:A:152:TYR:CD1	0.65	2.25	9	1
1:A:143:TRP:CZ2	1:A:145:ALA:HB2	0.65	2.26	5	6
1:A:114:LYS:CB	1:A:241:PHE:CE2	0.65	2.79	8	10
1:A:174:MET:CB	1:A:177:LEU:HD23	0.65	2.19	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:O	0.65	1.90	8	5
1:A:78:PHE:CZ	1:A:80:ILE:HD13	0.65	2.26	5	1
1:A:81:ARG:CD	2:A:252:FDA:N7A	0.65	2.60	1	4
1:A:63:SER:CB	1:A:108:LEU:HD21	0.65	2.21	7	2
1:A:60:VAL:O	1:A:60:VAL:HG13	0.65	1.91	3	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:PHE:CZ	0.65	2.26	7	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:104:VAL:CG1	0.65	2.80	8	2
1:A:53:LEU:HD12	1:A:104:VAL:CG1	0.65	2.20	7	1
1:A:138:ARG:HG3	1:A:170:LEU:HD21	0.65	1.68	3	1
1:A:140:MET:O	1:A:143:TRP:CD1	0.65	2.50	6	6
1:A:184:TRP:CD1	1:A:195:GLY:N	0.65	2.64	3	8
1:A:79:LEU:HD22	1:A:128:THR:HG22	0.64	1.68	1	3
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:C	0.64	2.12	2	4
1:A:209:ASP:O	1:A:210:ALA:HB2	0.64	1.92	8	7
1:A:205:LEU:HG	1:A:235:ILE:HD11	0.64	1.69	2	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:PHE:CD2	0.64	2.80	6	1
1:A:51:MET:N	1:A:108:LEU:HD23	0.64	2.07	7	1
1:A:124:VAL:HG23	1:A:152:TYR:O	0.64	1.92	8	1
1:A:54:THR:HG21	1:A:58:THR:OG1	0.64	1.92	10	5
1:A:45:PHE:CG	1:A:45:PHE:O	0.64	2.50	4	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:33:LYS:CG	0.64	2.80	5	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:105:LYS:H	0.64	1.51	6	1
1:A:114:LYS:CB	1:A:241:PHE:CD2	0.64	2.80	6	1
1:A:186:PRO:O	1:A:187:SER:CB	0.64	2.45	3	9
1:A:16:VAL:O	1:A:98:VAL:HG12	0.64	1.92	6	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:128:THR:CG2	0.64	2.22	6	1
1:A:140:MET:HG3	1:A:145:ALA:HB3	0.64	1.70	9	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:152:TYR:CE2	0.64	2.81	8	1
1:A:82:VAL:HG23	1:A:89:SER:CB	0.64	2.23	4	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:33:LYS:CG	0.64	2.80	5	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:O	0.64	2.31	5	10
1:A:53:LEU:CD1	1:A:102:LEU:CD1	0.64	2.76	9	3
1:A:124:VAL:HB	1:A:216:LEU:HD23	0.64	1.69	2	1
1:A:67:ALA:O	1:A:68:ASN:CB	0.64	2.46	4	2
1:A:122:TYR:CD2	1:A:152:TYR:CE1	0.64	2.86	5	1
1:A:48:GLY:N	1:A:111:PHE:CD2	0.64	2.66	4	1
1:A:141:GLN:HE21	1:A:177:LEU:HD21	0.64	1.53	6	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:CB	0.64	2.23	9	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD21	0.63	1.69	2	2
1:A:45:PHE:HB3	1:A:69:LEU:HD12	0.63	1.68	3	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:91:TYR:CE2	0.63	2.81	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:MET:CG	1:A:177:LEU:HD13	0.63	2.22	6	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:88:PHE:CZ	0.63	2.28	7	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:108:LEU:CD2	0.63	2.80	10	2
1:A:50:PHE:N	1:A:50:PHE:CD1	0.63	2.67	8	1
1:A:141:GLN:HG3	1:A:170:LEU:HD21	0.63	1.68	10	1
1:A:45:PHE:CG	1:A:139:GLN:CG	0.63	2.82	1	1
1:A:151:ILE:HD12	1:A:151:ILE:C	0.63	2.13	2	4
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:CG	0.63	2.81	1	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:27:VAL:HG21	0.63	1.70	1	4
1:A:52:ASP:N	1:A:105:LYS:O	0.63	2.32	7	7
1:A:246:LEU:HD12	2:A:252:FDA:C2	0.63	2.24	4	1
1:A:123:PHE:HZ	1:A:133:VAL:HG22	0.63	1.50	8	1
1:A:44:LYS:HA	1:A:70:PRO:HA	0.63	1.71	6	6
1:A:55:ILE:HG23	1:A:56:PRO:CD	0.63	2.22	9	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:124:VAL:O	0.63	1.94	1	6
1:A:143:TRP:CD2	1:A:145:ALA:HB2	0.63	2.29	5	6
1:A:155:VAL:HG23	1:A:161:LEU:HD22	0.63	1.70	4	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:51:MET:N	0.63	2.66	5	3
1:A:175:ARG:O	1:A:177:LEU:N	0.63	2.31	1	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:87:ARG:HB2	0.63	1.69	3	1
1:A:123:PHE:HE1	1:A:125:ALA:HB2	0.63	1.52	6	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:77:GLU:CB	0.63	2.24	10	1
1:A:16:VAL:HG12	1:A:31:LEU:CD2	0.62	2.24	1	3
1:A:54:THR:HG21	1:A:59:ASP:H	0.62	1.53	3	3
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD12	0.62	2.13	1	2
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:HG12	0.62	1.94	7	4
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:NE	0.62	2.66	8	2
1:A:55:ILE:HG21	1:A:91:TYR:CD2	0.62	2.29	10	2
1:A:152:TYR:CD1	1:A:180:LYS:CG	0.62	2.82	10	1
1:A:198:ILE:HD11	1:A:201:LEU:HB2	0.62	1.69	10	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:215:TYR:CG	0.62	2.29	4	6
1:A:171:GLU:HA	1:A:177:LEU:HD21	0.62	1.69	2	1
1:A:209:ASP:O	1:A:210:ALA:HB3	0.62	1.94	6	3
1:A:154:GLY:HA2	1:A:182:CYS:HB2	0.62	1.70	3	8
1:A:195:GLY:O	1:A:196:SER:CB	0.62	2.47	3	8
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD23	0.62	2.15	5	2
1:A:198:ILE:O	1:A:198:ILE:CD1	0.62	2.48	10	1
1:A:218:GLY:N	1:A:219:PRO:CD	0.62	2.63	4	4
1:A:157:THR:HG22	1:A:187:SER:HA	0.62	1.71	5	1
1:A:55:ILE:CA	1:A:105:LYS:H	0.62	2.07	6	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:88:PHE:CE2	0.62	2.29	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG11	2:A:252:FDA:HM71	0.62	1.70	10	1
1:A:216:LEU:HD22	1:A:222:MET:CG	0.62	2.24	1	2
1:A:67:ALA:HB3	1:A:77:GLU:N	0.62	2.10	4	1
1:A:156:ASN:CB	1:A:188:GLY:N	0.62	2.63	5	8
1:A:157:THR:HG22	1:A:187:SER:N	0.62	2.09	6	1
1:A:156:ASN:O	1:A:183:VAL:CG2	0.62	2.47	7	9
1:A:114:LYS:O	1:A:215:TYR:CZ	0.62	2.52	7	3
1:A:219:PRO:HG2	1:A:250:ALA:HB3	0.62	1.70	10	1
1:A:185:HIS:N	1:A:186:PRO:CD	0.61	2.63	6	7
1:A:218:GLY:CA	1:A:245:PHE:CD2	0.61	2.83	2	3
1:A:125:ALA:HB2	1:A:133:VAL:HG11	0.61	1.72	8	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:102:LEU:CD2	0.61	2.78	8	4
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:C	0.61	2.73	6	10
1:A:81:ARG:NH1	2:A:252:FDA:H61A	0.61	1.93	10	4
1:A:44:LYS:HA	1:A:70:PRO:CA	0.61	2.25	5	3
1:A:50:PHE:C	1:A:108:LEU:HD23	0.61	2.15	7	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:78:PHE:CE2	0.61	2.83	7	5
1:A:155:VAL:H	1:A:183:VAL:HG23	0.61	1.55	3	5
1:A:247:PRO:HG2	2:A:252:FDA:H3B	0.61	1.71	5	2
1:A:143:TRP:C	1:A:144:THR:HG22	0.61	2.16	9	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:13:GLU:O	0.61	2.53	10	4
1:A:122:TYR:HB3	1:A:152:TYR:CZ	0.61	2.30	9	3
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:HD23	0.61	1.95	6	1
1:A:122:TYR:CD2	1:A:150:ARG:HB3	0.61	2.31	10	3
1:A:211:ASN:O	1:A:240:VAL:HG23	0.61	1.96	9	6
1:A:55:ILE:HG21	1:A:91:TYR:CE2	0.61	2.31	10	2
1:A:141:GLN:CD	1:A:170:LEU:HD21	0.61	2.15	10	2
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:ALA:N	0.61	2.11	4	6
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD1	0.61	2.69	4	5
1:A:152:TYR:CD2	1:A:201:LEU:HD21	0.61	2.30	3	1
1:A:69:LEU:CB	1:A:70:PRO:CD	0.61	2.79	4	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:186:PRO:C	0.61	2.15	6	1
1:A:18:GLY:O	1:A:29:PHE:CD1	0.61	2.54	6	2
1:A:126:GLY:O	1:A:246:LEU:HD11	0.60	1.96	6	2
1:A:157:THR:O	1:A:158:GLU:CB	0.60	2.48	1	10
1:A:198:ILE:O	1:A:201:LEU:CD2	0.60	2.49	9	2
1:A:174:MET:HG2	1:A:177:LEU:HD13	0.60	1.72	6	1
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:CB	0.60	2.49	5	7
1:A:102:LEU:HD12	1:A:103:SER:N	0.60	2.11	3	6
1:A:155:VAL:HG11	1:A:161:LEU:HD21	0.60	1.73	1	2
1:A:156:ASN:O	1:A:158:GLU:N	0.60	2.35	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:MET:HE1	1:A:149:THR:HG23	0.60	1.71	1	1
1:A:225:ALA:HB3	1:A:251:ALA:O	0.60	1.95	6	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:HD22	0.60	1.57	7	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:65:SER:OG	0.60	2.54	8	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:108:LEU:CD1	0.60	2.84	10	1
1:A:131:ALA:N	1:A:132:PRO:CD	0.60	2.64	8	9
1:A:154:GLY:CA	1:A:182:CYS:HB2	0.60	2.27	8	8
1:A:78:PHE:CE2	1:A:80:ILE:CD1	0.60	2.85	5	2
1:A:69:LEU:CB	1:A:70:PRO:HD3	0.60	2.27	4	2
1:A:210:ALA:O	1:A:235:ILE:HD11	0.60	1.97	1	1
1:A:218:GLY:O	1:A:245:PHE:N	0.60	2.35	5	4
1:A:246:LEU:C	1:A:246:LEU:CD1	0.60	2.69	1	2
1:A:45:PHE:CZ	1:A:132:PRO:O	0.60	2.55	5	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:153:PHE:CD1	0.60	2.83	7	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:104:VAL:HG22	0.60	2.31	9	1
1:A:153:PHE:HZ	1:A:161:LEU:HD11	0.60	1.53	10	2
1:A:124:VAL:HG13	1:A:216:LEU:HD23	0.60	1.72	3	3
1:A:141:GLN:NE2	1:A:177:LEU:HD21	0.60	2.11	4	2
1:A:55:ILE:CG1	1:A:88:PHE:CE1	0.60	2.84	6	1
1:A:69:LEU:O	1:A:71:ASN:ND2	0.60	2.35	2	5
1:A:240:VAL:HG12	1:A:241:PHE:CD2	0.60	2.32	6	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:108:LEU:HD23	0.60	2.27	7	1
1:A:122:TYR:CD2	1:A:152:TYR:OH	0.60	2.55	6	7
1:A:184:TRP:CD1	1:A:195:GLY:HA2	0.60	2.32	1	8
1:A:192:GLY:CA	1:A:251:ALA:HB3	0.60	2.27	9	3
1:A:27:VAL:O	1:A:79:LEU:HD23	0.60	1.97	10	1
1:A:46:GLU:O	1:A:48:GLY:N	0.60	2.35	7	10
1:A:122:TYR:CD2	1:A:150:ARG:HB2	0.60	2.32	1	7
1:A:18:GLY:O	1:A:29:PHE:CE1	0.60	2.55	4	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:65:SER:HB2	0.60	2.32	4	1
1:A:43:VAL:O	1:A:45:PHE:N	0.60	2.35	6	1
1:A:69:LEU:N	1:A:70:PRO:CD	0.60	2.64	6	1
1:A:44:LYS:HA	1:A:71:ASN:N	0.60	2.12	10	1
1:A:48:GLY:O	1:A:110:VAL:HG12	0.59	1.96	1	2
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG13	0.59	1.96	1	4
1:A:209:ASP:O	1:A:210:ALA:CB	0.59	2.50	2	10
1:A:82:VAL:CG2	1:A:89:SER:CB	0.59	2.80	5	4
1:A:43:VAL:CG2	1:A:68:ASN:ND2	0.59	2.65	5	1
1:A:83:LEU:CD1	2:A:252:FDA:H1B	0.59	2.27	5	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:GLY:N	0.59	2.12	10	6
1:A:45:PHE:CE2	1:A:46:GLU:O	0.59	2.55	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:VAL:HB	1:A:152:TYR:CD2	0.59	2.32	8	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:27:VAL:CG2	0.59	2.81	1	5
1:A:194:GLN:O	1:A:195:GLY:C	0.59	2.41	8	10
1:A:239:GLN:O	1:A:241:PHE:CE2	0.59	2.55	7	8
1:A:50:PHE:CE2	1:A:109:GLY:O	0.59	2.55	3	2
1:A:55:ILE:CA	1:A:105:LYS:N	0.59	2.65	6	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:O	0.59	1.97	4	2
1:A:64:TYR:CE2	1:A:80:ILE:CG2	0.59	2.81	4	1
1:A:196:SER:CB	1:A:197:PRO:CD	0.59	2.80	8	2
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:O	0.59	2.56	2	5
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:CD2	0.59	2.80	4	6
1:A:239:GLN:O	1:A:241:PHE:CZ	0.59	2.56	10	7
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:C	0.59	2.75	5	1
1:A:48:GLY:O	1:A:50:PHE:CE1	0.59	2.55	4	4
1:A:78:PHE:O	1:A:78:PHE:CD1	0.59	2.56	3	4
1:A:82:VAL:HG21	1:A:89:SER:HB2	0.59	1.75	10	3
1:A:55:ILE:CG2	1:A:96:ALA:CB	0.59	2.80	6	1
1:A:81:ARG:NE	2:A:252:FDA:N7A	0.59	2.50	6	2
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:H	0.59	1.58	7	2
1:A:119:ALA:HB3	1:A:121:ARG:CZ	0.59	2.27	3	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:CB	0.59	2.81	3	1
1:A:246:LEU:HB2	2:A:252:FDA:N1	0.59	2.13	3	2
1:A:67:ALA:HB3	1:A:77:GLU:HB2	0.59	1.73	4	2
1:A:158:GLU:N	1:A:159:PRO:HD3	0.59	2.13	10	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:13:GLU:O	0.59	2.56	1	3
1:A:29:PHE:HB3	1:A:78:PHE:CE2	0.59	2.33	1	6
1:A:242:PHE:CD1	1:A:242:PHE:N	0.59	2.71	4	2
1:A:171:GLU:CD	1:A:179:VAL:HG12	0.59	2.19	6	1
1:A:195:GLY:O	1:A:197:PRO:N	0.59	2.36	8	2
1:A:20:ASN:HD21	1:A:22:VAL:HG12	0.59	1.58	5	5
1:A:137:VAL:HG12	1:A:141:GLN:HG3	0.59	1.75	4	1
1:A:205:LEU:HD23	1:A:235:ILE:CG1	0.59	2.28	5	2
1:A:250:ALA:O	1:A:251:ALA:HB2	0.59	1.97	5	2
1:A:53:LEU:HD12	1:A:104:VAL:CG2	0.59	2.27	8	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:209:ASP:O	0.59	2.56	10	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:27:VAL:CG2	0.58	2.27	2	2
1:A:45:PHE:O	1:A:45:PHE:CD1	0.58	2.55	4	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:177:LEU:C	0.58	2.19	8	2
1:A:130:LEU:CD1	1:A:153:PHE:CE1	0.58	2.85	7	2
1:A:29:PHE:HB3	1:A:78:PHE:CZ	0.58	2.33	10	2
1:A:80:ILE:CG2	1:A:82:VAL:CG1	0.58	2.80	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:LEU:CD1	1:A:104:VAL:CG2	0.58	2.81	8	2
1:A:123:PHE:HE2	1:A:137:VAL:HG21	0.58	1.55	5	1
1:A:16:VAL:HB	1:A:98:VAL:HG13	0.58	1.74	6	1
1:A:247:PRO:HG2	2:A:252:FDA:H8A	0.58	1.74	6	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:201:LEU:HB2	0.58	1.75	2	2
1:A:50:PHE:CD2	1:A:65:SER:HB2	0.58	2.33	9	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD1	0.58	2.67	10	3
1:A:50:PHE:CE1	1:A:51:MET:O	0.58	2.56	2	3
1:A:141:GLN:CG	1:A:170:LEU:HD22	0.58	2.29	8	2
1:A:156:ASN:OD1	2:A:252:FDA:N6A	0.58	2.36	2	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:33:LYS:HG3	0.58	2.34	5	1
1:A:152:TYR:N	1:A:152:TYR:CD1	0.58	2.72	8	1
1:A:121:ARG:CZ	1:A:149:THR:CG2	0.58	2.80	10	1
1:A:240:VAL:HG13	1:A:242:PHE:CE1	0.58	2.34	1	1
1:A:218:GLY:N	1:A:222:MET:CE	0.58	2.66	5	1
1:A:45:PHE:HB2	1:A:69:LEU:HD12	0.58	1.75	3	1
1:A:133:VAL:HG21	1:A:217:CYS:HB2	0.58	1.73	4	1
1:A:230:VAL:HG11	1:A:238:GLU:C	0.58	2.19	6	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HB2	0.58	1.76	10	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:63:SER:CB	0.58	2.86	10	1
1:A:219:PRO:CB	1:A:220:PRO:CD	0.58	2.81	10	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:59:ASP:N	0.58	2.37	1	9
1:A:114:LYS:HB2	1:A:241:PHE:CE2	0.58	2.34	4	9
1:A:152:TYR:CD1	1:A:180:LYS:CB	0.58	2.86	1	2
1:A:194:GLN:O	1:A:195:GLY:O	0.58	2.22	7	3
1:A:54:THR:O	1:A:102:LEU:HD13	0.58	1.98	5	1
1:A:16:VAL:HA	1:A:31:LEU:HD23	0.58	1.74	7	4
1:A:19:LEU:HD22	1:A:27:VAL:CG2	0.58	2.28	7	3
1:A:81:ARG:HG3	1:A:246:LEU:HD21	0.58	1.75	4	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:63:SER:HB2	0.58	2.34	10	2
1:A:201:LEU:HD13	1:A:201:LEU:H	0.58	1.58	5	2
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:CG	0.58	2.51	6	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:LYS:HE2	0.58	1.75	8	1
1:A:184:TRP:CG	1:A:195:GLY:CA	0.58	2.87	1	7
1:A:43:VAL:N	1:A:71:ASN:O	0.58	2.28	2	3
1:A:113:LEU:HD21	1:A:136:MET:HG3	0.58	1.76	9	1
1:A:124:VAL:HG22	1:A:222:MET:CE	0.58	2.29	10	1
1:A:124:VAL:HG22	1:A:222:MET:HE1	0.58	1.75	10	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:27:VAL:HG21	0.57	1.76	2	1
1:A:121:ARG:CB	1:A:215:TYR:CE2	0.57	2.87	5	7
1:A:184:TRP:O	1:A:185:HIS:CD2	0.57	2.57	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ILE:CA	1:A:104:VAL:CA	0.57	2.82	6	1
1:A:122:TYR:CD2	1:A:152:TYR:CZ	0.57	2.91	1	7
1:A:54:THR:OG1	1:A:60:VAL:N	0.57	2.37	2	4
1:A:174:MET:HB2	1:A:177:LEU:HD22	0.57	1.76	4	3
1:A:198:ILE:O	1:A:198:ILE:CG1	0.57	2.52	3	2
1:A:114:LYS:O	1:A:215:TYR:CE2	0.57	2.58	6	1
1:A:55:ILE:CB	1:A:56:PRO:HD3	0.57	2.29	6	10
1:A:98:VAL:CG2	1:A:98:VAL:O	0.57	2.52	4	3
1:A:218:GLY:O	1:A:220:PRO:CD	0.57	2.52	4	3
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:CB	0.57	2.52	9	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:133:VAL:CG2	0.57	2.81	10	1
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:HD3	0.57	2.34	4	6
1:A:48:GLY:O	1:A:50:PHE:CD1	0.57	2.56	7	3
1:A:250:ALA:O	1:A:251:ALA:CB	0.57	2.51	5	1
1:A:222:MET:CE	1:A:226:ALA:HB2	0.57	2.29	9	1
1:A:29:PHE:HB2	1:A:78:PHE:CZ	0.57	2.35	4	7
1:A:68:ASN:OD1	1:A:68:ASN:N	0.57	2.38	8	2
1:A:129:GLY:HA3	1:A:245:PHE:CE1	0.57	2.34	8	10
1:A:71:ASN:HB2	1:A:72:PRO:CD	0.57	2.30	2	1
1:A:67:ALA:HB3	1:A:77:GLU:H	0.57	1.60	4	1
1:A:121:ARG:NH2	1:A:147:ASN:ND2	0.57	2.52	4	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:229:LEU:CD1	0.57	2.81	5	1
1:A:14:ALA:C	1:A:101:VAL:HG13	0.57	2.19	7	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:177:LEU:N	0.57	2.15	10	2
1:A:205:LEU:CB	1:A:235:ILE:CD1	0.57	2.83	9	2
1:A:152:TYR:CE1	1:A:180:LYS:CG	0.57	2.88	10	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:123:PHE:CD2	0.57	2.88	1	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:31:LEU:CD1	0.57	2.87	2	1
1:A:247:PRO:O	1:A:248:SER:CB	0.57	2.52	3	2
1:A:43:VAL:O	1:A:69:LEU:O	0.57	2.21	10	3
1:A:190:TRP:CE3	1:A:191:GLU:N	0.57	2.73	8	8
1:A:205:LEU:HD12	1:A:233:ARG:HD3	0.57	1.75	6	4
1:A:81:ARG:HD2	2:A:252:FDA:N7A	0.57	2.14	3	6
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:O	0.57	2.58	5	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:65:SER:HB3	0.57	2.34	6	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:65:SER:HB2	0.57	2.34	9	1
1:A:140:MET:CE	1:A:149:THR:HG23	0.57	2.30	1	1
1:A:164:ILE:O	1:A:167:LEU:HD12	0.57	2.00	10	2
1:A:240:VAL:CG1	1:A:242:PHE:CZ	0.57	2.88	1	2
1:A:31:LEU:HD11	1:A:102:LEU:CD2	0.57	2.30	2	1
1:A:119:ALA:HB3	1:A:121:ARG:NH2	0.57	2.14	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:VAL:HG13	1:A:216:LEU:CD2	0.57	2.30	4	1
1:A:198:ILE:HD11	1:A:201:LEU:CB	0.57	2.30	10	1
1:A:154:GLY:O	1:A:155:VAL:CG1	0.57	2.53	3	10
1:A:45:PHE:CD2	1:A:139:GLN:OE1	0.57	2.57	4	1
1:A:123:PHE:CD2	1:A:137:VAL:CG2	0.57	2.88	5	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:229:LEU:HD12	0.57	2.30	5	1
1:A:44:LYS:N	1:A:71:ASN:N	0.57	2.52	6	1
1:A:222:MET:CA	1:A:251:ALA:OXT	0.57	2.53	1	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:31:LEU:CD2	0.57	2.88	4	4
1:A:65:SER:HB3	2:A:252:FDA:H6	0.57	1.77	5	1
1:A:161:LEU:O	1:A:162:PHE:CG	0.57	2.57	6	1
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:CB	0.56	2.93	5	8
1:A:191:GLU:N	1:A:251:ALA:CB	0.56	2.68	3	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CE1	0.56	2.93	5	1
1:A:26:THR:CG2	1:A:128:THR:CG2	0.56	2.79	9	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:91:TYR:CB	0.56	2.28	9	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:CD1	0.56	2.83	10	1
1:A:225:ALA:O	1:A:229:LEU:CD2	0.56	2.53	8	9
1:A:30:LEU:HD12	1:A:77:GLU:HB3	0.56	1.77	10	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:30:LEU:N	0.56	2.67	1	2
1:A:98:VAL:O	1:A:98:VAL:HG22	0.56	1.99	1	3
1:A:114:LYS:HB3	1:A:241:PHE:CE2	0.56	2.35	8	7
1:A:198:ILE:CG1	1:A:251:ALA:CB	0.56	2.82	1	1
1:A:230:VAL:HG12	1:A:236:PRO:CG	0.56	2.30	3	1
1:A:239:GLN:CA	1:A:241:PHE:CZ	0.56	2.88	7	3
1:A:149:THR:HB	1:A:177:LEU:HD11	0.56	1.77	6	2
1:A:67:ALA:HB2	1:A:132:PRO:HA	0.56	1.77	5	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:105:LYS:O	0.56	2.53	6	3
1:A:136:MET:CE	1:A:140:MET:CE	0.56	2.83	6	1
1:A:182:CYS:HB3	1:A:193:GLU:HA	0.56	1.75	7	2
1:A:83:LEU:HG	2:A:252:FDA:H4B	0.56	1.76	8	1
1:A:102:LEU:HD11	1:A:104:VAL:HG23	0.56	1.77	8	1
1:A:81:ARG:NH1	2:A:252:FDA:N6A	0.56	2.53	10	1
1:A:43:VAL:HG22	1:A:73:GLU:CG	0.56	2.31	2	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD2	0.56	2.67	6	4
1:A:12:PHE:CD1	1:A:13:GLU:N	0.56	2.74	7	3
1:A:51:MET:O	1:A:63:SER:CB	0.56	2.54	9	4
1:A:55:ILE:HG22	1:A:96:ALA:HB2	0.56	1.77	6	1
1:A:155:VAL:O	1:A:183:VAL:CG2	0.56	2.53	6	3
1:A:43:VAL:HG13	1:A:74:GLY:H	0.56	1.60	8	1
1:A:54:THR:HA	1:A:61:SER:HB3	0.56	1.77	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:ASN:N	1:A:176:ASN:ND2	0.56	2.53	1	5
1:A:190:TRP:O	1:A:249:GLY:N	0.56	2.38	6	5
1:A:153:PHE:CZ	1:A:161:LEU:CD1	0.56	2.88	5	1
1:A:198:ILE:HG23	1:A:229:LEU:HD12	0.56	1.77	5	1
1:A:68:ASN:CB	1:A:75:ARG:O	0.56	2.54	6	5
1:A:122:TYR:CZ	1:A:150:ARG:HD2	0.56	2.36	7	5
1:A:205:LEU:CG	1:A:235:ILE:HD11	0.56	2.30	2	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:150:ARG:HB2	0.56	2.36	5	2
1:A:247:PRO:CG	2:A:252:FDA:H3B	0.56	2.31	5	1
1:A:239:GLN:HA	1:A:241:PHE:CZ	0.56	2.36	7	1
1:A:190:TRP:CH2	1:A:191:GLU:O	0.56	2.59	8	1
1:A:154:GLY:HA3	1:A:182:CYS:CB	0.56	2.31	8	8
1:A:29:PHE:C	1:A:29:PHE:CD1	0.56	2.79	2	2
1:A:218:GLY:O	1:A:245:PHE:O	0.56	2.23	4	4
1:A:202:ARG:O	1:A:233:ARG:CD	0.56	2.54	3	2
1:A:67:ALA:HB3	1:A:77:GLU:CB	0.56	2.31	4	1
1:A:78:PHE:CE1	1:A:80:ILE:HG23	0.56	2.36	4	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:123:PHE:HE2	0.56	1.61	4	1
1:A:20:ASN:C	1:A:20:ASN:ND2	0.56	2.59	6	1
1:A:114:LYS:HB3	1:A:241:PHE:CD2	0.56	2.35	6	1
1:A:210:ALA:HA	1:A:214:ILE:HD11	0.56	1.78	2	1
1:A:214:ILE:O	1:A:239:GLN:O	0.56	2.24	6	2
1:A:137:VAL:O	1:A:141:GLN:CG	0.56	2.54	5	2
1:A:18:GLY:O	1:A:29:PHE:CG	0.56	2.59	6	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:C	0.56	2.79	2	9
1:A:124:VAL:CG1	1:A:124:VAL:O	0.56	2.54	9	2
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:HB2	0.56	2.31	10	5
1:A:64:TYR:CE1	1:A:65:SER:O	0.56	2.59	4	2
1:A:26:THR:HG21	1:A:128:THR:CG2	0.56	2.26	9	1
