



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:19 PM BST

PDB ID : 1U3N
Title : A SOD-like protein from *B. subtilis*, unstructured in solution, becomes ordered in the crystal: implications for function and for fibrillogenesis
Authors : Banci, L.; Bertini, I.; Calderone, V.; Cramaro, F.; Del Conte, R.; Fantoni, A.; Mangani, S.; Quattrone, A.; Viezzoli, M.S.
Deposited on : 2004-07-22

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

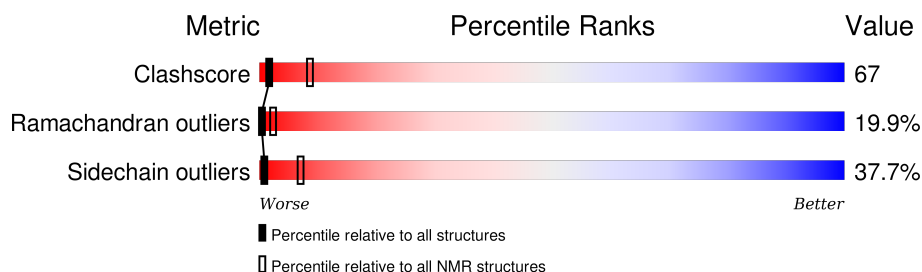
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 82%.

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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 $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	162	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 29 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:40-A:105, A:123-A:147, A:152-A:171, A:178-A:190 (124)	1.71	29

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 5 clusters and 5 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 7, 8, 10, 11, 23, 26, 27
2	2, 5, 13, 14, 16, 28
3	6, 18, 20, 21, 29, 30
4	1, 17
5	19, 24
Single-model clusters	9; 12; 15; 22; 25

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2377 atoms, of which 1165 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM.

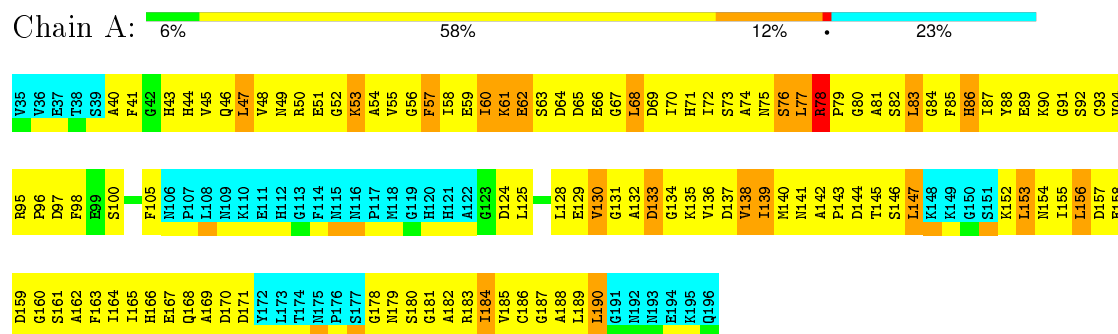
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	162	Total	C	H	N	O	S	0
			2377	750	1165	215	243	4	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM

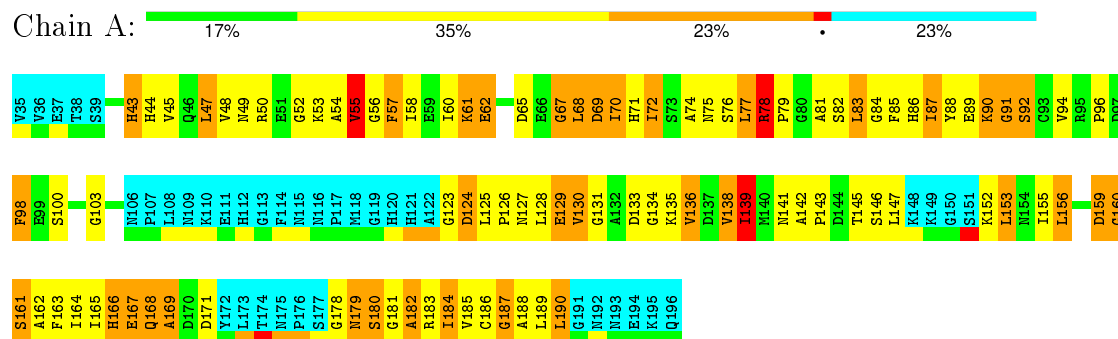


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

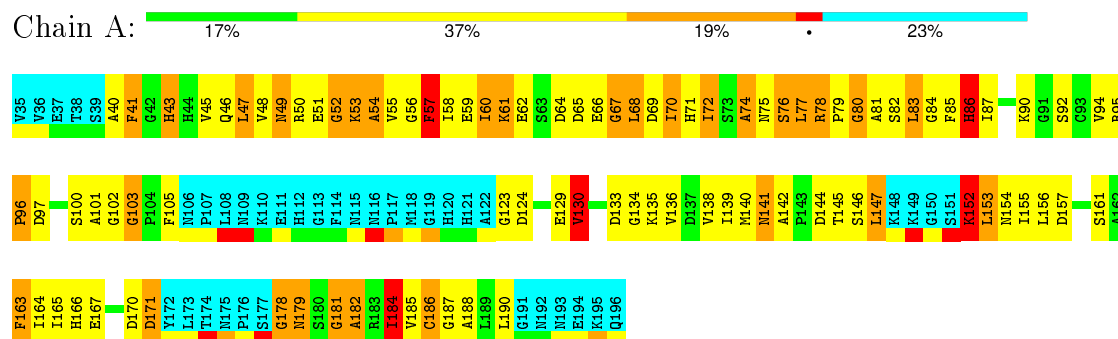
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



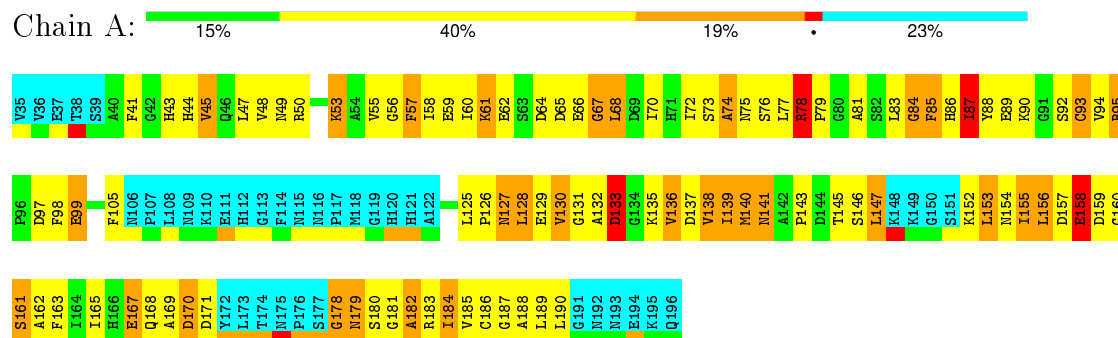
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



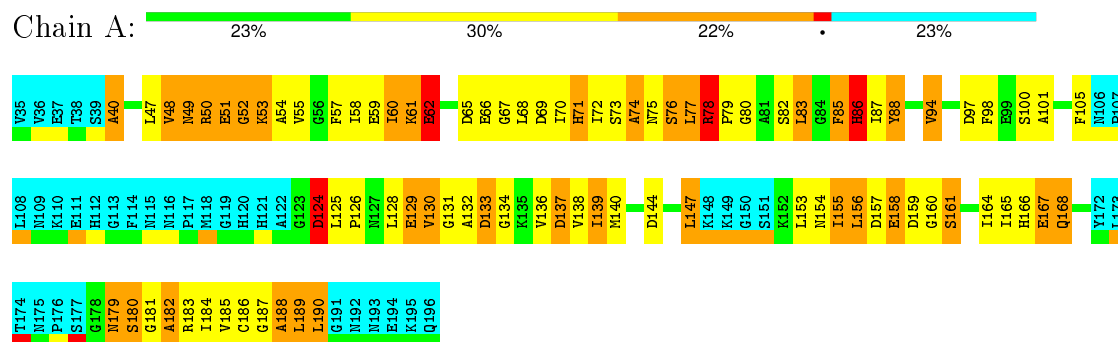
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



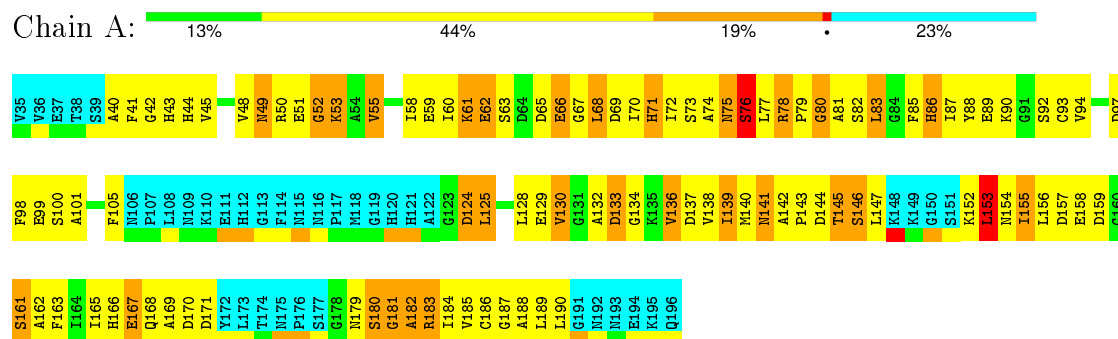
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



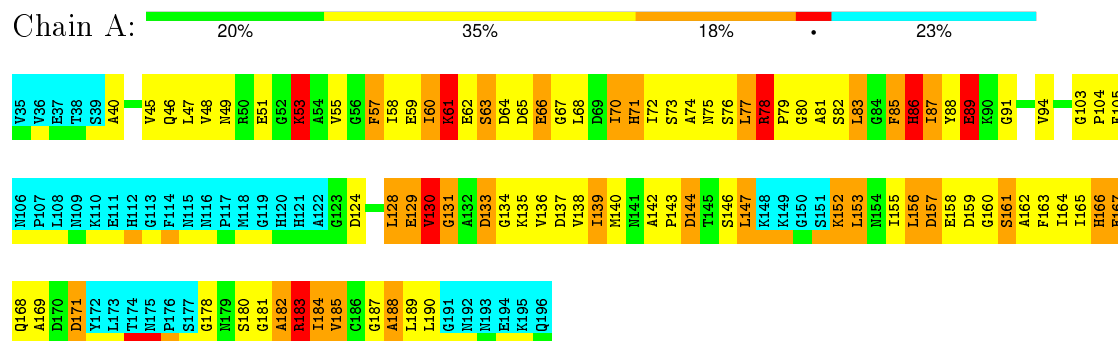
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



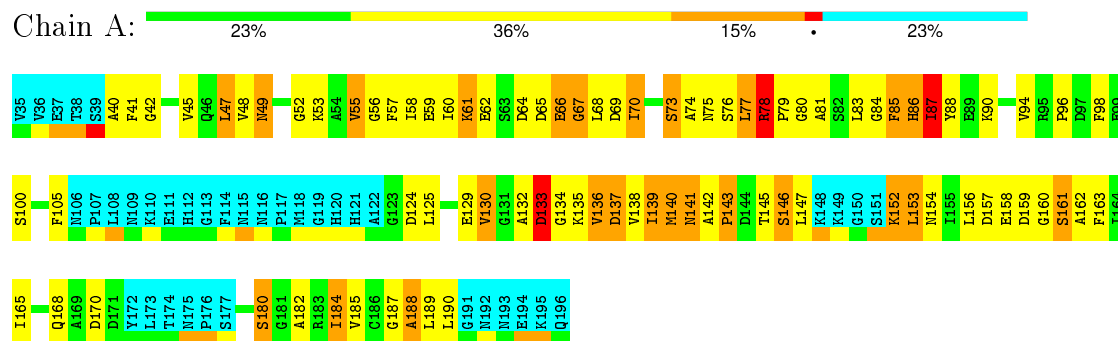
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



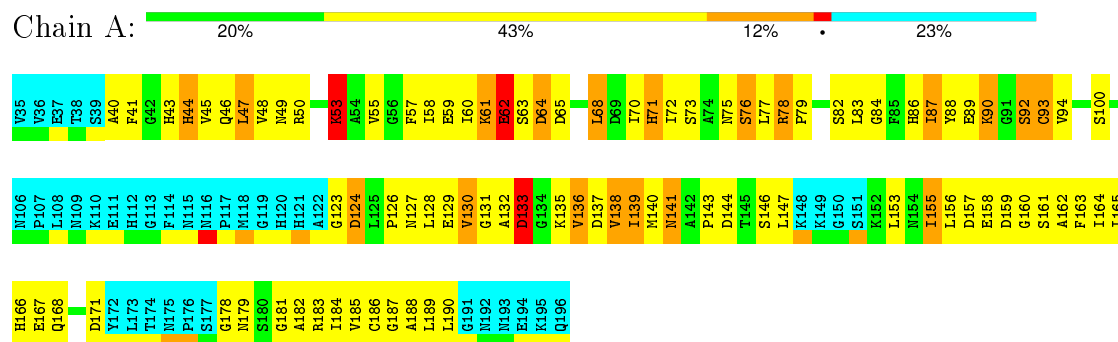
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



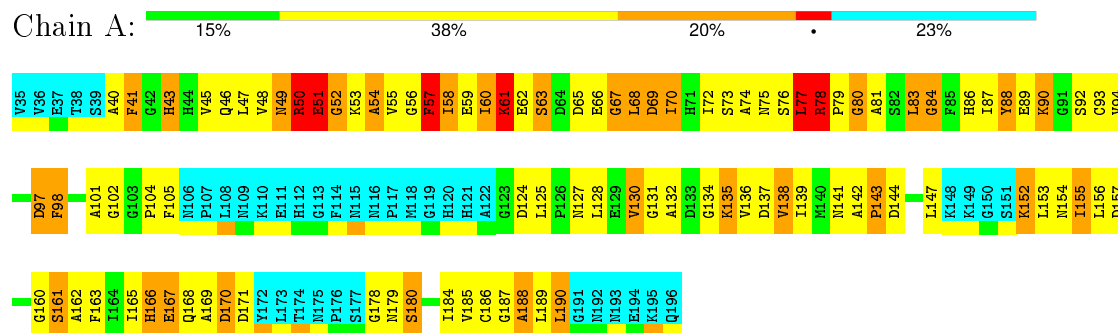
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



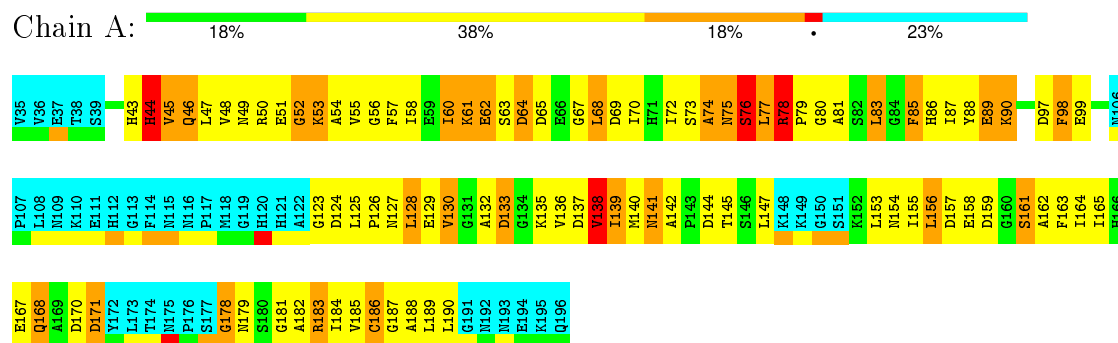
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



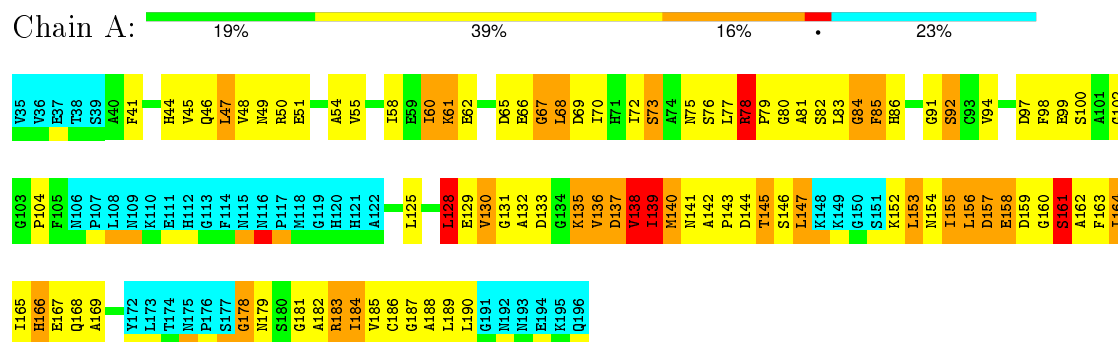
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



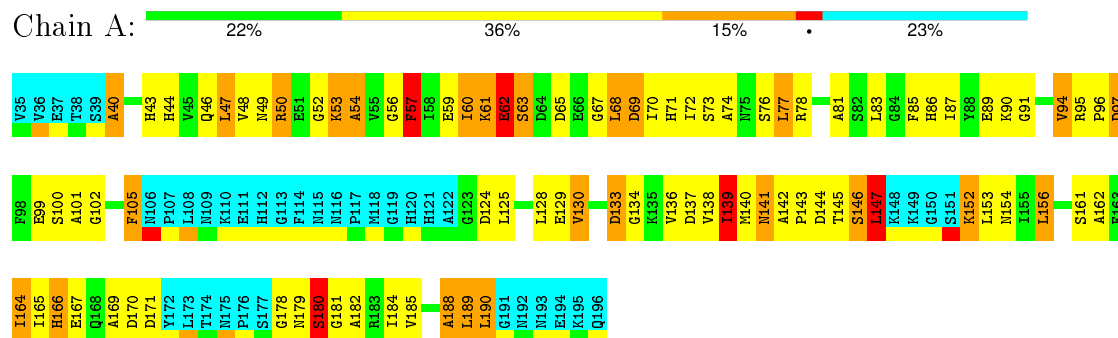
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



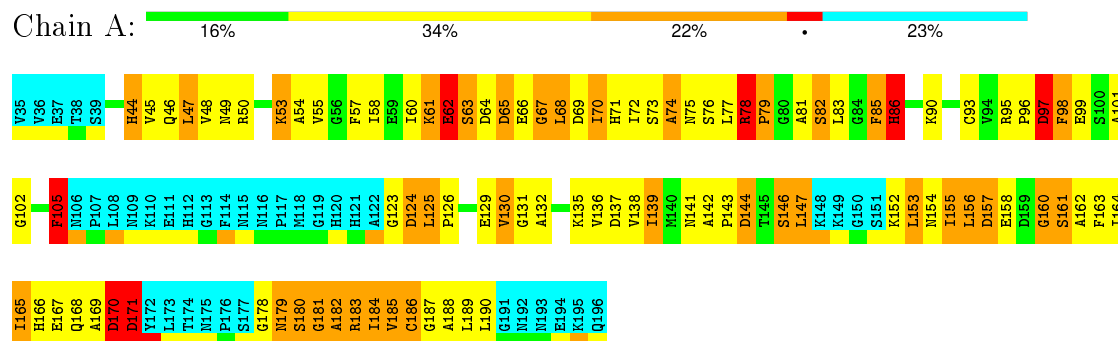
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



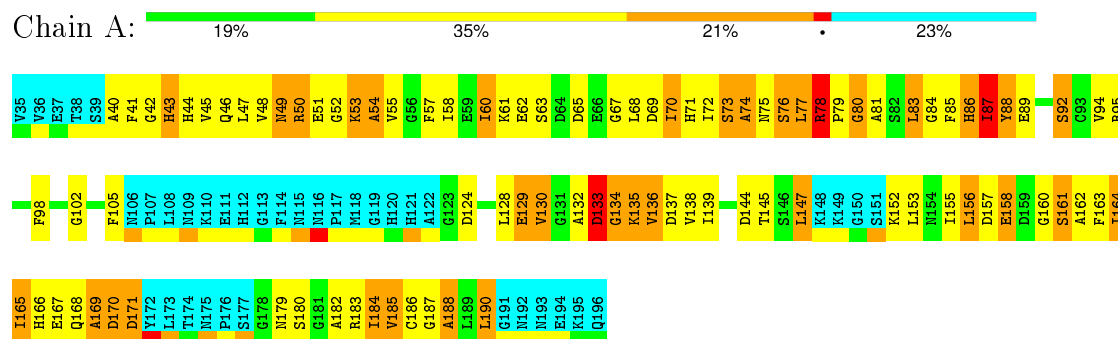
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



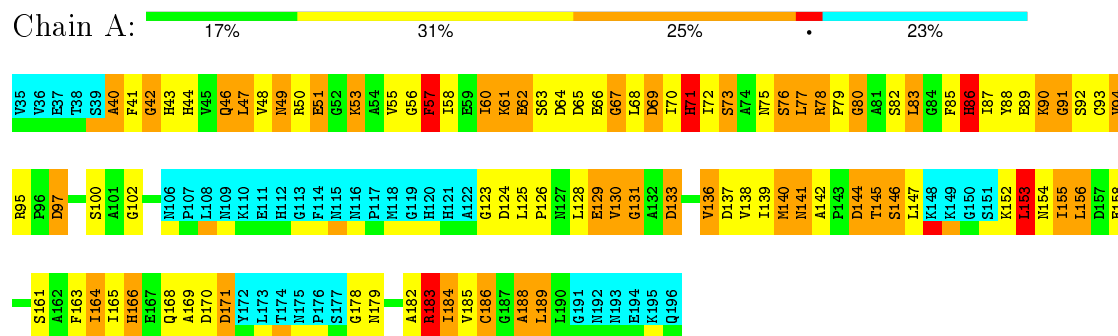
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