1:A:145:ALA:N	1:A:146:PRO:CD	0.56	2.68	3	2
1:A:55:ILE:HD13	1:A:91:TYR:O	0.56	2.01	5	1
1:A:129:GLY:HA3	2:A:252:FDA:HN3	0.56	1.60	6	4
1:A:201:LEU:H	1:A:201:LEU:HD22	0.56	1.60	9	2
1:A:205:LEU:CB	1:A:235:ILE:HD11	0.56	2.31	9	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:65:SER:HB3	0.56	2.35	9	1
1:A:55:ILE:O	1:A:91:TYR:CE2	0.56	2.59	9	1
1:A:50:PHE:CE2	2:A:252:FDA:HM71	0.55	2.35	1	2
1:A:201:LEU:O	1:A:205:LEU:CD2	0.55	2.54	10	7
1:A:191:GLU:CB	1:A:250:ALA:O	0.55	2.55	4	3
1:A:190:TRP:O	1:A:249:GLY:O	0.55	2.22	3	2
1:A:223:ILE:HD13	1:A:243:GLU:O	0.55	2.02	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:TYR:O	1:A:167:LEU:CD2	0.55	2.55	8	5
1:A:155:VAL:CG2	1:A:161:LEU:CD2	0.55	2.83	5	3
1:A:83:LEU:HD11	2:A:252:FDA:H4B	0.55	1.77	9	1
1:A:45:PHE:CE2	1:A:139:GLN:OE1	0.55	2.59	10	1
1:A:181:ALA:O	1:A:194:GLN:CG	0.55	2.54	9	5
1:A:202:ARG:HG2	1:A:229:LEU:HD22	0.55	1.78	2	4
1:A:43:VAL:CG1	1:A:73:GLU:HG3	0.55	2.32	2	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:PHE:HB3	0.55	2.01	4	2
1:A:113:LEU:HD11	1:A:136:MET:CG	0.55	2.27	4	1
1:A:83:LEU:HD13	2:A:252:FDA:C1B	0.55	2.31	5	1
1:A:126:GLY:O	1:A:246:LEU:CD2	0.55	2.54	6	1
1:A:198:ILE:CG1	1:A:201:LEU:HB2	0.55	2.31	10	1
1:A:18:GLY:O	1:A:19:LEU:CB	0.55	2.55	3	4
1:A:123:PHE:CD1	1:A:215:TYR:HB2	0.55	2.36	1	2
1:A:156:ASN:HB3	1:A:188:GLY:N	0.55	2.16	8	8
1:A:205:LEU:HD11	1:A:229:LEU:HB2	0.55	1.79	1	1
1:A:250:ALA:O	1:A:251:ALA:OXT	0.55	2.24	1	1
1:A:71:ASN:CB	1:A:72:PRO:CD	0.55	2.84	2	1
1:A:239:GLN:C	1:A:241:PHE:CZ	0.55	2.80	3	6
1:A:55:ILE:HD13	1:A:91:TYR:CG	0.55	2.36	10	3
1:A:205:LEU:HD23	1:A:235:ILE:HG12	0.55	1.78	5	1
1:A:205:LEU:HD21	1:A:230:VAL:HG22	0.55	1.77	5	1
1:A:98:VAL:O	1:A:100:GLN:N	0.55	2.40	2	1
1:A:129:GLY:C	1:A:245:PHE:CZ	0.55	2.80	5	7
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:C	0.55	2.60	4	5
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.55	2.01	8	2
1:A:78:PHE:CE1	1:A:80:ILE:HB	0.55	2.37	7	5
1:A:171:GLU:OE1	1:A:177:LEU:HD22	0.55	2.02	1	1
1:A:208:SER:O	1:A:209:ASP:CB	0.55	2.55	2	6
1:A:29:PHE:HB2	1:A:78:PHE:CE1	0.55	2.37	4	4
1:A:43:VAL:CG2	1:A:69:LEU:O	0.55	2.54	4	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:88:PHE:CE1	0.55	2.36	8	2
1:A:64:TYR:OH	1:A:79:LEU:N	0.55	2.40	3	9
1:A:158:GLU:O	1:A:161:LEU:N	0.55	2.39	2	4
1:A:207:SER:O	1:A:208:SER:CB	0.55	2.55	10	4
1:A:23:SER:CB	1:A:160:GLU:O	0.55	2.55	2	1
1:A:43:VAL:HG23	1:A:69:LEU:O	0.55	2.00	4	3
1:A:122:TYR:CE1	1:A:210:ALA:N	0.55	2.75	6	1
1:A:198:ILE:CG1	1:A:251:ALA:O	0.55	2.55	7	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:92:LEU:CD1	0.55	2.83	8	1
1:A:223:ILE:HD11	1:A:243:GLU:H	0.55	1.60	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:LEU:O	1:A:233:ARG:CG	0.55	2.55	3	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:29:PHE:HE2	0.55	1.62	4	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:65:SER:HB3	0.55	2.37	4	1
1:A:69:LEU:O	1:A:71:ASN:N	0.55	2.40	5	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:187:SER:CA	0.55	2.32	5	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:34:ARG:HB3	0.55	2.37	8	1
1:A:152:TYR:CD1	1:A:180:LYS:HB2	0.54	2.36	4	4
1:A:155:VAL:C	1:A:183:VAL:HG22	0.54	2.22	7	2
1:A:192:GLY:N	1:A:251:ALA:HB3	0.54	2.17	9	2
1:A:124:VAL:HB	1:A:152:TYR:CE1	0.54	2.38	9	1
1:A:13:GLU:O	1:A:33:LYS:CB	0.54	2.54	10	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:33:LYS:HG2	0.54	2.36	5	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:88:PHE:CE1	0.54	2.37	6	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:216:LEU:CD2	0.54	2.32	6	2
1:A:156:ASN:CA	1:A:183:VAL:HG22	0.54	2.32	6	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:78:PHE:HE2	0.54	1.62	10	1
1:A:121:ARG:HB3	1:A:215:TYR:CZ	0.54	2.37	7	8
1:A:121:ARG:HB3	1:A:215:TYR:CE2	0.54	2.36	5	2
1:A:222:MET:N	1:A:251:ALA:OXT	0.54	2.41	1	1
1:A:184:TRP:CG	1:A:195:GLY:HA2	0.54	2.37	10	5
1:A:246:LEU:HD21	2:A:252:FDA:O2	0.54	2.02	8	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:92:LEU:HA	0.54	1.80	3	1
1:A:78:PHE:CZ	1:A:80:ILE:HB	0.54	2.38	5	1
1:A:222:MET:O	1:A:226:ALA:CB	0.54	2.55	4	6
1:A:154:GLY:CA	1:A:182:CYS:CB	0.54	2.85	3	6
1:A:55:ILE:HG22	1:A:56:PRO:HD3	0.54	1.79	6	2
1:A:190:TRP:NE1	1:A:193:GLU:O	0.54	2.41	7	2
1:A:83:LEU:CG	2:A:252:FDA:H4B	0.54	2.33	8	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:179:VAL:HG23	0.54	1.80	8	1
1:A:65:SER:OG	1:A:132:PRO:CG	0.54	2.56	9	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:139:GLN:OE1	0.54	2.61	1	1
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:CG	0.54	2.56	1	5
1:A:127:GLY:HA2	1:A:155:VAL:CG1	0.54	2.32	3	5
1:A:211:ASN:N	1:A:212:PRO:HD2	0.54	2.18	9	10
1:A:90:ASP:O	1:A:94:ASN:CB	0.54	2.56	9	4
1:A:27:VAL:HG11	1:A:92:LEU:CD1	0.54	2.32	5	2
1:A:226:ALA:HB1	1:A:239:GLN:OE1	0.54	2.03	6	1
1:A:124:VAL:CB	1:A:152:TYR:O	0.54	2.56	8	1
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:CG2	0.54	2.55	9	3
1:A:55:ILE:CD1	1:A:91:TYR:O	0.54	2.55	4	3
1:A:124:VAL:CA	1:A:152:TYR:HB2	0.54	2.33	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:VAL:C	1:A:183:VAL:CG2	0.54	2.76	1	10
1:A:155:VAL:HB	1:A:161:LEU:HD13	0.54	1.79	1	1
1:A:182:CYS:HB3	1:A:193:GLU:C	0.54	2.23	8	9
1:A:234:GLY:O	1:A:236:PRO:N	0.54	2.41	1	7
1:A:171:GLU:OE2	1:A:179:VAL:HG11	0.54	2.03	2	1
1:A:124:VAL:HA	1:A:152:TYR:HB2	0.54	1.78	5	6
1:A:157:THR:CG2	1:A:187:SER:HA	0.54	2.33	7	8
1:A:162:PHE:O	1:A:163:TYR:CB	0.54	2.56	4	5
1:A:223:ILE:O	1:A:227:CYS:CB	0.54	2.55	5	2
1:A:195:GLY:O	1:A:196:SER:C	0.54	2.46	7	2
1:A:43:VAL:HG21	1:A:68:ASN:HB2	0.54	1.78	9	1
1:A:81:ARG:HB3	2:A:252:FDA:H8A	0.54	1.78	9	1
1:A:83:LEU:HD23	2:A:252:FDA:H4B	0.54	1.79	2	1
1:A:88:PHE:CG	2:A:252:FDA:O2P	0.54	2.61	7	2
1:A:122:TYR:N	1:A:122:TYR:CD1	0.54	2.75	3	6
1:A:51:MET:CA	1:A:105:LYS:O	0.54	2.56	3	1
1:A:122:TYR:CZ	1:A:209:ASP:O	0.54	2.60	10	3
1:A:164:ILE:CD1	1:A:165:ASP:N	0.54	2.67	6	9
1:A:190:TRP:O	1:A:248:SER:CB	0.54	2.55	7	2
1:A:213:ASP:CB	1:A:215:TYR:OH	0.54	2.55	7	9
1:A:145:ALA:HB3	1:A:147:ASN:OD1	0.54	2.03	2	2
1:A:29:PHE:CG	1:A:78:PHE:CZ	0.54	2.96	4	1
1:A:124:VAL:O	1:A:124:VAL:CG1	0.54	2.56	6	2
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:CB	0.54	2.56	7	2
1:A:55:ILE:HG13	1:A:91:TYR:CG	0.54	2.38	9	1
1:A:88:PHE:CD2	2:A:252:FDA:O2P	0.54	2.61	2	1
1:A:54:THR:HG21	1:A:60:VAL:N	0.54	2.17	3	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:C	0.54	2.81	5	2
1:A:239:GLN:O	1:A:241:PHE:N	0.54	2.41	6	1
1:A:67:ALA:O	1:A:77:GLU:CG	0.54	2.56	8	1
1:A:88:PHE:O	1:A:92:LEU:CD2	0.54	2.56	10	1
1:A:141:GLN:NE2	1:A:170:LEU:HD22	0.53	2.18	1	1
1:A:155:VAL:HG23	1:A:156:ASN:N	0.53	2.18	10	5
1:A:214:ILE:CG2	1:A:238:GLU:O	0.53	2.55	2	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:33:LYS:HE2	0.53	2.38	5	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:51:MET:O	0.53	2.61	5	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:113:LEU:N	0.53	2.17	5	1
1:A:50:PHE:CD2	2:A:252:FDA:H6	0.53	2.38	8	1
1:A:211:ASN:HA	1:A:235:ILE:HD11	0.53	1.79	10	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:139:GLN:CG	0.53	2.91	1	1
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:CD1	0.53	2.74	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD1	0.53	2.77	9	4
1:A:60:VAL:O	1:A:60:VAL:CG1	0.53	2.56	3	3
1:A:92:LEU:CA	1:A:96:ALA:HB3	0.53	2.31	10	3
1:A:240:VAL:O	1:A:241:PHE:CD1	0.53	2.60	7	4
1:A:123:PHE:O	1:A:123:PHE:CG	0.53	2.61	5	1
1:A:205:LEU:CD2	1:A:230:VAL:HG22	0.53	2.33	5	1
1:A:88:PHE:O	1:A:92:LEU:CD1	0.53	2.56	7	2
1:A:124:VAL:HG21	1:A:222:MET:HE2	0.53	1.78	7	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:235:ILE:HD11	0.53	1.80	8	2
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:HD13	0.53	2.03	9	2
1:A:211:ASN:CB	1:A:235:ILE:HD11	0.53	2.33	10	1
1:A:113:LEU:HB3	1:A:123:PHE:CE2	0.53	2.38	6	4
1:A:55:ILE:HG13	1:A:56:PRO:CD	0.53	2.33	2	1
1:A:127:GLY:CA	1:A:155:VAL:CG1	0.53	2.85	2	4
1:A:131:ALA:O	1:A:134:VAL:CG2	0.53	2.56	4	6
1:A:79:LEU:HD13	1:A:128:THR:HG23	0.53	1.79	10	3
1:A:198:ILE:CD1	1:A:229:LEU:HD11	0.53	2.30	3	2
1:A:191:GLU:CA	1:A:250:ALA:O	0.53	2.56	4	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:65:SER:HA	0.53	2.34	10	2
1:A:202:ARG:NE	1:A:229:LEU:HD22	0.53	2.18	8	2
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:CG2	0.53	2.56	8	1
1:A:219:PRO:HB3	1:A:250:ALA:CB	0.53	2.34	9	1
1:A:48:GLY:O	1:A:110:VAL:CG2	0.53	2.57	10	1
1:A:140:MET:O	1:A:145:ALA:HB3	0.53	2.03	1	1
1:A:234:GLY:O	1:A:236:PRO:CD	0.53	2.57	1	3
1:A:43:VAL:CG2	1:A:71:ASN:O	0.53	2.55	8	2
1:A:149:THR:O	1:A:177:LEU:CB	0.53	2.56	10	3
1:A:216:LEU:HB3	1:A:223:ILE:HD11	0.53	1.79	3	1
1:A:216:LEU:HB3	1:A:223:ILE:CD1	0.53	2.34	4	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:65:SER:CA	0.53	2.33	5	1
1:A:122:TYR:CB	1:A:152:TYR:CZ	0.53	2.92	9	2
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:CD1	0.53	2.56	4	3
1:A:214:ILE:C	1:A:215:TYR:CD1	0.53	2.82	7	10
1:A:55:ILE:HD13	1:A:91:TYR:CD2	0.53	2.39	4	1
1:A:140:MET:O	1:A:174:MET:CE	0.53	2.57	6	2
1:A:110:VAL:HG21	2:A:252:FDA:C7M	0.53	2.28	5	1
1:A:126:GLY:O	1:A:246:LEU:CD1	0.53	2.57	6	1
1:A:161:LEU:O	1:A:162:PHE:CB	0.53	2.55	6	1
1:A:26:THR:HG22	1:A:128:THR:HG21	0.53	1.79	9	1
1:A:81:ARG:NH1	1:A:161:LEU:HD11	0.53	2.19	2	1
1:A:149:THR:O	1:A:177:LEU:HB2	0.53	2.03	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:VAL:CG2	1:A:89:SER:HB2	0.53	2.34	6	5
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:CG	0.53	2.56	9	3
1:A:141:GLN:NE2	1:A:177:LEU:CD2	0.53	2.71	7	1
1:A:50:PHE:CB	2:A:252:FDA:HM72	0.53	2.33	8	1
1:A:91:TYR:O	1:A:95:ASP:CB	0.53	2.56	9	1
1:A:12:PHE:O	1:A:103:SER:CB	0.53	2.57	2	3
1:A:70:PRO:O	1:A:71:ASN:CB	0.53	2.57	6	1
1:A:121:ARG:NH2	1:A:149:THR:CG2	0.53	2.72	10	1
1:A:152:TYR:CE1	1:A:180:LYS:HG2	0.53	2.39	10	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:63:SER:HB3	0.53	2.38	1	2
1:A:64:TYR:CE2	2:A:252:FDA:N3	0.53	2.77	5	6
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:CG1	0.53	2.57	5	3
1:A:156:ASN:HB2	1:A:188:GLY:N	0.53	2.19	10	4
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:CG	0.53	2.97	2	3
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:HD23	0.53	2.34	4	2
1:A:223:ILE:CD1	1:A:243:GLU:O	0.53	2.57	3	3
1:A:64:TYR:CE1	1:A:78:PHE:HB2	0.53	2.39	8	5
1:A:12:PHE:CZ	1:A:34:ARG:HB2	0.53	2.38	4	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:104:VAL:CG1	0.53	2.92	5	1
1:A:51:MET:O	1:A:63:SER:CA	0.53	2.57	7	2
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:VAL:HG13	0.53	1.81	1	1
1:A:222:MET:HB2	1:A:251:ALA:HB3	0.53	1.80	1	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:100:GLN:O	0.53	2.57	2	3
1:A:210:ALA:CA	1:A:214:ILE:HD11	0.53	2.34	2	3
1:A:246:LEU:CD2	2:A:252:FDA:O2	0.53	2.57	8	4
1:A:146:PRO:O	1:A:175:ARG:CB	0.53	2.56	9	2
1:A:44:LYS:HA	1:A:70:PRO:N	0.53	2.18	5	1
1:A:191:GLU:CG	1:A:250:ALA:O	0.53	2.57	8	1
2:A:252:FDA:HN1	2:A:252:FDA:H3'	0.53	1.64	8	2
1:A:156:ASN:ND2	2:A:252:FDA:H62A	0.53	2.02	10	1
1:A:54:THR:O	1:A:55:ILE:C	0.53	2.47	7	10
1:A:190:TRP:N	1:A:248:SER:OG	0.53	2.42	1	3
1:A:15:GLU:CG	1:A:15:GLU:O	0.53	2.57	2	1
1:A:114:LYS:HB2	1:A:241:PHE:CD2	0.53	2.39	2	4
1:A:85:GLU:N	1:A:89:SER:OG	0.53	2.42	4	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:ARG:CG	0.53	2.57	6	3
1:A:45:PHE:CE1	1:A:136:MET:HA	0.53	2.39	8	1
1:A:196:SER:HB2	1:A:197:PRO:CD	0.53	2.34	8	1
1:A:25:ASN:CB	1:A:82:VAL:O	0.52	2.57	6	5
1:A:84:PRO:O	1:A:85:GLU:CB	0.52	2.57	10	2
1:A:215:TYR:CD1	1:A:215:TYR:N	0.52	2.76	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:CG	1:A:32:GLN:O	0.52	2.56	2	2
1:A:112:GLY:O	1:A:215:TYR:HA	0.52	2.04	10	5
1:A:129:GLY:CA	2:A:252:FDA:O4	0.52	2.57	3	2
1:A:29:PHE:CD1	1:A:31:LEU:CD2	0.52	2.91	4	2
1:A:69:LEU:HD13	1:A:135:SER:HB2	0.52	1.81	4	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD1	0.52	2.72	6	1
1:A:45:PHE:O	1:A:45:PHE:CD2	0.52	2.62	9	2
1:A:143:TRP:O	1:A:144:THR:CG2	0.52	2.57	7	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:131:ALA:CA	0.52	2.33	9	1
1:A:151:ILE:CG2	1:A:151:ILE:O	0.52	2.55	9	1
1:A:93:ARG:O	1:A:97:ARG:CG	0.52	2.57	9	2
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:CD2	0.52	2.56	8	3
1:A:150:ARG:NH2	1:A:209:ASP:OD1	0.52	2.43	3	1
1:A:48:GLY:O	1:A:110:VAL:CG1	0.52	2.57	5	1
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:CB	0.52	2.91	10	2
1:A:170:LEU:O	1:A:174:MET:HB3	0.52	2.04	10	2
1:A:50:PHE:CE2	2:A:252:FDA:C7M	0.52	2.93	1	3
1:A:150:ARG:CZ	1:A:178:THR:OG1	0.52	2.57	1	2
1:A:156:ASN:O	1:A:157:THR:C	0.52	2.47	6	9
1:A:163:TYR:O	1:A:167:LEU:CD1	0.52	2.57	1	2
1:A:192:GLY:CA	1:A:250:ALA:O	0.52	2.57	1	1
1:A:47:PRO:O	1:A:110:VAL:CG1	0.52	2.57	2	2
1:A:158:GLU:O	1:A:160:GLU:N	0.52	2.42	4	3
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:HD2	0.52	2.40	6	3
1:A:127:GLY:N	1:A:155:VAL:HG12	0.52	2.20	6	2
1:A:137:VAL:HG12	1:A:141:GLN:HE22	0.52	1.65	3	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:PHE:CG	0.52	2.92	6	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:152:TYR:O	0.52	2.57	8	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:56:PRO:CD	0.52	2.88	1	4
1:A:192:GLY:N	1:A:250:ALA:O	0.52	2.42	1	1
1:A:222:MET:CE	1:A:243:GLU:O	0.52	2.57	1	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:242:PHE:CE1	0.52	2.92	1	1
1:A:245:PHE:CD1	2:A:252:FDA:C4	0.52	2.92	6	6
1:A:27:VAL:HG12	1:A:80:ILE:O	0.52	2.04	3	4
1:A:98:VAL:O	1:A:98:VAL:CG1	0.52	2.58	2	1
1:A:156:ASN:O	1:A:183:VAL:CG1	0.52	2.56	5	4
1:A:14:ALA:HB3	1:A:102:LEU:CD1	0.52	2.34	7	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:75:ARG:O	0.52	2.56	8	1
1:A:50:PHE:CD2	2:A:252:FDA:C7M	0.52	2.92	3	8
1:A:131:ALA:N	1:A:132:PRO:HD2	0.52	2.20	6	2
1:A:16:VAL:HG12	1:A:102:LEU:HD23	0.52	1.82	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:VAL:HG12	1:A:141:GLN:CD	0.52	2.25	6	1
1:A:212:PRO:O	1:A:240:VAL:CG2	0.52	2.58	6	1
1:A:25:ASN:CA	1:A:82:VAL:O	0.52	2.57	10	6
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:HG	0.52	2.38	1	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HB	0.52	2.40	2	1
1:A:80:ILE:CG2	1:A:82:VAL:HG12	0.52	2.35	7	4
1:A:220:PRO:O	1:A:223:ILE:HB	0.52	2.04	4	4
1:A:222:MET:O	1:A:226:ALA:HB2	0.52	2.03	4	2
1:A:223:ILE:HD11	1:A:243:GLU:N	0.52	2.20	2	1
1:A:71:ASN:O	1:A:73:GLU:N	0.52	2.42	3	1
1:A:198:ILE:O	1:A:198:ILE:HG13	0.52	2.04	3	1
1:A:33:LYS:CD	1:A:104:VAL:HG11	0.52	2.34	4	1
1:A:198:ILE:O	1:A:201:LEU:HD22	0.52	2.04	5	1
1:A:166:GLU:O	1:A:170:LEU:CD2	0.52	2.57	6	2
1:A:222:MET:SD	1:A:223:ILE:N	0.52	2.83	5	2
1:A:63:SER:O	2:A:252:FDA:H2'	0.52	2.05	2	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:PHE:N	0.52	2.71	2	2
1:A:81:ARG:NH1	1:A:246:LEU:CD2	0.52	2.72	4	1
1:A:82:VAL:HG23	1:A:89:SER:HB2	0.52	1.81	4	2
1:A:155:VAL:CG2	1:A:161:LEU:CD1	0.52	2.82	4	2
1:A:157:THR:HA	1:A:183:VAL:CG1	0.52	2.35	6	4
1:A:70:PRO:O	1:A:71:ASN:ND2	0.52	2.42	6	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:152:TYR:CZ	0.52	2.40	8	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:29:PHE:CE2	0.52	2.40	10	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:139:GLN:HG3	0.52	2.39	1	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:108:LEU:HD11	0.52	2.40	2	3
1:A:55:ILE:HG12	1:A:56:PRO:HD3	0.52	1.82	5	6
1:A:149:THR:O	1:A:177:LEU:HA	0.52	2.05	2	10
1:A:214:ILE:CB	1:A:240:VAL:HG22	0.52	2.32	8	6
1:A:223:ILE:HG13	1:A:242:PHE:CB	0.52	2.35	9	3
1:A:26:THR:HG23	1:A:128:THR:HG21	0.52	1.81	2	1
1:A:29:PHE:CD1	1:A:29:PHE:O	0.52	2.63	2	1
1:A:211:ASN:N	1:A:214:ILE:HD13	0.52	2.20	9	6
1:A:230:VAL:CG1	1:A:238:GLU:HA	0.52	2.35	6	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:56:PRO:CD	0.52	2.35	4	5
1:A:16:VAL:O	1:A:99:GLY:CA	0.52	2.58	2	1
1:A:17:VAL:CA	1:A:98:VAL:CG1	0.52	2.88	3	1
1:A:121:ARG:HB2	1:A:215:TYR:CE2	0.52	2.40	10	5
1:A:61:SER:O	1:A:62:ARG:CB	0.52	2.58	6	2
1:A:202:ARG:O	1:A:233:ARG:NE	0.52	2.43	5	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:139:GLN:CD	0.52	2.83	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:O	1:A:139:GLN:NE2	0.52	2.43	1	1
1:A:119:ALA:O	1:A:121:ARG:NE	0.52	2.43	1	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:LEU:HB3	0.52	2.40	6	2
1:A:14:ALA:O	1:A:101:VAL:CG1	0.52	2.58	3	3
1:A:12:PHE:CD1	1:A:13:GLU:O	0.52	2.63	9	1
1:A:44:LYS:O	1:A:46:GLU:N	0.52	2.42	10	1
1:A:157:THR:C	1:A:159:PRO:CD	0.51	2.78	1	2
2:A:252:FDA:O4'	2:A:252:FDA:H1'2	0.51	2.06	1	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:29:PHE:CE2	0.51	2.40	4	1
1:A:144:THR:O	1:A:175:ARG:CG	0.51	2.58	5	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:55:ILE:C	0.51	2.79	6	1
1:A:122:TYR:CB	1:A:152:TYR:OH	0.51	2.58	7	1
1:A:61:SER:O	1:A:62:ARG:CG	0.51	2.59	1	3
1:A:124:VAL:HG22	1:A:152:TYR:CD2	0.51	2.40	2	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:LEU:HB2	0.51	2.40	4	5
1:A:219:PRO:HB2	1:A:250:ALA:CB	0.51	2.35	3	2
1:A:25:ASN:OD1	1:A:25:ASN:N	0.51	2.43	4	1
1:A:72:PRO:O	1:A:73:GLU:CG	0.51	2.58	4	1
1:A:114:LYS:HB3	1:A:241:PHE:CZ	0.51	2.40	10	3
1:A:192:GLY:HA2	1:A:251:ALA:CB	0.51	2.34	5	3
1:A:193:GLU:CG	1:A:251:ALA:OXT	0.51	2.59	5	1
1:A:161:LEU:C	1:A:162:PHE:CG	0.51	2.82	6	1
1:A:16:VAL:HG23	1:A:99:GLY:HA2	0.51	1.83	9	1
1:A:79:LEU:CD2	1:A:128:THR:O	0.51	2.56	9	1
1:A:81:ARG:HD3	2:A:252:FDA:N7A	0.51	2.20	3	2
1:A:154:GLY:HA3	1:A:182:CYS:HB2	0.51	1.81	6	4
1:A:129:GLY:HA3	2:A:252:FDA:N3	0.51	2.20	6	4
1:A:53:LEU:CB	1:A:55:ILE:CA	0.51	2.89	6	1
1:A:171:GLU:OE2	1:A:179:VAL:N	0.51	2.43	8	1
1:A:121:ARG:NE	1:A:149:THR:HG23	0.51	2.21	10	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:31:LEU:HB3	0.51	2.35	6	3
1:A:245:PHE:HE1	1:A:246:LEU:HD23	0.51	1.59	1	1
1:A:64:TYR:CE2	2:A:252:FDA:C2	0.51	2.94	10	4
1:A:210:ALA:HA	1:A:214:ILE:CD1	0.51	2.36	2	3
1:A:51:MET:CB	1:A:105:LYS:O	0.51	2.59	3	1
1:A:222:MET:CA	1:A:251:ALA:HA	0.51	2.36	9	4
1:A:14:ALA:CB	1:A:31:LEU:CB	0.51	2.88	6	1
1:A:55:ILE:HB	1:A:56:PRO:CD	0.51	2.34	6	2
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:CD2	0.51	2.57	6	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:91:TYR:CD2	0.51	2.40	9	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:78:PHE:CE1	0.51	2.94	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ILE:CG1	1:A:56:PRO:HD3	0.51	2.36	1	6
1:A:140:MET:SD	1:A:149:THR:CG2	0.51	2.99	1	1
1:A:156:ASN:HA	1:A:186:PRO:HG2	0.51	1.81	4	7
1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLU:CG	0.51	2.78	3	3
1:A:17:VAL:O	1:A:17:VAL:CG2	0.51	2.57	10	6
1:A:192:GLY:HA2	1:A:251:ALA:N	0.51	2.21	4	6
1:A:44:LYS:CG	1:A:44:LYS:O	0.51	2.57	5	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:235:ILE:HD13	0.51	1.82	7	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:128:THR:HG22	0.51	1.81	1	3
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD2	0.51	2.79	1	1
1:A:95:ASP:O	1:A:100:GLN:NE2	0.51	2.43	2	1
1:A:121:ARG:NH1	1:A:215:TYR:HH	0.51	2.03	2	1
1:A:235:ILE:O	1:A:235:ILE:CD1	0.51	2.57	2	2
1:A:133:VAL:CG2	1:A:217:CYS:SG	0.51	2.99	3	1
1:A:33:LYS:HD3	1:A:104:VAL:HG11	0.51	1.83	4	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:92:LEU:O	0.51	2.58	5	1
1:A:49:GLN:C	1:A:50:PHE:CD1	0.51	2.83	6	1
1:A:216:LEU:HD12	1:A:242:PHE:HB3	0.51	1.81	7	1
1:A:195:GLY:O	1:A:197:PRO:CD	0.51	2.58	8	1
1:A:230:VAL:CG1	1:A:235:ILE:CG2	0.51	2.87	10	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:71:ASN:ND2	0.51	2.21	2	1
1:A:45:PHE:N	1:A:69:LEU:O	0.51	2.43	6	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:33:LYS:HG2	0.51	2.40	5	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:PHE:HZ	0.51	1.63	7	1
1:A:155:VAL:HG11	1:A:161:LEU:HD22	0.51	1.80	1	1
1:A:27:VAL:HG12	1:A:82:VAL:HG13	0.51	1.82	8	5
1:A:58:THR:HG21	1:A:91:TYR:CE1	0.51	2.40	2	1
1:A:122:TYR:CG	1:A:150:ARG:HB2	0.51	2.41	2	4
1:A:31:LEU:HD22	1:A:102:LEU:CD2	0.51	2.21	8	2
1:A:43:VAL:O	1:A:71:ASN:O	0.51	2.29	4	3
1:A:122:TYR:CE1	1:A:150:ARG:HG3	0.51	2.40	5	1
1:A:199:ASP:OD1	1:A:202:ARG:NH2	0.51	2.44	6	1
1:A:14:ALA:HB3	1:A:102:LEU:HD13	0.51	1.82	7	1
1:A:188:GLY:HA3	2:A:252:FDA:N1A	0.51	2.21	8	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:66:PRO:CD	0.51	2.35	9	8
1:A:153:PHE:O	1:A:182:CYS:SG	0.51	2.69	8	9
1:A:230:VAL:HA	1:A:235:ILE:HG22	0.51	1.82	1	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:96:ALA:HB2	0.51	1.80	2	3
1:A:197:PRO:O	1:A:199:ASP:N	0.51	2.44	3	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:65:SER:HB3	0.51	2.41	4	1
1:A:133:VAL:CG2	1:A:217:CYS:CB	0.51	2.89	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:VAL:O	1:A:183:VAL:HG23	0.51	2.05	6	1
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:HG	0.51	2.06	9	2
1:A:124:VAL:HB	1:A:152:TYR:CD1	0.51	2.41	7	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:235:ILE:HG21	0.51	2.36	7	1
1:A:232:SER:OG	1:A:233:ARG:NH1	0.51	2.44	9	1
1:A:202:ARG:O	1:A:205:LEU:HG	0.51	2.06	3	7
1:A:211:ASN:ND2	1:A:236:PRO:O	0.51	2.43	2	2
1:A:121:ARG:NH1	1:A:215:TYR:OH	0.51	2.44	2	1
1:A:129:GLY:O	1:A:132:PRO:CD	0.51	2.59	8	2
1:A:167:LEU:CD2	1:A:179:VAL:HG21	0.51	2.37	2	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CD1	0.51	2.98	5	1
1:A:124:VAL:HA	1:A:152:TYR:CB	0.51	2.36	5	1
1:A:174:MET:CG	1:A:177:LEU:HB3	0.51	2.36	8	2
1:A:61:SER:O	1:A:62:ARG:CD	0.51	2.59	6	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:243:GLU:OE2	0.51	2.64	8	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:PHE:C	0.51	2.48	10	1
1:A:164:ILE:HA	1:A:167:LEU:HD11	0.50	1.82	10	2
1:A:212:PRO:O	1:A:239:GLN:N	0.50	2.43	5	5
1:A:155:VAL:HG22	1:A:161:LEU:CD2	0.50	2.36	6	2
1:A:156:ASN:C	1:A:183:VAL:CG2	0.50	2.80	6	1
1:A:124:VAL:HG11	1:A:152:TYR:CE2	0.50	2.41	8	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:179:VAL:HG23	0.50	2.35	8	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:108:LEU:HD13	0.50	2.40	10	1
1:A:52:ASP:O	1:A:105:LYS:O	0.50	2.28	9	3
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:HB3	0.50	2.36	3	1
1:A:111:PHE:CA	1:A:243:GLU:OE2	0.50	2.59	4	1
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:CD2	0.50	2.78	6	2
1:A:50:PHE:HB3	2:A:252:FDA:HM72	0.50	1.83	5	1
1:A:84:PRO:O	1:A:85:GLU:CG	0.50	2.59	8	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:63:SER:HB3	0.50	2.42	10	1
1:A:158:GLU:N	1:A:159:PRO:HD2	0.50	2.20	5	4
1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:OD1	0.50	2.43	9	2
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.50	2.85	3	7
1:A:182:CYS:HA	1:A:194:GLN:CB	0.50	2.36	3	3
1:A:191:GLU:H	1:A:251:ALA:HB2	0.50	1.66	3	1
1:A:151:ILE:HG22	1:A:179:VAL:HA	0.50	1.82	5	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:159:PRO:HD3	0.50	1.81	10	1
1:A:235:ILE:CG2	1:A:235:ILE:O	0.50	2.55	1	1
1:A:68:ASN:HB2	1:A:75:ARG:O	0.50	2.07	6	4
1:A:113:LEU:HB2	1:A:123:PHE:CD2	0.50	2.42	2	1
1:A:144:THR:O	1:A:145:ALA:O	0.50	2.29	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:ASN:C	1:A:176:ASN:ND2	0.50	2.65	9	5
1:A:67:ALA:O	1:A:68:ASN:OD1	0.50	2.29	3	1
1:A:78:PHE:C	1:A:79:LEU:HD12	0.50	2.27	6	1
1:A:51:MET:N	1:A:108:LEU:CD2	0.50	2.74	7	1
1:A:192:GLY:HA2	1:A:251:ALA:HB2	0.50	1.81	8	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HD12	0.50	2.42	5	2
1:A:133:VAL:CG2	1:A:217:CYS:HB2	0.50	2.37	4	1
1:A:223:ILE:CG1	1:A:242:PHE:HB2	0.50	2.35	4	3
1:A:50:PHE:HB2	1:A:65:SER:N	0.50	2.22	5	1
1:A:198:ILE:CG1	1:A:201:LEU:HD21	0.50	2.37	5	1
1:A:67:ALA:O	1:A:68:ASN:HB3	0.50	2.06	6	1
1:A:173:SER:O	1:A:174:MET:O	0.50	2.29	7	2
1:A:51:MET:C	1:A:108:LEU:CD2	0.50	2.80	7	1
1:A:227:CYS:SG	1:A:231:ARG:CZ	0.50	2.99	7	1
1:A:219:PRO:CB	1:A:250:ALA:O	0.50	2.60	9	1
1:A:54:THR:HA	1:A:61:SER:CB	0.50	2.37	9	10
1:A:123:PHE:CE2	1:A:133:VAL:CG1	0.50	2.81	3	3
1:A:48:GLY:O	1:A:49:GLN:O	0.50	2.30	9	4
1:A:54:THR:CG2	1:A:58:THR:OG1	0.50	2.60	10	4
1:A:129:GLY:CA	1:A:245:PHE:CE1	0.50	2.95	5	6
1:A:201:LEU:HB3	1:A:229:LEU:HD13	0.50	1.84	2	1
1:A:205:LEU:HD13	1:A:229:LEU:HB2	0.50	1.84	2	1
1:A:218:GLY:HA2	1:A:245:PHE:CD2	0.50	2.41	3	4
1:A:174:MET:HB3	1:A:177:LEU:HD12	0.50	1.83	5	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:136:MET:HG2	0.50	2.42	8	1
1:A:144:THR:C	1:A:146:PRO:CD	0.50	2.80	1	2
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:HB3	0.50	2.47	8	9
1:A:192:GLY:O	1:A:249:GLY:O	0.50	2.30	8	6
1:A:218:GLY:HA2	1:A:245:PHE:CG	0.50	2.41	2	4
1:A:83:LEU:O	1:A:85:GLU:N	0.50	2.43	3	2
1:A:171:GLU:CG	1:A:179:VAL:CG2	0.50	2.89	8	1
1:A:199:ASP:OD1	1:A:202:ARG:NE	0.50	2.44	9	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:29:PHE:CE1	0.50	2.42	1	3
1:A:43:VAL:HB	1:A:69:LEU:O	0.50	2.07	4	4
1:A:124:VAL:CB	1:A:152:TYR:HB2	0.50	2.36	3	2
1:A:140:MET:SD	1:A:149:THR:HG21	0.50	2.47	3	2
1:A:235:ILE:N	1:A:236:PRO:HD2	0.50	2.20	3	1
1:A:55:ILE:CB	1:A:56:PRO:CD	0.50	2.90	8	3
1:A:55:ILE:HG23	1:A:96:ALA:CB	0.50	2.37	6	1
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:CG1	0.50	2.59	7	2
1:A:143:TRP:CD1	1:A:145:ALA:N	0.50	2.80	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:OE1	0.50	2.44	9	1
1:A:81:ARG:CB	2:A:252:FDA:H8A	0.50	2.36	9	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:63:SER:HB2	0.50	2.41	10	1
1:A:217:CYS:C	1:A:219:PRO:CD	0.50	2.80	8	3
1:A:21:TRP:CD1	1:A:21:TRP:N	0.50	2.80	6	3
1:A:160:GLU:O	1:A:161:LEU:O	0.50	2.29	6	3
1:A:45:PHE:CD2	1:A:139:GLN:HG3	0.50	2.42	8	1
1:A:58:THR:O	1:A:59:ASP:CB	0.49	2.59	1	2
1:A:113:LEU:HD22	1:A:133:VAL:HG22	0.49	1.82	2	1
1:A:113:LEU:HB3	1:A:123:PHE:CZ	0.49	2.41	8	2
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:O	0.49	2.29	3	2
1:A:12:PHE:CZ	1:A:104:VAL:CG2	0.49	2.96	5	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:186:PRO:C	0.49	2.80	6	1
1:A:184:TRP:CE2	1:A:186:PRO:HG3	0.49	2.42	6	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:215:TYR:CD2	0.49	2.42	1	2
1:A:17:VAL:HA	1:A:98:VAL:CG1	0.49	2.37	3	1
1:A:63:SER:OG	1:A:108:LEU:HD21	0.49	2.07	3	1
1:A:70:PRO:C	1:A:71:ASN:ND2	0.49	2.65	4	1
1:A:27:VAL:CG1	1:A:82:VAL:HG13	0.49	2.36	10	2
1:A:123:PHE:CE2	1:A:151:ILE:HD11	0.49	2.41	5	1
1:A:156:ASN:ND2	1:A:160:GLU:CB	0.49	2.75	5	1
1:A:157:THR:HA	1:A:183:VAL:HG13	0.49	1.82	6	1
1:A:211:ASN:HA	1:A:235:ILE:HD13	0.49	1.82	6	1
1:A:124:VAL:HG21	1:A:193:GLU:CD	0.49	2.28	9	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:VAL:CG1	0.49	2.37	5	2
1:A:43:VAL:HG22	1:A:73:GLU:N	0.49	2.22	2	1
1:A:140:MET:HA	1:A:143:TRP:NE1	0.49	2.23	10	6
1:A:214:ILE:HG21	1:A:238:GLU:O	0.49	2.06	2	1
1:A:79:LEU:CB	1:A:128:THR:HG22	0.49	2.37	3	3
1:A:187:SER:O	2:A:252:FDA:N1A	0.49	2.45	3	1
1:A:53:LEU:CG	1:A:102:LEU:HD11	0.49	2.37	5	1
1:A:88:PHE:CB	2:A:252:FDA:O1A	0.49	2.61	5	1
1:A:54:THR:HG1	1:A:60:VAL:H	0.49	1.50	7	1
1:A:122:TYR:CZ	1:A:150:ARG:HD3	0.49	2.42	7	3
1:A:83:LEU:HD12	1:A:87:ARG:CG	0.49	2.38	8	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:108:LEU:CD2	0.49	2.37	9	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:88:PHE:CZ	0.49	2.42	9	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:70:PRO:HB3	0.49	2.42	10	1
1:A:33:LYS:O	1:A:33:LYS:CG	0.49	2.61	1	1
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD2	0.49	2.79	7	7
1:A:141:GLN:HE22	1:A:170:LEU:HD22	0.49	1.68	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:ILE:C	1:A:151:ILE:CD1	0.49	2.79	2	4
1:A:182:CYS:O	1:A:183:VAL:O	0.49	2.30	4	7
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:LEU:HG	0.49	2.42	9	2
1:A:49:GLN:NE2	1:A:108:LEU:O	0.49	2.46	3	2
1:A:192:GLY:O	1:A:251:ALA:N	0.49	2.45	9	1
1:A:26:THR:HG23	1:A:81:ARG:CG	0.49	2.32	10	1
1:A:15:GLU:N	1:A:33:LYS:HB2	0.49	2.22	1	3
1:A:155:VAL:CB	1:A:161:LEU:HD13	0.49	2.37	1	2
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:HB3	0.49	2.42	1	1
1:A:246:LEU:HB2	1:A:247:PRO:CD	0.49	2.36	1	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:179:VAL:HG21	0.49	1.84	2	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:229:LEU:HD12	0.49	2.37	2	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:65:SER:HB2	0.49	2.41	4	3
1:A:113:LEU:HB2	1:A:123:PHE:CE2	0.49	2.42	4	2
1:A:119:ALA:HB3	1:A:121:ARG:HH12	0.49	1.66	5	1
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HD21	0.49	2.06	9	1
1:A:69:LEU:HB3	1:A:70:PRO:CD	0.49	2.37	10	1
1:A:106:GLY:O	1:A:108:LEU:N	0.49	2.42	1	2
1:A:43:VAL:CG2	1:A:73:GLU:HA	0.49	2.38	2	1
1:A:98:VAL:O	1:A:99:GLY:C	0.49	2.51	2	2
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:N	0.49	2.81	4	2
1:A:199:ASP:N	1:A:199:ASP:OD1	0.49	2.45	5	2
1:A:121:ARG:CG	1:A:215:TYR:OH	0.49	2.60	4	3
1:A:44:LYS:O	1:A:45:PHE:CB	0.49	2.60	4	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:N	0.49	2.80	4	3
1:A:49:GLN:O	1:A:65:SER:CB	0.49	2.61	5	2
1:A:105:LYS:C	1:A:107:PRO:CD	0.49	2.80	7	1
1:A:143:TRP:HD1	1:A:145:ALA:HB2	0.49	1.64	7	1
1:A:122:TYR:CD2	1:A:150:ARG:HD2	0.49	2.42	8	1
1:A:190:TRP:CZ3	1:A:191:GLU:O	0.49	2.65	9	2
1:A:83:LEU:CB	1:A:84:PRO:CD	0.49	2.90	10	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:235:ILE:HB	0.49	2.36	10	1
1:A:211:ASN:CA	1:A:235:ILE:HD11	0.49	2.38	10	1
1:A:122:TYR:HA	1:A:150:ARG:O	0.49	2.08	2	7
1:A:81:ARG:NH1	2:A:252:FDA:N7A	0.49	2.60	4	1
1:A:141:GLN:HB3	1:A:170:LEU:CD2	0.49	2.37	4	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:151:ILE:CD1	0.49	2.96	5	1
1:A:68:ASN:HA	1:A:75:ARG:O	0.49	2.07	5	3
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:LEU:N	0.49	2.80	10	2
1:A:55:ILE:HD12	1:A:55:ILE:O	0.49	2.08	2	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:29:PHE:CD2	0.49	2.43	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:HD22	1:A:123:PHE:HZ	0.49	1.60	8	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:82:VAL:HG13	0.49	1.85	10	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:104:VAL:HG12	0.49	1.85	10	1
1:A:220:PRO:O	1:A:223:ILE:HG22	0.49	2.08	1	2
1:A:143:TRP:O	1:A:144:THR:CB	0.49	2.60	7	1
1:A:43:VAL:CG1	1:A:68:ASN:OD1	0.49	2.57	9	1
1:A:211:ASN:CG	1:A:235:ILE:CD1	0.49	2.82	9	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:33:LYS:HB2	0.49	2.38	10	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:N	0.49	2.46	1	1
1:A:211:ASN:O	1:A:237:GLY:O	0.49	2.31	2	1
1:A:68:ASN:HB3	1:A:76:LEU:HA	0.49	1.85	3	1
1:A:81:ARG:O	2:A:252:FDA:H51A	0.49	2.07	3	1
1:A:145:ALA:N	1:A:146:PRO:HD3	0.49	2.23	3	1
1:A:201:LEU:N	1:A:201:LEU:CD1	0.49	2.73	5	1
1:A:205:LEU:HD21	1:A:230:VAL:HG13	0.49	1.84	5	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:236:PRO:O	0.49	2.31	6	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:98:VAL:HA	0.49	2.38	7	1
1:A:83:LEU:HD13	2:A:252:FDA:C4B	0.49	2.38	7	1
1:A:65:SER:HG	1:A:132:PRO:CG	0.49	2.21	9	1
1:A:201:LEU:N	1:A:201:LEU:HD22	0.49	2.22	9	1
1:A:68:ASN:ND2	1:A:73:GLU:HA	0.48	2.23	2	1
1:A:220:PRO:O	1:A:223:ILE:CB	0.48	2.61	4	3
1:A:13:GLU:O	1:A:33:LYS:HB3	0.48	2.08	10	3
1:A:67:ALA:O	1:A:68:ASN:HB2	0.48	2.08	4	1
1:A:198:ILE:HG23	1:A:229:LEU:CD1	0.48	2.37	5	1
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG22	0.48	2.08	8	2
1:A:152:TYR:HB3	1:A:180:LYS:CB	0.48	2.38	8	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:96:ALA:HB3	0.48	1.82	9	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:80:ILE:O	0.48	2.08	10	1
1:A:79:LEU:CD2	1:A:128:THR:CG2	0.48	2.81	1	1
1:A:130:LEU:O	1:A:133:VAL:N	0.48	2.47	4	4
1:A:157:THR:N	1:A:186:PRO:HD2	0.48	2.23	7	3
1:A:48:GLY:CA	1:A:111:PHE:CE2	0.48	2.96	4	1
1:A:28:GLN:HB2	1:A:79:LEU:HD21	0.48	1.85	5	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:217:CYS:HB2	0.48	2.42	6	1
1:A:214:ILE:O	1:A:241:PHE:O	0.48	2.31	6	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:92:LEU:HA	0.48	2.38	7	1
1:A:83:LEU:CD1	2:A:252:FDA:O4B	0.48	2.61	7	1
1:A:152:TYR:CB	1:A:193:GLU:OE2	0.48	2.60	7	1
1:A:202:ARG:CG	1:A:229:LEU:HD22	0.48	2.38	9	1
1:A:48:GLY:O	1:A:49:GLN:C	0.48	2.51	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:218:GLY:O	1:A:220:PRO:HD3	0.48	2.08	4	3
1:A:50:PHE:HB3	1:A:65:SER:CA	0.48	2.38	10	2
1:A:50:PHE:O	1:A:106:GLY:O	0.48	2.31	5	3
1:A:205:LEU:CD2	1:A:235:ILE:HG12	0.48	2.39	5	1
1:A:43:VAL:HG12	1:A:72:PRO:HA	0.48	1.85	6	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:235:ILE:CD1	0.48	2.37	8	2
1:A:192:GLY:CA	1:A:251:ALA:N	0.48	2.76	9	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:78:PHE:CE2	0.48	2.42	10	1
1:A:56:PRO:HG2	1:A:58:THR:CG2	0.48	2.37	6	5
1:A:157:THR:O	1:A:158:GLU:HB2	0.48	2.08	3	9
1:A:81:ARG:NH2	1:A:128:THR:OG1	0.48	2.46	3	1
1:A:48:GLY:CA	1:A:111:PHE:CD2	0.48	2.96	4	1
1:A:174:MET:HB2	1:A:177:LEU:CD2	0.48	2.39	4	1
1:A:205:LEU:HD21	1:A:235:ILE:HD11	0.48	1.85	5	1
1:A:96:ALA:O	1:A:97:ARG:O	0.48	2.32	8	4
1:A:194:GLN:O	1:A:197:PRO:CG	0.48	2.62	7	1
1:A:146:PRO:O	1:A:147:ASN:O	0.48	2.31	9	1
1:A:12:PHE:O	1:A:103:SER:CA	0.48	2.61	1	2
1:A:65:SER:OG	2:A:252:FDA:H6	0.48	2.08	1	1
1:A:214:ILE:HB	1:A:238:GLU:O	0.48	2.09	2	1
1:A:223:ILE:HD12	1:A:243:GLU:O	0.48	2.08	2	1
1:A:67:ALA:O	1:A:76:LEU:HA	0.48	2.08	3	3
1:A:136:MET:O	1:A:136:MET:CE	0.48	2.61	3	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:110:VAL:O	0.48	2.65	4	1
1:A:89:SER:HA	1:A:92:LEU:CD1	0.48	2.38	7	2
1:A:51:MET:CB	1:A:106:GLY:HA3	0.48	2.38	8	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:79:LEU:O	0.48	2.32	9	7
1:A:144:THR:O	1:A:144:THR:OG1	0.48	2.28	9	3
1:A:219:PRO:HB2	1:A:222:MET:CB	0.48	2.38	4	4
1:A:82:VAL:HG23	1:A:89:SER:HB3	0.48	1.85	4	1
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLN:O	0.48	2.32	4	3
1:A:191:GLU:C	1:A:251:ALA:CB	0.48	2.82	6	2
1:A:216:LEU:O	1:A:243:GLU:O	0.48	2.31	6	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:235:ILE:CD1	0.48	2.37	9	2
1:A:29:PHE:C	1:A:30:LEU:CD1	0.48	2.82	2	3
1:A:152:TYR:CD1	1:A:180:LYS:HB3	0.48	2.44	1	1
1:A:156:ASN:CA	1:A:186:PRO:HG2	0.48	2.39	1	6
1:A:69:LEU:HG	1:A:70:PRO:CD	0.48	2.39	2	2
1:A:55:ILE:HG22	1:A:56:PRO:CD	0.48	2.38	6	2
1:A:79:LEU:HD23	1:A:128:THR:HG22	0.48	1.83	6	1
1:A:167:LEU:CB	1:A:179:VAL:HG21	0.48	2.35	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:CZ	2:A:252:FDA:C4	0.48	2.97	1	3
1:A:27:VAL:CG1	1:A:80:ILE:HG22	0.48	2.39	9	4
1:A:157:THR:O	1:A:158:GLU:CG	0.48	2.62	8	5
1:A:238:GLU:CG	1:A:238:GLU:O	0.48	2.61	2	1
1:A:29:PHE:CG	1:A:78:PHE:CE2	0.48	3.02	4	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:65:SER:CB	0.48	2.97	4	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:177:LEU:HD23	0.48	1.84	4	1
1:A:117:GLY:C	1:A:121:ARG:NH2	0.48	2.67	5	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:HD12	0.48	2.39	10	1
1:A:124:VAL:HA	1:A:152:TYR:O	0.48	2.08	9	7
1:A:140:MET:HG2	1:A:141:GLN:N	0.48	2.24	1	1
1:A:157:THR:C	1:A:159:PRO:HD2	0.48	2.29	3	2
1:A:222:MET:HE1	1:A:243:GLU:O	0.48	2.09	1	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:HG	0.48	2.38	3	3
1:A:222:MET:HE2	1:A:223:ILE:CG1	0.48	2.39	6	1
1:A:152:TYR:CB	1:A:180:LYS:HB3	0.48	2.39	8	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:56:PRO:N	0.48	2.22	9	1
1:A:65:SER:OG	1:A:65:SER:O	0.48	2.32	9	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:HD11	0.48	2.39	9	1
1:A:50:PHE:CE2	2:A:252:FDA:HM82	0.48	2.43	10	1
1:A:141:GLN:HG2	1:A:174:MET:CG	0.48	2.39	9	2
1:A:246:LEU:O	1:A:247:PRO:O	0.48	2.31	10	3
1:A:53:LEU:HA	1:A:55:ILE:CA	0.48	2.39	6	1
1:A:218:GLY:O	1:A:244:LYS:CA	0.48	2.62	6	1
1:A:235:ILE:O	1:A:236:PRO:O	0.48	2.32	6	1
1:A:56:PRO:HB3	1:A:96:ALA:HB2	0.48	1.85	7	1
1:A:143:TRP:C	1:A:144:THR:CG2	0.48	2.81	9	2
1:A:171:GLU:O	1:A:174:MET:SD	0.48	2.71	7	2
1:A:25:ASN:O	1:A:81:ARG:HA	0.48	2.09	8	1
1:A:124:VAL:HB	1:A:152:TYR:CG	0.48	2.44	8	1
1:A:219:PRO:CG	1:A:247:PRO:HA	0.48	2.39	10	1
1:A:20:ASN:O	1:A:27:VAL:HG23	0.47	2.09	1	3
1:A:45:PHE:CD2	1:A:70:PRO:HG3	0.47	2.43	1	1
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:HB2	0.47	2.09	9	5
1:A:175:ARG:O	1:A:176:ASN:C	0.47	2.51	1	1
1:A:181:ALA:O	1:A:194:GLN:HG3	0.47	2.09	8	4
1:A:153:PHE:CD1	1:A:154:GLY:N	0.47	2.82	2	2
1:A:45:PHE:O	1:A:70:PRO:CB	0.47	2.62	3	1
1:A:53:LEU:O	1:A:62:ARG:O	0.47	2.31	3	2
1:A:106:GLY:N	1:A:107:PRO:HD3	0.47	2.24	3	1
1:A:43:VAL:CG2	1:A:68:ASN:CG	0.47	2.77	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:GLY:O	1:A:87:ARG:CB	0.47	2.62	7	2
1:A:174:MET:HG2	1:A:177:LEU:CD1	0.47	2.39	6	1
1:A:105:LYS:C	1:A:107:PRO:HD3	0.47	2.29	7	1
1:A:184:TRP:O	1:A:185:HIS:CG	0.47	2.67	10	1
1:A:33:LYS:O	1:A:34:ARG:C	0.47	2.51	4	2
1:A:124:VAL:HG13	1:A:216:LEU:CG	0.47	2.39	4	1
1:A:136:MET:HE1	1:A:140:MET:CE	0.47	2.39	6	1
1:A:156:ASN:C	1:A:183:VAL:HG22	0.47	2.28	6	1
1:A:222:MET:HA	1:A:251:ALA:CA	0.47	2.39	6	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:159:PRO:CD	0.47	2.40	10	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:22:VAL:HG12	0.47	2.25	1	6
1:A:45:PHE:CD2	1:A:70:PRO:HD3	0.47	2.44	1	1
1:A:69:LEU:HG	1:A:70:PRO:N	0.47	2.24	2	2
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ARG:HG2	0.47	2.09	7	2
1:A:235:ILE:CD1	1:A:238:GLU:HB2	0.47	2.39	2	1
1:A:43:VAL:CB	1:A:69:LEU:O	0.47	2.63	4	1
1:A:110:VAL:CG2	2:A:252:FDA:HM73	0.47	2.30	5	1
1:A:197:PRO:O	1:A:198:ILE:HB	0.47	2.09	5	2
1:A:222:MET:HA	1:A:251:ALA:HA	0.47	1.85	7	3
1:A:55:ILE:CD1	1:A:91:TYR:CB	0.47	2.93	9	1
1:A:79:LEU:CB	1:A:128:THR:O	0.47	2.62	9	1
1:A:246:LEU:HD12	1:A:247:PRO:O	0.47	2.08	1	1
1:A:14:ALA:HB3	1:A:102:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:33:LYS:CB	0.47	2.39	3	1
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:HB2	0.47	2.50	3	3
1:A:31:LEU:CD2	1:A:102:LEU:CD2	0.47	2.88	8	2
1:A:55:ILE:HD13	1:A:91:TYR:HB3	0.47	1.85	8	2
1:A:121:ARG:CZ	1:A:147:ASN:ND2	0.47	2.77	4	1
1:A:11:SER:CB	1:A:105:LYS:HB3	0.47	2.40	5	1
1:A:68:ASN:O	1:A:75:ARG:O	0.47	2.32	5	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ARG:CG	0.47	2.62	7	1
1:A:114:LYS:HG3	1:A:241:PHE:CE2	0.47	2.45	7	1
1:A:191:GLU:HB3	1:A:251:ALA:CB	0.47	2.39	7	1
1:A:186:PRO:O	1:A:187:SER:HB2	0.47	2.09	7	9
1:A:113:LEU:HA	1:A:215:TYR:HB3	0.47	1.86	2	4
1:A:205:LEU:HD12	1:A:233:ARG:CD	0.47	2.39	10	3
1:A:12:PHE:N	1:A:104:VAL:O	0.47	2.47	4	1
1:A:141:GLN:OE1	1:A:170:LEU:CD1	0.47	2.61	4	1
1:A:64:TYR:CE2	2:A:252:FDA:C4	0.47	2.97	5	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HD13	0.47	2.44	5	1
1:A:156:ASN:ND2	1:A:159:PRO:HD2	0.47	2.25	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:MET:HA	1:A:106:GLY:CA	0.47	2.40	8	1
1:A:197:PRO:O	1:A:198:ILE:C	0.47	2.53	10	1
1:A:11:SER:CB	1:A:105:LYS:CG	0.47	2.93	1	1
1:A:23:SER:HB2	1:A:26:THR:OG1	0.47	2.10	5	9
1:A:82:VAL:HB	1:A:89:SER:CB	0.47	2.38	7	3
1:A:30:LEU:HA	1:A:76:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:THR:C	0.47	2.53	3	6
1:A:211:ASN:OD1	1:A:235:ILE:O	0.47	2.32	3	2
1:A:219:PRO:CB	1:A:250:ALA:CB	0.47	2.93	3	1
1:A:153:PHE:CE2	1:A:161:LEU:CD1	0.47	2.91	5	1
1:A:222:MET:CB	1:A:251:ALA:HA	0.47	2.40	5	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:166:GLU:HG2	0.47	2.45	6	2
1:A:170:LEU:N	1:A:170:LEU:HD23	0.47	2.25	6	2
1:A:145:ALA:HB1	1:A:147:ASN:OD1	0.47	2.08	7	1
1:A:53:LEU:CB	1:A:104:VAL:HG22	0.47	2.40	8	1
1:A:157:THR:CA	1:A:183:VAL:HG11	0.47	2.40	9	1
1:A:220:PRO:O	1:A:224:ASP:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:THR:O	0.47	2.33	1	4
1:A:68:ASN:CG	1:A:75:ARG:O	0.47	2.52	8	2
1:A:123:PHE:CE1	1:A:217:CYS:HB2	0.47	2.44	1	4
1:A:160:GLU:CD	2:A:252:FDA:N1A	0.47	2.67	2	1
1:A:218:GLY:HA2	1:A:245:PHE:O	0.47	2.10	2	2
1:A:68:ASN:HB3	1:A:75:ARG:O	0.47	2.08	8	4
1:A:140:MET:O	1:A:145:ALA:N	0.47	2.46	3	1
1:A:202:ARG:HA	1:A:205:LEU:HD11	0.47	1.87	3	1
1:A:115:GLU:HB2	1:A:121:ARG:CZ	0.47	2.40	4	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:215:TYR:CE2	0.47	3.03	4	1
1:A:149:THR:HB	1:A:177:LEU:CD1	0.47	2.39	4	2
1:A:158:GLU:HA	1:A:161:LEU:HD21	0.47	1.86	4	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:78:PHE:CG	0.47	3.02	5	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:CA	0.47	2.38	8	2
1:A:43:VAL:O	1:A:44:LYS:C	0.47	2.52	6	1
1:A:55:ILE:CA	1:A:105:LYS:HG3	0.47	2.34	6	1