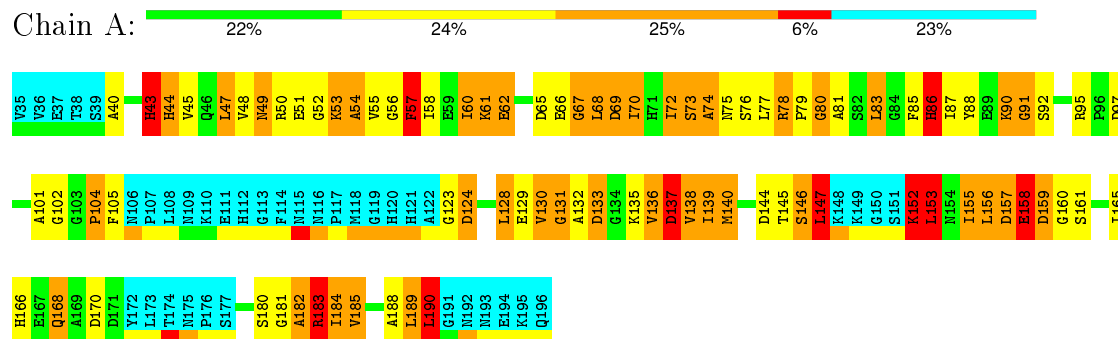
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



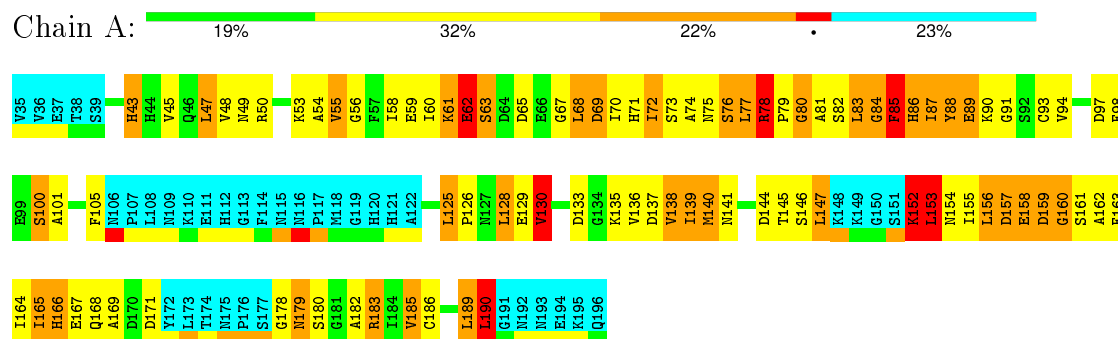
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



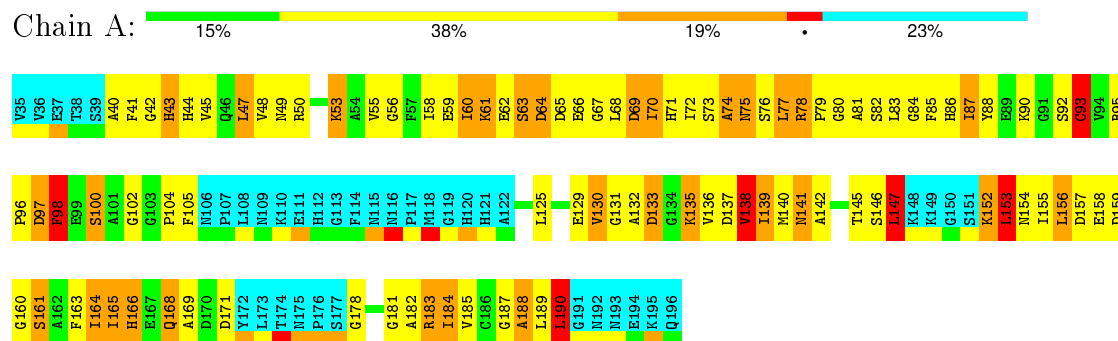
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



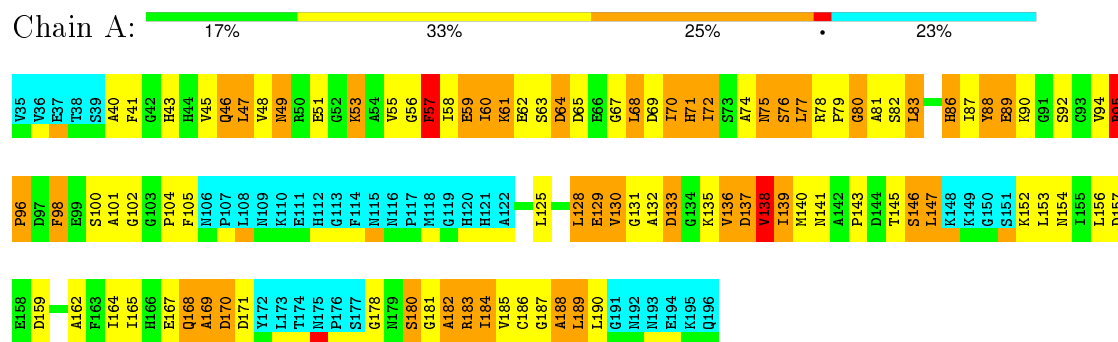
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



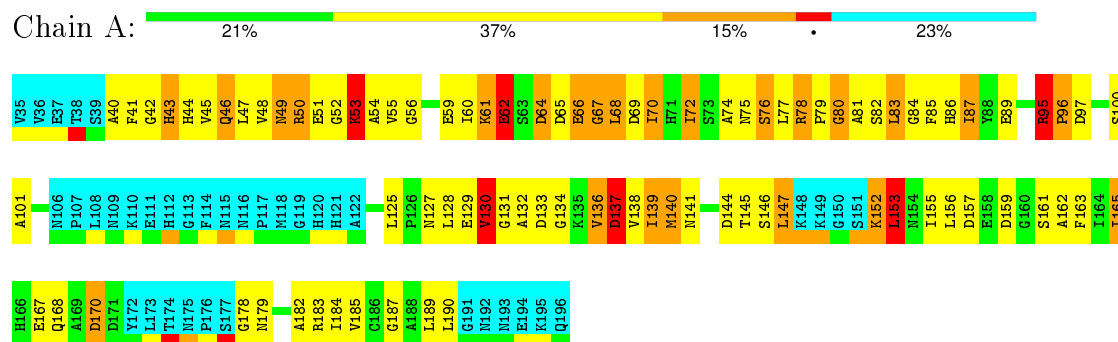
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



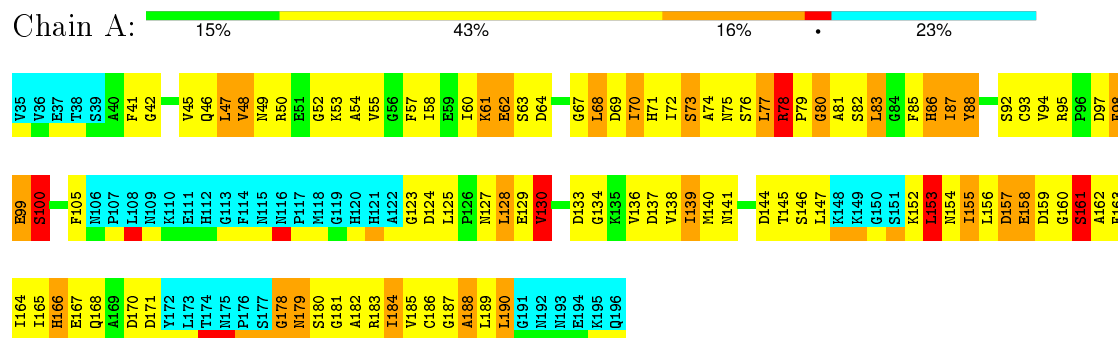
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



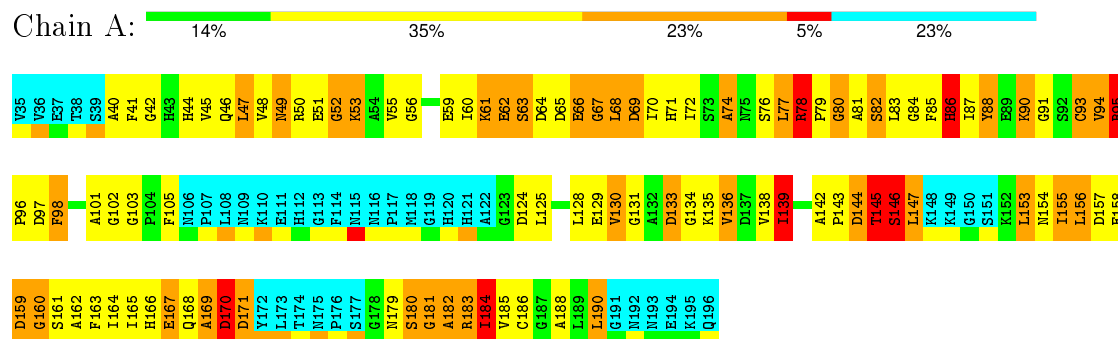
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



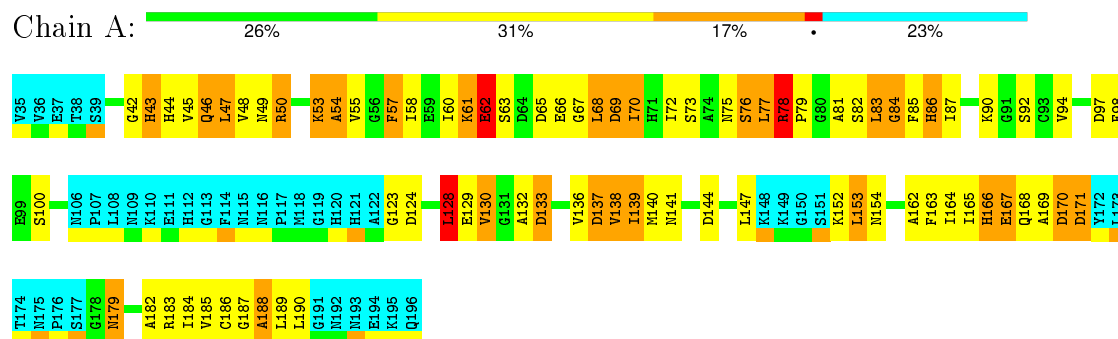
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein vojM



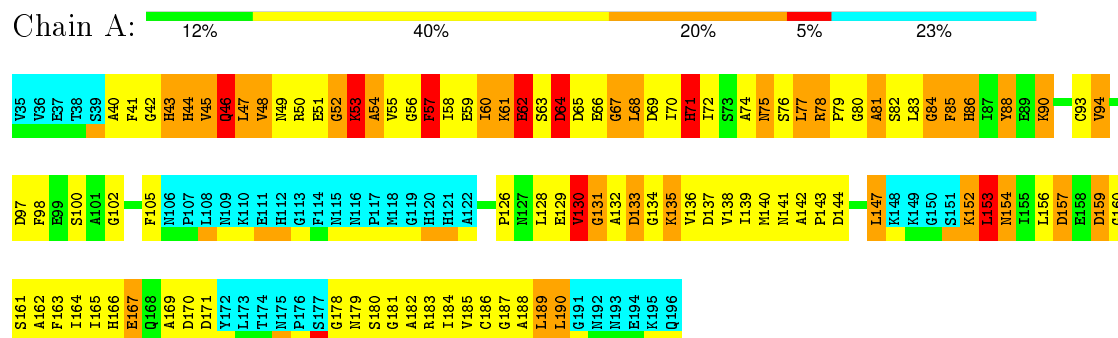
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



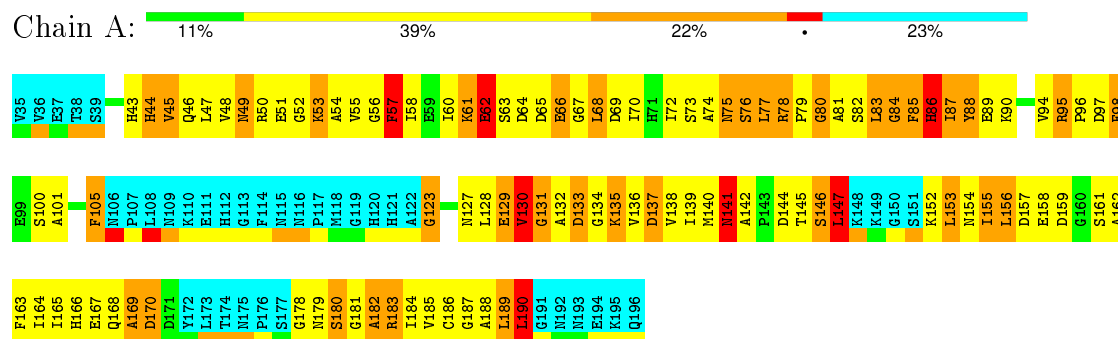
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



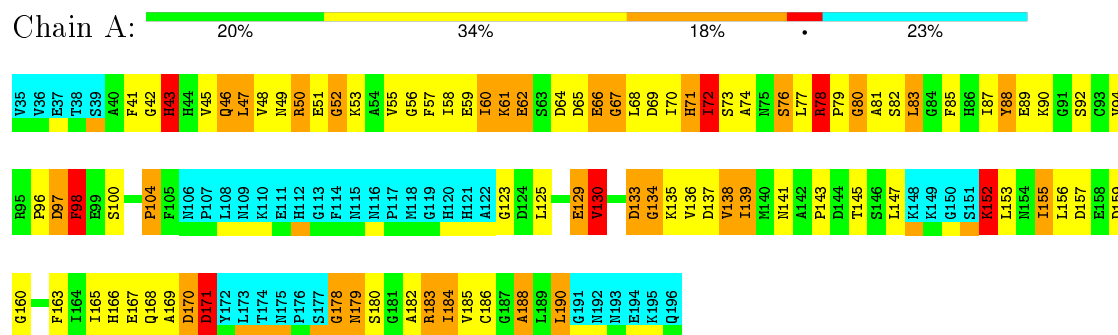
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



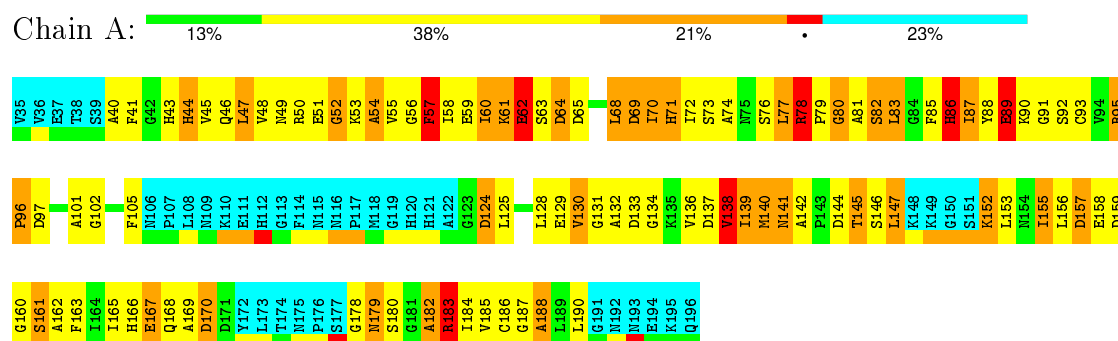
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



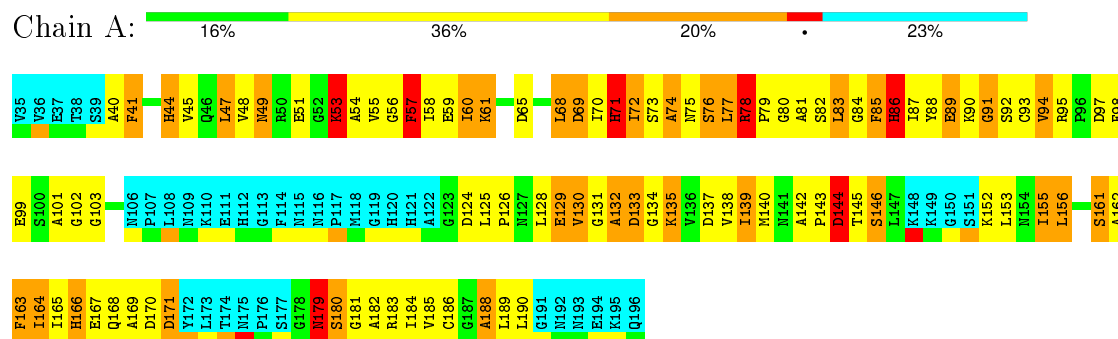
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



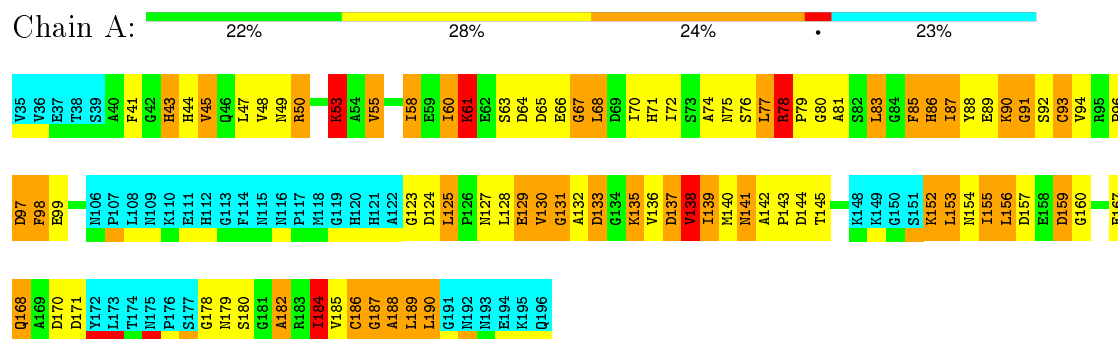
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



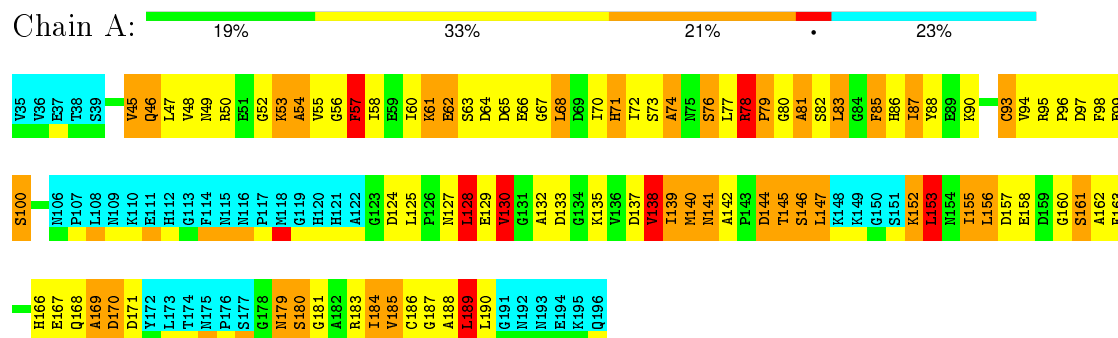
4.2.29 Score per residue for model 29 (medoid)

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *the structure of SOD-like from bacillus subtilis was determined using triple resonance three- and bi-dimensional and homonuclear bi-dimensional NMR technique.*

Of the ? calculated structures, 30 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	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 6073
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1608
Number of shifts mapped to atoms	1608
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	82%

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

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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	919	891	879	120±17
All	All	27570	26730	26370	3609