1:A:222:MET:HB2	1:A:250:ALA:CB	0.47	2.40	6	1
1:A:52:ASP:O	1:A:105:LYS:N	0.47	2.42	7	1
1:A:86:GLY:N	1:A:90:ASP:OD1	0.47	2.48	8	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:179:VAL:CG2	0.47	2.40	8	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:161:LEU:HD21	0.47	2.45	9	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:104:VAL:CG1	0.47	2.40	10	1
1:A:83:LEU:HG	1:A:84:PRO:CD	0.47	2.39	10	1
1:A:43:VAL:CG2	1:A:73:GLU:CA	0.47	2.85	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:CYS:HB3	1:A:193:GLU:CA	0.47	2.39	7	4
1:A:43:VAL:HG23	1:A:68:ASN:CB	0.47	2.40	5	1
1:A:108:LEU:CG	1:A:109:GLY:N	0.47	2.78	5	2
1:A:113:LEU:CB	1:A:215:TYR:HB3	0.47	2.40	9	3
1:A:170:LEU:O	1:A:174:MET:SD	0.47	2.72	7	1
1:A:223:ILE:HD11	1:A:242:PHE:C	0.47	2.31	1	1
1:A:90:ASP:O	1:A:94:ASN:OD1	0.47	2.33	2	2
1:A:122:TYR:OH	1:A:150:ARG:NE	0.47	2.42	6	2
1:A:190:TRP:O	1:A:250:ALA:CA	0.47	2.63	3	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:76:LEU:H	0.47	1.70	4	2
1:A:83:LEU:HD13	2:A:252:FDA:H1B	0.47	1.86	5	1
1:A:71:ASN:N	1:A:71:ASN:ND2	0.47	2.60	10	1
1:A:129:GLY:O	1:A:132:PRO:HD2	0.47	2.10	10	7
1:A:124:VAL:CG1	1:A:193:GLU:OE2	0.47	2.63	2	1
1:A:144:THR:O	1:A:145:ALA:C	0.47	2.53	5	7
1:A:205:LEU:CD2	1:A:230:VAL:HA	0.47	2.40	4	2
1:A:48:GLY:HA3	1:A:111:PHE:CD2	0.47	2.45	4	1
1:A:72:PRO:O	1:A:73:GLU:HG2	0.47	2.10	4	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:GLN:HG2	0.47	2.10	5	2
1:A:158:GLU:HA	1:A:161:LEU:CD2	0.47	2.40	4	1
1:A:91:TYR:CE1	1:A:95:ASP:CG	0.47	2.88	5	1
1:A:176:ASN:ND2	1:A:176:ASN:N	0.47	2.62	9	5
1:A:82:VAL:HG11	1:A:92:LEU:CD1	0.47	2.40	6	1
1:A:123:PHE:O	1:A:151:ILE:CD1	0.47	2.59	7	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:136:MET:CG	0.47	2.98	8	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:HD22	0.47	2.40	9	1
1:A:25:ASN:HA	1:A:82:VAL:O	0.46	2.11	1	8
1:A:45:PHE:CG	1:A:70:PRO:HD3	0.46	2.45	1	1
1:A:43:VAL:CA	1:A:73:GLU:HG3	0.46	2.40	2	1
1:A:71:ASN:OD1	1:A:72:PRO:HD2	0.46	2.10	2	1
1:A:246:LEU:CD2	1:A:247:PRO:HD2	0.46	2.40	10	2
1:A:124:VAL:HB	1:A:152:TYR:CB	0.46	2.40	5	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:237:GLY:CA	0.46	2.63	5	1
1:A:217:CYS:O	1:A:250:ALA:CB	0.46	2.62	5	1
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:HG2	0.46	2.50	9	1
1:A:150:ARG:CG	1:A:178:THR:OG1	0.46	2.63	10	1
1:A:164:ILE:HA	1:A:167:LEU:CD1	0.46	2.40	1	4
1:A:64:TYR:O	1:A:66:PRO:HD3	0.46	2.10	7	6
1:A:68:ASN:O	1:A:69:LEU:HB3	0.46	2.10	2	1
1:A:164:ILE:CG2	1:A:165:ASP:N	0.46	2.78	2	1
1:A:217:CYS:C	1:A:219:PRO:HD3	0.46	2.30	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:A:252:FDA:H51A	2:A:252:FDA:O1P	0.46	2.09	5	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:153:PHE:CE1	0.46	2.44	7	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:PHE:O	0.46	2.33	8	1
1:A:122:TYR:CZ	1:A:150:ARG:HG3	0.46	2.45	8	1
1:A:53:LEU:CB	1:A:104:VAL:HA	0.46	2.40	10	1
1:A:211:ASN:HB3	1:A:212:PRO:CD	0.46	2.40	1	8
1:A:214:ILE:HG22	1:A:240:VAL:HG13	0.46	1.86	8	2
1:A:218:GLY:O	1:A:244:LYS:HA	0.46	2.09	6	4
1:A:230:VAL:HG22	1:A:238:GLU:HB3	0.46	1.87	2	1
1:A:230:VAL:CG2	1:A:238:GLU:HB3	0.46	2.39	2	1
1:A:202:ARG:O	1:A:233:ARG:HD2	0.46	2.10	3	1
1:A:23:SER:OG	1:A:160:GLU:O	0.46	2.32	4	2
1:A:202:ARG:HB3	1:A:233:ARG:NE	0.46	2.26	4	3
1:A:211:ASN:CB	1:A:235:ILE:HD13	0.46	2.37	4	1
1:A:198:ILE:HD11	1:A:251:ALA:OXT	0.46	2.11	5	1
1:A:185:HIS:O	1:A:186:PRO:O	0.46	2.33	6	1
1:A:205:LEU:C	1:A:235:ILE:HG21	0.46	2.31	7	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:29:PHE:CZ	0.46	2.45	10	1
1:A:189:ASP:O	1:A:251:ALA:OXT	0.46	2.33	10	1
1:A:192:GLY:HA2	1:A:251:ALA:CA	0.46	2.41	9	4
1:A:219:PRO:HD2	1:A:250:ALA:CB	0.46	2.40	1	1
1:A:245:PHE:CD1	2:A:252:FDA:C4X	0.46	2.98	1	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:198:ILE:O	0.46	2.10	3	1
1:A:229:LEU:O	1:A:233:ARG:HG3	0.46	2.10	3	1
1:A:110:VAL:O	1:A:243:GLU:OE2	0.46	2.34	4	1
1:A:49:GLN:O	1:A:65:SER:CA	0.46	2.63	5	2
1:A:127:GLY:N	1:A:155:VAL:CG1	0.46	2.79	5	1
1:A:173:SER:O	1:A:174:MET:C	0.46	2.53	5	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:VAL:N	0.46	2.26	6	1
1:A:44:LYS:HE3	1:A:45:PHE:CE1	0.46	2.45	7	1
1:A:69:LEU:HD23	1:A:70:PRO:HD2	0.46	1.87	7	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:75:ARG:NH1	0.46	2.48	7	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:216:LEU:HB3	0.46	2.40	7	1
1:A:188:GLY:O	2:A:252:FDA:H2A	0.46	2.11	7	1
1:A:55:ILE:HG22	1:A:95:ASP:O	0.46	2.11	8	1
1:A:50:PHE:O	1:A:108:LEU:O	0.46	2.33	1	2
1:A:25:ASN:HB3	1:A:82:VAL:O	0.46	2.11	5	4
1:A:50:PHE:CG	1:A:108:LEU:HD21	0.46	2.44	2	1
1:A:45:PHE:O	1:A:70:PRO:HB3	0.46	2.10	3	1
1:A:92:LEU:HA	1:A:96:ALA:CB	0.46	2.39	3	2
1:A:69:LEU:HB3	1:A:70:PRO:HD3	0.46	1.88	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:VAL:HG13	1:A:186:PRO:HD2	0.46	1.88	5	1
1:A:219:PRO:O	1:A:222:MET:SD	0.46	2.73	5	1
1:A:140:MET:CG	1:A:141:GLN:N	0.46	2.78	7	1
1:A:16:VAL:HG22	1:A:99:GLY:C	0.46	2.31	9	1
1:A:26:THR:HG21	1:A:128:THR:CB	0.46	2.39	1	1
1:A:123:PHE:CD1	1:A:215:TYR:CB	0.46	2.99	1	1
1:A:154:GLY:HA3	1:A:182:CYS:SG	0.46	2.51	1	6
1:A:15:GLU:O	1:A:15:GLU:HG2	0.46	2.11	2	3
1:A:211:ASN:O	1:A:237:GLY:C	0.46	2.54	2	1
1:A:212:PRO:O	1:A:237:GLY:O	0.46	2.34	2	1
1:A:246:LEU:HD12	2:A:252:FDA:H4'	0.46	1.86	3	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:178:THR:N	0.46	2.65	5	2
1:A:191:GLU:N	1:A:191:GLU:OE1	0.46	2.49	7	1
1:A:67:ALA:O	1:A:77:GLU:HG2	0.46	2.11	8	1
1:A:219:PRO:HG2	1:A:247:PRO:HA	0.46	1.86	10	1
1:A:162:PHE:O	1:A:163:TYR:HB2	0.46	2.11	6	6
1:A:166:GLU:O	1:A:169:SER:OG	0.46	2.33	1	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:56:PRO:HD3	0.46	1.85	2	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:104:VAL:CG2	0.46	2.41	3	1
1:A:115:GLU:OE1	1:A:215:TYR:CE2	0.46	2.68	3	1
1:A:190:TRP:O	1:A:250:ALA:HA	0.46	2.11	3	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:215:TYR:OH	0.46	2.10	7	4
1:A:126:GLY:HA3	1:A:250:ALA:N	0.46	2.25	5	1
1:A:176:ASN:C	1:A:177:LEU:HD12	0.46	2.30	10	1
1:A:177:LEU:N	1:A:177:LEU:CD1	0.46	2.79	10	1
1:A:194:GLN:O	1:A:196:SER:O	0.46	2.33	10	1
1:A:230:VAL:CG1	1:A:235:ILE:HG23	0.46	2.39	10	1
1:A:12:PHE:HD1	1:A:104:VAL:HG22	0.46	1.71	1	1
1:A:92:LEU:O	1:A:96:ALA:CB	0.46	2.56	1	4
1:A:163:TYR:O	1:A:167:LEU:HD11	0.46	2.11	1	1
1:A:245:PHE:CE1	2:A:252:FDA:C4	0.46	2.99	1	1
1:A:118:MET:HA	1:A:147:ASN:CB	0.46	2.41	2	2
1:A:125:ALA:HA	1:A:217:CYS:O	0.46	2.11	4	4
1:A:230:VAL:CG1	1:A:238:GLU:HB3	0.46	2.40	2	1
1:A:240:VAL:HG12	1:A:241:PHE:CD1	0.46	2.46	2	1
1:A:80:ILE:O	1:A:80:ILE:CG2	0.46	2.64	3	1
1:A:84:PRO:O	1:A:85:GLU:O	0.46	2.34	3	1
1:A:114:LYS:CB	1:A:241:PHE:CZ	0.46	2.99	4	2
1:A:108:LEU:CD2	1:A:109:GLY:O	0.46	2.63	5	1
1:A:182:CYS:HB3	1:A:193:GLU:O	0.46	2.11	9	2
1:A:190:TRP:O	1:A:248:SER:HB3	0.46	2.11	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:SER:HB3	1:A:197:PRO:CD	0.46	2.40	5	1
1:A:184:TRP:CZ2	1:A:186:PRO:HB3	0.46	2.45	7	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:104:VAL:CG1	0.46	2.99	8	1
1:A:43:VAL:O	1:A:71:ASN:C	0.46	2.54	9	1
1:A:81:ARG:CD	1:A:247:PRO:HD3	0.46	2.40	9	1
1:A:218:GLY:O	1:A:243:GLU:O	0.46	2.34	10	1
1:A:250:ALA:O	1:A:251:ALA:O	0.46	2.34	10	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:32:GLN:O	0.46	2.63	2	2
1:A:211:ASN:OD1	1:A:211:ASN:C	0.46	2.55	3	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:92:LEU:HD23	0.46	1.84	5	1
1:A:27:VAL:CG1	1:A:82:VAL:CG1	0.46	2.93	5	3
1:A:108:LEU:HD21	1:A:109:GLY:O	0.46	2.11	5	1
1:A:218:GLY:HA3	1:A:250:ALA:HB3	0.46	1.87	6	2
1:A:230:VAL:HG11	1:A:238:GLU:CA	0.46	2.40	6	1
1:A:174:MET:O	1:A:174:MET:SD	0.46	2.73	7	1
1:A:187:SER:O	1:A:187:SER:OG	0.46	2.33	10	1
1:A:129:GLY:O	2:A:252:FDA:O4	0.46	2.35	5	7
1:A:43:VAL:CG2	1:A:73:GLU:N	0.46	2.79	2	1
1:A:192:GLY:N	1:A:250:ALA:C	0.46	2.70	4	1
1:A:237:GLY:O	1:A:238:GLU:C	0.46	2.54	6	1
1:A:29:PHE:CD2	1:A:78:PHE:CE2	0.46	3.04	7	1
1:A:82:VAL:O	1:A:82:VAL:CG2	0.46	2.64	8	1
1:A:223:ILE:HG12	1:A:242:PHE:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:21:TRP:CE2	1:A:93:ARG:HD3	0.46	2.46	9	1
1:A:26:THR:N	1:A:82:VAL:HG23	0.46	2.27	9	1
1:A:69:LEU:HB3	1:A:70:PRO:HD2	0.46	1.87	10	2
1:A:11:SER:HB2	1:A:105:LYS:CG	0.45	2.41	6	3
1:A:16:VAL:HG21	1:A:97:ARG:O	0.45	2.11	1	1
1:A:50:PHE:HZ	2:A:252:FDA:HM82	0.45	1.61	1	1
1:A:157:THR:N	1:A:186:PRO:HG2	0.45	2.26	4	5
1:A:51:MET:HB3	1:A:106:GLY:CA	0.45	2.41	2	1
1:A:213:ASP:HB2	1:A:215:TYR:OH	0.45	2.11	6	2
1:A:80:ILE:O	1:A:80:ILE:HG22	0.45	2.12	3	2
1:A:85:GLU:N	1:A:89:SER:HG	0.45	2.09	4	1
1:A:141:GLN:O	1:A:144:THR:HG22	0.45	2.11	4	1
1:A:81:ARG:HG3	1:A:246:LEU:HD11	0.45	1.86	5	1
1:A:114:LYS:CG	1:A:241:PHE:CE2	0.45	2.99	7	1
1:A:156:ASN:OD1	2:A:252:FDA:N1A	0.45	2.49	7	1
1:A:56:PRO:HA	1:A:91:TYR:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:244:LYS:CG	1:A:244:LYS:O	0.45	2.64	9	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:31:LEU:HD21	0.45	2.46	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:216:LEU:HD13	1:A:223:ILE:HG13	0.45	1.86	2	1
1:A:230:VAL:HG22	1:A:238:GLU:HG2	0.45	1.88	2	1
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:CG	0.45	2.65	3	4
1:A:122:TYR:CE2	1:A:150:ARG:CG	0.45	2.99	3	3
1:A:146:PRO:O	1:A:175:ARG:HB3	0.45	2.11	3	2
1:A:157:THR:C	1:A:183:VAL:HG11	0.45	2.32	5	1
1:A:82:VAL:O	1:A:83:LEU:O	0.45	2.33	8	2
1:A:141:GLN:CG	1:A:170:LEU:HB3	0.45	2.42	6	1
1:A:219:PRO:HG2	1:A:250:ALA:O	0.45	2.12	6	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:84:PRO:HD2	0.45	2.40	7	1
1:A:141:GLN:HG3	1:A:174:MET:HB2	0.45	1.88	8	1
1:A:21:TRP:CZ2	1:A:93:ARG:HG3	0.45	2.47	2	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:79:LEU:C	0.45	2.55	6	4
1:A:124:VAL:CG1	1:A:152:TYR:HB2	0.45	2.36	2	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:215:TYR:CD1	0.45	2.47	4	1
1:A:174:MET:CB	1:A:177:LEU:HD22	0.45	2.41	4	1
1:A:192:GLY:CA	1:A:251:ALA:HA	0.45	2.41	4	1
1:A:182:CYS:CB	1:A:193:GLU:HA	0.45	2.41	7	1
1:A:56:PRO:HB3	1:A:91:TYR:CD1	0.45	2.46	9	1
1:A:65:SER:OG	1:A:132:PRO:HG2	0.45	2.11	9	2
1:A:193:GLU:OE2	1:A:222:MET:SD	0.45	2.75	9	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:108:LEU:HD11	0.45	2.46	10	1
1:A:192:GLY:O	1:A:222:MET:SD	0.45	2.75	10	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:63:SER:CB	0.45	2.99	2	3
1:A:222:MET:SD	1:A:223:ILE:HD12	0.45	2.52	1	2
1:A:16:VAL:CB	1:A:100:GLN:O	0.45	2.65	2	1
1:A:230:VAL:HG13	1:A:238:GLU:HB3	0.45	1.88	2	1
1:A:129:GLY:HA3	2:A:252:FDA:O4	0.45	2.10	3	2
1:A:82:VAL:O	1:A:82:VAL:HG23	0.45	2.11	8	2
1:A:163:TYR:CZ	1:A:166:GLU:HG2	0.45	2.46	6	2
1:A:204:ASP:OD1	1:A:209:ASP:OD2	0.45	2.34	6	1
1:A:205:LEU:HD12	1:A:233:ARG:HD2	0.45	1.87	8	1
1:A:205:LEU:HD12	1:A:233:ARG:CG	0.45	2.42	9	1
1:A:216:LEU:HD22	1:A:222:MET:HG2	0.45	1.89	1	2
1:A:12:PHE:CG	1:A:13:GLU:N	0.45	2.84	2	2
1:A:72:PRO:O	1:A:73:GLU:CB	0.45	2.65	2	1
1:A:160:GLU:OE1	1:A:187:SER:O	0.45	2.34	2	1
1:A:243:GLU:OE2	2:A:252:FDA:HM73	0.45	2.12	2	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:63:SER:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:43:VAL:HA	1:A:72:PRO:CA	0.45	2.41	6	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:174:MET:CE	0.45	2.65	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:GLU:C	1:A:251:ALA:HB2	0.45	2.32	6	1
1:A:191:GLU:O	1:A:251:ALA:HB3	0.45	2.10	7	3
1:A:16:VAL:HG11	1:A:98:VAL:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:163:TYR:O	1:A:167:LEU:HD21	0.45	2.11	7	1
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:HG22	0.45	2.12	9	1
1:A:193:GLU:HG3	1:A:198:ILE:CG2	0.45	2.42	10	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:33:LYS:HB3	0.45	2.41	1	2
1:A:210:ALA:CA	1:A:214:ILE:CD1	0.45	2.95	8	3
1:A:230:VAL:HG22	1:A:238:GLU:CB	0.45	2.41	2	1
1:A:44:LYS:CA	1:A:70:PRO:HA	0.45	2.39	5	3
1:A:183:VAL:N	1:A:194:GLN:HA	0.45	2.26	10	3
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:LEU:HD22	0.45	1.87	4	1
1:A:81:ARG:O	2:A:252:FDA:O2A	0.45	2.35	8	6
1:A:137:VAL:HG12	1:A:141:GLN:CG	0.45	2.40	4	1
1:A:223:ILE:O	1:A:227:CYS:SG	0.45	2.75	6	1
1:A:121:ARG:HB2	1:A:121:ARG:CZ	0.45	2.41	9	1
1:A:162:PHE:C	1:A:162:PHE:CD1	0.45	2.89	9	1
1:A:201:LEU:HB3	1:A:229:LEU:CD1	0.45	2.42	10	1
1:A:11:SER:CB	1:A:105:LYS:HG2	0.45	2.41	6	2
1:A:156:ASN:HB3	1:A:188:GLY:CA	0.45	2.42	9	5
1:A:50:PHE:CZ	1:A:63:SER:HB3	0.45	2.47	2	1
1:A:88:PHE:CE2	2:A:252:FDA:H5'1	0.45	2.45	3	1
1:A:129:GLY:HA3	1:A:245:PHE:CZ	0.45	2.47	3	1
1:A:152:TYR:CE2	1:A:201:LEU:HD21	0.45	2.46	3	1
1:A:240:VAL:C	1:A:241:PHE:CD1	0.45	2.90	9	4
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:C	0.45	2.55	3	2
1:A:48:GLY:C	1:A:50:PHE:CE1	0.45	2.90	4	1
1:A:122:TYR:CE2	1:A:152:TYR:OH	0.45	2.57	5	1
1:A:16:VAL:HG12	1:A:98:VAL:HG13	0.45	1.88	7	1
1:A:53:LEU:CB	1:A:104:VAL:HB	0.45	2.42	7	1
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:CD	0.45	2.55	9	1
1:A:121:ARG:CZ	1:A:149:THR:HG23	0.45	2.40	10	1
1:A:174:MET:SD	1:A:174:MET:O	0.45	2.74	10	1
1:A:54:THR:CG2	1:A:60:VAL:N	0.45	2.79	3	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:136:MET:SD	0.45	3.01	3	1
1:A:195:GLY:O	1:A:196:SER:OG	0.45	2.32	5	4
1:A:203:GLU:HA	1:A:233:ARG:NH1	0.45	2.26	3	1
1:A:46:GLU:O	1:A:47:PRO:C	0.45	2.56	4	2
1:A:217:CYS:O	1:A:250:ALA:HB2	0.45	2.11	5	1
1:A:61:SER:O	1:A:62:ARG:NE	0.45	2.50	6	1
1:A:29:PHE:HB3	1:A:78:PHE:CD2	0.45	2.46	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:MET:SD	1:A:174:MET:C	0.45	2.95	7	2
1:A:171:GLU:OE2	1:A:179:VAL:HG23	0.45	2.12	8	1
1:A:11:SER:CB	1:A:105:LYS:HB2	0.45	2.42	9	2
1:A:79:LEU:HB3	1:A:128:THR:O	0.45	2.12	9	1
1:A:216:LEU:HB3	1:A:222:MET:CG	0.45	2.42	1	1
1:A:246:LEU:HB2	1:A:247:PRO:HD2	0.45	1.88	9	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:96:ALA:CB	0.45	2.41	2	1
1:A:112:GLY:O	1:A:215:TYR:HB3	0.45	2.12	10	3
1:A:83:LEU:O	1:A:89:SER:CB	0.45	2.64	6	4
1:A:93:ARG:O	1:A:97:ARG:CD	0.45	2.64	6	1
1:A:130:LEU:O	1:A:134:VAL:N	0.45	2.43	6	1
1:A:51:MET:O	1:A:63:SER:HA	0.45	2.12	10	2
1:A:152:TYR:HA	1:A:180:LYS:CB	0.45	2.42	7	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:148:GLU:N	0.45	2.50	10	1
1:A:157:THR:CA	1:A:186:PRO:HD2	0.45	2.41	10	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:HD13	0.45	2.27	1	1
1:A:190:TRP:O	1:A:248:SER:OG	0.45	2.33	1	1
1:A:230:VAL:HA	1:A:235:ILE:CG2	0.45	2.42	1	1
1:A:170:LEU:O	1:A:177:LEU:CD2	0.45	2.64	2	1
1:A:226:ALA:HA	1:A:229:LEU:HD11	0.45	1.89	2	2
1:A:70:PRO:CG	1:A:139:GLN:OE1	0.45	2.65	3	1
1:A:244:LYS:O	1:A:244:LYS:HG3	0.45	2.12	9	2
1:A:131:ALA:O	1:A:134:VAL:HG22	0.45	2.11	5	5
1:A:205:LEU:O	1:A:235:ILE:CG2	0.45	2.55	5	1
1:A:205:LEU:CG	1:A:235:ILE:HG12	0.45	2.42	5	1
1:A:227:CYS:SG	1:A:239:GLN:NE2	0.45	2.90	6	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:PHE:CE2	0.45	3.00	6	1
1:A:56:PRO:HB3	1:A:96:ALA:CB	0.45	2.43	7	1
1:A:122:TYR:HB3	1:A:152:TYR:OH	0.45	2.12	8	1
1:A:59:ASP:C	1:A:60:VAL:CG2	0.45	2.85	9	1
1:A:79:LEU:CG	1:A:131:ALA:HB2	0.45	2.42	9	1
1:A:12:PHE:HE2	1:A:14:ALA:HB2	0.45	1.64	10	1
1:A:219:PRO:CD	1:A:245:PHE:O	0.45	2.65	10	1
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HG	0.44	2.13	3	5
1:A:23:SER:HB2	1:A:160:GLU:O	0.44	2.12	2	1
1:A:112:GLY:O	1:A:241:PHE:HB2	0.44	2.12	2	2
1:A:133:VAL:CG2	1:A:217:CYS:HB3	0.44	2.42	2	1
1:A:147:ASN:O	1:A:174:MET:HE1	0.44	2.12	2	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:13:GLU:O	0.44	2.70	3	1
1:A:24:SER:OG	1:A:25:ASN:OD1	0.44	2.33	3	1
1:A:138:ARG:HG3	1:A:170:LEU:HD11	0.44	1.89	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:GLY:C	1:A:236:PRO:HD2	0.44	2.32	3	1
1:A:25:ASN:O	1:A:82:VAL:O	0.44	2.34	5	1
1:A:205:LEU:CD2	1:A:235:ILE:CG1	0.44	2.95	5	1
1:A:60:VAL:CG1	1:A:60:VAL:O	0.44	2.65	7	1
1:A:80:ILE:CG2	1:A:80:ILE:O	0.44	2.64	7	2
1:A:50:PHE:HD2	2:A:252:FDA:H6	0.44	1.72	8	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:87:ARG:HG3	0.44	2.42	8	1
1:A:81:ARG:NE	1:A:247:PRO:HD3	0.44	2.27	9	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:102:LEU:C	0.44	2.81	1	1
1:A:148:GLU:CB	1:A:176:ASN:HB2	0.44	2.42	1	2
1:A:162:PHE:CG	1:A:163:TYR:N	0.44	2.83	8	3
1:A:210:ALA:HB1	1:A:214:ILE:CD1	0.44	2.35	1	1
1:A:90:ASP:O	1:A:94:ASN:HB2	0.44	2.12	8	6
1:A:183:VAL:HG13	1:A:186:PRO:HD3	0.44	1.88	3	1
1:A:113:LEU:CA	1:A:215:TYR:HB3	0.44	2.42	9	2
1:A:220:PRO:HG2	1:A:250:ALA:CB	0.44	2.42	4	2
1:A:29:PHE:O	1:A:78:PHE:HB3	0.44	2.12	5	1
1:A:49:GLN:O	1:A:65:SER:HA	0.44	2.12	10	2
1:A:157:THR:O	1:A:158:GLU:HG3	0.44	2.12	5	4
1:A:202:ARG:HG3	1:A:229:LEU:CD1	0.44	2.43	5	1
1:A:22:VAL:HG22	1:A:26:THR:HB	0.44	1.88	6	1
1:A:61:SER:C	1:A:62:ARG:CG	0.44	2.85	6	1
1:A:140:MET:O	1:A:174:MET:HE3	0.44	2.12	6	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:64:TYR:C	0.44	2.31	10	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:166:GLU:CB	0.44	3.00	10	1
1:A:246:LEU:CD1	2:A:252:FDA:O5'	0.44	2.65	10	1
1:A:65:SER:O	1:A:132:PRO:HG3	0.44	2.12	4	3
1:A:198:ILE:CD1	1:A:198:ILE:O	0.44	2.65	3	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.44	2.83	5	1
1:A:223:ILE:O	1:A:227:CYS:HB3	0.44	2.12	7	3
1:A:245:PHE:CE1	1:A:246:LEU:HB2	0.44	2.47	7	2
1:A:52:ASP:N	1:A:106:GLY:HA3	0.44	2.27	6	1
1:A:170:LEU:CB	1:A:177:LEU:CD2	0.44	2.91	6	1
1:A:190:TRP:CZ2	1:A:196:SER:O	0.44	2.70	6	1
1:A:202:ARG:CG	1:A:229:LEU:HB3	0.44	2.42	9	3
1:A:79:LEU:HG	1:A:128:THR:CG2	0.44	2.42	9	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:101:VAL:HG22	0.44	2.12	10	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:100:GLN:N	0.44	2.50	10	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:CD1	0.44	2.82	1	1
1:A:219:PRO:HD3	1:A:247:PRO:O	0.44	2.13	1	1
1:A:234:GLY:O	1:A:235:ILE:C	0.44	2.54	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:MET:HA	1:A:105:LYS:O	0.44	2.13	3	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:95:ASP:HB3	0.44	2.42	5	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:233:ARG:HD3	0.44	2.42	9	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:27:VAL:HG21	0.44	1.88	10	1
1:A:110:VAL:HG11	2:A:252:FDA:HM72	0.44	1.86	10	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD1	0.44	2.81	2	1
1:A:164:ILE:HG22	1:A:165:ASP:N	0.44	2.28	2	1
1:A:218:GLY:O	1:A:220:PRO:HD2	0.44	2.13	2	1
1:A:221:GLY:O	1:A:224:ASP:N	0.44	2.51	4	2
1:A:124:VAL:HG21	1:A:193:GLU:OE2	0.44	2.13	3	1
1:A:226:ALA:O	1:A:230:VAL:CG2	0.44	2.65	3	4
1:A:137:VAL:O	1:A:141:GLN:HG3	0.44	2.12	4	2
1:A:167:LEU:O	1:A:170:LEU:HG	0.44	2.12	6	2
1:A:191:GLU:O	1:A:251:ALA:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:104:VAL:CG1	0.44	2.93	7	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:91:TYR:CG	0.44	3.01	9	1
1:A:219:PRO:HB2	1:A:250:ALA:O	0.44	2.12	9	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:209:ASP:OD1	0.44	2.36	1	1
1:A:12:PHE:O	1:A:103:SER:OG	0.44	2.36	2	2
1:A:133:VAL:HG21	1:A:217:CYS:SG	0.44	2.53	3	1
1:A:149:THR:O	1:A:177:LEU:HG	0.44	2.12	10	5
1:A:202:ARG:HG2	1:A:229:LEU:CD1	0.44	2.40	3	1
1:A:220:PRO:O	1:A:224:ASP:CG	0.44	2.56	10	1
1:A:230:VAL:HG13	1:A:235:ILE:HG21	0.44	1.87	10	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:123:PHE:CD2	0.44	2.47	1	1
1:A:192:GLY:O	1:A:250:ALA:C	0.44	2.56	1	2
1:A:163:TYR:CE1	1:A:166:GLU:CD	0.44	2.91	2	1
1:A:202:ARG:O	1:A:233:ARG:HD3	0.44	2.12	3	7
1:A:218:GLY:O	1:A:219:PRO:O	0.44	2.35	3	1
1:A:67:ALA:CB	1:A:77:GLU:HB2	0.44	2.42	6	2
1:A:55:ILE:CD1	1:A:92:LEU:HA	0.44	2.43	5	1
1:A:153:PHE:CG	1:A:154:GLY:N	0.44	2.85	6	1
1:A:243:GLU:OE1	1:A:244:LYS:N	0.44	2.51	6	1
1:A:148:GLU:HA	1:A:176:ASN:O	0.44	2.12	10	2
1:A:182:CYS:HA	1:A:194:GLN:N	0.44	2.27	7	1
1:A:183:VAL:O	1:A:194:GLN:HG2	0.44	2.13	7	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:65:SER:CA	0.44	2.95	10	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:235:ILE:CG1	0.44	2.43	10	1
1:A:144:THR:C	1:A:146:PRO:HD3	0.44	2.33	9	2
1:A:70:PRO:O	1:A:71:ASN:HB3	0.44	2.13	8	3
1:A:83:LEU:O	1:A:89:SER:HB3	0.44	2.13	8	2

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	0.44	2.91	5	1
1:A:170:LEU:O	1:A:174:MET:HB2	0.44	2.13	5	1
1:A:174:MET:CG	1:A:177:LEU:CD1	0.44	2.96	6	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:235:ILE:HG12	0.44	2.43	7	1
1:A:21:TRP:NE1	1:A:93:ARG:HD3	0.44	2.27	9	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:131:ALA:HB2	0.44	1.89	9	1
1:A:69:LEU:HG	1:A:70:PRO:HD3	0.44	1.89	10	1
1:A:12:PHE:O	1:A:103:SER:HA	0.44	2.12	1	3
1:A:45:PHE:C	1:A:139:GLN:NE2	0.44	2.72	1	1
1:A:213:ASP:HB2	1:A:215:TYR:CZ	0.44	2.47	2	2
1:A:25:ASN:ND2	2:A:252:FDA:N3A	0.44	2.66	4	1
1:A:80:ILE:O	1:A:80:ILE:HG12	0.44	2.12	8	3
1:A:113:LEU:HD23	1:A:113:LEU:H	0.44	1.73	8	2
1:A:222:MET:CE	1:A:223:ILE:HD12	0.44	2.43	6	1
1:A:55:ILE:HG22	1:A:56:PRO:N	0.44	2.28	8	1
1:A:56:PRO:HA	1:A:91:TYR:CZ	0.44	2.48	9	1
1:A:124:VAL:HG11	1:A:216:LEU:HD22	0.44	1.88	9	1
1:A:211:ASN:CG	1:A:235:ILE:HD13	0.44	2.33	9	1
1:A:14:ALA:O	1:A:102:LEU:CD1	0.44	2.56	10	1
1:A:23:SER:HB2	1:A:26:THR:CB	0.43	2.43	10	7
1:A:113:LEU:HD23	1:A:123:PHE:CE2	0.43	2.48	1	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:PHE:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:156:ASN:HB2	1:A:187:SER:CA	0.43	2.43	3	1
1:A:63:SER:O	2:A:252:FDA:O2'	0.43	2.36	4	3
1:A:70:PRO:O	1:A:71:ASN:CG	0.43	2.57	4	1
1:A:246:LEU:CD1	2:A:252:FDA:O2	0.43	2.66	4	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:65:SER:HA	0.43	1.89	5	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:152:TYR:HB2	0.43	2.37	6	1
1:A:222:MET:HB2	1:A:250:ALA:HB1	0.43	1.89	6	1
1:A:69:LEU:C	1:A:71:ASN:ND2	0.43	2.71	9	1
1:A:197:PRO:O	1:A:198:ILE:O	0.43	2.36	10	1
1:A:223:ILE:HD11	1:A:242:PHE:HB2	0.43	1.89	10	1
1:A:208:SER:O	1:A:209:ASP:CG	0.43	2.56	3	4
1:A:50:PHE:HB2	1:A:65:SER:CB	0.43	2.42	2	1
1:A:222:MET:N	1:A:251:ALA:N	0.43	2.66	2	1
1:A:199:ASP:HA	1:A:202:ARG:CD	0.43	2.44	3	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:65:SER:CB	0.43	3.00	4	1
1:A:47:PRO:O	1:A:48:GLY:C	0.43	2.57	5	2
1:A:222:MET:HE2	1:A:223:ILE:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:115:GLU:HB2	1:A:121:ARG:NH1	0.43	2.28	8	1
1:A:222:MET:CE	1:A:226:ALA:CB	0.43	2.96	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:GLU:HG3	1:A:103:SER:OG	0.43	2.14	1	1
1:A:214:ILE:CB	1:A:238:GLU:O	0.43	2.66	2	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:33:LYS:HB3	0.43	1.88	3	1
1:A:216:LEU:CB	1:A:223:ILE:HD11	0.43	2.43	4	1
1:A:184:TRP:C	1:A:185:HIS:CG	0.43	2.91	5	1
1:A:223:ILE:CD1	1:A:242:PHE:HB2	0.43	2.43	5	2
1:A:161:LEU:O	1:A:162:PHE:CD2	0.43	2.71	6	1
1:A:219:PRO:HB2	1:A:250:ALA:HB3	0.43	1.89	10	1
1:A:157:THR:CB	1:A:159:PRO:HD2	0.43	2.44	1	1
1:A:246:LEU:HD12	1:A:246:LEU:O	0.43	2.13	1	1
1:A:156:ASN:C	1:A:158:GLU:N	0.43	2.72	3	4
1:A:124:VAL:CB	1:A:152:TYR:HB3	0.43	2.43	5	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:63:SER:N	0.43	2.51	6	1
1:A:111:PHE:O	1:A:243:GLU:HB2	0.43	2.14	7	2
1:A:143:TRP:CD1	1:A:145:ALA:CB	0.43	2.98	7	1
1:A:47:PRO:O	1:A:110:VAL:HB	0.43	2.13	8	1
1:A:65:SER:HB3	1:A:132:PRO:CG	0.43	2.43	8	1
1:A:240:VAL:HG12	1:A:242:PHE:CZ	0.43	2.48	9	1
1:A:92:LEU:O	1:A:96:ALA:C	0.43	2.56	10	1
1:A:213:ASP:HA	1:A:239:GLN:O	0.43	2.14	4	7
1:A:43:VAL:CB	1:A:73:GLU:HG3	0.43	2.44	2	1
1:A:122:TYR:CZ	1:A:150:ARG:NE	0.43	2.87	3	1
1:A:141:GLN:CG	1:A:174:MET:CG	0.43	2.96	3	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:159:PRO:HD2	0.43	1.91	5	1
1:A:216:LEU:HB2	1:A:222:MET:SD	0.43	2.53	6	1
1:A:194:GLN:O	1:A:197:PRO:HG3	0.43	2.13	7	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:100:GLN:NE2	0.43	2.52	9	1
1:A:189:ASP:CA	1:A:251:ALA:O	0.43	2.67	10	1
1:A:189:ASP:C	1:A:251:ALA:OXT	0.43	2.56	10	1
1:A:143:TRP:CZ2	1:A:145:ALA:HB3	0.43	2.48	2	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:80:ILE:HG22	0.43	2.43	4	2
1:A:69:LEU:HB2	1:A:70:PRO:CD	0.43	2.44	4	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:216:LEU:HG	0.43	1.89	4	2
1:A:71:ASN:OD1	1:A:74:GLY:N	0.43	2.42	5	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:236:PRO:C	0.43	2.57	8	2
1:A:49:GLN:CD	1:A:108:LEU:O	0.43	2.57	6	1
1:A:119:ALA:HB3	1:A:121:ARG:HE	0.43	1.73	6	1
1:A:225:ALA:CB	1:A:251:ALA:O	0.43	2.67	6	1
1:A:174:MET:CG	1:A:177:LEU:HB2	0.43	2.44	7	1
1:A:25:ASN:O	1:A:81:ARG:CA	0.43	2.66	8	1
1:A:49:GLN:HA	1:A:110:VAL:HG12	0.43	1.90	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLY:O	1:A:215:TYR:CA	0.43	2.67	10	1
1:A:220:PRO:O	1:A:224:ASP:HB2	0.43	2.13	10	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:65:SER:HA	0.43	1.89	5	4
1:A:16:VAL:HB	1:A:100:GLN:O	0.43	2.13	2	1
1:A:18:GLY:O	1:A:19:LEU:HB3	0.43	2.14	8	4
1:A:80:ILE:HG21	1:A:88:PHE:CE1	0.43	2.48	2	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:177:LEU:CD1	0.43	2.42	2	1
1:A:68:ASN:HB3	1:A:76:LEU:CA	0.43	2.43	3	1
1:A:16:VAL:HB	1:A:98:VAL:CG1	0.43	2.42	6	1
1:A:44:LYS:HA	1:A:70:PRO:C	0.43	2.34	6	1
1:A:115:GLU:HA	1:A:121:ARG:CZ	0.43	2.43	7	1
1:A:187:SER:O	1:A:189:ASP:N	0.43	2.52	7	1
1:A:73:GLU:HG2	1:A:75:ARG:NH1	0.43	2.28	8	1
1:A:189:ASP:HA	1:A:251:ALA:O	0.43	2.13	10	1
1:A:154:GLY:C	1:A:155:VAL:HG13	0.43	2.33	6	5
1:A:192:GLY:HA2	1:A:250:ALA:O	0.43	2.14	1	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:31:LEU:HG	0.43	2.48	2	1
1:A:53:LEU:HB2	1:A:104:VAL:HA	0.43	1.90	2	2
1:A:55:ILE:C	1:A:55:ILE:CD1	0.43	2.78	2	1
1:A:68:ASN:OD1	1:A:68:ASN:C	0.43	2.57	2	2
1:A:171:GLU:CA	1:A:177:LEU:HD21	0.43	2.39	2	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:86:GLY:N	0.43	2.29	3	1
1:A:156:ASN:ND2	1:A:161:LEU:HD12	0.43	2.29	3	1
1:A:149:THR:OG1	1:A:174:MET:CE	0.43	2.66	4	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:105:LYS:CD	0.43	2.44	6	1
1:A:13:GLU:HB2	1:A:34:ARG:CD	0.43	2.44	6	1
1:A:43:VAL:HA	1:A:71:ASN:C	0.43	2.33	6	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:187:SER:N	0.43	2.79	6	1
1:A:183:VAL:CG1	1:A:184:TRP:N	0.43	2.81	6	1
1:A:114:LYS:CG	1:A:241:PHE:CD2	0.43	3.02	7	1
1:A:164:ILE:HD13	1:A:164:ILE:C	0.43	2.33	7	1
1:A:51:MET:CG	1:A:106:GLY:HA3	0.43	2.44	8	1
1:A:58:THR:O	1:A:59:ASP:HB3	0.43	2.12	9	1
1:A:189:ASP:C	1:A:251:ALA:O	0.43	2.57	10	1
1:A:25:ASN:OD1	2:A:252:FDA:N1A	0.43	2.52	1	1
1:A:124:VAL:HB	1:A:216:LEU:CD2	0.43	2.41	2	1
1:A:195:GLY:O	1:A:196:SER:HB2	0.43	2.14	9	5
1:A:68:ASN:O	1:A:68:ASN:OD1	0.43	2.37	3	1
1:A:190:TRP:C	1:A:251:ALA:N	0.43	2.72	3	1
1:A:247:PRO:O	1:A:248:SER:HB2	0.43	2.14	10	2
1:A:131:ALA:HA	1:A:134:VAL:HG22	0.43	1.91	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:TYR:CG	1:A:152:TYR:OH	0.43	2.72	7	1
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ARG:HG3	0.43	2.14	7	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:78:PHE:HB2	0.43	2.49	8	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:68:ASN:CG	0.43	2.33	9	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:152:TYR:CD1	0.43	3.00	9	1
1:A:217:CYS:C	1:A:219:PRO:HD2	0.43	2.34	9	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:235:ILE:CB	0.43	2.43	10	1
1:A:17:VAL:HA	1:A:98:VAL:HG23	0.43	1.91	1	1
1:A:156:ASN:HA	1:A:186:PRO:CG	0.43	2.44	1	2
1:A:212:PRO:O	1:A:239:GLN:HB2	0.43	2.14	1	5
1:A:234:GLY:O	1:A:236:PRO:HD3	0.43	2.14	4	4
1:A:247:PRO:O	1:A:248:SER:C	0.43	2.57	2	3
1:A:183:VAL:HG13	1:A:186:PRO:CD	0.43	2.44	8	2
1:A:51:MET:SD	1:A:104:VAL:CG2	0.43	3.07	5	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:141:GLN:OE1	0.43	2.62	6	1
1:A:181:ALA:O	1:A:194:GLN:HG2	0.43	2.14	6	1
1:A:191:GLU:HG2	1:A:219:PRO:CG	0.43	2.44	6	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:33:LYS:HB2	0.43	2.44	7	1
1:A:45:PHE:CB	1:A:70:PRO:HD3	0.43	2.44	8	1
1:A:119:ALA:O	1:A:121:ARG:HG3	0.43	2.13	8	1
1:A:136:MET:SD	1:A:136:MET:O	0.43	2.76	9	1
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:OE2	0.43	2.36	9	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:101:VAL:CG2	0.43	2.66	10	1
1:A:211:ASN:CG	1:A:235:ILE:CG1	0.43	2.88	10	1
1:A:71:ASN:HB2	1:A:72:PRO:HD2	0.42	1.89	2	1
1:A:202:ARG:O	1:A:205:LEU:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:47:PRO:HB2	1:A:132:PRO:O	0.42	2.13	3	1
1:A:157:THR:O	1:A:159:PRO:HD3	0.42	2.13	3	1
1:A:216:LEU:HD22	1:A:223:ILE:HD12	0.42	1.91	3	1
1:A:155:VAL:HG23	1:A:161:LEU:CD2	0.42	2.43	4	1
1:A:43:VAL:HG22	1:A:68:ASN:ND2	0.42	2.28	5	1
1:A:82:VAL:HG21	1:A:89:SER:CB	0.42	2.42	10	2
1:A:124:VAL:HG23	1:A:193:GLU:OE2	0.42	2.14	7	1
2:A:252:FDA:N3A	2:A:252:FDA:H2B	0.42	2.28	7	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:32:GLN:O	0.42	2.13	9	2
1:A:90:ASP:O	1:A:94:ASN:CG	0.42	2.57	3	3
1:A:171:GLU:HA	1:A:177:LEU:CD2	0.42	2.44	4	2
1:A:106:GLY:N	1:A:107:PRO:CD	0.42	2.82	3	1
1:A:246:LEU:HD23	1:A:247:PRO:N	0.42	2.28	3	1
1:A:70:PRO:C	1:A:71:ASN:CG	0.42	2.77	4	2
1:A:150:ARG:NE	1:A:178:THR:HB	0.42	2.28	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:ILE:HG23	1:A:201:LEU:CD2	0.42	2.44	5	1
1:A:13:GLU:HB2	1:A:34:ARG:CG	0.42	2.44	6	1
1:A:14:ALA:O	1:A:101:VAL:CG2	0.42	2.67	6	1
1:A:201:LEU:O	1:A:205:LEU:HD21	0.42	2.14	8	2
1:A:122:TYR:HB2	1:A:152:TYR:OH	0.42	2.14	9	1
1:A:192:GLY:O	1:A:250:ALA:HA	0.42	2.14	9	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:105:LYS:O	0.42	2.12	9	5
1:A:157:THR:O	1:A:158:GLU:HG2	0.42	2.14	2	1
1:A:136:MET:O	1:A:136:MET:HE1	0.42	2.13	3	1
1:A:208:SER:C	1:A:209:ASP:OD1	0.42	2.58	4	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:150:ARG:CG	0.42	3.02	5	1
1:A:212:PRO:O	1:A:240:VAL:HG21	0.42	2.15	6	1
1:A:51:MET:HB2	1:A:66:PRO:CG	0.42	2.44	7	1
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:HA	0.42	2.53	7	1
1:A:44:LYS:HG2	1:A:45:PHE:CD1	0.42	2.49	9	1
1:A:54:THR:HG22	1:A:61:SER:CB	0.42	2.44	9	1
1:A:33:LYS:O	1:A:33:LYS:CD	0.42	2.68	1	1
1:A:25:ASN:C	1:A:82:VAL:O	0.42	2.57	5	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:ARG:C	0.42	2.57	5	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:209:ASP:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:206:GLU:CD	1:A:233:ARG:NH2	0.42	2.73	5	1
1:A:216:LEU:HB2	1:A:222:MET:CE	0.42	2.44	6	1
1:A:181:ALA:O	1:A:194:GLN:CD	0.42	2.57	7	1
1:A:43:VAL:CG2	1:A:68:ASN:OD1	0.42	2.63	9	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:80:ILE:HB	0.42	2.49	9	1
1:A:91:TYR:O	1:A:95:ASP:HB3	0.42	2.14	9	1
1:A:201:LEU:H	1:A:201:LEU:CD1	0.42	2.27	9	1
1:A:202:ARG:HD3	1:A:229:LEU:HD22	0.42	1.90	9	1
1:A:121:ARG:NH2	1:A:149:THR:HG22	0.42	2.30	10	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:84:PRO:CD	0.42	2.44	1	1
1:A:44:LYS:O	1:A:70:PRO:CA	0.42	2.67	2	1
1:A:235:ILE:HD12	1:A:238:GLU:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:63:SER:HB2	0.42	2.50	5	1
1:A:157:THR:CA	1:A:183:VAL:CG1	0.42	2.98	5	1
1:A:246:LEU:HD22	1:A:247:PRO:CD	0.42	2.45	5	3
1:A:54:THR:C	1:A:55:ILE:C	0.42	2.77	6	1
1:A:205:LEU:HD12	1:A:233:ARG:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:32:GLN:O	1:A:33:LYS:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:75:ARG:O	1:A:75:ARG:HG3	0.42	2.13	8	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD2	0.42	2.86	8	1
1:A:219:PRO:HB3	1:A:249:GLY:O	0.42	2.14	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:VAL:CG2	1:A:99:GLY:C	0.42	2.88	9	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:100:GLN:HG2	0.42	1.88	9	1
1:A:223:ILE:CD1	1:A:243:GLU:C	0.42	2.88	9	1
1:A:49:GLN:O	1:A:65:SER:HB2	0.42	2.13	10	1
1:A:152:TYR:CE1	1:A:180:LYS:HG3	0.42	2.50	10	1
1:A:238:GLU:O	1:A:238:GLU:HG3	0.42	2.13	2	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:69:LEU:HA	0.42	1.91	3	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:89:SER:HB3	0.42	2.44	10	3
1:A:113:LEU:HD21	1:A:136:MET:CB	0.42	2.45	3	1
1:A:201:LEU:O	1:A:205:LEU:HG	0.42	2.15	10	3
1:A:49:GLN:O	1:A:66:PRO:HD2	0.42	2.14	6	5
1:A:13:GLU:HB3	1:A:33:LYS:CD	0.42	2.43	6	1
1:A:64:TYR:O	1:A:66:PRO:CD	0.42	2.67	7	1
1:A:89:SER:HA	1:A:92:LEU:HD11	0.42	1.91	7	1
1:A:219:PRO:HB2	1:A:222:MET:HB3	0.42	1.90	9	2
1:A:211:ASN:ND2	1:A:235:ILE:HD12	0.42	2.29	9	1
1:A:216:LEU:CD2	1:A:223:ILE:HA	0.42	2.44	10	1
1:A:222:MET:HA	1:A:251:ALA:OXT	0.42	2.14	1	1
1:A:205:LEU:HD11	1:A:229:LEU:HD12	0.42	1.90	2	1
1:A:219:PRO:HA	1:A:245:PHE:O	0.42	2.14	3	1
1:A:214:ILE:HD12	1:A:214:ILE:HA	0.42	1.76	4	1
1:A:218:GLY:N	1:A:219:PRO:HD2	0.42	2.29	4	2
1:A:160:GLU:O	1:A:161:LEU:C	0.42	2.57	10	1
1:A:223:ILE:HG13	1:A:242:PHE:HB2	0.42	1.91	1	1
1:A:112:GLY:O	1:A:241:PHE:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:214:ILE:HG22	1:A:239:GLN:O	0.42	2.14	2	2
1:A:222:MET:HA	1:A:251:ALA:HB3	0.42	1.91	2	1
1:A:33:LYS:HG3	1:A:34:ARG:N	0.42	2.30	3	1
1:A:121:ARG:HG2	1:A:215:TYR:OH	0.42	2.15	4	2
1:A:56:PRO:CD	1:A:58:THR:CG2	0.42	2.89	4	1
1:A:202:ARG:HG3	1:A:229:LEU:CD2	0.42	2.45	5	1
1:A:208:SER:O	1:A:209:ASP:HB2	0.42	2.14	5	1
1:A:136:MET:CE	1:A:136:MET:O	0.42	2.67	6	1
1:A:222:MET:HE2	1:A:223:ILE:CA	0.42	2.45	6	1
1:A:24:SER:CB	1:A:160:GLU:HG2	0.42	2.45	9	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:80:ILE:HG13	0.42	2.49	9	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:166:GLU:HG3	0.42	2.50	9	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:133:VAL:CG2	0.42	2.95	10	1
1:A:246:LEU:HD11	2:A:252:FDA:O5'	0.42	2.14	10	1
1:A:15:GLU:HB3	1:A:32:GLN:O	0.42	2.15	2	2
1:A:56:PRO:CG	1:A:58:THR:CG2	0.42	2.87	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:PHE:CD2	1:A:80:ILE:HD12	0.42	2.49	2	1
1:A:81:ARG:HB2	1:A:246:LEU:HD22	0.42	1.90	3	1
1:A:121:ARG:HG2	1:A:213:ASP:OD2	0.42	2.15	3	1
1:A:216:LEU:CB	1:A:222:MET:SD	0.42	3.08	6	1
1:A:222:MET:HE2	1:A:223:ILE:HD12	0.42	1.92	6	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:82:VAL:HG12	0.42	1.92	7	1
1:A:105:LYS:O	1:A:107:PRO:HD2	0.42	2.14	7	1
1:A:119:ALA:O	1:A:121:ARG:HD3	0.42	2.15	7	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:LEU:HB2	0.42	1.92	9	1
1:A:156:ASN:O	1:A:158:GLU:CG	0.42	2.67	9	1
1:A:84:PRO:O	1:A:85:GLU:HG2	0.42	2.15	10	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:216:LEU:HD12	0.42	1.92	10	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:235:ILE:HB	0.42	1.92	10	1
1:A:79:LEU:CD2	1:A:128:THR:HG22	0.42	2.41	1	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:111:PHE:N	0.42	2.87	3	1
1:A:153:PHE:O	1:A:182:CYS:HB2	0.42	2.14	3	2
1:A:223:ILE:CG1	1:A:242:PHE:CB	0.42	2.98	4	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:102:LEU:HB3	0.42	2.44	5	1
1:A:119:ALA:O	1:A:121:ARG:HG2	0.42	2.15	5	1
1:A:174:MET:HG3	1:A:177:LEU:CB	0.42	2.45	5	1
1:A:223:ILE:O	1:A:227:CYS:HB2	0.42	2.13	5	2
1:A:190:TRP:CH2	1:A:196:SER:O	0.42	2.73	6	1
1:A:204:ASP:CG	1:A:209:ASP:OD1	0.42	2.58	6	1
1:A:16:VAL:HB	1:A:29:PHE:CE1	0.42	2.50	9	1
1:A:121:ARG:HH12	1:A:149:THR:HG23	0.42	1.74	9	1
1:A:198:ILE:HG21	1:A:251:ALA:OXT	0.42	2.15	9	1
1:A:208:SER:O	1:A:209:ASP:OD2	0.42	2.37	9	1
1:A:137:VAL:HG13	1:A:141:GLN:NE2	0.42	2.30	10	1
1:A:156:ASN:HB2	1:A:187:SER:C	0.41	2.35	3	1
1:A:48:GLY:HA3	1:A:111:PHE:CE2	0.41	2.50	4	1
1:A:52:ASP:C	1:A:52:ASP:OD1	0.41	2.58	4	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:102:LEU:O	0.41	2.13	5	1
1:A:205:LEU:HD13	1:A:230:VAL:HA	0.41	1.91	8	1
1:A:58:THR:C	1:A:59:ASP:OD1	0.41	2.59	9	1
1:A:141:GLN:CG	1:A:170:LEU:CD2	0.41	2.85	10	1
1:A:222:MET:HB3	1:A:250:ALA:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:16:VAL:HG22	1:A:31:LEU:HD21	0.41	1.92	2	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:88:PHE:CE1	0.41	2.51	2	1
1:A:124:VAL:HG23	1:A:215:TYR:O	0.41	2.15	2	1
1:A:13:GLU:O	1:A:33:LYS:HG2	0.41	2.15	3	1
1:A:82:VAL:HB	1:A:89:SER:HB3	0.41	1.92	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:CD1	2:A:252:FDA:C4B	0.41	2.98	7	1
1:A:81:ARG:NH2	2:A:252:FDA:H4'	0.41	2.30	9	1
1:A:148:GLU:CD	1:A:176:ASN:CB	0.41	2.87	1	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:229:LEU:CD1	0.41	2.99	2	1
1:A:83:LEU:O	1:A:89:SER:OG	0.41	2.33	4	1
1:A:161:LEU:HD23	1:A:161:LEU:H	0.41	1.75	4	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:65:SER:HA	0.41	2.44	10	2
1:A:91:TYR:CE1	1:A:95:ASP:OD2	0.41	2.73	5	1
1:A:111:PHE:O	1:A:242:PHE:O	0.41	2.39	5	1
1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:CD2	0.41	2.83	5	1
1:A:51:MET:O	1:A:63:SER:HB3	0.41	2.15	6	1
1:A:166:GLU:O	1:A:170:LEU:HD23	0.41	2.15	6	1
1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:CD	0.41	2.28	7	1
1:A:168:LYS:O	1:A:172:ARG:HG3	0.41	2.16	7	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:77:GLU:HB2	0.41	1.92	10	1
1:A:104:VAL:O	1:A:104:VAL:CG2	0.41	2.68	10	1
1:A:169:SER:O	1:A:173:SER:N	0.41	2.52	1	1
1:A:145:ALA:O	1:A:175:ARG:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:182:CYS:SG	1:A:193:GLU:CD	0.41	2.98	2	2
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:HG3	0.41	2.15	2	2
1:A:157:THR:HA	1:A:186:PRO:HD2	0.41	1.92	3	1
1:A:197:PRO:C	1:A:199:ASP:N	0.41	2.73	3	1
1:A:246:LEU:HB2	2:A:252:FDA:HN1	0.41	1.74	3	1
1:A:246:LEU:HD12	2:A:252:FDA:C4'	0.41	2.45	3	1
1:A:131:ALA:O	1:A:134:VAL:HG23	0.41	2.16	4	1
1:A:81:ARG:HG3	1:A:246:LEU:CD1	0.41	2.45	5	1
1:A:124:VAL:CB	1:A:152:TYR:CB	0.41	2.99	5	1
1:A:197:PRO:O	1:A:198:ILE:CB	0.41	2.68	6	2
1:A:150:ARG:HD3	1:A:178:THR:OG1	0.41	2.15	6	1
1:A:150:ARG:HG3	1:A:178:THR:OG1	0.41	2.15	7	1
1:A:16:VAL:HB	1:A:29:PHE:CZ	0.41	2.50	9	2
1:A:67:ALA:CB	1:A:132:PRO:HA	0.41	2.45	8	1
1:A:156:ASN:C	1:A:183:VAL:CG1	0.41	2.88	9	1
1:A:223:ILE:HD11	1:A:243:GLU:CA	0.41	2.46	9	1
1:A:163:TYR:CE2	1:A:166:GLU:CG	0.41	3.04	10	1
1:A:225:ALA:O	1:A:229:LEU:HD21	0.41	2.16	10	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:123:PHE:CD2	0.41	2.50	1	1
1:A:25:ASN:ND2	2:A:252:FDA:C2A	0.41	2.84	2	1
1:A:53:LEU:HG	1:A:102:LEU:CD1	0.41	2.46	5	1
1:A:56:PRO:HA	1:A:102:LEU:HB2	0.41	1.91	5	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:92:LEU:HD12	0.41	1.91	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:GLN:HG2	1:A:170:LEU:O	0.41	2.15	8	1
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:C	0.41	2.33	1	1
1:A:126:GLY:HA3	1:A:249:GLY:C	0.41	2.36	1	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD23	0.41	1.93	9	2
1:A:88:PHE:CD2	2:A:252:FDA:P	0.41	3.13	2	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:178:THR:N	0.41	2.30	9	2
1:A:219:PRO:HA	1:A:250:ALA:HB2	0.41	1.91	2	1
1:A:110:VAL:C	1:A:243:GLU:OE2	0.41	2.58	4	1
1:A:156:ASN:N	1:A:183:VAL:CG2	0.41	2.83	4	1
1:A:91:TYR:CD1	1:A:95:ASP:HB2	0.41	2.51	5	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:209:ASP:CG	0.41	2.58	5	1
1:A:16:VAL:O	1:A:98:VAL:CG1	0.41	2.68	6	1
1:A:78:PHE:C	1:A:79:LEU:CD1	0.41	2.89	6	1
1:A:185:HIS:H	1:A:186:PRO:HD3	0.41	1.73	6	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:66:PRO:HD3	0.41	1.92	7	1
1:A:122:TYR:CB	1:A:152:TYR:CE1	0.41	3.01	7	1
1:A:155:VAL:HG23	1:A:156:ASN:H	0.41	1.75	9	2
1:A:188:GLY:CA	2:A:252:FDA:C2A	0.41	2.98	7	1
1:A:205:LEU:HA	1:A:210:ALA:O	0.41	2.15	7	1
1:A:25:ASN:O	1:A:81:ARG:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:141:GLN:HG3	1:A:174:MET:CB	0.41	2.46	8	1
1:A:207:SER:OG	1:A:208:SER:N	0.41	2.51	8	1
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD23	0.41	2.15	10	1
1:A:124:VAL:HG11	1:A:216:LEU:CD1	0.41	2.45	10	1
1:A:246:LEU:CB	1:A:247:PRO:CD	0.41	2.99	1	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:LEU:HD23	0.41	1.93	2	1
1:A:216:LEU:O	1:A:243:GLU:N	0.41	2.52	2	1
1:A:67:ALA:CB	1:A:77:GLU:CB	0.41	2.98	4	1
1:A:245:PHE:O	1:A:246:LEU:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HD11	0.41	1.89	9	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:201:LEU:CD2	0.41	2.83	9	1
1:A:223:ILE:HG13	1:A:242:PHE:HB3	0.41	1.93	9	1
1:A:14:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HB2	0.41	1.91	1	1
1:A:139:GLN:O	1:A:143:TRP:HB2	0.41	2.16	1	1
1:A:58:THR:O	1:A:59:ASP:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:211:ASN:CB	1:A:212:PRO:CD	0.41	2.99	2	1
1:A:226:ALA:O	1:A:229:LEU:HG	0.41	2.16	2	1
1:A:27:VAL:CG1	1:A:80:ILE:O	0.41	2.67	3	1
1:A:46:GLU:O	1:A:69:LEU:HG	0.41	2.16	3	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:33:LYS:HE3	0.41	2.51	4	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:215:TYR:CD2	0.41	3.08	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:LEU:O	1:A:162:PHE:HB3	0.41	2.15	7	3
1:A:155:VAL:C	1:A:183:VAL:HG23	0.41	2.35	6	1
1:A:144:THR:O	1:A:146:PRO:HD3	0.41	2.16	7	1
1:A:84:PRO:O	1:A:85:GLU:HG3	0.41	2.16	8	1
1:A:114:LYS:O	1:A:215:TYR:OH	0.41	2.38	8	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:105:LYS:O	0.41	2.69	9	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:65:SER:OG	0.41	2.16	1	1
1:A:164:ILE:O	1:A:168:LYS:HG3	0.41	2.16	1	3
1:A:219:PRO:HB3	1:A:247:PRO:O	0.41	2.16	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:92:LEU:HD22	0.41	2.38	3	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:86:GLY:CA	0.41	2.46	3	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:239:GLN:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:12:PHE:HB3	1:A:104:VAL:HG22	0.41	1.93	4	1
1:A:174:MET:CB	1:A:177:LEU:CD1	0.41	2.99	4	1
1:A:44:LYS:CB	1:A:70:PRO:HA	0.41	2.45	5	1
1:A:51:MET:HB3	1:A:106:GLY:O	0.41	2.16	5	1
1:A:86:GLY:CA	1:A:90:ASP:HB2	0.41	2.46	5	1
1:A:28:GLN:HG2	1:A:30:LEU:HD21	0.41	1.91	6	1
1:A:230:VAL:CG1	1:A:238:GLU:CA	0.41	2.98	6	1
1:A:143:TRP:O	1:A:144:THR:OG1	0.41	2.32	7	1
1:A:188:GLY:HA2	2:A:252:FDA:N1A	0.41	2.30	7	1
1:A:152:TYR:HA	1:A:180:LYS:HB3	0.41	1.92	8	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:96:ALA:HB3	0.41	2.45	9	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:91:TYR:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:148:GLU:CA	1:A:176:ASN:O	0.41	2.69	10	1
1:A:155:VAL:CG2	1:A:156:ASN:N	0.41	2.82	10	1
1:A:191:GLU:HB3	1:A:250:ALA:O	0.41	2.16	2	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:100:GLN:CD	0.41	2.37	4	1
1:A:219:PRO:O	1:A:223:ILE:HB	0.41	2.16	8	2
1:A:23:SER:OG	1:A:160:GLU:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:99:GLY:HA2	0.41	2.46	9	1
1:A:51:MET:O	1:A:63:SER:HB2	0.41	2.15	9	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:215:TYR:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:246:LEU:HG	1:A:247:PRO:HD2	0.41	1.94	10	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:105:LYS:HG3	0.40	1.93	1	1
1:A:110:VAL:HG23	2:A:252:FDA:HM73	0.40	1.93	1	1
1:A:210:ALA:O	1:A:211:ASN:HB2	0.40	2.15	1	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:LEU:CB	0.40	3.04	1	1
1:A:202:ARG:O	1:A:233:ARG:HG2	0.40	2.15	2	1
1:A:227:CYS:SG	1:A:239:GLN:OE1	0.40	2.79	2	1
1:A:150:ARG:HD3	1:A:178:THR:CB	0.40	2.46	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CG	1:A:139:GLN:OE1	0.40	2.74	4	1
1:A:181:ALA:O	1:A:194:GLN:NE2	0.40	2.42	5	1
1:A:82:VAL:HB	1:A:89:SER:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:131:ALA:CA	1:A:134:VAL:HG22	0.40	2.47	6	1
1:A:56:PRO:HB3	1:A:96:ALA:CA	0.40	2.46	7	1
1:A:111:PHE:O	1:A:243:GLU:CD	0.40	2.60	8	1
1:A:211:ASN:O	1:A:240:VAL:CG2	0.40	2.68	9	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:229:LEU:HD21	0.40	2.46	1	1
1:A:43:VAL:HG13	1:A:73:GLU:HG2	0.40	1.89	2	1
1:A:182:CYS:HA	1:A:194:GLN:CG	0.40	2.46	2	1
1:A:69:LEU:HB2	1:A:70:PRO:HD3	0.40	1.93	4	1
1:A:149:THR:O	1:A:177:LEU:CA	0.40	2.69	5	1
1:A:123:PHE:HA	1:A:215:TYR:O	0.40	2.16	6	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:87:ARG:HG3	0.40	1.92	8	1
1:A:27:VAL:HG12	1:A:82:VAL:CG2	0.40	2.47	9	1
1:A:193:GLU:OE2	1:A:250:ALA:CB	0.40	2.63	9	1
1:A:83:LEU:HG	1:A:84:PRO:HD3	0.40	1.93	10	1
1:A:93:ARG:O	1:A:97:ARG:HG3	0.40	2.16	9	2
1:A:91:TYR:O	1:A:95:ASP:HB2	0.40	2.17	5	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:237:GLY:N	0.40	2.54	5	1
1:A:13:GLU:O	1:A:34:ARG:HB2	0.40	2.16	6	1
1:A:204:ASP:CB	1:A:209:ASP:OD1	0.40	2.70	6	1
1:A:198:ILE:HG12	1:A:251:ALA:O	0.40	2.16	7	1
1:A:229:LEU:O	1:A:233:ARG:HD2	0.40	2.16	8	2
1:A:143:TRP:O	1:A:144:THR:HG22	0.40	2.16	9	1
1:A:246:LEU:CD1	1:A:247:PRO:N	0.40	2.85	9	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:VAL:HG13	0.40	2.16	10	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:66:PRO:HD2	0.40	1.93	1	2
1:A:128:THR:HG22	1:A:128:THR:O	0.40	2.17	1	1
1:A:124:VAL:HG11	1:A:216:LEU:CD2	0.40	2.46	3	1
1:A:98:VAL:CG1	1:A:100:GLN:HG3	0.40	2.37	4	1
1:A:162:PHE:CD1	1:A:162:PHE:N	0.40	2.90	4	1
1:A:144:THR:O	1:A:175:ARG:HG2	0.40	2.16	5	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:88:PHE:CE1	0.40	3.04	6	1
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:HB	0.40	2.16	7	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:235:ILE:CG2	0.40	2.45	7	1
1:A:29:PHE:O	1:A:77:GLU:HA	0.40	2.17	8	1
1:A:34:ARG:CD	1:A:34:ARG:C	0.40	2.89	8	1
1:A:168:LYS:O	1:A:171:GLU:HB2	0.40	2.16	8	1
1:A:192:GLY:O	1:A:193:GLU:HB2	0.40	2.15	9	1
1:A:33:LYS:O	1:A:33:LYS:HG3	0.40	2.16	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LYS:O	1:A:33:LYS:HD2	0.40	2.16	1	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HD23	0.40	1.94	2	1
1:A:43:VAL:HG12	1:A:69:LEU:O	0.40	2.17	3	1
1:A:50:PHE:HB3	1:A:65:SER:HA	0.40	1.93	3	1
1:A:92:LEU:C	1:A:96:ALA:HB3	0.40	2.36	3	1
1:A:138:ARG:O	1:A:142:GLU:OE1	0.40	2.40	3	1
1:A:190:TRP:CA	1:A:251:ALA:HB2	0.40	2.47	3	1
1:A:191:GLU:HG3	1:A:251:ALA:HB3	0.40	1.92	3	1
1:A:31:LEU:O	1:A:76:LEU:CD1	0.40	2.69	4	1
1:A:140:MET:O	1:A:174:MET:SD	0.40	2.79	4	1
1:A:124:VAL:CA	1:A:152:TYR:CB	0.40	2.99	5	1
1:A:180:LYS:HE2	1:A:194:GLN:OE1	0.40	2.16	5	1
1:A:205:LEU:CD2	1:A:235:ILE:CD1	0.40	2.99	5	1
1:A:131:ALA:HA	1:A:134:VAL:CG2	0.40	2.46	6	1
1:A:47:PRO:HD2	1:A:110:VAL:HG11	0.40	1.92	7	1
1:A:144:THR:O	1:A:146:PRO:N	0.40	2.54	7	1
1:A:32:GLN:O	1:A:33:LYS:CB	0.40	2.68	8	1
1:A:152:TYR:CD1	1:A:180:LYS:HG3	0.40	2.51	10	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	233/250 (93%)	160±4 (68±2%)	41±4 (18±2%)	33±3 (14±1%)	1	5
All	All	2330/2500 (93%)	1595 (68%)	408 (18%)	327 (14%)	1	5