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 67.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD12	1.11	1.12	21	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HD11	1.09	1.21	23	1
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CE1	1.06	1.86	23	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:165:ILE:HD11	1.06	1.86	15	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD13	1.03	1.88	27	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HD11	1.01	1.32	26	3
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HD12	1.01	1.27	13	2
1:A:68:LEU:HD23	1:A:142:ALA:HB2	1.01	1.30	22	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG13	1.00	1.23	8	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:163:PHE:CE2	1.00	1.91	2	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:HD21	0.97	1.74	4	2
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:HD12	0.96	1.61	28	8
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG22	0.96	1.38	14	5
1:A:70:ILE:CD1	1:A:138:VAL:HG13	0.95	1.91	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ASP:O	1:A:70:ILE:HD13	0.94	1.62	26	1
1:A:75:ASN:O	1:A:83:LEU:HD22	0.94	1.63	19	1
1:A:82:SER:O	1:A:83:LEU:HD13	0.94	1.62	15	11
1:A:47:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE2	0.93	1.98	22	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:ILE:HD13	0.93	1.63	2	6
1:A:147:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13	0.93	1.39	22	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:155:ILE:HD13	0.92	1.94	22	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:HD12	0.92	1.39	29	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CD1	0.92	1.93	13	3
1:A:80:GLY:O	1:A:83:LEU:HD21	0.91	1.65	10	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:CE1	0.91	2.01	22	1
1:A:55:VAL:O	1:A:74:ALA:HB1	0.91	1.65	22	5
1:A:167:GLU:CG	1:A:182:ALA:HB3	0.91	1.96	17	1
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:HG12	0.91	1.37	14	2
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD21	0.91	1.42	15	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD1	0.91	1.95	21	1
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:HD12	0.90	1.65	27	2
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:O	0.90	1.64	6	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG12	0.89	1.80	7	2
1:A:156:LEU:HD22	1:A:156:LEU:O	0.89	1.66	12	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HG23	0.88	1.43	12	6
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:HG12	0.88	1.69	8	2
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:HD11	0.87	1.43	25	4
1:A:67:GLY:O	1:A:68:LEU:HD23	0.87	1.68	16	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:74:ALA:HB1	0.87	1.42	4	3
1:A:71:HIS:O	1:A:71:HIS:CG	0.87	2.27	26	1
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:HD23	0.87	1.68	13	2
1:A:188:ALA:C	1:A:189:LEU:HD22	0.87	1.89	11	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.86	1.84	28	1
1:A:164:ILE:O	1:A:164:ILE:HD13	0.86	1.69	12	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:OG1	0.86	1.70	2	4
1:A:45:VAL:HG22	1:A:188:ALA:N	0.86	1.86	2	2
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:HG21	0.86	1.44	17	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HD13	0.86	1.45	11	2
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:HD11	0.85	1.70	8	2
1:A:138:VAL:C	1:A:139:ILE:HD13	0.85	1.92	28	10
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG23	0.85	2.00	11	3
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:HG22	0.85	1.46	5	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HD13	0.85	1.70	19	2
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:CB	0.85	2.00	28	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:N	0.85	1.87	29	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:LEU:HD12	1:A:190:LEU:O	0.85	1.70	5	3
1:A:68:LEU:HD11	1:A:145:THR:O	0.85	1.70	29	1
1:A:67:GLY:C	1:A:68:LEU:HD13	0.84	1.93	29	2
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:N	0.84	1.88	12	4
1:A:68:LEU:CD2	1:A:142:ALA:HB2	0.84	2.02	22	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:HD22	0.84	1.72	5	1
1:A:190:LEU:O	1:A:190:LEU:HD12	0.84	1.71	30	3
1:A:163:PHE:CD1	1:A:165:ILE:HD12	0.84	2.08	22	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HD12	0.83	1.72	12	8
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD13	0.83	2.07	27	2
1:A:82:SER:OG	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.73	23	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:CD2	0.83	2.02	18	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:153:LEU:O	0.83	1.74	12	7
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:O	0.82	1.74	29	7
1:A:161:SER:HB3	1:A:188:ALA:HB1	0.82	1.48	21	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:53:LYS:O	0.82	1.74	2	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:LEU:HD11	0.82	1.49	9	5
1:A:153:LEU:HB2	1:A:156:LEU:HD11	0.82	1.52	10	5
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:ASN:O	0.82	1.75	8	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:HG23	0.82	1.52	15	4
1:A:83:LEU:HD12	1:A:128:LEU:HD13	0.82	1.51	21	1
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:HG23	0.81	1.52	2	4
1:A:48:VAL:HG13	1:A:53:LYS:O	0.81	1.76	14	6
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:O	0.81	1.75	3	6
1:A:164:ILE:HG21	1:A:166:HIS:CE1	0.81	2.10	6	1
1:A:52:GLY:O	1:A:77:LEU:HD11	0.81	1.73	24	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HG21	0.81	1.51	19	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:CG	0.81	1.95	28	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD13	0.81	1.90	15	6
1:A:47:LEU:CD2	1:A:58:ILE:HD11	0.81	2.06	26	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CD1	0.81	2.05	23	1
1:A:48:VAL:HG13	1:A:54:ALA:HB2	0.81	1.52	20	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:72:ILE:HG23	0.81	2.06	4	2
1:A:59:GLU:N	1:A:72:ILE:HG22	0.81	1.90	3	1
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:HD11	0.81	1.75	24	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:165:ILE:HG23	0.80	1.51	5	9
1:A:70:ILE:HD13	1:A:138:VAL:HG13	0.80	1.51	19	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG22	0.80	1.75	26	5
1:A:45:VAL:HG13	1:A:45:VAL:O	0.80	1.75	19	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:142:ALA:CB	0.80	2.06	22	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:187:GLY:HA2	0.80	1.52	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HD11	0.80	2.07	13	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD11	0.80	1.53	28	3
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG23	0.80	1.77	4	7
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:N	0.80	1.92	27	3
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:HD23	0.80	1.76	19	1
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:N	0.80	1.90	24	3
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:HG21	0.80	1.76	25	4
1:A:48:VAL:HG22	1:A:53:LYS:O	0.80	1.75	16	9
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:N	0.80	1.92	25	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:HG23	0.80	1.51	23	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD12	0.80	1.77	17	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:55:VAL:HG13	0.79	1.77	24	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG13	0.79	1.54	21	8
1:A:81:ALA:HB1	1:A:168:GLN:HB3	0.79	1.51	23	1
1:A:72:ILE:HD11	1:A:85:PHE:CZ	0.79	2.11	10	1
1:A:153:LEU:HB3	1:A:156:LEU:HD11	0.79	1.55	16	1
1:A:153:LEU:CB	1:A:156:LEU:HD11	0.79	2.06	16	3
1:A:83:LEU:C	1:A:165:ILE:HG23	0.79	1.98	24	3
1:A:50:ARG:N	1:A:169:ALA:HB1	0.79	1.93	9	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:58:ILE:HD11	0.79	2.08	29	2
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:HG21	0.79	1.54	12	1
1:A:67:GLY:HA3	1:A:142:ALA:HB3	0.78	1.55	22	9
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:HG23	0.78	1.55	24	2
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:HG23	0.78	1.55	1	2
1:A:50:ARG:HB2	1:A:184:ILE:HG23	0.78	1.52	14	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:83:LEU:N	0.78	1.94	2	7
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:HG21	0.78	1.54	21	5
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:HD12	0.78	1.77	28	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:81:ALA:HB3	0.77	1.56	19	1
1:A:81:ALA:HB3	1:A:169:ALA:HB2	0.77	1.54	11	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:164:ILE:HD13	0.77	1.80	1	1
1:A:189:LEU:HD12	1:A:189:LEU:O	0.77	1.80	28	2
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:HD13	0.77	1.79	25	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:HD23	0.77	1.78	9	3
1:A:60:ILE:HD13	1:A:147:LEU:HD13	0.77	1.55	19	1
1:A:136:VAL:HG12	1:A:136:VAL:O	0.77	1.79	26	3
1:A:45:VAL:HG21	1:A:189:LEU:HD12	0.77	1.57	9	1
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:HD12	0.77	2.00	15	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:HB3	0.77	1.57	15	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:156:LEU:N	0.77	1.92	1	2
1:A:84:GLY:N	1:A:165:ILE:HG23	0.76	1.95	7	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD23	1:A:145:THR:OG1	0.76	1.80	7	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:HG22	0.76	1.80	7	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD11	0.76	1.58	29	7
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:HD12	0.76	1.95	21	3
1:A:156:LEU:HD12	1:A:161:SER:OG	0.76	1.80	28	1
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:HD3	0.76	1.95	8	1
1:A:76:SER:O	1:A:130:VAL:HG13	0.76	1.79	11	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:HG12	0.76	1.58	25	2
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG22	0.76	1.58	2	3
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HD22	0.75	1.81	5	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD2	0.75	2.11	29	3
1:A:68:LEU:HD13	1:A:147:LEU:HD21	0.75	1.59	22	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD11	0.75	2.10	23	2
1:A:165:ILE:HD12	1:A:165:ILE:N	0.75	1.96	3	4
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:HD12	0.75	2.01	6	7
1:A:68:LEU:HD21	1:A:145:THR:OG1	0.75	1.81	16	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD12	0.75	1.96	2	3
1:A:82:SER:C	1:A:83:LEU:HD13	0.75	2.01	2	9
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:O	0.75	1.82	9	3
1:A:68:LEU:O	1:A:147:LEU:HD11	0.75	1.82	4	3
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:HG23	0.74	1.58	20	2
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD13	0.74	1.57	14	1
1:A:92:SER:HB2	1:A:188:ALA:HB3	0.74	1.56	14	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD22	0.74	1.98	25	6
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CD1	0.74	2.12	21	6
1:A:78:ARG:O	1:A:130:VAL:HG11	0.74	1.82	12	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.74	1.83	21	2
1:A:125:LEU:HD11	1:A:129:GLU:OE1	0.74	1.81	29	2
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:HG12	0.74	2.01	30	7
1:A:83:LEU:HD23	1:A:128:LEU:O	0.74	1.83	3	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:HB2	0.74	1.82	30	2
1:A:189:LEU:C	1:A:189:LEU:HD12	0.74	2.02	17	1
1:A:164:ILE:HD13	1:A:164:ILE:O	0.74	1.82	15	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:HA	0.74	1.59	23	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:HD13	0.74	1.60	30	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:CB	0.74	2.13	13	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CD2	0.74	2.13	28	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:CD1	0.74	2.13	25	3
1:A:139:ILE:HD13	1:A:139:ILE:N	0.74	1.98	27	3
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HA	0.74	1.60	2	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG11	0.73	2.13	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:ALA:HB1	1:A:143:PRO:HD2	0.73	1.57	9	5
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HD13	0.73	2.17	27	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:CD1	0.73	2.13	23	1
1:A:146:SER:HB2	1:A:153:LEU:HD23	0.73	1.58	30	3
1:A:72:ILE:HG22	1:A:85:PHE:CZ	0.73	2.18	26	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:70:ILE:CG1	0.73	2.13	20	1
1:A:62:GLU:HA	1:A:68:LEU:HD13	0.73	1.58	30	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG13	0.73	1.98	2	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:C	0.73	2.04	29	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:HD12	0.73	1.97	28	4
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:GLY:N	0.73	1.98	8	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:76:SER:HB2	0.73	1.60	24	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HG22	0.73	1.59	14	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:165:ILE:CD1	0.73	2.13	25	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CG	0.73	2.13	25	1
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:HD13	0.73	2.04	9	3
1:A:68:LEU:CD2	1:A:147:LEU:HD11	0.73	2.13	20	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:HA3	0.73	1.60	2	4
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG2	0.73	2.14	6	4
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:C	0.72	2.04	22	8
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD21	0.72	1.83	20	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:163:PHE:CE2	0.72	2.77	26	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:185:VAL:HG11	0.72	2.04	10	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:128:LEU:HD22	0.72	1.99	28	2
1:A:139:ILE:N	1:A:139:ILE:HD13	0.72	1.98	10	6
1:A:154:ASN:C	1:A:156:LEU:HD13	0.72	2.05	17	1
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:HB3	0.72	1.84	13	6
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:ALA:CB	0.72	2.15	5	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:71:HIS:HB2	0.72	1.60	28	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:74:ALA:HB1	0.72	1.60	25	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:HB2	0.71	1.84	29	3
1:A:68:LEU:HD12	1:A:70:ILE:CG2	0.71	2.15	30	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HD13	0.71	1.85	16	2
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HD11	0.71	2.15	5	6
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG12	0.71	1.85	12	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:165:ILE:HD11	0.71	2.20	15	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:H	0.71	1.44	28	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG22	0.71	2.06	22	2
1:A:74:ALA:HB1	1:A:128:LEU:HD11	0.71	1.60	21	1
1:A:137:ASP:HB2	1:A:139:ILE:HD11	0.71	1.60	13	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:165:ILE:CD1	0.71	2.74	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD21	0.71	2.16	18	1
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CG	0.71	2.44	5	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CD1	0.71	2.15	25	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:CB	0.71	2.39	30	2
1:A:85:PHE:CG	1:A:163:PHE:CD2	0.71	2.79	26	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:55:VAL:HG22	0.70	1.63	22	3
1:A:45:VAL:HG12	1:A:187:GLY:HA3	0.70	1.62	29	3
1:A:77:LEU:O	1:A:77:LEU:HD12	0.70	1.85	15	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD23	0.70	1.63	28	2
1:A:155:ILE:HD13	1:A:155:ILE:C	0.70	2.07	29	8
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD23	0.70	1.64	8	3
1:A:62:GLU:HA	1:A:147:LEU:HD13	0.70	1.62	13	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:CD2	0.70	2.16	15	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:N	0.70	2.01	29	2
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:HD13	0.70	1.86	29	1
1:A:155:ILE:HG23	1:A:156:LEU:HD13	0.70	1.63	11	1
1:A:82:SER:C	1:A:83:LEU:HD22	0.70	2.06	15	4
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG23	0.70	2.07	30	5
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:CG2	0.70	2.17	12	1
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG21	0.70	2.00	2	7
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HD12	0.70	1.87	15	6
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:HG11	0.70	1.86	27	4
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:NE2	0.70	2.00	24	1
1:A:68:LEU:HD21	1:A:140:MET:O	0.70	1.87	12	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:158:GLU:O	0.70	1.87	3	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:CB	0.70	2.17	15	2
1:A:161:SER:C	1:A:189:LEU:HD11	0.69	2.07	28	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:N	0.69	2.02	5	6
1:A:156:LEU:HD12	1:A:156:LEU:O	0.69	1.87	27	2
1:A:164:ILE:CG2	1:A:166:HIS:CE1	0.69	2.74	6	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:70:ILE:HG13	0.69	1.62	20	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:HD11	0.69	2.02	29	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD11	0.69	2.17	26	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:H	0.69	1.47	7	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:CG1	0.69	2.16	6	2
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:HD11	0.69	1.64	29	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:153:LEU:CD2	0.69	2.75	24	1
1:A:152:LYS:O	1:A:153:LEU:C	0.69	2.30	18	11
1:A:47:LEU:HD21	1:A:56:GLY:C	0.69	2.07	15	6
1:A:166:HIS:HA	1:A:184:ILE:HD11	0.69	1.63	13	2
1:A:67:GLY:C	1:A:68:LEU:HD23	0.69	2.08	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:HG12	0.69	1.63	29	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG23	0.69	2.02	23	6
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:N	0.69	2.02	24	8
1:A:87:ILE:HG23	1:A:88:TYR:N	0.69	2.02	7	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:HG21	0.69	1.87	23	4
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:HD23	0.69	1.87	29	2
1:A:164:ILE:HD13	1:A:164:ILE:C	0.69	2.07	12	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:130:VAL:HG22	0.69	1.64	22	1
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:HB3	0.69	1.85	14	5
1:A:75:ASN:CG	1:A:128:LEU:HD22	0.69	2.08	28	1
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:CD	0.69	2.56	8	19
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:HD23	0.69	1.87	30	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:CB	0.69	2.40	12	3
1:A:68:LEU:HA	1:A:147:LEU:HD11	0.69	1.64	27	2
1:A:168:GLN:NE2	1:A:179:ASN:HD21	0.69	1.85	3	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:187:GLY:O	0.69	1.88	14	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:GLU:C	0.69	2.31	25	24
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:CA	0.69	2.16	2	2
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:C	0.69	2.31	23	1
1:A:86:HIS:O	1:A:163:PHE:CE2	0.69	2.46	14	1
1:A:161:SER:HB3	1:A:190:LEU:HD12	0.69	1.63	14	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:C	0.68	2.31	27	7
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG12	0.68	1.63	12	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:189:LEU:O	0.68	1.88	19	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:128:LEU:HD13	0.68	2.08	4	1
1:A:92:SER:HA	1:A:188:ALA:HB1	0.68	1.65	18	2
1:A:48:VAL:HG12	1:A:50:ARG:H	0.68	1.49	14	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG21	0.68	1.64	6	3
1:A:155:ILE:HD13	1:A:155:ILE:O	0.68	1.89	15	2
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:HG12	0.68	1.87	23	6
1:A:45:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HD13	0.68	2.19	28	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:HB3	0.68	1.65	11	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD11	0.68	1.88	1	1
1:A:74:ALA:O	1:A:128:LEU:HD21	0.68	1.89	21	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD13	0.68	2.02	20	1
1:A:71:HIS:O	1:A:71:HIS:CD2	0.68	2.46	26	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:143:PRO:CD	0.68	2.19	9	2
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HB1	0.68	1.65	20	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:HB3	0.68	1.88	4	2
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:HG12	0.68	1.88	26	4
1:A:48:VAL:HA	1:A:54:ALA:HB2	0.68	1.64	23	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD22	1:A:140:MET:HA	0.68	1.66	25	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HB	0.68	1.65	22	3
1:A:48:VAL:HG23	1:A:48:VAL:O	0.68	1.89	9	1
1:A:139:ILE:HD12	1:A:139:ILE:N	0.68	2.03	23	1
1:A:164:ILE:HD11	1:A:166:HIS:CG	0.67	2.24	12	2
1:A:74:ALA:HB1	1:A:77:LEU:HD11	0.67	1.64	12	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HG	0.67	1.65	27	4
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HA	0.67	1.65	3	5
1:A:51:GLU:OE2	1:A:169:ALA:HB1	0.67	1.89	6	1
1:A:40:ALA:HB1	1:A:59:GLU:HG3	0.67	1.66	4	1
1:A:138:VAL:HG23	1:A:138:VAL:O	0.67	1.89	6	4
1:A:167:GLU:HG3	1:A:182:ALA:HB3	0.67	1.66	17	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG22	0.67	1.66	16	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:185:VAL:HG11	0.67	2.04	10	2
1:A:166:HIS:CD2	1:A:185:VAL:O	0.67	2.47	14	1
1:A:76:SER:O	1:A:78:ARG:N	0.67	2.28	7	5
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:HB2	0.67	1.64	6	3
1:A:75:ASN:HB3	1:A:83:LEU:HD23	0.67	1.67	5	2
1:A:159:ASP:O	1:A:160:GLY:C	0.67	2.33	1	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:187:GLY:CA	0.67	2.20	10	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:145:THR:OG1	0.67	1.90	28	3
1:A:153:LEU:HD21	1:A:158:GLU:O	0.67	1.89	3	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD22	0.67	1.66	18	1
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:HB3	0.67	1.88	23	4
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG21	0.67	1.67	23	2
1:A:70:ILE:HG23	1:A:145:THR:HG21	0.67	1.67	25	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HB2	0.66	1.67	3	2
1:A:72:ILE:HD12	1:A:85:PHE:CD2	0.66	2.25	14	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:CG2	0.66	2.20	30	1
1:A:189:LEU:HD12	1:A:189:LEU:C	0.66	2.10	4	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:45:VAL:O	0.66	1.89	6	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD12	0.66	2.17	29	1
1:A:70:ILE:HG22	1:A:70:ILE:O	0.66	1.90	4	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:HG12	0.66	1.67	25	3
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG21	0.66	1.91	1	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:163:PHE:CE2	0.66	2.83	18	3
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD21	0.66	2.21	17	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:O	0.66	1.90	25	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HB1	0.66	1.67	16	3
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HG12	0.66	1.65	11	2
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:HA	0.66	1.65	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:HD12	0.66	1.90	15	2
1:A:168:GLN:HG2	1:A:184:ILE:HD11	0.66	1.67	29	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:LEU:CD1	0.66	2.20	9	1
1:A:146:SER:O	1:A:147:LEU:C	0.66	2.34	25	7
1:A:49:ASN:HB3	1:A:185:VAL:HG11	0.66	1.68	9	2
1:A:85:PHE:O	1:A:85:PHE:CG	0.66	2.49	14	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD11	0.66	1.67	26	1
1:A:67:GLY:O	1:A:68:LEU:HD13	0.66	1.91	29	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.66	2.43	25	5
1:A:47:LEU:CA	1:A:185:VAL:HG13	0.66	2.20	22	2
1:A:85:PHE:CD2	1:A:163:PHE:CD2	0.66	2.84	6	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:CG	0.66	2.11	29	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:165:ILE:CD1	0.66	2.75	15	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD22	0.65	2.21	12	2
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CB	0.65	2.44	5	4
1:A:85:PHE:CB	1:A:163:PHE:CD2	0.65	2.80	26	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:HG11	0.65	1.92	3	2
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD23	0.65	2.06	28	1
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:HG13	0.65	2.10	21	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:147:LEU:CD1	0.65	2.20	19	1
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:HG22	0.65	1.89	3	1
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:CG	0.65	2.43	29	4
1:A:49:ASN:CA	1:A:185:VAL:HG22	0.65	2.21	2	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG2	0.65	2.21	27	3
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD1	0.65	2.58	6	4
1:A:152:LYS:O	1:A:155:ILE:HG23	0.65	1.92	2	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.65	2.84	26	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:71:HIS:HB3	0.65	1.67	26	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG23	0.65	1.92	8	2
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:HB2	0.65	1.92	14	7
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:HA	0.65	1.69	19	2
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:HB3	0.65	1.67	30	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:HB2	0.64	1.92	3	3
1:A:48:VAL:HG12	1:A:54:ALA:HB2	0.64	1.68	9	1
1:A:49:ASN:O	1:A:77:LEU:HD21	0.64	1.92	9	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG12	0.64	2.13	12	1
1:A:184:ILE:HD13	1:A:184:ILE:H	0.64	1.51	11	3
1:A:57:PHE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.64	2.65	13	2
1:A:45:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HD13	0.64	1.67	28	1
1:A:155:ILE:CG2	1:A:156:LEU:HD23	0.64	2.22	25	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:81:ALA:CB	0.64	2.22	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:H	1:A:68:LEU:HD12	0.64	1.50	2	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:71:HIS:ND1	0.64	2.06	26	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD1	0.64	2.75	27	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG12	0.64	1.92	30	6
1:A:45:VAL:HG12	1:A:188:ALA:O	0.64	1.93	16	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	0.64	1.69	16	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD22	0.64	1.70	12	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HB3	0.64	1.68	13	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:47:LEU:HD11	0.64	2.23	28	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:131:GLY:N	0.64	2.61	24	7
1:A:85:PHE:O	1:A:85:PHE:CD2	0.64	2.51	27	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:163:PHE:CD2	0.64	2.86	11	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:45:VAL:O	0.64	2.46	19	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG11	0.64	2.07	18	3
1:A:55:VAL:HB	1:A:83:LEU:HD21	0.64	1.69	19	1
1:A:164:ILE:HG22	1:A:186:CYS:HB2	0.64	1.69	10	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:HG23	0.64	1.91	16	1
1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:LYS:HG3	0.64	1.69	24	2
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HG13	0.64	2.23	2	2
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:HG23	0.64	1.93	21	6
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:HB2	0.64	1.92	28	4
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:C	0.64	2.71	28	4
1:A:168:GLN:CG	1:A:184:ILE:HD11	0.64	2.23	29	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:HB2	0.64	1.92	13	4
1:A:125:LEU:HD13	1:A:167:GLU:HB2	0.63	1.68	3	1
1:A:76:SER:HA	1:A:130:VAL:HG13	0.63	1.69	14	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:C	0.63	2.14	18	2
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD11	0.63	2.23	9	1
1:A:48:VAL:CB	1:A:54:ALA:HB2	0.63	2.23	12	2
1:A:84:GLY:H	1:A:165:ILE:HG23	0.63	1.52	25	5
1:A:67:GLY:HA2	1:A:142:ALA:HB3	0.63	1.69	9	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:CB	0.63	2.45	29	2
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD2	0.63	2.60	29	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:187:GLY:HA3	0.63	1.70	25	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:74:ALA:HB3	0.63	1.71	9	2
1:A:130:VAL:O	1:A:131:GLY:C	0.63	2.36	15	3
1:A:59:GLU:H	1:A:72:ILE:HG22	0.63	1.51	3	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:HB	0.63	1.70	6	1
1:A:184:ILE:N	1:A:184:ILE:HD13	0.63	2.09	11	1
1:A:75:ASN:C	1:A:83:LEU:HD22	0.63	2.14	19	1
1:A:184:ILE:HD13	1:A:184:ILE:N	0.63	2.09	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLU:HB3	1:A:147:LEU:HD22	0.63	1.71	15	1
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:HD11	0.63	2.23	8	3
1:A:93:CYS:SG	1:A:188:ALA:HB2	0.63	2.34	18	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CD2	0.63	2.86	11	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:130:VAL:HG23	0.63	1.70	8	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:SER:CB	0.62	2.47	30	11
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:O	0.62	2.52	21	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:N	0.62	2.09	27	2
1:A:162:ALA:O	1:A:163:PHE:CD1	0.62	2.52	10	6
1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CD1	0.62	2.66	1	1
1:A:147:LEU:CG	1:A:155:ILE:HD13	0.62	2.23	25	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:N	0.62	2.10	23	3
1:A:68:LEU:HD22	1:A:146:SER:HB3	0.62	1.71	13	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CD1	0.62	2.43	15	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CB	0.62	2.25	23	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	0.62	2.66	3	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CG	0.62	2.52	28	3
1:A:69:ASP:OD1	1:A:72:ILE:HG21	0.62	1.95	28	1
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:CB	0.62	2.47	13	5
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:ALA:HB3	0.62	1.72	5	2
1:A:156:LEU:CD2	1:A:156:LEU:O	0.62	2.47	12	2
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:CD2	0.62	2.78	17	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD11	0.62	1.71	3	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:HD12	0.62	1.94	24	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:47:LEU:N	0.62	2.61	12	4
1:A:68:LEU:H	1:A:68:LEU:HD23	0.62	1.54	26	1
1:A:156:LEU:N	1:A:156:LEU:HD13	0.62	2.10	17	4
1:A:47:LEU:HB3	1:A:55:VAL:HG22	0.62	1.72	29	1
1:A:161:SER:O	1:A:189:LEU:HD11	0.62	1.95	28	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:CG2	0.62	2.25	20	1
1:A:68:LEU:C	1:A:139:ILE:HG22	0.62	2.15	6	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:78:ARG:NH1	0.62	2.09	15	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CD2	0.61	2.52	2	3
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HG12	0.61	1.72	4	6
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:HD12	0.61	1.95	30	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:146:SER:CB	0.61	2.24	13	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:83:LEU:HG	0.61	1.72	1	1
1:A:86:HIS:O	1:A:88:TYR:CE2	0.61	2.52	21	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:55:VAL:O	0.61	1.95	29	2
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:HG13	0.61	1.70	22	3
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG13	0.61	2.13	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:OE2	0.61	2.53	28	1
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:CB	0.61	2.49	14	4
1:A:77:LEU:HD22	1:A:83:LEU:HD21	0.61	1.73	17	1
1:A:57:PHE:O	1:A:58:ILE:HD13	0.61	1.95	6	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:H	0.61	1.56	19	4
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG21	0.61	2.16	9	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:CG	0.61	2.26	10	1
1:A:62:GLU:CB	1:A:68:LEU:HD23	0.61	2.25	4	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CZ	0.61	2.31	22	1
1:A:155:ILE:HG23	1:A:156:LEU:HD22	0.61	1.71	5	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HD12	0.61	2.26	2	1
1:A:160:GLY:HA3	1:A:190:LEU:HD21	0.61	1.73	16	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:HB2	0.61	2.24	11	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:78:ARG:HB2	0.61	1.73	15	1
1:A:61:LYS:N	1:A:70:ILE:HG22	0.61	2.11	7	3
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:O	0.61	2.18	22	7
1:A:156:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD21	0.61	2.26	26	2
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:HG23	0.61	1.96	27	1
1:A:86:HIS:O	1:A:163:PHE:CD1	0.61	2.53	13	1
1:A:127:ASN:O	1:A:136:VAL:HG21	0.61	1.96	1	1
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:HG12	0.61	1.71	6	2
1:A:79:PRO:O	1:A:80:GLY:C	0.60	2.38	17	20
1:A:47:LEU:C	1:A:185:VAL:HG23	0.60	2.16	23	2
1:A:49:ASN:HB2	1:A:77:LEU:HD11	0.60	1.72	9	1
1:A:87:ILE:O	1:A:88:TYR:CD1	0.60	2.54	6	1
1:A:69:ASP:OD2	1:A:147:LEU:HD21	0.60	1.96	15	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.31	8	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:CB	0.60	2.49	18	11
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HG	0.60	1.72	2	2
1:A:147:LEU:HG	1:A:155:ILE:HD13	0.60	1.74	25	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:HB3	0.60	1.71	22	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:55:VAL:HG22	0.60	2.27	29	3
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:HD22	0.60	2.16	5	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:HB1	0.60	2.22	4	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CD2	0.60	2.55	16	10
1:A:145:THR:HA	1:A:155:ILE:HG21	0.60	1.73	28	3
1:A:47:LEU:HD13	1:A:74:ALA:CB	0.60	2.25	25	1
1:A:161:SER:CB	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.25	21	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD1	0.60	2.64	10	3
1:A:70:ILE:CD1	1:A:70:ILE:C	0.60	2.69	17	11
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:HD23	0.60	1.96	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:CG2	0.60	2.25	5	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.74	5	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD11	0.60	2.26	3	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.31	8	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:165:ILE:N	0.60	2.65	3	5
1:A:77:LEU:HD13	1:A:170:ASP:HB2	0.60	1.73	21	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:CG2	0.60	2.49	17	7
1:A:147:LEU:CD2	1:A:155:ILE:HD13	0.60	2.26	25	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:86:HIS:N	0.60	2.69	5	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:163:PHE:CZ	0.60	2.31	2	1
1:A:72:ILE:HG22	1:A:72:ILE:O	0.60	1.96	15	2
1:A:81:ALA:O	1:A:130:VAL:HG23	0.60	1.96	1	3
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HD12	0.60	1.72	2	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:188:ALA:CB	0.60	2.85	8	1
1:A:48:VAL:HG13	1:A:48:VAL:O	0.60	1.97	11	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:68:LEU:N	0.60	2.64	5	2
1:A:85:PHE:CG	1:A:86:HIS:N	0.60	2.69	5	2
1:A:85:PHE:O	1:A:85:PHE:CD1	0.60	2.55	14	2
1:A:60:ILE:CG1	1:A:70:ILE:CG2	0.60	2.80	29	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:124:ASP:O	0.60	2.54	4	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:HA	0.60	1.74	1	1
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HB2	0.60	1.72	21	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:160:GLY:HA2	0.60	1.72	22	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:N	0.60	2.12	2	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:CG2	0.60	2.78	11	1
1:A:50:ARG:H	1:A:169:ALA:HB1	0.59	1.57	9	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:O	0.59	1.97	9	1
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:CD1	0.59	2.80	30	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:CG2	0.59	2.25	15	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:HG22	0.59	2.24	4	2
1:A:139:ILE:H	1:A:139:ILE:HD13	0.59	1.57	29	2
1:A:59:GLU:O	1:A:70:ILE:HG22	0.59	1.96	26	1
1:A:68:LEU:CB	1:A:147:LEU:HD11	0.59	2.27	11	2
1:A:156:LEU:H	1:A:156:LEU:HD13	0.59	1.55	14	3
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:HD13	0.59	1.97	28	2
1:A:67:GLY:CA	1:A:142:ALA:HB3	0.59	2.27	30	4
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:CB	0.59	2.50	15	2
1:A:94:VAL:HG13	1:A:96:PRO:HD2	0.59	1.74	2	1
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:CB	0.59	2.26	20	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG12	0.59	2.27	25	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:153:LEU:O	0.59	2.47	27	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ALA:HB3	1:A:134:GLY:CA	0.59	2.27	27	1
1:A:153:LEU:HB2	1:A:156:LEU:HD21	0.59	1.75	16	2
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:CD1	0.59	2.70	10	6
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HG22	0.59	1.97	13	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HD13	0.59	1.98	28	2
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:HB2	0.59	1.98	25	3
1:A:74:ALA:CB	1:A:128:LEU:HD11	0.59	2.27	21	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:CG1	0.59	2.66	29	6
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD22	0.59	2.12	13	1
1:A:56:GLY:C	1:A:57:PHE:CG	0.59	2.76	15	14
1:A:128:LEU:O	1:A:128:LEU:HD12	0.59	1.98	1	1
1:A:50:ARG:HH21	1:A:53:LYS:HB2	0.59	1.56	9	1
1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CD	0.59	2.65	9	1
1:A:78:ARG:HB2	1:A:81:ALA:HB2	0.59	1.75	12	1
1:A:83:LEU:O	1:A:84:GLY:C	0.59	2.41	23	4
1:A:128:LEU:HD11	1:A:136:VAL:HG11	0.59	1.73	8	1
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:CB	0.59	2.28	6	2
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CG1	0.59	2.51	14	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HD21	0.58	2.28	25	1
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:CG1	0.58	2.50	26	5
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CG	0.58	2.27	27	3
1:A:94:VAL:HG22	1:A:94:VAL:O	0.58	1.97	6	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD21	0.58	1.75	11	3
1:A:88:TYR:CD1	1:A:89:GLU:N	0.58	2.72	14	1
1:A:165:ILE:H	1:A:165:ILE:HD12	0.58	1.57	14	1
1:A:43:HIS:CE1	1:A:44:HIS:CE1	0.58	2.91	8	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HG22	0.58	1.74	17	2
1:A:61:LYS:HD2	1:A:61:LYS:N	0.58	2.13	29	1
1:A:143:PRO:O	1:A:145:THR:HG23	0.58	1.98	11	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:C	0.58	2.42	7	2
1:A:155:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD23	0.58	2.28	8	5
1:A:47:LEU:O	1:A:55:VAL:HG22	0.58	1.97	18	2
1:A:178:GLY:O	1:A:184:ILE:HG22	0.58	1.98	9	1
1:A:49:ASN:CB	1:A:185:VAL:HG11	0.58	2.28	9	1
1:A:190:LEU:HD13	1:A:190:LEU:N	0.58	2.13	16	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:CB	0.58	2.52	14	10
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:CG1	0.58	2.72	30	7
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:HG21	0.58	1.97	21	4
1:A:69:ASP:HA	1:A:138:VAL:HG22	0.58	1.75	27	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:HD11	0.58	1.98	29	2
1:A:81:ALA:O	1:A:83:LEU:HD22	0.58	1.98	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:VAL:HG22	1:A:185:VAL:O	0.58	1.98	23	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:CB	0.58	2.28	6	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:137:ASP:OD2	0.58	2.56	14	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:C	0.58	2.41	8	12
1:A:147:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	0.58	1.76	25	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:130:VAL:HG21	0.58	2.28	12	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:O	0.58	1.98	30	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:HG3	0.58	1.75	10	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:HD21	0.58	1.99	16	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HD11	0.58	1.74	13	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HD11	0.58	1.76	13	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CG	0.58	2.28	25	1
1:A:91:GLY:H	1:A:190:LEU:HD21	0.58	1.59	1	1
1:A:82:SER:H	1:A:169:ALA:HB2	0.58	1.58	18	1
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:CG2	0.58	2.51	2	4
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:O	0.58	1.98	11	1
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:C	0.58	2.41	11	6
1:A:49:ASN:CG	1:A:185:VAL:HG21	0.58	2.20	22	2
1:A:58:ILE:HD11	1:A:74:ALA:HB2	0.58	1.75	21	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:HG22	0.58	1.76	16	3
1:A:49:ASN:N	1:A:49:ASN:HD22	0.58	1.97	5	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:76:SER:O	0.58	1.98	23	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.57	2.26	21	2
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:CD1	0.57	2.29	17	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HB	0.57	1.73	30	3
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HA	0.57	1.76	30	1
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HG13	0.57	1.75	10	1
1:A:69:ASP:C	1:A:147:LEU:HD11	0.57	2.19	14	1
1:A:94:VAL:HG22	1:A:96:PRO:HD2	0.57	1.75	2	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:158:GLU:C	0.57	2.19	3	1
1:A:169:ALA:HB2	1:A:180:SER:HA	0.57	1.74	6	1
1:A:76:SER:OG	1:A:81:ALA:CB	0.57	2.52	29	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.92	11	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:77:LEU:HD11	0.57	1.74	17	2
1:A:160:GLY:O	1:A:161:SER:CB	0.57	2.52	13	8
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:HB3	0.57	1.74	25	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:H	0.57	1.58	29	2
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG22	0.57	1.75	12	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD12	0.57	1.76	23	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:61:LYS:O	0.57	1.99	29	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.57	1.75	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LYS:CB	1:A:164:ILE:HD11	0.57	2.29	24	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CB	0.57	2.52	15	10
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:CG1	0.57	2.30	25	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.34	22	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:N	0.57	2.37	23	2
1:A:159:ASP:CB	1:A:189:LEU:HD21	0.57	2.30	24	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG13	0.57	2.00	17	2
1:A:156:LEU:HD23	1:A:157:ASP:N	0.57	2.15	10	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD23	0.57	1.76	6	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ARG:CB	0.57	2.53	2	17
1:A:49:ASN:HD22	1:A:49:ASN:N	0.57	1.98	10	2
1:A:88:TYR:C	1:A:88:TYR:CD1	0.57	2.77	19	1
1:A:74:ALA:HB3	1:A:134:GLY:HA3	0.57	1.77	27	1
1:A:183:ARG:O	1:A:184:ILE:HD12	0.57	2.00	27	1
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.57	2.72	27	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:76:SER:C	0.57	2.19	23	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:70:ILE:HG23	0.57	1.76	30	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG11	0.57	1.76	10	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:77:LEU:HD21	0.57	1.59	6	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:HB3	0.57	2.00	28	6
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HD22	0.57	2.35	27	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:HG22	0.57	2.00	24	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.57	2.68	28	3
1:A:185:VAL:HG23	1:A:185:VAL:O	0.57	1.99	12	1
1:A:104:PRO:O	1:A:105:PHE:CB	0.57	2.53	16	1
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD12	0.56	1.60	1	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CG1	0.56	2.30	21	4
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG21	0.56	1.75	12	2
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CG	0.56	2.58	10	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:OD2	0.56	2.00	28	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:72:ILE:CG2	0.56	2.53	28	1
1:A:159:ASP:HA	1:A:190:LEU:HD13	0.56	1.76	1	1
1:A:163:PHE:H	1:A:188:ALA:HB2	0.56	1.60	9	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:CB	0.56	2.53	4	5
1:A:40:ALA:HB1	1:A:43:HIS:NE2	0.56	2.15	15	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:HA	0.56	1.77	4	2
1:A:78:ARG:CB	1:A:79:PRO:HD3	0.56	2.31	28	16
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:N	0.56	2.14	7	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:CD1	0.56	2.31	7	2
1:A:91:GLY:N	1:A:190:LEU:HD21	0.56	2.15	1	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:ND1	0.56	2.68	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ARG:HG3	1:A:50:ARG:O	0.56	2.00	9	1
1:A:152:LYS:CG	1:A:152:LYS:O	0.56	2.52	17	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD22	0.56	1.99	17	1
1:A:92:SER:HB2	1:A:188:ALA:HB1	0.56	1.78	5	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CD1	0.56	2.83	29	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:125:LEU:CB	0.56	2.88	4	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:CG1	0.56	2.16	8	1
1:A:57:PHE:CD2	1:A:59:GLU:CG	0.56	2.88	8	1
1:A:61:LYS:H	1:A:70:ILE:HG22	0.56	1.60	16	6
1:A:55:VAL:CG2	1:A:75:ASN:O	0.56	2.54	16	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:HG13	0.56	2.00	7	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG22	0.56	2.00	21	1
1:A:139:ILE:CD1	1:A:139:ILE:N	0.56	2.67	27	3
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD13	0.56	2.16	5	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:165:ILE:HG21	0.56	1.78	4	2
1:A:98:PHE:O	1:A:98:PHE:CD2	0.56	2.57	4	1
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CG	0.56	2.79	28	1
1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:LYS:HG2	0.56	1.76	25	1
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:CB	0.56	2.53	23	7
1:A:68:LEU:HD23	1:A:68:LEU:N	0.56	2.16	26	2
1:A:88:TYR:CZ	1:A:104:PRO:CD	0.56	2.89	26	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:190:LEU:C	0.56	2.21	3	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HG	0.56	1.76	25	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:128:LEU:CD1	0.56	2.29	21	1
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG12	0.56	2.01	9	2
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HG12	0.56	1.76	6	3
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:CD1	0.56	2.84	27	2
1:A:139:ILE:N	1:A:139:ILE:CD1	0.56	2.66	10	4
1:A:49:ASN:HD22	1:A:77:LEU:HD21	0.56	1.52	4	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:H	0.56	1.60	24	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:CG1	0.56	2.31	29	2
1:A:139:ILE:HG21	1:A:142:ALA:HB2	0.56	1.75	9	1
1:A:47:LEU:O	1:A:54:ALA:HB1	0.56	2.01	11	1
1:A:164:ILE:CG2	1:A:166:HIS:NE2	0.56	2.69	25	2
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:GLY:C	0.56	2.21	9	1
1:A:57:PHE:H	1:A:74:ALA:HB2	0.56	1.60	19	2
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:C	0.56	2.43	22	3
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:CD2	0.56	2.31	20	1
1:A:144:ASP:HA	1:A:147:LEU:HD12	0.56	1.78	15	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:137:ASP:OD1	0.56	2.59	6	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:C	0.56	2.43	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:SER:OG	1:A:94:VAL:HG13	0.55	2.01	19	1
1:A:161:SER:OG	1:A:163:PHE:CZ	0.55	2.54	5	1
1:A:155:ILE:O	1:A:160:GLY:CA	0.55	2.54	17	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:157:ASP:OD1	0.55	2.01	22	1
1:A:184:ILE:CG2	1:A:185:VAL:HG12	0.55	2.24	14	1
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:O	0.55	2.01	28	1
1:A:81:ALA:O	1:A:130:VAL:CG2	0.55	2.54	7	6
1:A:83:LEU:CD2	1:A:83:LEU:N	0.55	2.68	9	3
1:A:156:LEU:HD13	1:A:156:LEU:H	0.55	1.60	17	3
1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:HD13	0.55	2.21	23	4
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG22	0.55	2.16	10	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:146:SER:HB2	0.55	1.76	13	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:147:LEU:HD13	0.55	1.78	6	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:LEU:HD11	0.55	1.77	14	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD21	0.55	1.79	11	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:162:ALA:HA	0.55	1.79	24	1
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:O	0.55	2.24	21	5
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:C	0.55	2.21	27	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:163:PHE:CE2	0.55	2.89	20	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:55:VAL:HG13	0.55	1.62	16	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:HD13	0.55	1.78	29	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:CG1	0.55	2.30	6	3
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:ASN:C	0.55	2.22	8	1
1:A:138:VAL:CG2	1:A:138:VAL:O	0.55	2.54	1	5
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:HG12	0.55	2.01	4	3
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD11	0.55	2.02	21	2
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG13	0.55	2.21	17	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:47:LEU:CD2	0.55	2.85	10	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD13	0.55	2.32	3	1
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:CD	0.55	2.55	29	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:77:LEU:HD11	0.55	2.22	21	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CD1	0.55	2.60	18	1
1:A:50:ARG:O	1:A:52:GLY:N	0.55	2.40	9	1
1:A:48:VAL:CA	1:A:54:ALA:HB2	0.55	2.32	12	3
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:CD2	0.55	2.54	17	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG11	0.55	1.78	5	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:71:HIS:C	0.55	2.22	15	2
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.55	1.78	25	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:130:VAL:HG22	0.55	1.78	1	1
1:A:89:GLU:CD	1:A:164:ILE:HD13	0.55	2.22	1	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG23	0.55	1.77	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:N	1:A:130:VAL:HG11	0.55	2.16	5	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.55	2.74	2	2
1:A:68:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	0.55	1.79	20	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:CB	0.55	2.85	22	3
1:A:156:LEU:HD22	1:A:161:SER:OG	0.55	2.02	20	2
1:A:57:PHE:CE1	1:A:59:GLU:OE2	0.55	2.60	12	2
1:A:55:VAL:HB	1:A:83:LEU:HD12	0.55	1.77	7	1
1:A:63:SER:OG	1:A:69:ASP:CB	0.55	2.55	17	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:C	0.55	2.21	19	1
1:A:66:GLU:O	1:A:67:GLY:O	0.55	2.23	29	3
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:CB	0.55	2.32	29	2
1:A:159:ASP:HB3	1:A:189:LEU:HD21	0.55	1.77	24	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:130:VAL:HG22	0.54	1.78	11	4
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:CA	0.54	2.32	18	2
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD11	0.54	1.77	11	1
1:A:138:VAL:CG1	1:A:139:ILE:N	0.54	2.69	4	2
1:A:161:SER:C	1:A:188:ALA:HB1	0.54	2.23	9	1
1:A:74:ALA:HB2	1:A:85:PHE:CE2	0.54	2.37	17	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CG2	0.54	2.86	27	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.54	2.32	22	1
1:A:87:ILE:C	1:A:88:TYR:CG	0.54	2.80	6	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:125:LEU:HB3	0.54	2.38	4	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:O	0.54	2.25	8	9
1:A:189:LEU:CD2	1:A:189:LEU:O	0.54	2.55	1	1
1:A:67:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HD23	0.54	1.78	20	1
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG23	0.54	2.02	26	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:HIS:H	0.54	1.62	15	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.54	2.71	24	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:H	0.54	1.62	28	3
1:A:48:VAL:HG12	1:A:54:ALA:CB	0.54	2.32	9	1
1:A:45:VAL:O	1:A:46:GLN:C	0.54	2.46	19	4
1:A:72:ILE:CD1	1:A:72:ILE:O	0.54	2.54	30	3
1:A:156:LEU:HD11	1:A:161:SER:HA	0.54	1.79	2	1
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:H	0.54	1.60	24	2
1:A:162:ALA:CB	1:A:187:GLY:O	0.54	2.55	14	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD21	0.54	2.28	15	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:CB	0.54	2.56	14	10
1:A:68:LEU:CD2	1:A:145:THR:OG1	0.54	2.56	21	2
1:A:51:GLU:O	1:A:52:GLY:C	0.54	2.45	4	9
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CD1	0.54	2.81	28	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG23	0.54	2.33	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:ILE:O	1:A:155:ILE:HD13	0.54	2.02	9	1
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:CD1	0.54	2.56	19	2
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:O	0.54	2.02	27	1
1:A:66:GLU:O	1:A:67:GLY:C	0.54	2.45	29	13
1:A:156:LEU:N	1:A:156:LEU:CD1	0.54	2.64	1	2
1:A:85:PHE:HB2	1:A:163:PHE:CD2	0.54	2.38	26	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:CB	0.54	2.55	3	1
1:A:67:GLY:N	1:A:142:ALA:O	0.54	2.40	13	2
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG21	0.54	2.33	6	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HG13	0.54	1.77	8	1
1:A:154:ASN:CG	1:A:154:ASN:O	0.54	2.45	7	3
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:CB	0.54	2.91	7	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:O	0.54	2.61	13	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:153:LEU:HD21	0.54	2.37	24	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:CG	0.54	2.61	28	2
1:A:161:SER:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.54	2.38	27	3
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:CG2	0.54	2.56	1	3
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:CG2	0.54	2.75	30	6
1:A:61:LYS:H	1:A:70:ILE:HG21	0.54	1.62	20	1
1:A:72:ILE:CG1	1:A:72:ILE:O	0.54	2.56	30	2
1:A:72:ILE:CD1	1:A:138:VAL:N	0.54	2.71	26	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:HD11	0.54	1.80	3	1
1:A:98:PHE:CD1	1:A:183:ARG:NH2	0.54	2.76	13	1
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD22	0.54	1.62	16	4
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:CD1	0.54	2.54	25	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:HD12	0.54	2.02	21	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:53:LYS:C	0.54	2.23	3	3
1:A:90:LYS:O	1:A:164:ILE:CG1	0.54	2.56	17	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD11	0.54	1.79	5	1
1:A:63:SER:H	1:A:68:LEU:HD22	0.54	1.63	30	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG11	0.54	1.78	8	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:165:ILE:HD13	0.53	1.79	28	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:145:THR:O	0.53	2.56	17	2
1:A:78:ARG:O	1:A:131:GLY:CA	0.53	2.56	16	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:138:VAL:CG2	0.53	2.32	13	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:ALA:CB	0.53	2.91	8	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:163:PHE:N	0.53	2.42	21	1
1:A:184:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG12	0.53	2.33	9	2
1:A:130:VAL:CG1	1:A:131:GLY:N	0.53	2.69	27	3
1:A:46:GLN:O	1:A:46:GLN:CG	0.53	2.56	2	2
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG21	0.53	2.18	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:HIS:CG	1:A:58:ILE:O	0.53	2.62	1	1
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:CD1	0.53	2.33	14	2
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:C	0.53	2.23	9	1
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:CG2	0.53	2.28	17	1
1:A:189:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD12	0.53	2.33	17	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:188:ALA:N	0.53	2.18	19	1
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:HG23	0.53	2.04	27	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:H	0.53	1.64	16	1
1:A:163:PHE:N	1:A:163:PHE:CD1	0.53	2.77	28	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG13	0.53	2.03	25	2
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:O	0.53	2.27	9	9
1:A:94:VAL:CG1	1:A:188:ALA:HB1	0.53	2.34	19	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:71:HIS:O	0.53	2.57	26	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:167:GLU:CB	0.53	2.33	3	1
1:A:163:PHE:CG	1:A:163:PHE:O	0.53	2.61	15	1
1:A:85:PHE:HD1	1:A:128:LEU:HD11	0.53	1.64	28	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:54:ALA:HB2	0.53	1.81	12	1
1:A:76:SER:OG	1:A:134:GLY:CA	0.53	2.57	2	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CB	0.53	2.34	24	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:81:ALA:HB3	0.53	1.79	28	1
1:A:130:VAL:HG12	1:A:131:GLY:H	0.53	1.62	11	5
1:A:184:ILE:CG2	1:A:185:VAL:N	0.53	2.71	24	5
1:A:167:GLU:CD	1:A:182:ALA:HB3	0.53	2.23	17	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:CB	0.53	2.34	17	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:CD1	0.53	2.57	23	1
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:CD1	0.53	2.56	16	2
1:A:41:PHE:CE2	1:A:59:GLU:HA	0.53	2.39	20	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:71:HIS:O	0.53	2.04	26	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD13	0.53	2.19	6	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:55:VAL:CG2	0.53	2.86	24	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:HD21	0.53	1.78	2	4
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:O	0.53	2.04	3	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:147:LEU:HD22	0.53	1.81	16	1
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:HD23	0.53	2.04	13	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:PRO:O	0.53	2.04	13	2
1:A:92:SER:OG	1:A:164:ILE:HG22	0.53	2.04	15	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:ND2	0.53	2.56	25	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG23	0.53	1.80	12	1
1:A:46:GLN:CG	1:A:46:GLN:O	0.53	2.56	20	1
1:A:56:GLY:HA2	1:A:77:LEU:HD23	0.53	1.81	15	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD23	0.53	1.81	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:HIS:O	1:A:45:VAL:HG23	0.53	2.04	25	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:HG	0.53	1.81	25	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CG2	0.53	2.57	1	2
1:A:50:ARG:NE	1:A:51:GLU:CB	0.53	2.72	9	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:74:ALA:CB	0.52	2.87	25	1
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:HD22	0.52	2.04	25	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.82	9	1
1:A:161:SER:O	1:A:188:ALA:HB1	0.52	2.03	9	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:H	0.52	1.64	24	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:O	0.52	2.57	23	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CG2	0.52	2.58	5	8
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:CG1	0.52	2.34	25	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:188:ALA:C	0.52	2.24	16	1
1:A:156:LEU:C	1:A:156:LEU:HD22	0.52	2.25	14	2
1:A:166:HIS:HB2	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.80	15	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:61:LYS:O	0.52	2.58	2	4
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:HB2	0.52	1.80	15	3
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:O	0.52	2.05	26	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:C	0.52	2.78	29	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:CD2	0.52	2.57	24	1
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:CG	0.52	2.57	25	1
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:O	0.52	2.04	21	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:48:VAL:O	0.52	2.57	9	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:56:GLY:O	0.52	2.04	22	2
1:A:48:VAL:H	1:A:185:VAL:HG23	0.52	1.62	30	1
1:A:136:VAL:CG2	1:A:136:VAL:O	0.52	2.57	3	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:GLU:CG	0.52	2.58	15	1
1:A:76:SER:HG	1:A:83:LEU:HD11	0.52	1.60	8	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CD1	0.52	2.57	25	4
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CB	0.52	2.58	13	3
1:A:139:ILE:H	1:A:139:ILE:HD12	0.52	1.62	9	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:N	0.52	2.43	24	2
1:A:146:SER:CB	1:A:153:LEU:HD23	0.52	2.34	20	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:184:ILE:HD11	0.52	2.03	30	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:CA	0.52	2.34	26	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:83:LEU:CD1	0.52	2.35	15	1
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:CD1	0.52	2.58	15	3
1:A:88:TYR:CE1	1:A:162:ALA:HA	0.52	2.40	21	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CG2	0.52	2.86	18	1
1:A:147:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	0.52	1.81	22	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:153:LEU:N	0.52	2.20	29	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:CG	1:A:85:PHE:O	0.52	2.62	16	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD11	0.52	2.40	30	2
1:A:68:LEU:HD11	1:A:142:ALA:CB	0.52	2.35	12	1
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:C	0.52	2.47	26	4
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:N	0.52	2.20	17	2
1:A:49:ASN:HD21	1:A:55:VAL:HG21	0.52	1.63	17	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:CB	0.52	2.57	15	3
1:A:47:LEU:O	1:A:54:ALA:CB	0.52	2.58	11	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:CG1	0.52	2.58	13	3
1:A:147:LEU:CD2	1:A:147:LEU:N	0.52	2.65	25	1
1:A:76:SER:CB	1:A:81:ALA:HB3	0.52	2.32	19	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:162:ALA:O	0.52	2.58	27	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.52	2.86	22	1
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:OD1	0.52	2.05	29	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CG	0.52	2.63	15	6
1:A:136:VAL:CG1	1:A:136:VAL:O	0.52	2.56	23	3
1:A:95:ARG:N	1:A:96:PRO:CD	0.52	2.73	27	6
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:O	0.52	2.57	1	1
1:A:161:SER:CB	1:A:163:PHE:CE2	0.52	2.93	9	3
1:A:85:PHE:CB	1:A:128:LEU:HD12	0.52	2.35	22	1
1:A:141:ASN:ND2	1:A:141:ASN:O	0.52	2.43	20	1
1:A:57:PHE:CD2	1:A:59:GLU:HG2	0.52	2.39	8	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:CB	0.52	2.58	3	3
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:HD11	0.52	2.05	7	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HG21	0.52	1.81	17	1
1:A:75:ASN:O	1:A:134:GLY:O	0.52	2.27	5	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:58:ILE:O	0.52	2.58	10	2
1:A:45:VAL:CG1	1:A:47:LEU:HD21	0.52	2.34	10	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:145:THR:OG1	0.52	2.05	10	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:138:VAL:O	0.51	2.57	7	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD2	0.51	2.35	25	1
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	0.51	1.60	25	1
1:A:50:ARG:CG	1:A:77:LEU:HD22	0.51	2.35	9	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:68:LEU:N	0.51	2.20	12	2
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD11	0.51	1.82	17	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:185:VAL:CG1	0.51	2.88	22	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG13	0.51	2.21	16	2
1:A:76:SER:CB	1:A:133:ASP:HA	0.51	2.34	26	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD22	0.51	2.36	16	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:HD21	0.51	1.82	11	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:CD1	0.51	2.58	27	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:PHE:CE1	1:A:73:SER:O	0.51	2.63	7	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD1	0.51	2.63	15	3
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:GLY:H	0.51	1.61	8	2
1:A:81:ALA:HB1	1:A:168:GLN:CB	0.51	2.31	23	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.58	3	2
1:A:52:GLY:CA	1:A:77:LEU:HD11	0.51	2.36	16	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:CB	0.51	2.57	6	1
1:A:76:SER:CB	1:A:134:GLY:N	0.51	2.73	7	2
1:A:164:ILE:HD11	1:A:166:HIS:CD2	0.51	2.39	12	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:CA	0.51	2.34	23	2
1:A:144:ASP:O	1:A:145:THR:C	0.51	2.48	27	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:CB	0.51	2.58	3	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:CG1	0.51	2.59	25	2
1:A:55:VAL:C	1:A:75:ASN:O	0.51	2.49	18	3
1:A:83:LEU:CD1	1:A:165:ILE:HG21	0.51	2.34	12	1
1:A:189:LEU:C	1:A:189:LEU:CD1	0.51	2.75	17	1
1:A:183:ARG:C	1:A:184:ILE:HD12	0.51	2.26	27	2
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.51	2.74	20	1
1:A:56:GLY:CA	1:A:74:ALA:HB1	0.51	2.34	16	1
1:A:86:HIS:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.40	13	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:170:ASP:HB2	0.51	1.82	13	1
1:A:76:SER:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.58	11	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:C	0.51	2.48	11	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:47:LEU:HD21	0.51	1.82	25	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CD2	0.51	2.64	1	1
1:A:50:ARG:CZ	1:A:51:GLU:CB	0.51	2.88	9	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CB	0.51	2.94	27	1
1:A:161:SER:HB3	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.41	10	2
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:HB3	0.51	2.06	5	3
1:A:76:SER:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.51	1.83	2	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:CB	0.51	2.58	15	5
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:CD2	0.51	2.57	3	1
1:A:166:HIS:HB2	1:A:182:ALA:HB1	0.51	1.82	16	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:147:LEU:HD21	0.51	2.25	15	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:CA	0.51	2.58	16	3
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:CB	0.51	2.58	5	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:145:THR:HB	0.51	1.83	3	1
1:A:79:PRO:HG2	1:A:83:LEU:HD11	0.51	1.83	24	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:HB3	0.51	2.06	22	8
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CG1	0.51	2.36	17	2
1:A:189:LEU:CD1	1:A:189:LEU:O	0.51	2.59	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG1	0.51	2.35	19	1
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:MET:N	0.51	2.21	16	3
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:N	0.51	2.44	25	2
1:A:50:ARG:CD	1:A:50:ARG:C	0.51	2.78	9	1
1:A:51:GLU:O	1:A:53:LYS:N	0.51	2.44	24	6
1:A:68:LEU:CD1	1:A:147:LEU:HD11	0.51	2.36	9	1
1:A:166:HIS:CG	1:A:184:ILE:HB	0.51	2.40	15	1
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:CG1	0.51	2.59	4	2
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:CD1	0.51	2.59	18	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:CD2	0.51	2.59	18	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:139:ILE:HD13	0.51	2.36	9	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.59	30	1
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:HD23	0.51	2.36	15	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:85:PHE:O	0.51	2.64	4	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:CD1	0.51	2.55	28	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:139:ILE:O	0.51	2.59	7	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.51	1.83	21	1
1:A:92:SER:O	1:A:93:CYS:CB	0.51	2.59	8	2
1:A:49:ASN:HD22	1:A:185:VAL:HG21	0.51	1.66	15	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:128:LEU:CD2	0.51	2.74	4	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CD2	0.50	2.36	25	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:CB	0.50	2.59	30	3
1:A:153:LEU:HD13	1:A:161:SER:OG	0.50	2.06	1	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HG12	0.50	1.83	17	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:CD1	0.50	2.36	29	1
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:N	0.50	2.45	7	2
1:A:162:ALA:C	1:A:163:PHE:CG	0.50	2.85	21	2
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:ND2	0.50	2.45	25	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:CB	0.50	2.89	27	2
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:HG23	0.50	2.06	22	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:130:VAL:O	0.50	2.59	30	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:ND1	0.50	2.21	14	1
1:A:83:LEU:HB2	1:A:128:LEU:HD13	0.50	1.81	11	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:145:THR:HG23	0.50	2.33	15	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CB	0.50	2.59	24	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:HB3	0.50	2.42	7	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:CB	0.50	2.58	29	9
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:HD12	0.50	2.33	9	1
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:CG	0.50	2.60	17	2
1:A:146:SER:HA	1:A:153:LEU:CB	0.50	2.37	27	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:170:ASP:HB3	0.50	1.83	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ASP:C	1:A:70:ILE:HD13	0.50	2.26	26	1
1:A:75:ASN:O	1:A:77:LEU:N	0.50	2.43	3	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:O	0.50	2.60	16	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:HG13	0.50	2.06	13	1
1:A:169:ALA:HB3	1:A:180:SER:HA	0.50	1.83	13	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:48:VAL:O	0.50	2.59	11	1
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:C	0.50	2.50	7	4
1:A:87:ILE:HA	1:A:162:ALA:HB2	0.50	1.83	21	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:134:GLY:CA	0.50	2.88	9	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:HA3	0.50	1.84	19	2
1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:VAL:HG21	0.50	1.84	10	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HG23	0.50	2.07	3	1
1:A:165:ILE:O	1:A:184:ILE:CG1	0.50	2.60	13	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG21	0.50	1.82	6	1
1:A:76:SER:OG	1:A:81:ALA:HB3	0.50	2.07	6	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:LYS:HB3	0.50	2.06	29	1
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:HD22	0.50	2.07	11	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:CG	0.50	2.60	29	2
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:CB	0.50	2.60	10	4
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:CB	0.50	2.59	17	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD12	0.50	2.37	27	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:44:HIS:C	0.50	2.84	10	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:128:LEU:O	0.50	2.58	3	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:CG1	0.50	2.35	7	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:HD22	0.50	2.04	21	1
1:A:67:GLY:O	1:A:145:THR:HG23	0.50	2.06	22	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:61:LYS:N	0.50	2.74	23	1
1:A:171:ASP:CB	1:A:179:ASN:O	0.50	2.60	26	1
1:A:49:ASN:O	1:A:51:GLU:N	0.50	2.43	14	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD21	0.50	1.83	11	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:CD1	0.50	2.59	1	2
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:CG2	0.50	2.37	1	2
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:CD1	0.50	2.59	18	1
1:A:79:PRO:O	1:A:81:ALA:N	0.50	2.44	9	10
1:A:70:ILE:HG21	1:A:147:LEU:CD2	0.50	2.37	12	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:C	0.50	2.50	27	4
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CA	0.50	2.60	5	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:74:ALA:O	0.50	2.07	13	1
1:A:61:LYS:C	1:A:61:LYS:CD	0.50	2.79	29	1
1:A:85:PHE:C	1:A:86:HIS:CG	0.50	2.85	15	1
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HG22	0.50	2.37	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:C	0.50	2.85	22	1
1:A:145:THR:N	1:A:147:LEU:HD22	0.50	2.21	20	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:77:LEU:HD21	0.50	2.27	20	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:156:LEU:CD2	0.50	2.90	3	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:136:VAL:CG2	0.50	2.59	15	2
1:A:179:ASN:OD1	1:A:184:ILE:HG21	0.50	2.06	24	1
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:HD2	0.50	2.22	2	6
1:A:155:ILE:HG22	1:A:156:LEU:N	0.50	2.21	22	2
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG11	0.50	2.07	1	2
1:A:83:LEU:CD1	1:A:128:LEU:HD13	0.50	2.31	21	1
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD13	0.50	1.66	12	1
1:A:129:GLU:N	1:A:133:ASP:OD1	0.50	2.45	27	1
1:A:49:ASN:N	1:A:185:VAL:CG2	0.50	2.74	22	1
1:A:167:GLU:CG	1:A:184:ILE:CG1	0.50	2.89	23	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:CD2	0.50	2.59	16	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CD1	0.50	2.59	13	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HB	0.50	2.06	14	1
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:CB	0.49	2.60	30	7
1:A:147:LEU:CD1	1:A:147:LEU:O	0.49	2.57	21	2
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HB2	0.49	1.83	9	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:165:ILE:HD12	0.49	2.42	22	1
1:A:96:PRO:O	1:A:97:ASP:CB	0.49	2.59	29	4
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:N	0.49	2.22	26	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:104:PRO:CD	0.49	2.95	26	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:133:ASP:O	0.49	2.60	10	1
1:A:76:SER:HG	1:A:130:VAL:HG22	0.49	1.67	7	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:165:ILE:CG2	0.49	2.37	2	6
1:A:153:LEU:HD12	1:A:154:ASN:H	0.49	1.66	22	2
1:A:138:VAL:O	1:A:139:ILE:HG23	0.49	2.06	22	3
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG21	0.49	1.84	21	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:SER:CB	0.49	2.60	21	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:N	0.49	2.45	26	1
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:HB	0.49	1.84	3	1
1:A:45:VAL:O	1:A:57:PHE:CD2	0.49	2.65	13	1
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:HD21	0.49	1.84	6	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD11	0.49	1.84	11	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:188:ALA:HA	0.49	2.42	8	1
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:ASP:N	0.49	2.75	13	2
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:CB	0.49	2.91	30	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:157:ASP:O	0.49	2.08	16	2
1:A:57:PHE:C	1:A:58:ILE:HD12	0.49	2.28	28	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:ASP:O	1:A:135:LYS:N	0.49	2.45	26	3
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:CD1	0.49	2.60	11	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:134:GLY:O	0.49	2.45	25	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:87:ILE:O	0.49	2.60	1	2
1:A:68:LEU:CB	1:A:147:LEU:HD21	0.49	2.38	1	1
1:A:71:HIS:CG	1:A:71:HIS:O	0.49	2.66	1	1
1:A:164:ILE:C	1:A:164:ILE:CD1	0.49	2.80	12	1
1:A:88:TYR:CG	1:A:89:GLU:N	0.49	2.80	3	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:147:LEU:HD21	0.49	1.81	18	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:H	0.49	1.68	12	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:C	0.49	2.50	19	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:60:ILE:O	0.49	2.66	22	1
1:A:76:SER:O	1:A:79:PRO:HD3	0.49	2.06	24	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD12	0.49	1.82	7	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:HB2	0.49	2.08	14	4
1:A:161:SER:HB2	1:A:163:PHE:CZ	0.49	2.42	30	2
1:A:94:VAL:HG12	1:A:95:ARG:H	0.49	1.68	12	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HB3	0.49	2.42	27	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD23	0.49	1.83	27	1
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CD1	0.49	2.38	23	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:187:GLY:CA	0.49	2.91	3	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:44:HIS:O	0.49	2.66	8	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:HB3	0.49	2.42	7	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:C	0.49	2.50	20	3
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:N	0.49	2.23	1	4
1:A:189:LEU:C	1:A:189:LEU:HD23	0.49	2.28	1	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CB	0.49	2.60	14	2
1:A:70:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CD1	0.49	2.38	18	1
1:A:49:ASN:O	1:A:77:LEU:CD2	0.49	2.60	9	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:O	0.49	2.30	19	5
1:A:41:PHE:CE2	1:A:61:LYS:CE	0.49	2.96	29	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:70:ILE:O	0.49	2.57	29	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:O	0.49	2.08	8	1
1:A:155:ILE:CG2	1:A:156:LEU:N	0.49	2.76	22	2
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:CG2	0.49	2.61	12	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CD1	0.49	2.37	27	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:190:LEU:CB	0.49	2.61	22	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:CB	0.49	2.38	16	2
1:A:84:GLY:HA3	1:A:125:LEU:HD23	0.49	1.84	3	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:147:LEU:HD23	0.49	2.07	16	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:157:ASP:O	0.49	2.61	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HG23	1:A:71:HIS:C	0.49	2.27	26	1
1:A:98:PHE:CG	1:A:98:PHE:O	0.49	2.64	4	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:N	0.49	2.46	7	4
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HD13	0.49	1.85	17	1
1:A:167:GLU:O	1:A:180:SER:CB	0.49	2.61	27	1
1:A:182:ALA:O	1:A:183:ARG:C	0.49	2.51	15	2
1:A:70:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:161:SER:OG	0.48	2.59	28	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD21	0.48	1.85	20	2
1:A:83:LEU:HB2	1:A:128:LEU:CB	0.48	2.38	30	1
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:CB	0.48	2.61	29	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD23	0.48	2.07	14	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:164:ILE:CD1	0.48	2.59	1	1
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:LEU:HD21	0.48	1.83	10	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD23	0.48	1.85	25	1
1:A:164:ILE:HG13	1:A:166:HIS:CD2	0.48	2.43	1	1
1:A:50:ARG:C	1:A:52:GLY:N	0.48	2.67	9	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:CG2	0.48	2.38	12	3
1:A:94:VAL:HG13	1:A:188:ALA:HB1	0.48	1.85	19	1
1:A:74:ALA:N	1:A:134:GLY:O	0.48	2.47	27	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:42:GLY:N	0.48	2.82	5	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD13	0.48	1.83	3	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:185:VAL:HG11	0.48	1.84	29	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:47:LEU:HD11	0.48	1.85	28	1
1:A:92:SER:CB	1:A:164:ILE:HG21	0.48	2.39	28	1
1:A:82:SER:HA	1:A:129:GLU:CB	0.48	2.38	25	2
1:A:189:LEU:O	1:A:190:LEU:O	0.48	2.31	18	5
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:C	0.48	2.50	17	2
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:CD1	0.48	2.66	27	1
1:A:167:GLU:HB3	1:A:181:GLY:O	0.48	2.07	22	1
1:A:130:VAL:O	1:A:131:GLY:O	0.48	2.32	16	3
1:A:162:ALA:HB3	1:A:187:GLY:C	0.48	2.27	14	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:HG21	0.48	1.85	11	1
1:A:178:GLY:O	1:A:184:ILE:HG21	0.48	2.08	11	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD21	0.48	1.86	25	1
1:A:74:ALA:HB1	1:A:77:LEU:CD1	0.48	2.37	12	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:HB2	0.48	1.85	2	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:CB	0.48	2.38	25	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD12	0.48	2.43	25	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:ASP:N	0.48	2.46	18	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:H	0.48	1.68	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:VAL:HG12	1:A:48:VAL:O	0.48	2.08	17	1
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CD2	0.48	2.66	5	1
1:A:81:ALA:HA	1:A:129:GLU:C	0.48	2.29	30	1
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HG22	0.48	1.85	10	1
1:A:182:ALA:O	1:A:183:ARG:CB	0.48	2.61	16	2
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:HD23	0.48	1.86	15	1
1:A:93:CYS:HB2	1:A:188:ALA:HB2	0.48	1.86	15	2
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:CD1	0.48	2.38	30	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:CG1	0.48	2.62	26	1
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:LEU:HD11	0.48	1.85	10	1
1:A:163:PHE:O	1:A:163:PHE:CD1	0.48	2.66	15	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD2	0.48	2.69	25	4
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:HA	0.48	2.09	25	1
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CZ	0.48	2.39	23	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:70:ILE:HG22	0.48	2.38	29	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:CB	0.48	2.91	25	1
1:A:161:SER:OG	1:A:190:LEU:N	0.48	2.47	25	1
1:A:49:ASN:CA	1:A:185:VAL:CG2	0.48	2.91	22	1
1:A:85:PHE:C	1:A:85:PHE:CD1	0.48	2.87	26	2
1:A:83:LEU:HD21	1:A:130:VAL:CG2	0.48	2.39	3	1
1:A:156:LEU:C	1:A:156:LEU:CD2	0.48	2.82	11	2
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:CA	0.48	2.92	11	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:43:HIS:NE2	0.48	2.76	15	1
1:A:82:SER:HB2	1:A:168:GLN:CB	0.48	2.39	27	6
1:A:88:TYR:OH	1:A:164:ILE:N	0.48	2.47	21	1
1:A:152:LYS:O	1:A:154:ASN:N	0.48	2.47	9	2
1:A:68:LEU:CD2	1:A:140:MET:O	0.48	2.61	12	1
1:A:87:ILE:HG21	1:A:155:ILE:O	0.48	2.09	5	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:162:ALA:HB3	0.48	2.08	20	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:55:VAL:CG2	0.48	2.39	24	3
1:A:45:VAL:HG11	1:A:163:PHE:HB2	0.48	1.85	26	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:NE2	0.48	2.47	26	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:157:ASP:N	0.48	2.77	10	1
1:A:190:LEU:HD13	1:A:190:LEU:H	0.48	1.69	16	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:HD23	0.48	2.09	13	1
1:A:47:LEU:CG	1:A:58:ILE:HD11	0.48	2.39	29	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:136:VAL:HG11	0.48	2.24	4	1
1:A:178:GLY:O	1:A:181:GLY:N	0.48	2.47	24	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:135:LYS:CG	0.47	2.62	18	1
1:A:74:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD11	0.47	2.37	12	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:147:LEU:HD13	0.47	2.32	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB3	0.47	2.43	11	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:69:ASP:HA	0.47	2.39	15	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:55:VAL:CG1	0.47	2.59	24	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:N	0.47	2.62	5	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG21	0.47	2.23	18	2
1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:VAL:HG11	0.47	1.83	17	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:CG2	0.47	2.39	16	2
1:A:139:ILE:HG13	1:A:142:ALA:HB2	0.47	1.85	30	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:158:GLU:O	0.47	2.61	3	1
1:A:63:SER:O	1:A:65:ASP:N	0.47	2.47	13	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:69:ASP:CB	0.47	2.85	28	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:57:PHE:HA	0.47	1.86	7	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:157:ASP:CB	0.47	2.39	25	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD12	0.47	2.07	21	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD22	0.47	2.38	21	1
1:A:63:SER:O	1:A:64:ASP:CB	0.47	2.62	24	3
1:A:78:ARG:HH21	1:A:171:ASP:HB3	0.47	1.69	19	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:188:ALA:H	0.47	1.69	19	2
1:A:88:TYR:CZ	1:A:104:PRO:HD2	0.47	2.44	26	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:CD1	0.47	2.61	29	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:126:PRO:HD3	0.47	2.44	4	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:161:SER:O	0.47	2.61	4	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HG21	0.47	2.35	7	1
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASP:N	0.47	2.47	16	9
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:CD2	0.47	2.68	18	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:CG2	0.47	2.83	9	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:HB3	0.47	2.40	12	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:162:ALA:HB1	0.47	2.39	17	1
1:A:54:ALA:O	1:A:76:SER:O	0.47	2.32	17	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:HA	0.47	2.09	19	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:CD1	0.47	2.35	23	2
1:A:76:SER:OG	1:A:76:SER:O	0.47	2.32	20	2
1:A:77:LEU:CG	1:A:83:LEU:HD11	0.47	2.39	28	1
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:O	0.47	2.33	9	2
1:A:179:ASN:HB3	1:A:184:ILE:HG21	0.47	1.84	12	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:155:ILE:O	0.47	2.10	22	1
1:A:183:ARG:O	1:A:184:ILE:CG2	0.47	2.63	22	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD13	0.47	1.86	29	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:130:VAL:HG22	0.47	2.39	11	1
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HG13	0.47	1.86	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:OD2	0.47	2.09	24	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:88:TYR:N	0.47	2.77	14	2
1:A:62:GLU:O	1:A:63:SER:C	0.47	2.53	22	2
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CB	0.47	2.63	8	3
1:A:92:SER:N	1:A:188:ALA:O	0.47	2.48	1	1
1:A:88:TYR:O	1:A:157:ASP:CB	0.47	2.63	21	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:155:ILE:C	0.47	2.83	15	2
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:GLY:CA	0.47	2.38	9	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:87:ILE:O	0.47	2.67	17	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:125:LEU:H	0.47	1.70	5	1
1:A:87:ILE:O	1:A:88:TYR:CG	0.47	2.68	6	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:139:ILE:HG23	0.47	2.29	7	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD11	0.47	1.87	25	1
1:A:63:SER:OG	1:A:66:GLU:CB	0.47	2.62	25	1
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:CD	0.47	2.63	25	1
1:A:156:LEU:H	1:A:156:LEU:HD22	0.47	1.70	1	1
1:A:165:ILE:N	1:A:185:VAL:O	0.47	2.47	21	2
1:A:57:PHE:C	1:A:58:ILE:HD13	0.47	2.30	9	2
1:A:154:ASN:C	1:A:156:LEU:CD1	0.47	2.81	17	1
1:A:68:LEU:CA	1:A:147:LEU:HD21	0.47	2.40	19	1
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:CG	0.47	2.62	22	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:179:ASN:N	0.47	2.48	26	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:N	0.47	2.24	3	2
1:A:153:LEU:CD2	1:A:158:GLU:O	0.47	2.62	3	1
1:A:76:SER:CB	1:A:79:PRO:O	0.47	2.62	11	1
1:A:61:LYS:O	1:A:70:ILE:HG22	0.47	2.10	11	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:56:GLY:O	0.47	2.62	15	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:56:GLY:C	0.47	2.83	15	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:189:LEU:C	0.47	2.30	24	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:126:PRO:HB3	0.47	2.44	24	1
1:A:74:ALA:O	1:A:133:ASP:O	0.47	2.32	22	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HG	0.47	1.87	25	1
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:HB2	0.47	2.10	9	5
1:A:68:LEU:HD12	1:A:142:ALA:CB	0.47	2.39	27	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:CG1	0.47	2.39	27	1
1:A:157:ASP:O	1:A:160:GLY:N	0.47	2.46	24	5
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:CD1	0.47	2.98	25	1
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.47	2.78	9	3
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:HB	0.47	1.86	17	2
1:A:184:ILE:N	1:A:184:ILE:CD1	0.47	2.78	11	1
1:A:58:ILE:HG12	1:A:163:PHE:CZ	0.47	2.44	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:N	0.47	2.25	21	1
1:A:184:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG22	0.47	2.40	12	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:159:ASP:O	0.47	2.10	17	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:55:VAL:HG11	0.47	2.30	10	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:HD11	0.47	1.86	16	1
1:A:156:LEU:CB	1:A:161:SER:OG	0.47	2.63	6	1
1:A:165:ILE:H	1:A:185:VAL:HG13	0.47	1.70	4	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:CG2	0.46	2.59	7	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HA	0.46	1.87	17	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:ND2	0.46	2.48	3	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:71:HIS:HB2	0.46	2.35	28	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HG12	0.46	2.09	28	1
1:A:164:ILE:O	1:A:164:ILE:CD1	0.46	2.61	15	3
1:A:44:HIS:CD2	1:A:44:HIS:O	0.46	2.68	28	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:C	0.46	2.53	20	6
1:A:170:ASP:OD1	1:A:171:ASP:N	0.46	2.48	9	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:HB3	0.46	2.09	12	1
1:A:55:VAL:O	1:A:74:ALA:C	0.46	2.54	10	2
1:A:48:VAL:HG12	1:A:185:VAL:HG21	0.46	1.85	29	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:O	0.46	2.33	28	2
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:HB3	0.46	2.10	21	1
1:A:88:TYR:CZ	1:A:162:ALA:HA	0.46	2.46	21	1
1:A:88:TYR:O	1:A:90:LYS:N	0.46	2.48	9	3
1:A:140:MET:O	1:A:142:ALA:N	0.46	2.49	12	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:138:VAL:HG22	0.46	2.33	5	1
1:A:40:ALA:HB1	1:A:43:HIS:CD2	0.46	2.46	15	1
1:A:78:ARG:C	1:A:130:VAL:CG1	0.46	2.84	4	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CD1	0.46	2.94	28	1
1:A:78:ARG:CB	1:A:79:PRO:CD	0.46	2.93	28	6
1:A:72:ILE:O	1:A:136:VAL:O	0.46	2.34	10	5
1:A:85:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD13	0.46	2.46	6	2
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:O	0.46	2.33	27	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:187:GLY:HA2	0.46	1.86	5	1
1:A:168:GLN:C	1:A:168:GLN:CD	0.46	2.74	16	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:83:LEU:O	0.46	2.49	13	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:ND2	0.46	2.48	29	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:126:PRO:HD2	0.46	2.45	4	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:165:ILE:HD13	0.46	1.85	25	1
1:A:76:SER:OG	1:A:134:GLY:N	0.46	2.48	22	2
1:A:50:ARG:CZ	1:A:51:GLU:HB3	0.46	2.40	9	1
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG22	0.46	2.30	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD1	0.46	2.96	27	1
1:A:42:GLY:HA2	1:A:44:HIS:CE1	0.46	2.45	14	1
1:A:84:GLY:N	1:A:168:GLN:NE2	0.46	2.63	8	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HG	0.46	2.41	25	2
1:A:146:SER:HB3	1:A:155:ILE:HD11	0.46	1.87	27	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:CG1	0.46	2.41	26	2
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:N	0.46	2.49	30	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:N	0.46	2.76	26	1
1:A:129:GLU:CG	1:A:129:GLU:O	0.46	2.63	24	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:55:VAL:O	0.46	2.63	29	1
1:A:164:ILE:HG13	1:A:166:HIS:CE1	0.46	2.46	14	1
1:A:77:LEU:N	1:A:79:PRO:HD3	0.46	2.25	8	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:HB3	0.46	2.41	22	4
1:A:147:LEU:CA	1:A:152:LYS:O	0.46	2.63	7	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:HA	0.46	1.88	9	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:CG1	0.46	2.94	9	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HB	0.46	2.41	20	1
1:A:50:ARG:CG	1:A:51:GLU:N	0.46	2.75	20	1
1:A:55:VAL:O	1:A:77:LEU:HD23	0.46	2.11	30	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG22	0.46	1.87	6	1
1:A:56:GLY:CA	1:A:77:LEU:HD23	0.46	2.41	15	1
1:A:75:ASN:HB2	1:A:134:GLY:CA	0.46	2.40	9	3
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HD13	0.46	2.10	12	1