All 70 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	58	THR	10
1	A	69	LEU	10
1	A	155	VAL	10
1	A	158	GLU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	183	VAL	10
1	A	186	PRO	10
1	A	187	SER	10
1	A	195	GLY	10
1	A	196	SER	10
1	A	210	ALA	10
1	A	211	ASN	10
1	A	247	PRO	10
1	A	193	GLU	9
1	A	208	SER	9
1	A	198	ILE	8
1	A	47	PRO	8
1	A	235	ILE	7
1	A	59	ASP	6
1	A	60	VAL	6
1	A	62	ARG	6
1	A	97	ARG	6
1	A	162	PHE	6
1	A	209	ASP	6
1	A	145	ALA	6
1	A	197	PRO	6
1	A	49	GLN	5
1	A	106	GLY	5
1	A	112	GLY	5
1	A	157	THR	5
1	A	174	MET	5
1	A	246	LEU	5
1	A	33	LYS	5
1	A	87	ARG	5
1	A	19	LEU	4
1	A	70	PRO	4
1	A	85	GLU	4
1	A	98	VAL	4
1	A	147	ASN	3
1	A	34	ARG	3
1	A	86	GLY	3
1	A	185	HIS	3
1	A	45	PHE	3
1	A	100	GLN	3
1	A	161	LEU	3
1	A	175	ARG	2
1	A	56	PRO	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	71	ASN	2
1	A	73	GLU	2
1	A	99	GLY	2
1	A	159	PRO	2
1	A	240	VAL	2
1	A	44	LYS	2
1	A	68	ASN	2
1	A	95	ASP	2
1	A	219	PRO	2
1	A	17	VAL	2
1	A	220	PRO	2
1	A	83	LEU	2
1	A	55	ILE	2
1	A	176	ASN	1
1	A	212	PRO	1
1	A	75	ARG	1
1	A	84	PRO	1
1	A	160	GLU	1
1	A	236	PRO	1
1	A	238	GLU	1
1	A	74	GLY	1
1	A	207	SER	1
1	A	48	GLY	1
1	A	144	THR	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	197/210 (94%)	108±5 (55±2%)	89±5 (45±2%)	0	2
All	All	1970/2100 (94%)	1078 (55%)	892 (45%)	0	2