1:A:128:LEU:HD13	1:A:136:VAL:HB	0.46	1.86	12	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HG	0.46	2.41	17	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:54:ALA:N	0.46	2.63	2	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:N	0.46	2.79	11	1
1:A:144:ASP:O	1:A:146:SER:N	0.46	2.48	15	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:CG	0.46	2.53	18	6
1:A:47:LEU:HD12	1:A:74:ALA:CB	0.46	2.38	9	2
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:C	0.46	2.54	22	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:HB3	0.46	2.40	30	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:89:GLU:HG3	0.46	2.46	3	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:N	0.46	2.26	11	2
1:A:51:GLU:OE1	1:A:179:ASN:CB	0.46	2.63	15	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:HB2	0.46	2.41	25	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:130:VAL:O	0.46	2.64	21	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HD11	0.46	2.11	18	1
1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:HD2	0.46	2.26	9	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:CG	0.46	2.64	26	2
1:A:94:VAL:HG12	1:A:94:VAL:O	0.46	2.11	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:HD12	0.46	1.87	15	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:HD22	0.46	2.11	15	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:CD2	0.46	2.64	15	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CG1	0.45	2.94	25	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:GLU:O	0.45	2.34	22	5
1:A:49:ASN:ND2	1:A:83:LEU:HD12	0.45	2.26	1	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD13	0.45	1.85	1	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG23	0.45	1.86	18	1
1:A:50:ARG:O	1:A:51:GLU:C	0.45	2.54	9	1
1:A:57:PHE:CG	1:A:59:GLU:OE2	0.45	2.69	9	1
1:A:69:ASP:CA	1:A:139:ILE:HG22	0.45	2.42	22	2
1:A:56:GLY:N	1:A:75:ASN:O	0.45	2.49	17	1
1:A:55:VAL:CB	1:A:83:LEU:HD21	0.45	2.40	19	1
1:A:55:VAL:O	1:A:77:LEU:N	0.45	2.46	15	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:N	0.45	2.42	28	3
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:OD1	0.45	2.34	28	1
1:A:133:ASP:C	1:A:135:LYS:N	0.45	2.68	26	4
1:A:55:VAL:CB	1:A:77:LEU:HG	0.45	2.41	25	1
1:A:183:ARG:O	1:A:183:ARG:CG	0.45	2.63	17	2
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:OD1	0.45	2.34	27	1
1:A:163:PHE:C	1:A:164:ILE:HD12	0.45	2.32	22	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CG2	0.45	2.63	2	1
1:A:67:GLY:CA	1:A:142:ALA:O	0.45	2.65	13	1
1:A:71:HIS:NE2	1:A:137:ASP:OD2	0.45	2.49	14	1
1:A:141:ASN:CG	1:A:141:ASN:O	0.45	2.53	8	1
1:A:178:GLY:C	1:A:180:SER:N	0.45	2.69	24	1
1:A:166:HIS:C	1:A:167:GLU:CG	0.45	2.84	28	1
1:A:88:TYR:N	1:A:162:ALA:HB3	0.45	2.26	1	1
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:CD2	0.45	2.65	18	1
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:CB	0.45	2.94	12	2
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ASP:N	0.45	2.46	20	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:C	0.45	2.55	20	1
1:A:42:GLY:O	1:A:60:ILE:HD13	0.45	2.11	14	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:HIS:N	0.45	2.24	15	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:70:ILE:O	0.45	2.62	4	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:189:LEU:H	0.45	1.71	8	1
1:A:87:ILE:HA	1:A:162:ALA:HB3	0.45	1.88	1	1
1:A:63:SER:CB	1:A:68:LEU:HB2	0.45	2.41	9	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:CG	0.45	2.64	9	1
1:A:72:ILE:C	1:A:72:ILE:HD12	0.45	2.31	12	1
1:A:61:LYS:CG	1:A:61:LYS:O	0.45	2.64	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:GLU:CD	1:A:52:GLY:N	0.45	2.69	10	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:C	0.45	2.55	8	1
1:A:82:SER:OG	1:A:129:GLU:CB	0.45	2.64	24	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:GLU:CG	0.45	2.85	28	1
1:A:138:VAL:C	1:A:139:ILE:CD1	0.45	2.83	13	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:CG2	0.45	2.42	17	3
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:HD12	0.45	2.12	18	1
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:CD1	0.45	2.56	12	2
1:A:166:HIS:CE1	1:A:168:GLN:HG3	0.45	2.46	17	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CB	0.45	2.99	27	1
1:A:88:TYR:O	1:A:190:LEU:CD2	0.45	2.64	22	1
1:A:190:LEU:O	1:A:190:LEU:CD1	0.45	2.57	30	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:75:ASN:C	0.45	2.32	11	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:79:PRO:O	0.45	2.11	11	1
1:A:166:HIS:ND1	1:A:182:ALA:C	0.45	2.69	4	1
1:A:76:SER:O	1:A:134:GLY:N	0.45	2.50	4	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:86:HIS:HB2	0.45	2.46	24	1
1:A:94:VAL:HG13	1:A:95:ARG:N	0.45	2.27	28	1
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:HG	0.45	2.12	7	1
1:A:189:LEU:O	1:A:190:LEU:C	0.45	2.55	25	7
1:A:89:GLU:HG3	1:A:90:LYS:N	0.45	2.27	1	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:O	0.45	2.69	21	1
1:A:48:VAL:HA	1:A:54:ALA:CB	0.45	2.40	12	3
1:A:68:LEU:HD21	1:A:139:ILE:HD13	0.45	1.89	9	1
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:CG	0.45	2.55	5	3
1:A:154:ASN:CB	1:A:157:ASP:O	0.45	2.65	2	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:70:ILE:HG13	0.45	1.89	10	1
1:A:43:HIS:CG	1:A:153:LEU:HD21	0.45	2.46	24	1
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:CB	0.45	2.64	30	2
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:ARG:H	0.45	1.71	21	1
1:A:92:SER:C	1:A:93:CYS:SG	0.45	2.95	27	1
1:A:65:ASP:CG	1:A:66:GLU:N	0.45	2.70	24	2
1:A:153:LEU:H	1:A:153:LEU:HD12	0.45	1.71	29	1
1:A:189:LEU:CG	1:A:189:LEU:O	0.45	2.64	4	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:CD2	0.45	2.42	7	2
1:A:166:HIS:CG	1:A:183:ARG:HA	0.45	2.47	26	4
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:C	0.45	2.54	21	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:56:GLY:C	0.45	2.32	18	1
1:A:81:ALA:H	1:A:130:VAL:HG21	0.45	1.71	12	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:VAL:CG1	0.45	2.65	17	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:157:ASP:O	0.45	2.12	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:PHE:N	1:A:73:SER:O	0.45	2.49	15	1
1:A:90:LYS:HB3	1:A:162:ALA:HB1	0.45	1.88	8	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ARG:HB2	0.45	2.12	25	3
1:A:164:ILE:HB	1:A:166:HIS:CE1	0.45	2.47	21	1
1:A:166:HIS:C	1:A:166:HIS:CD2	0.45	2.90	12	1
1:A:138:VAL:CA	1:A:139:ILE:HD13	0.45	2.42	27	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:58:ILE:CG1	0.45	2.41	23	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CB	0.45	2.65	20	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:56:GLY:C	0.45	2.86	26	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:71:HIS:CD2	0.45	2.47	26	1
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:CG1	0.45	2.58	3	1
1:A:76:SER:OG	1:A:135:LYS:N	0.45	2.50	28	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:139:ILE:O	0.45	2.12	7	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:HB3	0.45	2.12	25	3
1:A:130:VAL:HG12	1:A:131:GLY:N	0.45	2.27	22	2
1:A:68:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.45	1.87	1	1
1:A:63:SER:C	1:A:68:LEU:HD22	0.45	2.32	18	1
1:A:75:ASN:C	1:A:76:SER:OG	0.45	2.56	17	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:HB2	0.45	2.41	22	2
1:A:95:ARG:CB	1:A:96:PRO:HD3	0.45	2.42	2	3
1:A:180:SER:O	1:A:182:ALA:N	0.45	2.50	5	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:163:PHE:O	0.45	2.11	30	1
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:C	0.45	2.53	30	1
1:A:156:LEU:CB	1:A:160:GLY:O	0.45	2.64	26	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:CB	0.45	2.65	10	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD13	0.45	1.89	16	1
1:A:91:GLY:HA2	1:A:188:ALA:HB1	0.45	1.87	6	1
1:A:68:LEU:C	1:A:69:ASP:OD1	0.45	2.55	15	1
1:A:53:LYS:CG	1:A:54:ALA:N	0.44	2.79	25	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:69:ASP:O	0.44	2.55	9	2
1:A:83:LEU:O	1:A:84:GLY:O	0.44	2.35	9	3
1:A:68:LEU:HD23	1:A:145:THR:O	0.44	2.12	2	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:180:SER:CB	0.44	2.66	26	1
1:A:80:GLY:CA	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.42	10	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:HB3	0.44	2.36	14	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:83:LEU:HD12	0.44	1.88	11	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:HD23	0.44	2.12	24	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:163:PHE:CD1	0.44	2.47	7	1
1:A:44:HIS:O	1:A:188:ALA:O	0.44	2.36	25	1
1:A:128:LEU:H	1:A:136:VAL:HG11	0.44	1.72	21	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:54:ALA:HB2	0.44	2.39	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:ILE:N	1:A:139:ILE:HD12	0.44	2.27	9	1
1:A:144:ASP:C	1:A:145:THR:OG1	0.44	2.56	22	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CD1	0.44	2.65	23	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:133:ASP:C	0.44	2.32	26	1
1:A:49:ASN:N	1:A:49:ASN:ND2	0.44	2.64	10	1
1:A:132:ALA:CB	1:A:135:LYS:HG3	0.44	2.42	10	1
1:A:70:ILE:N	1:A:139:ILE:HG23	0.44	2.28	6	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:70:ILE:HB	0.44	2.43	29	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:HIS:C	0.44	2.55	14	1
1:A:48:VAL:HG12	1:A:50:ARG:N	0.44	2.23	14	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CG1	0.44	2.64	11	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HD13	0.44	1.88	11	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:85:PHE:CD2	0.44	2.85	15	1
1:A:76:SER:O	1:A:133:ASP:C	0.44	2.55	8	1
1:A:52:GLY:O	1:A:54:ALA:N	0.44	2.48	21	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG12	0.44	2.42	9	4
1:A:137:ASP:O	1:A:137:ASP:CG	0.44	2.55	12	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG13	0.44	2.42	27	2
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG23	0.44	1.88	22	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:CG2	0.44	2.66	22	1
1:A:94:VAL:HG13	1:A:96:PRO:CD	0.44	2.42	2	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:139:ILE:CD1	0.44	2.42	30	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:CD1	0.44	2.77	29	1
1:A:92:SER:O	1:A:94:VAL:N	0.44	2.48	11	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:187:GLY:HA3	0.44	1.88	9	1
1:A:52:GLY:HA2	1:A:77:LEU:HD21	0.44	1.89	27	1
1:A:146:SER:OG	1:A:146:SER:O	0.44	2.35	22	1
1:A:167:GLU:HG2	1:A:184:ILE:CG1	0.44	2.42	23	1
1:A:73:SER:O	1:A:75:ASN:ND2	0.44	2.50	10	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:O	0.44	2.66	3	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:75:ASN:O	0.44	2.12	16	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:71:HIS:H	0.44	1.73	29	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:OD1	0.44	2.35	4	2
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CG	0.44	2.43	24	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:131:GLY:C	0.44	2.33	24	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:HG	0.44	1.87	28	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:CG	0.44	2.66	18	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD13	0.44	1.88	5	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:CB	0.44	2.95	11	1
1:A:90:LYS:NZ	1:A:93:CYS:SG	0.44	2.90	24	1
1:A:180:SER:OG	1:A:180:SER:O	0.44	2.35	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:PHE:CE1	1:A:165:ILE:CD1	0.44	3.01	22	1
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:HG2	0.44	2.11	6	3
1:A:60:ILE:HG23	1:A:71:HIS:CB	0.44	2.41	26	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:CG2	0.44	2.62	16	1
1:A:63:SER:CB	1:A:68:LEU:CB	0.44	2.96	6	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:C	0.44	2.56	6	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:61:LYS:HE2	0.44	2.48	29	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:134:GLY:N	0.44	2.28	7	1
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:HD23	0.44	2.12	7	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.44	2.43	25	1
1:A:49:ASN:H	1:A:49:ASN:ND2	0.44	2.11	22	2
1:A:160:GLY:O	1:A:161:SER:O	0.44	2.36	21	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:164:ILE:CD1	0.44	3.00	21	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:147:LEU:CD2	0.44	2.43	18	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:CG2	0.44	2.43	17	2
1:A:51:GLU:C	1:A:53:LYS:N	0.44	2.71	27	4
1:A:170:ASP:OD2	1:A:181:GLY:N	0.44	2.51	30	1
1:A:71:HIS:CB	1:A:137:ASP:OD1	0.44	2.65	30	1
1:A:73:SER:HA	1:A:136:VAL:HG23	0.44	1.89	11	1
1:A:78:ARG:CA	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.43	4	1
1:A:44:HIS:O	1:A:44:HIS:CG	0.44	2.71	28	1
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:CD1	0.44	2.79	1	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:C	0.44	2.54	12	2
1:A:130:VAL:HG22	1:A:131:GLY:H	0.44	1.73	27	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:C	0.44	2.85	23	1
1:A:82:SER:HB3	1:A:168:GLN:CB	0.44	2.43	4	3
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:O	0.44	2.36	3	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD13	0.44	2.12	18	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:159:ASP:O	0.44	2.65	17	1
1:A:144:ASP:O	1:A:145:THR:O	0.44	2.36	22	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:HB1	0.44	2.41	5	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:HD11	0.44	2.13	23	1
1:A:59:GLU:C	1:A:71:HIS:CB	0.44	2.86	26	1
1:A:77:LEU:C	1:A:133:ASP:OD2	0.44	2.56	8	1
1:A:57:PHE:O	1:A:73:SER:O	0.43	2.36	25	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:83:LEU:CG	0.43	2.42	1	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:133:ASP:O	0.43	2.12	10	2
1:A:70:ILE:HD12	1:A:71:HIS:N	0.43	2.28	12	1
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:HB3	0.43	2.43	17	2
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:O	0.43	2.36	19	2
1:A:154:ASN:O	1:A:155:ILE:HD12	0.43	2.12	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ASN:N	1:A:179:ASN:OD1	0.43	2.49	2	1
1:A:167:GLU:CG	1:A:184:ILE:HG12	0.43	2.42	23	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD21	0.43	1.89	26	1
1:A:152:LYS:CG	1:A:153:LEU:N	0.43	2.77	26	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:162:ALA:O	0.43	2.66	3	1
1:A:70:ILE:N	1:A:147:LEU:HD11	0.43	2.28	14	1
1:A:170:ASP:OD2	1:A:170:ASP:N	0.43	2.51	14	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HB3	0.43	1.89	25	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:CB	0.43	2.96	1	1
1:A:50:ARG:NE	1:A:51:GLU:HB2	0.43	2.28	9	1
1:A:179:ASN:O	1:A:179:ASN:ND2	0.43	2.52	9	1
1:A:87:ILE:O	1:A:163:PHE:CE1	0.43	2.71	27	1
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:HG22	0.43	1.90	22	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HG21	0.43	1.90	5	1
1:A:167:GLU:O	1:A:168:GLN:CG	0.43	2.65	30	1
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:H	0.43	1.72	14	1
1:A:166:HIS:CE1	1:A:184:ILE:HD13	0.43	2.48	15	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:LEU:CD1	0.43	2.43	28	1
1:A:137:ASP:CG	1:A:137:ASP:O	0.43	2.56	28	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:C	0.43	2.57	21	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:CG2	0.43	2.43	19	1
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD22	0.43	1.88	27	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:155:ILE:CD1	0.43	2.84	22	1
1:A:129:GLU:O	1:A:129:GLU:CG	0.43	2.64	5	1
1:A:170:ASP:HA	1:A:178:GLY:O	0.43	2.12	3	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:133:ASP:OD1	0.43	2.66	29	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:CG	0.43	2.67	11	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:71:HIS:CB	0.43	2.38	28	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HB3	0.43	2.44	25	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:HA	0.43	2.43	1	1
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:O	0.43	2.37	21	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:CD2	0.43	3.01	12	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:189:LEU:HD21	0.43	1.89	17	1
1:A:68:LEU:HD11	1:A:147:LEU:HD21	0.43	1.88	17	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CB	0.43	2.66	19	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:HG13	0.43	1.87	27	1
1:A:63:SER:CB	1:A:67:GLY:O	0.43	2.66	22	1
1:A:183:ARG:C	1:A:184:ILE:HG23	0.43	2.34	22	1
1:A:92:SER:CB	1:A:189:LEU:HD23	0.43	2.44	16	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:145:THR:OG1	0.43	2.37	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:ALA:HB3	0.43	1.90	7	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CG	0.43	2.57	21	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:C	0.43	2.92	17	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:CG	0.43	2.97	17	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:134:GLY:CA	0.43	2.44	22	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:130:VAL:HG13	0.43	1.89	2	1
1:A:170:ASP:OD2	1:A:181:GLY:CA	0.43	2.66	30	1
1:A:178:GLY:O	1:A:180:SER:N	0.43	2.51	24	2
1:A:168:GLN:O	1:A:179:ASN:ND2	0.43	2.51	10	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:83:LEU:O	0.43	2.57	13	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:O	0.43	2.36	13	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:156:LEU:CB	0.43	2.96	25	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:54:ALA:HB2	0.43	2.43	21	1
1:A:89:GLU:H	1:A:162:ALA:HB3	0.43	1.73	27	1
1:A:88:TYR:HA	1:A:162:ALA:HB2	0.43	1.91	5	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:68:LEU:N	0.43	2.81	26	1
1:A:163:PHE:O	1:A:165:ILE:CD1	0.43	2.67	3	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:CD2	0.43	2.43	6	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:O	0.43	2.36	23	2
1:A:105:PHE:CG	1:A:123:GLY:HA3	0.43	2.49	25	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:CD	0.43	2.87	1	1
1:A:159:ASP:OD1	1:A:160:GLY:N	0.43	2.52	21	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:HB3	0.43	2.14	18	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:126:PRO:HD3	0.43	2.44	17	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:69:ASP:OD2	0.43	2.14	19	1
1:A:76:SER:C	1:A:78:ARG:N	0.43	2.71	19	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:HB3	0.43	2.14	5	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HG23	0.43	1.88	27	1
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HG21	0.43	1.91	22	1
1:A:85:PHE:HB2	1:A:128:LEU:HD21	0.43	1.90	23	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:OG	0.43	2.32	16	1
1:A:136:VAL:CG2	1:A:137:ASP:N	0.43	2.81	16	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HG23	0.43	2.14	6	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:CG2	0.43	2.44	11	1
1:A:94:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD22	0.43	1.91	4	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:GLY:O	0.43	2.36	29	4
1:A:159:ASP:HB3	1:A:189:LEU:HD23	0.43	1.89	7	1
1:A:96:PRO:O	1:A:98:PHE:N	0.43	2.48	19	2
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:CYS:N	0.43	2.29	1	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:187:GLY:CA	0.43	2.43	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG13	0.43	2.13	21	1
1:A:154:ASN:HA	1:A:156:LEU:CD1	0.43	2.44	17	1
1:A:138:VAL:HG13	1:A:139:ILE:N	0.43	2.28	27	1
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HA	0.43	2.43	2	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:77:LEU:HG	0.43	1.90	20	1
1:A:157:ASP:CB	1:A:160:GLY:O	0.43	2.67	30	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:HG3	0.43	2.49	3	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:HG12	0.43	1.90	13	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:156:LEU:C	0.43	2.87	14	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:C	0.43	2.74	15	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:55:VAL:CG2	0.43	2.44	24	1
1:A:129:GLU:HG3	1:A:133:ASP:CB	0.43	2.44	28	1
1:A:162:ALA:O	1:A:163:PHE:CG	0.43	2.72	21	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:145:THR:HG1	0.43	1.72	21	1
1:A:50:ARG:CG	1:A:50:ARG:O	0.43	2.65	9	1
1:A:54:ALA:C	1:A:55:VAL:HG13	0.43	2.34	17	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG21	0.43	1.88	27	1
1:A:52:GLY:CA	1:A:77:LEU:CD2	0.43	2.97	22	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:134:GLY:C	0.43	2.57	5	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:71:HIS:HB3	0.43	2.42	26	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:163:PHE:CD1	0.43	2.49	28	1
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG13	0.43	2.34	15	2
1:A:43:HIS:CD2	1:A:58:ILE:HG21	0.43	2.49	18	1
1:A:156:LEU:H	1:A:156:LEU:CD1	0.43	2.25	12	1
1:A:167:GLU:HB3	1:A:182:ALA:CA	0.43	2.43	22	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:138:VAL:HG23	0.43	1.91	2	1
1:A:61:LYS:HD3	1:A:61:LYS:O	0.43	2.12	29	2
1:A:63:SER:HB2	1:A:68:LEU:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:45:VAL:N	0.43	2.86	29	1
1:A:45:VAL:O	1:A:58:ILE:CD1	0.43	2.66	29	1
1:A:157:ASP:N	1:A:157:ASP:OD2	0.43	2.51	11	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:HB3	0.43	2.13	15	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:CA	0.43	2.43	4	1
1:A:187:GLY:O	1:A:189:LEU:N	0.42	2.48	11	2
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD22	0.42	2.13	18	1
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:O	0.42	2.37	14	6
1:A:160:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD21	0.42	2.43	27	1
1:A:97:ASP:OD1	1:A:97:ASP:N	0.42	2.52	27	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:156:LEU:N	0.42	2.29	30	1
1:A:144:ASP:OD2	1:A:144:ASP:C	0.42	2.56	30	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:CB	0.42	2.67	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:SER:HA	1:A:155:ILE:HG21	0.42	1.90	13	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD2	0.42	2.81	13	1
1:A:90:LYS:NZ	1:A:102:GLY:H	0.42	2.12	13	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HG12	0.42	2.44	6	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:69:ASP:HA	0.42	2.43	4	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:84:GLY:O	1:A:168:GLN:NE2	0.42	2.52	1	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:189:LEU:HB2	0.42	1.91	9	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG12	0.42	1.90	12	1
1:A:48:VAL:O	1:A:184:ILE:O	0.42	2.38	12	2
1:A:54:ALA:C	1:A:55:VAL:CG1	0.42	2.87	17	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:O	0.42	2.37	15	3
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:166:HIS:HA	1:A:182:ALA:O	0.42	2.14	23	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:74:ALA:CB	0.42	2.36	30	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:H	0.42	1.73	3	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.67	16	1
1:A:62:GLU:H	1:A:147:LEU:HD11	0.42	1.74	6	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HB	0.42	1.90	29	1
1:A:69:ASP:CA	1:A:147:LEU:HD11	0.42	2.45	14	1
1:A:72:ILE:CG2	1:A:72:ILE:O	0.42	2.67	15	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:HB2	0.42	2.14	24	1
1:A:86:HIS:CE1	1:A:126:PRO:HB3	0.42	2.50	28	1
1:A:61:LYS:N	1:A:70:ILE:CG2	0.42	2.82	7	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:HG3	0.42	2.14	25	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:CG	0.42	2.58	21	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD12	0.42	2.14	9	1
1:A:89:GLU:O	1:A:89:GLU:CG	0.42	2.67	12	1
1:A:163:PHE:O	1:A:164:ILE:HD12	0.42	2.15	22	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:C	0.42	2.57	2	1
1:A:146:SER:HB2	1:A:153:LEU:CD2	0.42	2.44	20	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG23	0.42	2.34	8	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.96	18	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:HIS:O	0.42	2.37	24	4
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HG	0.42	2.14	22	1
1:A:161:SER:CB	1:A:163:PHE:CZ	0.42	3.02	30	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:163:PHE:H	0.42	1.75	30	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:CD2	0.42	2.44	30	1
1:A:128:LEU:CB	1:A:136:VAL:HG11	0.42	2.42	10	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CD1	0.42	2.84	13	1
1:A:98:PHE:CE1	1:A:183:ARG:NH2	0.42	2.88	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:N	0.42	2.52	11	1
1:A:67:GLY:O	1:A:142:ALA:HB3	0.42	2.14	25	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:OD1	0.42	2.36	21	1
1:A:92:SER:O	1:A:93:CYS:C	0.42	2.58	18	1
1:A:43:HIS:HD2	1:A:58:ILE:HG21	0.42	1.74	18	1
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:C	0.42	2.58	9	4
1:A:146:SER:C	1:A:147:LEU:HD13	0.42	2.34	20	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:HB2	0.42	2.14	26	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HG	0.42	2.44	3	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.98	13	1
1:A:75:ASN:O	1:A:83:LEU:HB2	0.42	2.13	15	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:N	0.42	2.86	15	2
1:A:69:ASP:OD1	1:A:147:LEU:HD21	0.42	2.14	15	1
1:A:126:PRO:HB2	1:A:128:LEU:HD21	0.42	1.90	4	1
1:A:67:GLY:O	1:A:145:THR:O	0.42	2.37	7	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:139:ILE:CG1	0.42	2.97	25	1
1:A:166:HIS:ND1	1:A:167:GLU:N	0.42	2.68	1	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:O	0.42	2.37	23	2
1:A:60:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG21	0.42	2.44	21	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:GLU:CG	0.42	2.68	17	2
1:A:70:ILE:HG12	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.44	2	1
1:A:167:GLU:OE1	1:A:179:ASN:OD1	0.42	2.38	23	1
1:A:75:ASN:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.44	23	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:N	0.42	2.80	23	1
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:HD12	0.42	2.34	20	1
1:A:56:GLY:HA2	1:A:74:ALA:HB1	0.42	1.90	20	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.44	3	2
1:A:190:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	0.42	1.75	16	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HD13	0.42	2.14	16	1
1:A:51:GLU:OE2	1:A:169:ALA:CB	0.42	2.66	6	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.44	29	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:78:ARG:CB	0.42	2.43	15	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:GLY:O	0.42	2.38	15	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:CG2	0.42	2.82	8	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:CG	0.42	3.03	18	1
1:A:165:ILE:HD12	1:A:165:ILE:H	0.42	1.73	2	3
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:O	0.42	2.38	9	1
1:A:189:LEU:HG	1:A:189:LEU:O	0.42	2.14	17	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:134:GLY:O	0.42	2.36	24	2
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.78	2	1
1:A:72:ILE:HG12	1:A:72:ILE:O	0.42	2.14	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:CA	0.42	2.41	13	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:C	0.42	2.87	13	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:O	0.42	2.37	13	1
1:A:62:GLU:HB2	1:A:68:LEU:HD23	0.42	1.92	4	1
1:A:163:PHE:N	1:A:187:GLY:O	0.42	2.53	25	1
1:A:88:TYR:C	1:A:157:ASP:OD2	0.42	2.58	21	1
1:A:82:SER:OG	1:A:169:ALA:CB	0.42	2.58	23	1
1:A:169:ALA:C	1:A:170:ASP:CG	0.42	2.78	30	1
1:A:71:HIS:H	1:A:71:HIS:CD2	0.42	2.33	30	1
1:A:75:ASN:CA	1:A:133:ASP:O	0.42	2.68	10	1
1:A:56:GLY:CA	1:A:73:SER:O	0.42	2.67	15	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:158:GLU:N	0.42	2.72	4	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:ND1	0.42	2.50	24	1
1:A:147:LEU:C	1:A:152:LYS:O	0.42	2.58	7	1
1:A:40:ALA:O	1:A:42:GLY:N	0.42	2.49	7	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:VAL:HG13	0.42	2.15	1	1
1:A:159:ASP:O	1:A:160:GLY:O	0.42	2.36	1	1
1:A:50:ARG:HG2	1:A:77:LEU:HD22	0.42	1.90	9	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:CE1	0.42	2.72	27	1
1:A:47:LEU:C	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.88	2	1
1:A:82:SER:HG	1:A:169:ALA:HB2	0.42	1.72	23	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:CB	0.42	2.98	26	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CG2	0.42	2.68	13	1
1:A:94:VAL:CG2	1:A:94:VAL:O	0.42	2.67	6	1
1:A:51:GLU:OE1	1:A:179:ASN:CG	0.42	2.58	15	1
1:A:155:ILE:O	1:A:155:ILE:CD1	0.42	2.63	15	1
1:A:77:LEU:H	1:A:130:VAL:HG13	0.42	1.74	28	1
1:A:41:PHE:O	1:A:60:ILE:O	0.42	2.37	28	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:C	0.42	2.93	21	1
1:A:190:LEU:C	1:A:190:LEU:HD12	0.42	2.35	12	1
1:A:154:ASN:O	1:A:156:LEU:HD13	0.42	2.14	17	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:163:PHE:CE1	0.42	2.50	17	1
1:A:71:HIS:O	1:A:72:ILE:HG23	0.42	2.15	19	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CG1	0.42	2.45	22	1
1:A:46:GLN:N	1:A:187:GLY:CA	0.42	2.83	30	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:157:ASP:OD1	0.42	2.68	30	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG12	0.42	2.45	13	1
1:A:146:SER:O	1:A:152:LYS:O	0.42	2.38	6	1
1:A:41:PHE:CD1	1:A:41:PHE:N	0.42	2.87	29	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:70:ILE:CG2	0.42	2.45	29	1
1:A:186:CYS:O	1:A:187:GLY:O	0.42	2.37	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:HD12	1:A:160:GLY:HA2	0.42	1.91	29	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:CG2	0.42	2.45	14	1
1:A:166:HIS:NE2	1:A:185:VAL:O	0.42	2.53	14	1
1:A:132:ALA:C	1:A:133:ASP:CG	0.42	2.78	14	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:139:ILE:HG13	0.41	2.44	25	1
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:ARG:N	0.41	2.30	21	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:HB2	0.41	2.15	12	1
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASN:CG	0.41	2.78	17	1
1:A:190:LEU:CD1	1:A:190:LEU:O	0.41	2.63	19	1
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG11	0.41	2.29	27	1
1:A:57:PHE:N	1:A:74:ALA:HB2	0.41	2.27	30	1
1:A:82:SER:HB3	1:A:169:ALA:N	0.41	2.30	30	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:71:HIS:ND1	0.41	2.82	26	1
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HA	0.41	1.91	10	1
1:A:73:SER:HB3	1:A:137:ASP:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:160:GLY:HA2	0.41	2.45	29	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:75:ASN:C	0.41	2.89	11	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:136:VAL:HG21	0.41	2.15	11	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:CD1	0.41	2.44	11	1
1:A:167:GLU:C	1:A:168:GLN:CG	0.41	2.88	4	1
1:A:167:GLU:C	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.58	8	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ASN:ND2	0.41	2.52	28	1
1:A:51:GLU:OE2	1:A:179:ASN:OD1	0.41	2.38	28	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG13	0.41	1.91	12	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:128:LEU:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:HG11	0.41	1.91	27	1
1:A:82:SER:O	1:A:165:ILE:HG23	0.41	2.15	22	1
1:A:68:LEU:O	1:A:138:VAL:O	0.41	2.38	13	2
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CD2	0.41	2.93	2	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:C	0.41	2.58	3	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:58:ILE:HG13	0.41	2.45	16	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:O	0.41	2.34	16	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:O	0.41	2.38	29	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:HB2	0.41	2.15	14	1
1:A:68:LEU:O	1:A:145:THR:O	0.41	2.38	14	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:179:ASN:C	0.41	2.58	11	1
1:A:166:HIS:C	1:A:168:GLN:N	0.41	2.73	15	1
1:A:78:ARG:N	1:A:130:VAL:HG13	0.41	2.30	4	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.38	8	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:C	0.41	2.58	24	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:CG	0.41	2.59	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:N	1:A:162:ALA:O	0.41	2.50	9	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:HB3	0.41	2.45	17	1
1:A:130:VAL:HG22	1:A:131:GLY:N	0.41	2.31	19	1
1:A:169:ALA:C	1:A:170:ASP:OD2	0.41	2.59	22	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:HD12	0.41	2.15	23	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:O	0.41	2.37	13	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:CG	0.41	2.59	13	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:55:VAL:HG12	0.41	1.74	29	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CG1	0.41	2.67	15	1
1:A:92:SER:OG	1:A:186:CYS:SG	0.41	2.78	15	1
1:A:155:ILE:HD12	1:A:156:LEU:HD23	0.41	1.91	4	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:OE1	0.41	2.72	24	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:69:ASP:HB3	0.41	1.90	28	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:57:PHE:CA	0.41	2.97	7	1
1:A:63:SER:HA	1:A:66:GLU:O	0.41	2.15	18	1
1:A:183:ARG:CG	1:A:183:ARG:O	0.41	2.68	18	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:170:ASP:C	0.41	2.58	9	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.39	19	1
1:A:60:ILE:HA	1:A:70:ILE:HB	0.41	1.90	27	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	0.41	1.92	27	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:145:THR:O	0.41	2.68	2	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:86:HIS:HB2	0.41	2.51	23	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:184:ILE:CD1	0.41	2.68	16	1
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:HD11	0.41	2.16	13	1
1:A:161:SER:CB	1:A:190:LEU:O	0.41	2.69	14	1
1:A:76:SER:HA	1:A:130:VAL:CG1	0.41	2.43	14	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:CD1	0.41	2.45	15	1
1:A:50:ARG:O	1:A:179:ASN:CG	0.41	2.58	8	1
1:A:152:LYS:CD	1:A:152:LYS:N	0.41	2.84	24	1
1:A:162:ALA:HA	1:A:189:LEU:HD21	0.41	1.92	28	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:59:GLU:HB3	0.41	2.50	7	1
1:A:166:HIS:C	1:A:166:HIS:ND1	0.41	2.74	1	1
1:A:171:ASP:CG	1:A:171:ASP:O	0.41	2.59	3	2
1:A:154:ASN:OD1	1:A:154:ASN:N	0.41	2.52	12	1
1:A:74:ALA:HB2	1:A:85:PHE:CZ	0.41	2.51	17	1
1:A:75:ASN:HB2	1:A:136:VAL:CG2	0.41	2.45	19	1
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:O	0.41	2.59	27	1
1:A:95:ARG:N	1:A:96:PRO:HD2	0.41	2.31	27	1
1:A:74:ALA:C	1:A:75:ASN:ND2	0.41	2.73	5	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:86:HIS:HB2	0.41	2.51	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG12	1:A:71:HIS:CB	0.41	2.45	26	1
1:A:171:ASP:CG	1:A:179:ASN:C	0.41	2.79	26	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HG	0.41	1.92	3	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:156:LEU:N	0.41	2.84	14	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:187:GLY:C	0.41	2.88	11	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CG2	0.41	2.45	11	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:165:ILE:HG21	0.41	1.93	24	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:55:VAL:HG12	0.41	2.34	7	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:186:CYS:HB2	0.41	2.45	1	1
1:A:132:ALA:C	1:A:133:ASP:OD1	0.41	2.58	18	1
1:A:169:ALA:O	1:A:171:ASP:N	0.41	2.53	12	1
1:A:43:HIS:O	1:A:58:ILE:HG21	0.41	2.16	17	1
1:A:164:ILE:HD12	1:A:164:ILE:N	0.41	2.30	23	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:187:GLY:HA3	0.41	2.45	20	1
1:A:97:ASP:O	1:A:99:GLU:N	0.41	2.51	3	1
1:A:43:HIS:C	1:A:44:HIS:CG	0.41	2.93	16	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HB2	0.41	1.87	13	1
1:A:169:ALA:HB3	1:A:180:SER:CA	0.41	2.46	13	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HD13	0.41	2.45	11	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CB	0.41	2.45	11	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:45:VAL:O	0.41	2.16	8	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:SER:OG	0.41	2.37	28	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:134:GLY:N	0.41	2.31	22	2
1:A:87:ILE:HG22	1:A:161:SER:HA	0.41	1.93	1	1
1:A:168:GLN:O	1:A:180:SER:O	0.41	2.38	19	2
1:A:80:GLY:O	1:A:170:ASP:CG	0.41	2.59	22	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:155:ILE:HD11	0.41	2.45	2	1
1:A:88:TYR:O	1:A:160:GLY:O	0.41	2.39	4	1
1:A:179:ASN:HD22	1:A:180:SER:N	0.41	2.14	28	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:GLY:C	0.41	2.59	7	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG22	0.41	2.16	25	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:157:ASP:CA	0.41	2.45	25	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:126:PRO:HD3	0.41	2.51	1	1
1:A:51:GLU:N	1:A:170:ASP:O	0.41	2.53	9	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:69:ASP:CB	0.41	2.45	12	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:HD3	0.41	2.16	19	1
1:A:155:ILE:HG13	1:A:155:ILE:O	0.41	2.16	27	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:187:GLY:HA2	0.41	2.46	5	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.41	2.45	30	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:71:HIS:CG	0.41	2.51	26	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:184:ILE:CD1	0.41	2.98	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ASP:CG	1:A:160:GLY:O	0.41	2.59	11	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HD11	0.41	1.92	28	1
1:A:55:VAL:O	1:A:76:SER:O	0.41	2.39	28	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:54:ALA:O	0.41	2.15	1	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:189:LEU:HB2	0.41	2.45	1	1
1:A:165:ILE:C	1:A:166:HIS:CG	0.41	2.94	21	1
1:A:49:ASN:N	1:A:53:LYS:O	0.41	2.53	21	2
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:HA3	0.41	2.16	21	1
1:A:56:GLY:CA	1:A:74:ALA:HA	0.41	2.46	18	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:N	0.41	2.30	14	2
1:A:135:LYS:CG	1:A:135:LYS:O	0.41	2.69	11	2
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:HD13	0.41	2.31	9	1
1:A:88:TYR:O	1:A:90:LYS:O	0.41	2.38	9	1
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASN:OD1	0.41	2.59	12	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:OG	0.41	2.37	17	2
1:A:75:ASN:HB2	1:A:136:VAL:CG1	0.41	2.45	19	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:OD1	0.41	2.69	22	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASP:N	0.41	2.74	16	2
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:HG12	0.41	1.92	2	1
1:A:47:LEU:CA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.99	2	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:HB3	0.41	2.16	16	2
1:A:73:SER:O	1:A:75:ASN:CG	0.41	2.59	10	1
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:OD1	0.41	2.38	10	1
1:A:63:SER:OG	1:A:69:ASP:CG	0.41	2.59	10	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:HG23	0.41	2.16	13	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:O	0.41	2.39	6	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:165:ILE:CG2	0.41	2.45	6	1
1:A:73:SER:OG	1:A:137:ASP:OD1	0.41	2.39	6	1
1:A:87:ILE:O	1:A:162:ALA:C	0.41	2.60	14	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:CD2	0.41	2.68	14	1
1:A:171:ASP:N	1:A:171:ASP:OD1	0.41	2.53	14	1
1:A:84:GLY:O	1:A:164:ILE:O	0.41	2.39	11	1
1:A:164:ILE:C	1:A:165:ILE:HD12	0.41	2.36	4	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:69:ASP:HA	0.41	2.46	24	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.46	7	1
1:A:76:SER:O	1:A:76:SER:OG	0.41	2.38	27	2
1:A:75:ASN:CB	1:A:134:GLY:HA3	0.41	2.46	9	1
1:A:167:GLU:O	1:A:167:GLU:HG3	0.41	2.16	22	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:CG	0.41	2.46	20	1
1:A:42:GLY:O	1:A:44:HIS:ND1	0.41	2.48	20	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:188:ALA:CA	0.41	2.45	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:O	0.41	2.38	26	1
1:A:127:ASN:O	1:A:136:VAL:CG1	0.41	2.69	10	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:75:ASN:N	0.41	2.31	10	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:179:ASN:ND2	0.41	2.61	3	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:189:LEU:O	0.41	2.14	3	1
1:A:164:ILE:CG1	1:A:186:CYS:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:187:GLY:N	0.41	2.84	14	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:CG2	0.41	2.46	11	1
1:A:159:ASP:O	1:A:190:LEU:O	0.41	2.39	8	1
1:A:161:SER:CA	1:A:188:ALA:HA	0.40	2.47	7	1
1:A:61:LYS:C	1:A:70:ILE:HG22	0.40	2.36	7	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HA	0.40	1.92	25	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:77:LEU:HG	0.40	2.45	25	1
1:A:50:ARG:CB	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.69	12	1
1:A:60:ILE:H	1:A:60:ILE:HD12	0.40	1.77	19	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD23	0.40	2.16	27	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:GLY:C	0.40	2.59	22	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:179:ASN:ND2	0.40	2.54	5	1
1:A:68:LEU:CG	1:A:147:LEU:HD11	0.40	2.45	20	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:130:VAL:O	0.40	2.16	30	1
1:A:168:GLN:O	1:A:180:SER:OG	0.40	2.39	26	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:75:ASN:N	0.40	2.31	13	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:CD1	0.40	2.98	14	1
1:A:68:LEU:O	1:A:69:ASP:OD1	0.40	2.39	11	1
1:A:50:ARG:O	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.38	15	1
1:A:56:GLY:N	1:A:77:LEU:HD23	0.40	2.31	15	1
1:A:159:ASP:O	1:A:189:LEU:CD2	0.40	2.69	24	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:CG	0.40	2.74	21	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:CB	0.40	2.47	21	1
1:A:61:LYS:CG	1:A:62:GLU:N	0.40	2.85	19	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:HB1	0.40	2.46	27	1
1:A:69:ASP:N	1:A:69:ASP:OD1	0.40	2.54	27	1
1:A:56:GLY:C	1:A:57:PHE:CD2	0.40	2.95	27	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:ND1	0.40	2.54	5	2
1:A:184:ILE:C	1:A:184:ILE:HD12	0.40	2.37	23	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:CG1	0.40	2.44	10	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:145:THR:OG1	0.40	2.69	10	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:HA	0.40	2.16	16	1
1:A:83:LEU:CG	1:A:128:LEU:O	0.40	2.69	16	1
1:A:166:HIS:HB2	1:A:182:ALA:CB	0.40	2.46	16	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:O	0.40	2.69	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:HD12	0.40	2.17	6	1
1:A:131:GLY:C	1:A:133:ASP:N	0.40	2.73	29	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:CD2	0.40	2.45	11	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:C	0.40	2.59	11	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:O	0.40	2.69	8	1
1:A:87:ILE:HG21	1:A:154:ASN:ND2	0.40	2.31	25	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:190:LEU:CD2	0.40	2.91	18	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:139:ILE:HA	0.40	1.92	12	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.39	17	1
1:A:51:GLU:HB3	1:A:78:ARG:HH21	0.40	1.76	19	1
1:A:190:LEU:CD1	1:A:190:LEU:C	0.40	2.90	22	1
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:OD1	0.40	2.69	10	1
1:A:158:GLU:O	1:A:159:ASP:OD1	0.40	2.39	3	1
1:A:179:ASN:ND2	1:A:179:ASN:O	0.40	2.53	3	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:58:ILE:CG1	0.40	3.00	16	1
1:A:164:ILE:CG2	1:A:186:CYS:HB3	0.40	2.44	13	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:75:ASN:CA	0.40	2.46	13	1
1:A:181:GLY:C	1:A:182:ALA:O	0.40	2.60	13	1
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:C	0.40	2.60	29	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:139:ILE:HB	0.40	2.46	11	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:OE1	0.40	2.69	11	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:HB2	0.40	2.15	4	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:61:LYS:HB3	0.40	2.46	28	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:165:ILE:CD1	0.40	2.46	28	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:152:LYS:O	0.40	2.16	7	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:184:ILE:CG2	0.40	2.47	25	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:C	0.40	2.60	9	1
1:A:44:HIS:O	1:A:189:LEU:O	0.40	2.40	12	1
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HD23	0.40	2.16	22	1
1:A:86:HIS:O	1:A:162:ALA:O	0.40	2.38	5	1
1:A:98:PHE:O	1:A:100:SER:N	0.40	2.54	5	1
1:A:102:GLY:O	1:A:103:GLY:C	0.40	2.59	2	1
1:A:136:VAL:C	1:A:137:ASP:CG	0.40	2.80	20	1
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:HB2	0.40	2.17	30	1
1:A:87:ILE:HB	1:A:162:ALA:O	0.40	2.16	6	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:CB	0.40	2.68	6	1
1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:OD1	0.40	2.53	29	1
1:A:133:ASP:O	1:A:134:GLY:C	0.40	2.59	14	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:O	0.40	2.39	15	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:179:ASN:ND2	0.40	2.54	8	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:HG	0.40	2.16	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG13	0.40	2.16	24	1
1:A:132:ALA:C	1:A:134:GLY:N	0.40	2.74	28	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD21	0.40	2.16	28	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:139:ILE:CG1	0.40	2.46	25	1
1:A:82:SER:HB2	1:A:168:GLN:CG	0.40	2.47	1	1
1:A:166:HIS:C	1:A:168:GLN:H	0.40	2.19	21	1
1:A:154:ASN:CA	1:A:156:LEU:CD1	0.40	3.00	17	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:179:ASN:C	0.40	2.60	26	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:61:LYS:HB2	0.40	2.51	3	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD11	0.40	1.93	11	1
1:A:76:SER:OG	1:A:128:LEU:C	0.40	2.59	15	1
1:A:97:ASP:OD1	1:A:97:ASP:C	0.40	2.59	15	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	124/162 (77%)	58±5 (47±4%)	41±5 (33±4%)	25±5 (20±4%)	0	2
All	All	3720/4860 (77%)	1735 (47%)	1243 (33%)	742 (20%)	0	2

All 89 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	130	VAL	26
1	A	78	ARG	25
1	A	53	LYS	19
1	A	67	GLY	19
1	A	141	ASN	18
1	A	188	ALA	17
1	A	144	ASP	17
1	A	86	HIS	16
1	A	98	PHE	16
1	A	182	ALA	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	87	ILE	15
1	A	62	GLU	15
1	A	43	HIS	14
1	A	101	ALA	14
1	A	80	GLY	14
1	A	138	VAL	13
1	A	180	SER	13
1	A	94	VAL	12
1	A	102	GLY	12
1	A	178	GLY	12
1	A	64	ASP	12
1	A	95	ARG	11
1	A	97	ASP	11
1	A	74	ALA	11
1	A	57	PHE	11
1	A	170	ASP	11
1	A	133	ASP	11
1	A	152	LYS	10
1	A	190	LEU	10
1	A	143	PRO	10
1	A	84	GLY	10
1	A	100	SER	10
1	A	161	SER	10
1	A	52	GLY	9
1	A	40	ALA	9
1	A	54	ALA	9
1	A	153	LEU	9
1	A	77	LEU	9
1	A	171	ASP	9
1	A	183	ARG	9
1	A	96	PRO	9
1	A	124	ASP	9
1	A	179	ASN	9
1	A	169	ALA	9
1	A	91	GLY	9
1	A	89	GLU	8
1	A	158	GLU	8
1	A	104	PRO	7
1	A	189	LEU	7
1	A	76	SER	7
1	A	131	GLY	7
1	A	85	PHE	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	123	GLY	7
1	A	139	ILE	7
1	A	93	CYS	7
1	A	71	HIS	6
1	A	146	SER	5
1	A	44	HIS	5
1	A	103	GLY	5
1	A	50	ARG	5
1	A	147	LEU	5
1	A	184	ILE	4
1	A	128	LEU	4
1	A	181	GLY	4
1	A	42	GLY	4
1	A	61	LYS	4
1	A	105	PHE	4
1	A	160	GLY	4
1	A	63	SER	4
1	A	187	GLY	3
1	A	55	VAL	3
1	A	137	ASP	3
1	A	145	THR	3
1	A	46	GLN	2
1	A	167	GLU	2
1	A	134	GLY	2
1	A	154	ASN	2
1	A	41	PHE	2
1	A	51	GLU	2
1	A	72	ILE	2
1	A	81	ALA	2
1	A	79	PRO	2
1	A	99	GLU	2
1	A	166	HIS	2
1	A	132	ALA	1
1	A	136	VAL	1
1	A	45	VAL	1
1	A	127	ASN	1
1	A	156	LEU	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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	97/130 (75%)	60±5 (62±5%)	37±5 (38±5%)	1	7
All	All	2910/3900 (75%)	1813 (62%)	1097 (38%)	1	7