All 162 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	19	LEU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	ASN	10
1	A	29	PHE	10
1	A	53	LEU	10
1	A	54	THR	10
1	A	80	ILE	10
1	A	92	LEU	10
1	A	102	LEU	10
1	A	108	LEU	10
1	A	121	ARG	10
1	A	130	LEU	10
1	A	151	ILE	10
1	A	163	TYR	10
1	A	164	ILE	10
1	A	167	LEU	10
1	A	176	ASN	10
1	A	184	TRP	10
1	A	189	ASP	10
1	A	198	ILE	10
1	A	201	LEU	10
1	A	205	LEU	10
1	A	213	ASP	10
1	A	214	ILE	10
1	A	223	ILE	10
1	A	229	LEU	10
1	A	245	PHE	10
1	A	26	THR	9
1	A	30	LEU	9
1	A	81	ARG	9
1	A	93	ARG	9
1	A	150	ARG	9
1	A	170	LEU	9
1	A	174	MET	9
1	A	233	ARG	9
1	A	114	LYS	9
1	A	62	ARG	8
1	A	71	ASN	8
1	A	76	LEU	8
1	A	135	SER	8
1	A	136	MET	8
1	A	143	TRP	8
1	A	162	PHE	8
1	A	194	GLN	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	241	PHE	8
1	A	69	LEU	8
1	A	25	ASN	7
1	A	34	ARG	7
1	A	43	VAL	7
1	A	55	ILE	7
1	A	95	ASP	7
1	A	97	ARG	7
1	A	105	LYS	7
1	A	180	LYS	7
1	A	222	MET	7
1	A	244	LYS	7
1	A	139	GLN	7
1	A	141	GLN	7
1	A	242	PHE	7
1	A	12	PHE	6
1	A	45	PHE	6
1	A	68	ASN	6
1	A	78	PHE	6
1	A	138	ARG	6
1	A	144	THR	6
1	A	199	ASP	6
1	A	215	TYR	6
1	A	44	LYS	6
1	A	49	GLN	6
1	A	33	LYS	6
1	A	208	SER	6
1	A	46	GLU	5
1	A	89	SER	5
1	A	98	VAL	5
1	A	100	GLN	5
1	A	113	LEU	5
1	A	115	GLU	5
1	A	118	MET	5
1	A	156	ASN	5
1	A	161	LEU	5
1	A	175	ARG	5
1	A	177	LEU	5
1	A	193	GLU	5
1	A	206	GLU	5
1	A	217	CYS	5
1	A	232	SER	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	235	ILE	5
1	A	246	LEU	5
1	A	50	PHE	5
1	A	60	VAL	5
1	A	63	SER	5
1	A	85	GLU	5
1	A	87	ARG	5
1	A	91	TYR	5
1	A	75	ARG	5
1	A	90	ASP	5
1	A	216	LEU	5
1	A	140	MET	5
1	A	172	ARG	5
1	A	157	THR	5
1	A	73	GLU	4
1	A	83	LEU	4
1	A	104	VAL	4
1	A	148	GLU	4
1	A	165	ASP	4
1	A	116	ARG	4
1	A	124	VAL	4
1	A	160	GLU	4
1	A	191	GLU	4
1	A	228	GLU	4
1	A	123	PHE	4
1	A	79	LEU	4
1	A	88	PHE	4
1	A	166	GLU	4
1	A	243	GLU	4
1	A	169	SER	4
1	A	149	THR	3
1	A	158	GLU	3
1	A	248	SER	3
1	A	103	SER	3
1	A	173	SER	3
1	A	203	GLU	3
1	A	11	SER	3
1	A	13	GLU	3
1	A	51	MET	3
1	A	122	TYR	3
1	A	207	SER	3
1	A	59	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	VAL	3
1	A	52	ASP	3
1	A	185	HIS	3
1	A	209	ASP	3
1	A	32	GLN	3
1	A	152	TYR	3
1	A	196	SER	3
1	A	142	GLU	2
1	A	171	GLU	2
1	A	187	SER	2
1	A	231	ARG	2
1	A	56	PRO	2
1	A	153	PHE	2
1	A	110	VAL	2
1	A	22	VAL	2
1	A	111	PHE	2
1	A	24	SER	2
1	A	178	THR	2
1	A	28	GLN	2
1	A	65	SER	2
1	A	238	GLU	2
1	A	23	SER	1
1	A	15	GLU	1
1	A	61	SER	1
1	A	64	TYR	1
1	A	224	ASP	1
1	A	230	VAL	1
1	A	31	LEU	1
1	A	77	GLU	1
1	A	137	VAL	1
1	A	202	ARG	1
1	A	204	ASP	1
1	A	128	THR	1
1	A	82	VAL	1
1	A	147	ASN	1