All 91 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	61	LYS	30
1	A	65	ASP	27
1	A	68	LEU	23
1	A	186	CYS	23
1	A	139	ILE	23
1	A	78	ARG	22
1	A	153	LEU	21
1	A	83	LEU	21
1	A	155	ILE	21
1	A	47	LEU	20
1	A	90	LYS	20
1	A	167	GLU	19
1	A	183	ARG	19
1	A	50	ARG	19
1	A	147	LEU	19
1	A	86	HIS	19
1	A	125	LEU	18
1	A	57	PHE	18
1	A	156	LEU	18
1	A	184	ILE	17
1	A	133	ASP	17
1	A	60	ILE	17
1	A	135	LYS	16
1	A	46	GLN	16
1	A	88	TYR	16
1	A	140	MET	16
1	A	73	SER	15
1	A	62	GLU	15
1	A	49	ASN	15
1	A	146	SER	14
1	A	152	LYS	14
1	A	77	LEU	14
1	A	136	VAL	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	70	ILE	14
1	A	124	ASP	14
1	A	130	VAL	13
1	A	76	SER	13
1	A	69	ASP	13
1	A	170	ASP	13
1	A	71	HIS	13
1	A	105	PHE	13
1	A	97	ASP	12
1	A	190	LEU	12
1	A	44	HIS	12
1	A	159	ASP	12
1	A	100	SER	12
1	A	161	SER	12
1	A	64	ASP	12
1	A	129	GLU	11
1	A	158	GLU	11
1	A	128	LEU	11
1	A	75	ASN	10
1	A	53	LYS	10
1	A	157	ASP	10
1	A	85	PHE	10
1	A	137	ASP	10
1	A	98	PHE	10
1	A	138	VAL	9
1	A	87	ILE	9
1	A	92	SER	9
1	A	168	GLN	9
1	A	166	HIS	9
1	A	63	SER	9
1	A	66	GLU	8
1	A	43	HIS	8
1	A	171	ASP	8
1	A	41	PHE	8
1	A	99	GLU	8
1	A	164	ILE	8
1	A	89	GLU	7
1	A	72	ILE	7
1	A	189	LEU	7
1	A	93	CYS	7
1	A	144	ASP	6
1	A	185	VAL	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	180	SER	6
1	A	165	ILE	5
1	A	45	VAL	5
1	A	141	ASN	5
1	A	179	ASN	5
1	A	95	ARG	4
1	A	51	GLU	4
1	A	145	THR	4
1	A	55	VAL	3
1	A	82	SER	3
1	A	48	VAL	3
1	A	58	ILE	2
1	A	59	GLU	2
1	A	163	PHE	2
1	A	94	VAL	2
1	A	154	ASN	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 82% for the well-defined parts and 77% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 6073