6.3.3 RNA

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)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	FDA	A	252	-	51,58,58	2.50±0.02	18±1 (35±1%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	FDA	A	252	-	60,89,89	1.96±0.02	15±1 (24±1%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	FDA	A	252	-	-	0±0,30,50,50	0±0,6,6,6

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	252	FDA	C4X-C10	9.31	1.48	1.38	5	10
2	A	252	FDA	C9A-N10	5.81	1.46	1.38	5	10
2	A	252	FDA	PA-O2A	4.33	1.35	1.55	8	10
2	A	252	FDA	O4B-C1B	4.30	1.47	1.41	9	10
2	A	252	FDA	C10-N1	3.99	1.38	1.33	1	10
2	A	252	FDA	O5'-C5'	3.66	1.58	1.44	8	10
2	A	252	FDA	C4-N3	3.55	1.39	1.33	3	10
2	A	252	FDA	C5'-C4'	3.45	1.46	1.51	3	10
2	A	252	FDA	P-O2P	3.44	1.39	1.55	7	10
2	A	252	FDA	P-O5'	3.07	1.46	1.59	9	10
2	A	252	FDA	C8-C7	3.04	1.48	1.40	2	10
2	A	252	FDA	C5X-N5	2.94	1.40	1.35	9	10
2	A	252	FDA	C4A-N3A	2.75	1.39	1.35	3	10
2	A	252	FDA	C4X-C4	2.74	1.46	1.41	9	10
2	A	252	FDA	C2'-C3'	2.70	1.48	1.53	5	6
2	A	252	FDA	C2-N3	2.68	1.43	1.38	4	10
2	A	252	FDA	C2-N1	2.46	1.33	1.38	10	10
2	A	252	FDA	C2A-N3A	2.45	1.36	1.32	10	10
2	A	252	FDA	C4'-C3'	2.17	1.49	1.53	3	5

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
2	A	252	FDA	C2-N3-C4	8.17	122.04	115.14	10	10
2	A	252	FDA	C4X-C4-N3	4.36	117.47	123.43	8	10
2	A	252	FDA	C1'-N10-C10	4.31	122.27	118.41	5	10
2	A	252	FDA	C3B-C2B-C1B	3.68	106.52	100.98	5	10
2	A	252	FDA	C10-C4X-C4	3.62	117.56	119.95	9	10
2	A	252	FDA	C5X-C9A-N10	3.40	115.25	117.72	4	10
2	A	252	FDA	O5B-PA-O1A	3.05	97.17	109.07	5	10
2	A	252	FDA	C5A-C6A-N6A	2.62	124.33	120.35	8	10
2	A	252	FDA	C5'-C4'-C3'	2.62	107.14	112.20	5	10
2	A	252	FDA	C2A-N1A-C6A	2.56	123.14	118.75	8	10
2	A	252	FDA	C4'-C3'-C2'	2.52	108.12	113.36	4	6
2	A	252	FDA	C5A-C6A-N1A	2.32	115.08	120.35	7	10
2	A	252	FDA	C4X-N5-C5X	2.32	119.09	116.77	4	10
2	A	252	FDA	C1'-N10-C9A	2.28	116.50	118.29	5	1
2	A	252	FDA	P-O3P-PA	2.25	140.54	132.83	9	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
2	A	252	FDA	C4X-C10-N10	2.11	118.14	120.30	4	4
2	A	252	FDA	O5'-P-O1P	2.04	101.08	109.07	7	8

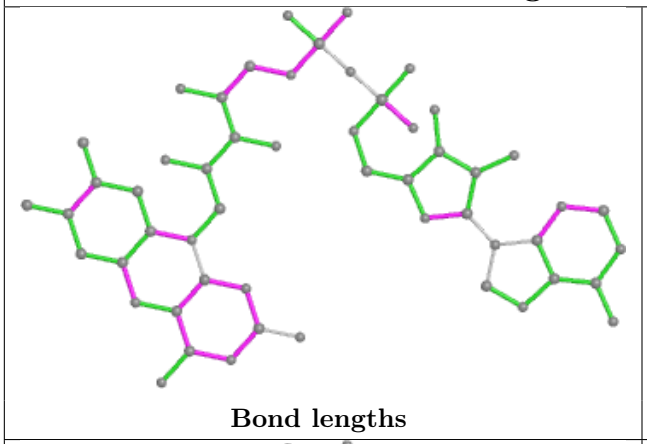
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

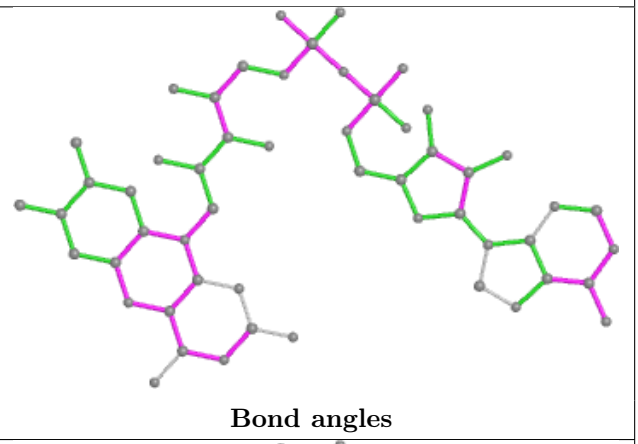
There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less then 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.

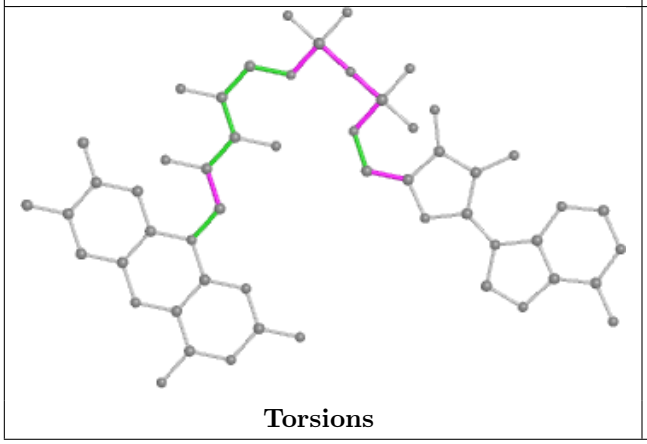
Ligand FDA A 252



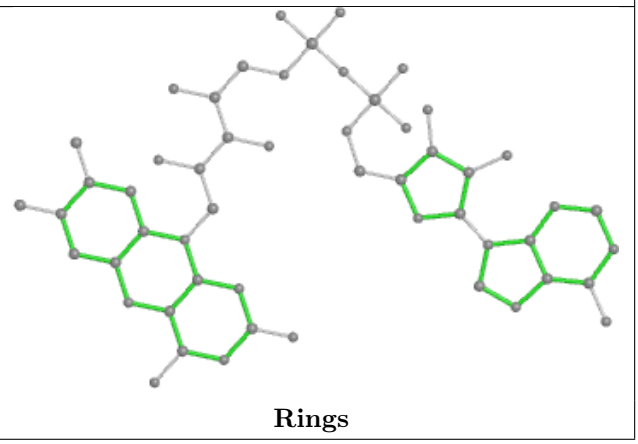
Bond lengths



Bond angles



Torsions



Rings

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

No chemical shift data were provided