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1608
Number of shifts mapped to atoms	1608
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	5

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	156	2.97 ± 0.11	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	136	2.94 ± 0.13	Should be applied
$^{13}\text{C}'$	153	3.19 ± 0.23	Should be applied
^{15}N	142	1.46 ± 0.34	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 82%, i.e. 1143 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1402. 17 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	589/610 (97%)	233/243 (96%)	243/248 (98%)	113/119 (95%)
Sidechain	519/695 (75%)	310/403 (77%)	202/267 (76%)	7/25 (28%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	35/97 (36%)	18/54 (33%)	17/38 (45%)	0/5 (0%)
Overall	1143/1402 (82%)	561/700 (80%)	462/553 (84%)	120/149 (81%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 77%, i.e. 1431 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1855. 20 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	741/794 (93%)	290/316 (92%)	309/324 (95%)	142/154 (92%)
Sidechain	643/926 (69%)	380/541 (70%)	253/348 (73%)	10/37 (27%)
Aromatic	47/135 (35%)	24/75 (32%)	23/52 (44%)	0/8 (0%)
Overall	1431/1855 (77%)	694/932 (74%)	585/724 (81%)	152/199 (76%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	73	SER	HB3	2.17	5.25 – 2.45	-6.0
1	A	73	SER	HB2	2.42	5.18 – 2.58	-5.6
1	A	96	PRO	CG	21.16	32.66 – 21.76	-5.6
1	A	111	GLU	HB2	0.93	3.08 – 0.98	-5.2
1	A	186	CYS	HB3	0.52	5.25 – 0.55	-5.1

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:

