



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Nov 23, 2017 – 06:44 AM EST

PDB ID : 1AUZ  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF SPOIIAA, A PHOSPHORYLATABLE COMPONENT OF THE SYSTEM THAT REGULATES TRANSCRIPTION FACTOR SIGMA-F OF BACILLUS SUBTILIS, NMR, 24 STRUCTURES  
Authors : Kovacs, H.; Comfort, D.; Lord, M.; Campbell, I.D.; Yudkin, M.D.  
Deposited on : unknown

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20030345  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20030345

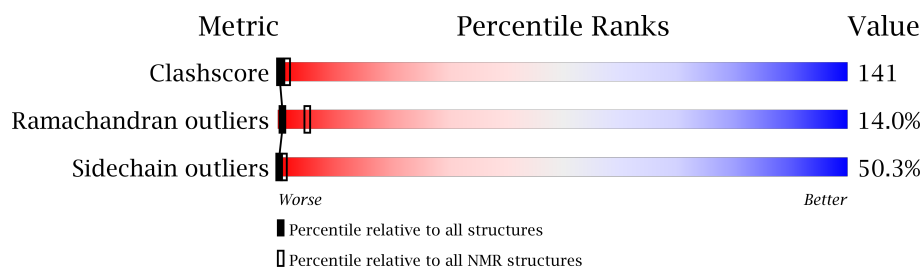
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*


The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

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  $\geq 3$ , 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	116	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 24 models. Model 13 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:2-A:69, A:75-A:115 (109)	0.34	13

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 7 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1693 atoms, of which 795 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SPOIIAA.

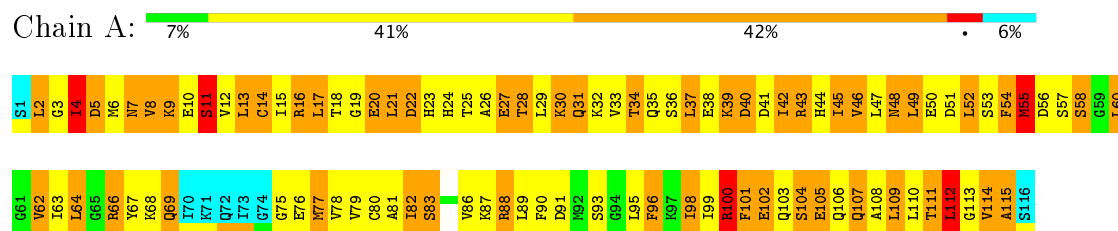
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	116	Total	C	H	N	O	S	0
			1693	567	795	154	171	6	

## 4 Residue-property plots [i](#)

### 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: SPOIIAA

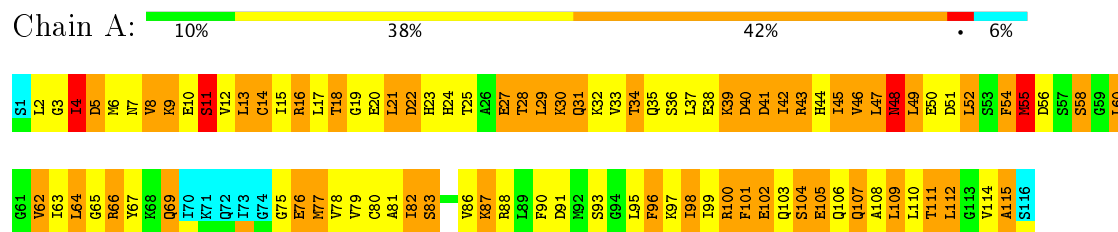


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

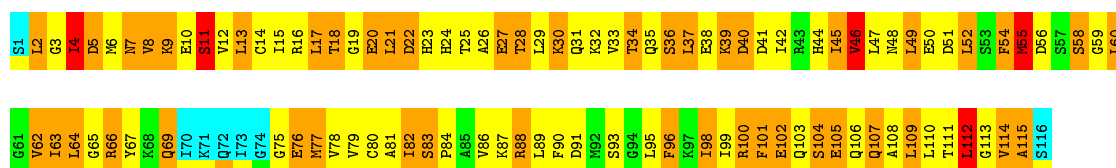
- Molecule 1: SPOIIAA



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SPOIIAA

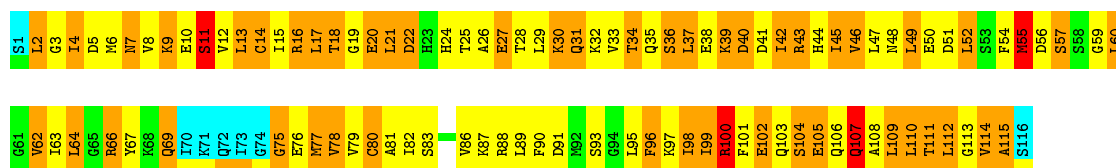




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SPOHIAA

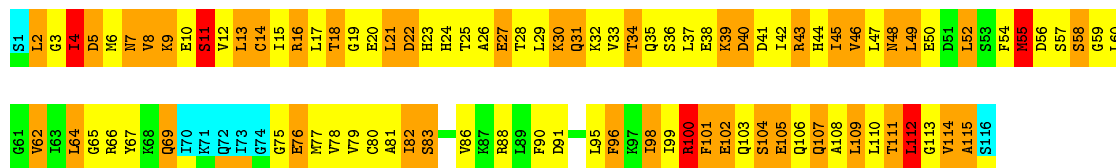
Chain A: 9% 41% 41% 6%



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SPOHIAA

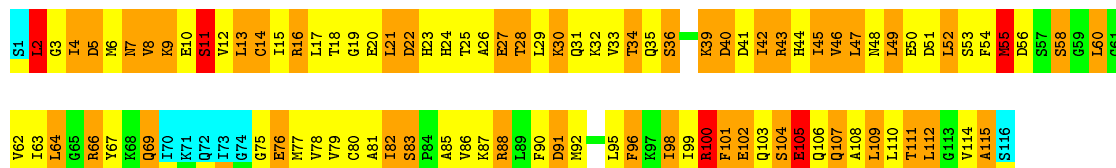
Chain A: 11% 43% 35% 6%



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: SPOHIAA

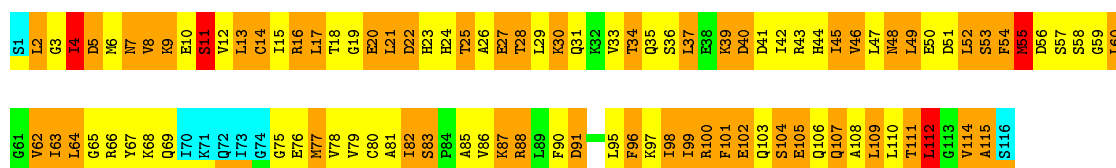
Chain A: 11% 41% 38% 6%



### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SPOHIAA

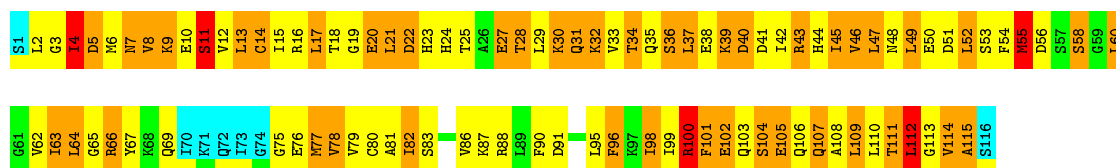
Chain A: 8% 40% 43% 6%



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SPOHIAA

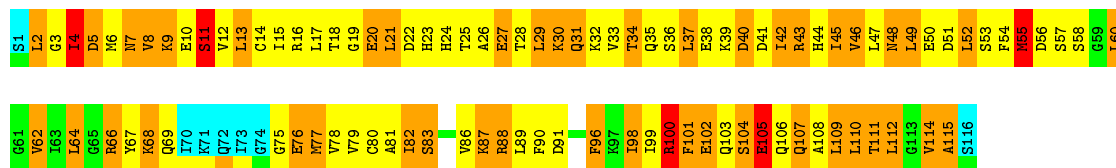
Chain A: 10% 41% 39% 6%



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SPOHIAA

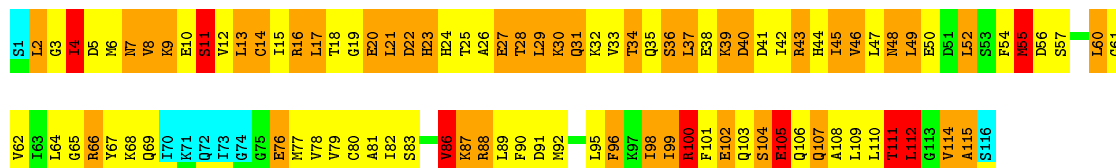
Chain A: 10% 41% 39% 6%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SPOHIAA

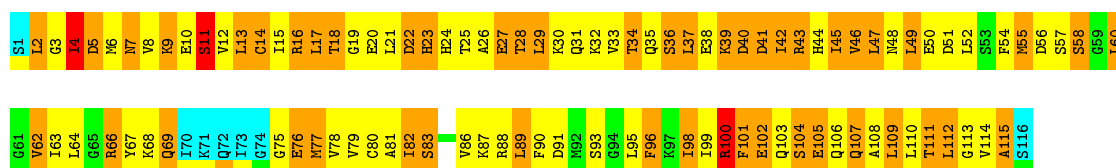
Chain A: 10% 41% 35% 7% 6%



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SPOHIAA

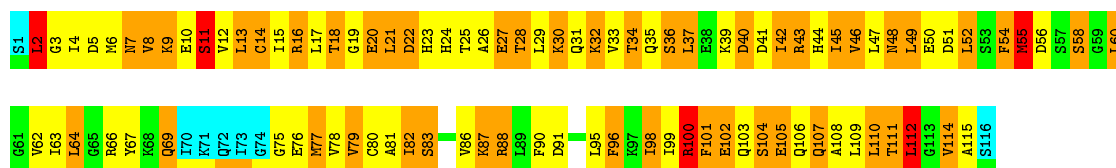
Chain A: 8% 42% 41% 6%



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SPOIIAA

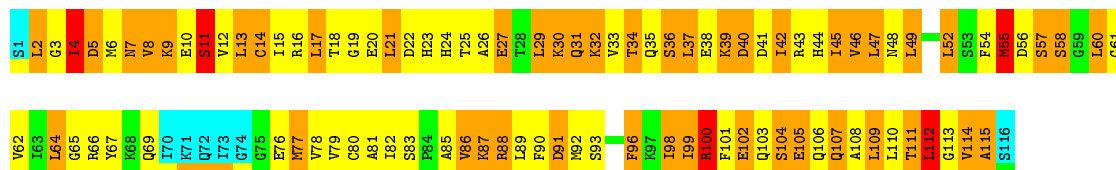
Chain A: 13% 37% 40% 6%



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SPOIIAA

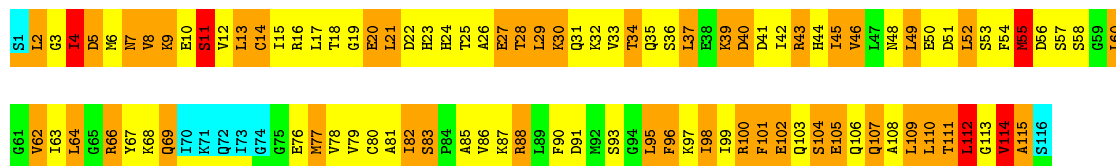
Chain A: 10% 41% 39% 6%



#### 4.2.13 Score per residue for model 13 (medoid)

- Molecule 1: SPOIIAA

Chain A: 9% 43% 38% 6%

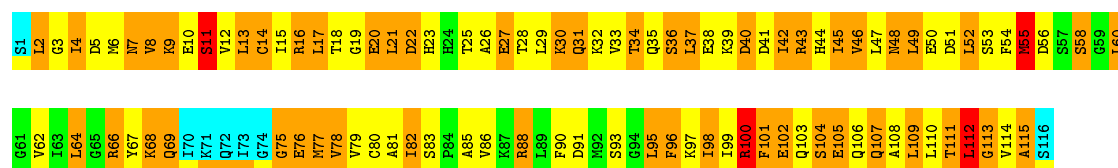


#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SPOIIAA

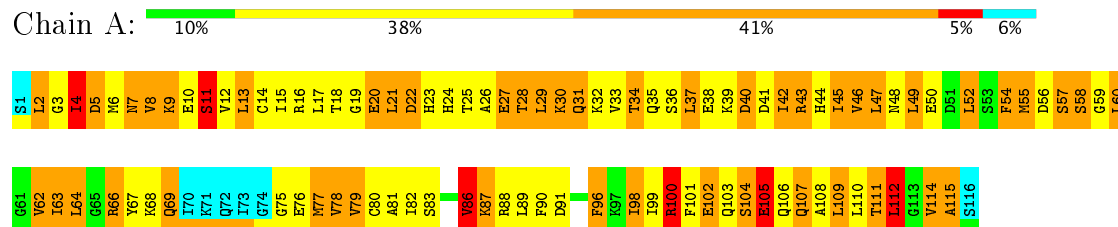
Chain A: 9% 38% 43% 6%





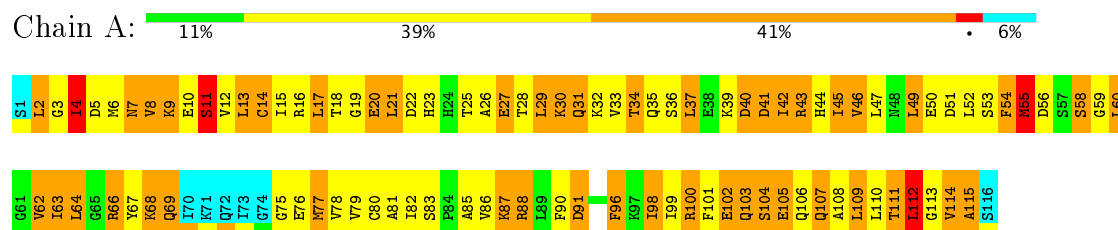
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: SPOIIAA



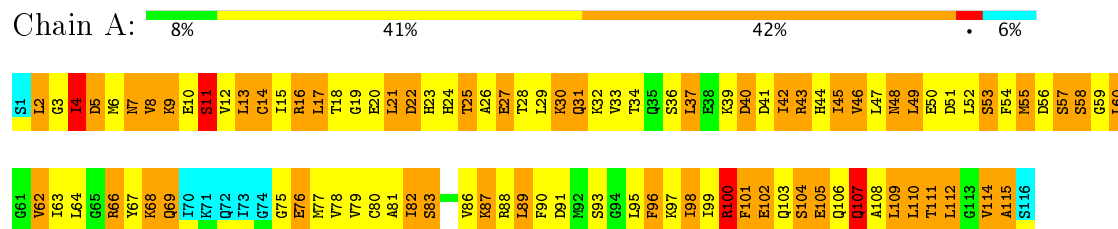
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SPOIIAA



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

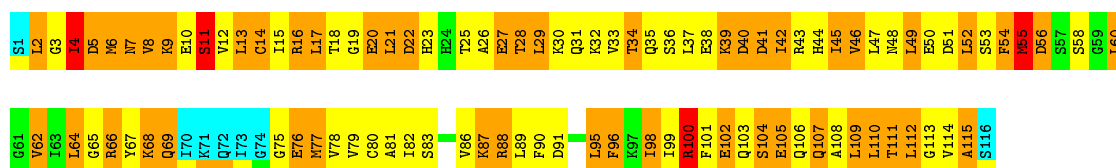
- Molecule 1: SPOIIAA



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SPOIIAA

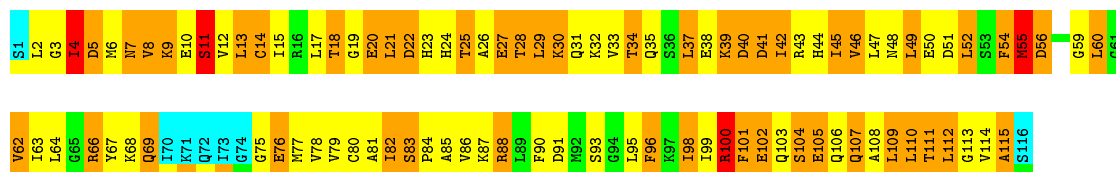




#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: SPOIIAA

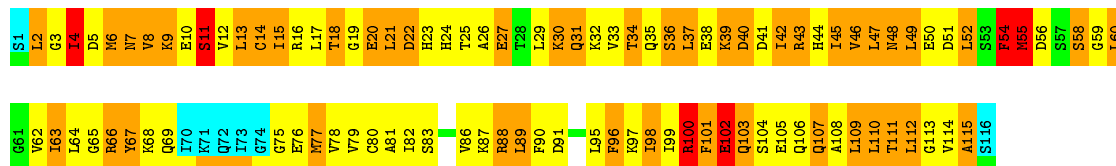
Chain A: 9% 41% 41% 6%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: SPOIIAA

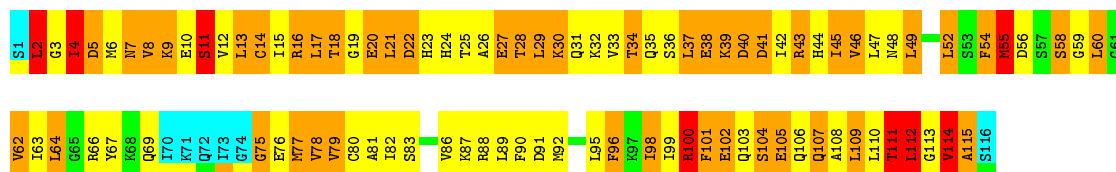
Chain A: 8% 41% 40% 5% 6%



#### 4.2.21 Score per residue for model 21

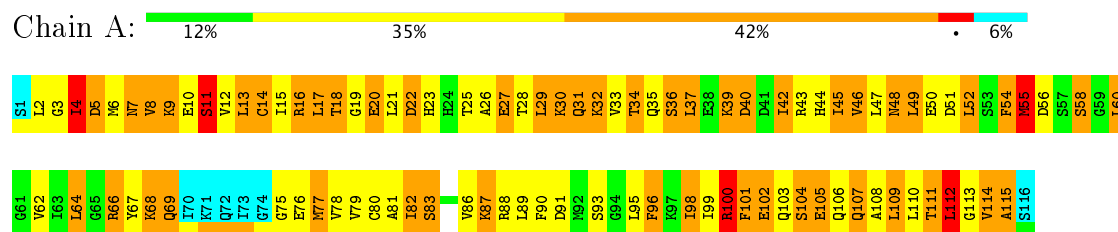
- Molecule 1: SPOIIAA

Chain A: 10% 38% 39% 7% 6%



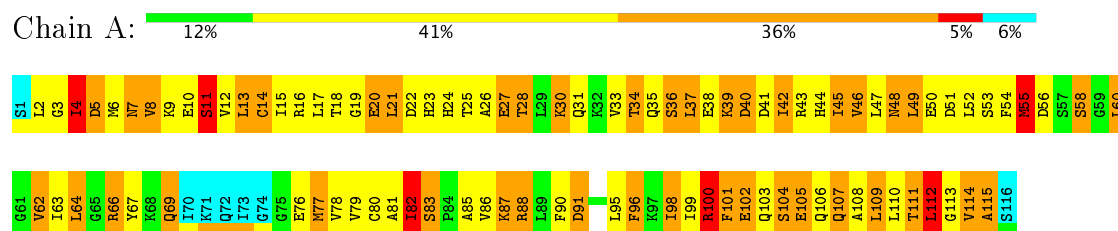
#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: SPOIIAA



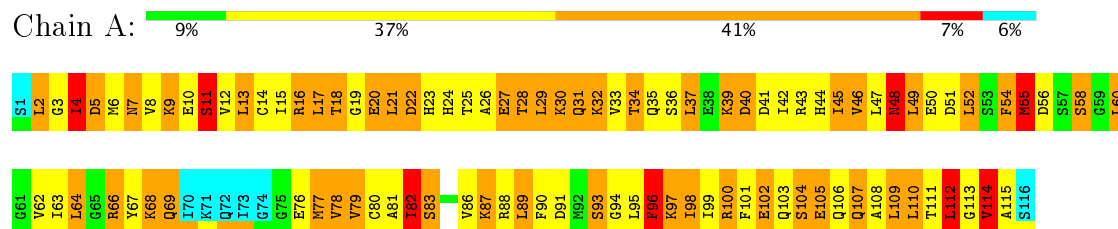
#### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: SPOHAA



#### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: SPOHAA



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING IN TORSION ANGLE SPACE*.

Of the 100 calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: *TARGET FUNCTION AND LEAST RESTRAINT VIOLATIONS*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	
DYANA	structure solution	1.3

No chemical shift data was provided. 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	848	750	880	243±13
All	All	20352	18000	21120	5834

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 141.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ILE:HD13	1:A:45:ILE:O	1.13	1.43	23	9
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:HD13	1.13	1.44	12	14
1:A:44:HIS:CD2	1:A:112:LEU:HD22	1.02	1.89	16	9
1:A:79:VAL:HG21	1:A:101:PHE:CE2	1.01	1.91	20	1
1:A:95:LEU:O	1:A:98:ILE:N	1.00	1.94	24	9
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD13	0.99	1.77	2	4
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:THR:N	0.99	1.73	9	2
1:A:111:THR:CG2	1:A:115:ALA:HB3	0.98	1.86	11	22
1:A:55:MET:O	1:A:55:MET:SD	0.97	2.21	16	7
1:A:29:LEU:O	1:A:33:VAL:HG23	0.97	1.60	19	21
1:A:55:MET:SD	1:A:55:MET:O	0.97	2.21	13	5
1:A:112:LEU:HD13	1:A:112:LEU:C	0.97	1.77	24	3
1:A:78:VAL:HG12	1:A:110:LEU:HD12	0.96	1.30	20	5
1:A:44:HIS:CE1	1:A:112:LEU:HD13	0.96	1.95	9	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:MET:HE3	1:A:55:MET:O	0.96	1.59	11	8
1:A:45:ILE:HD13	1:A:45:ILE:C	0.95	1.81	17	12
1:A:31:GLN:O	1:A:34:THR:HG22	0.95	1.60	17	20
1:A:21:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD13	0.94	1.92	8	9
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:NH1	0.94	1.75	1	1
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:HD23	0.94	1.62	20	4
1:A:13:LEU:HD13	1:A:13:LEU:N	0.94	1.75	4	7
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:HD13	0.94	1.82	2	12
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD13	0.94	1.75	3	4
1:A:103:GLN:O	1:A:105:GLU:N	0.93	2.02	21	24
1:A:22:ASP:OD1	1:A:25:THR:HG23	0.93	1.61	23	4
1:A:79:VAL:HG22	1:A:101:PHE:CE2	0.93	1.98	24	18
1:A:49:LEU:HD22	1:A:52:LEU:CD2	0.93	1.94	21	2
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:HD23	0.92	1.63	16	7
1:A:113:GLY:O	1:A:114:VAL:HG23	0.92	1.64	7	6
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:HD12	0.92	1.64	22	7
1:A:55:MET:SD	1:A:86:VAL:HG22	0.92	2.05	6	13
1:A:79:VAL:HG22	1:A:101:PHE:CZ	0.91	2.01	17	13
1:A:111:THR:HG22	1:A:115:ALA:HB3	0.91	1.42	24	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:55:MET:SD	0.90	2.06	12	3
1:A:55:MET:CE	1:A:86:VAL:HG22	0.90	1.95	19	14
1:A:33:VAL:HG11	1:A:66:ARG:CG	0.90	1.97	12	2
1:A:112:LEU:HD11	1:A:114:VAL:O	0.89	1.67	21	5
1:A:49:LEU:HD22	1:A:52:LEU:HD22	0.89	1.43	21	6
1:A:79:VAL:HG13	1:A:101:PHE:CD2	0.89	2.02	1	20
1:A:3:GLY:N	1:A:18:THR:O	0.89	2.05	21	24
1:A:44:HIS:CE1	1:A:112:LEU:HD22	0.89	2.01	17	9
1:A:13:LEU:HD22	1:A:44:HIS:O	0.89	1.68	4	11
1:A:12:VAL:CG2	1:A:46:VAL:HG23	0.88	1.98	12	24
1:A:45:ILE:HD12	1:A:76:GLU:O	0.88	1.68	11	10
1:A:44:HIS:CG	1:A:112:LEU:HD22	0.88	2.02	6	15
1:A:12:VAL:HG21	1:A:46:VAL:HG23	0.88	1.46	12	24
1:A:95:LEU:O	1:A:97:LYS:N	0.88	2.07	24	1
1:A:34:THR:HG23	1:A:35:GLN:NE2	0.88	1.83	18	4
1:A:55:MET:HE3	1:A:55:MET:HA	0.87	1.43	10	2
1:A:26:ALA:O	1:A:62:VAL:HG21	0.87	1.69	6	6
1:A:33:VAL:HG22	1:A:66:ARG:CD	0.87	1.99	21	3
1:A:64:LEU:HD12	1:A:99:ILE:HD11	0.87	1.47	4	6
1:A:17:LEU:HD23	1:A:17:LEU:O	0.87	1.68	14	2
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:HD11	0.86	2.10	15	5
1:A:55:MET:HA	1:A:55:MET:HE3	0.86	1.44	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LEU:O	1:A:81:ALA:HB1	0.86	1.69	10	22
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:HD11	0.86	1.70	7	10
1:A:7:ASN:O	1:A:13:LEU:HA	0.86	1.70	9	22
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:HA	0.86	1.44	20	21
1:A:2:LEU:HD12	1:A:25:THR:HB	0.85	1.48	7	4
1:A:15:ILE:HG22	1:A:17:LEU:HD21	0.85	1.48	10	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:O	0.85	1.72	7	1
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:HD22	0.84	1.87	10	7
1:A:64:LEU:HD22	1:A:99:ILE:HD11	0.84	1.45	13	4
1:A:2:LEU:HD13	1:A:20:GLU:O	0.84	1.72	15	13
1:A:107:GLN:HA	1:A:110:LEU:HD12	0.84	1.50	9	4
1:A:54:PHE:O	1:A:55:MET:HE3	0.84	1.73	19	15
1:A:46:VAL:HG22	1:A:110:LEU:O	0.83	1.73	14	20
1:A:33:VAL:HG12	1:A:37:LEU:HD23	0.83	1.48	12	7
1:A:29:LEU:HA	1:A:32:LYS:CG	0.83	2.04	22	1
1:A:33:VAL:HG11	1:A:66:ARG:CD	0.83	2.04	17	1
1:A:104:SER:O	1:A:107:GLN:N	0.83	2.12	19	22
1:A:33:VAL:HG12	1:A:37:LEU:CD2	0.83	2.04	12	8
1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:VAL:CG2	0.82	2.03	17	1
1:A:55:MET:SD	1:A:86:VAL:HG13	0.82	2.14	22	7
1:A:64:LEU:HD12	1:A:99:ILE:CD1	0.82	2.04	12	4
1:A:111:THR:HG23	1:A:115:ALA:HB3	0.82	1.48	16	8
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:HD21	0.82	1.73	12	9
1:A:98:ILE:HG22	1:A:99:ILE:HD12	0.82	1.49	7	4
1:A:23:HIS:NE2	1:A:24:HIS:CD2	0.82	2.48	5	15
1:A:78:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD12	0.82	1.48	7	1
1:A:114:VAL:O	1:A:114:VAL:HG12	0.82	1.73	7	8
1:A:114:VAL:HG13	1:A:114:VAL:O	0.82	1.73	6	1
1:A:14:CYS:O	1:A:15:ILE:HD12	0.82	1.75	24	20
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:C	0.82	1.95	5	3
1:A:114:VAL:HG12	1:A:114:VAL:O	0.82	1.74	4	11
1:A:111:THR:HG21	1:A:115:ALA:HB3	0.82	1.51	17	18
1:A:60:LEU:HD21	1:A:90:PHE:CZ	0.81	2.10	14	17
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:HB3	0.81	1.74	3	23
1:A:45:ILE:HD11	1:A:78:VAL:N	0.81	1.89	21	16
1:A:22:ASP:OD2	1:A:25:THR:HG23	0.81	1.73	5	2
1:A:9:LYS:O	1:A:12:VAL:HG12	0.81	1.74	8	24
1:A:44:HIS:NE2	1:A:114:VAL:HG11	0.81	1.89	14	2
1:A:45:ILE:CG1	1:A:77:MET:HA	0.81	2.06	9	17
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:HD22	0.81	1.95	19	3
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:CB	0.81	2.05	21	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LEU:HD22	1:A:55:MET:SD	0.81	2.15	12	4
1:A:22:ASP:O	1:A:26:ALA:N	0.81	2.14	11	19
1:A:67:TYR:CG	1:A:98:ILE:O	0.80	2.34	4	19
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:CG2	0.80	2.05	21	10
1:A:45:ILE:HD11	1:A:78:VAL:H	0.80	1.37	2	11
1:A:52:LEU:HD12	1:A:86:VAL:CG2	0.80	2.07	2	3
1:A:52:LEU:HD21	1:A:55:MET:CB	0.80	2.07	17	11
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:CD1	0.79	2.51	2	2
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:ILE:CG2	0.79	2.08	13	3
1:A:17:LEU:HD11	1:A:29:LEU:HD13	0.79	1.54	4	1
1:A:2:LEU:C	1:A:2:LEU:HD23	0.79	1.98	21	3
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:HD22	0.79	2.18	22	2
1:A:21:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HD13	0.79	1.53	8	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:CA	0.79	2.08	11	4
1:A:12:VAL:HG11	1:A:111:THR:HG23	0.79	1.55	2	2
1:A:11:SER:O	1:A:44:HIS:N	0.78	2.16	23	24
1:A:82:ILE:HD11	1:A:87:LYS:CB	0.78	2.08	9	6
1:A:13:LEU:HD11	1:A:43:ARG:HB3	0.78	1.56	4	5
1:A:17:LEU:CD1	1:A:49:LEU:HD21	0.78	2.08	11	2
1:A:112:LEU:CD1	1:A:112:LEU:C	0.78	2.52	24	5
1:A:33:VAL:HG22	1:A:66:ARG:HG3	0.78	1.55	3	8
1:A:78:VAL:CG1	1:A:110:LEU:HD12	0.78	2.08	7	3
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:HD22	0.78	1.98	9	2
1:A:21:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HD13	0.78	1.55	6	2
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:ILE:HG21	0.78	1.53	18	3
1:A:33:VAL:HG11	1:A:66:ARG:HD3	0.78	1.56	17	1
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:CG	0.77	2.67	17	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:101:PHE:CE1	0.77	2.14	8	12
1:A:52:LEU:HD13	1:A:52:LEU:C	0.77	1.99	14	10
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD13	0.77	1.98	6	2
1:A:112:LEU:O	1:A:114:VAL:HG23	0.77	1.78	14	2
1:A:33:VAL:HG11	1:A:66:ARG:HG3	0.77	1.57	12	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:HG12	0.77	1.78	1	12
1:A:44:HIS:CE1	1:A:112:LEU:HD23	0.77	2.15	2	6
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:HD13	0.77	2.19	24	4
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:SER:CB	0.77	2.09	24	1
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:HD12	0.77	2.20	3	1
1:A:82:ILE:HG23	1:A:83:SER:N	0.77	1.95	8	14
1:A:33:VAL:HG22	1:A:66:ARG:HD3	0.77	1.57	21	1
1:A:55:MET:SD	1:A:89:LEU:HD13	0.76	2.20	20	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:HG23	0.76	1.58	5	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:HD12	0.76	1.95	14	1
1:A:46:VAL:HG12	1:A:46:VAL:O	0.76	1.80	6	12
1:A:15:ILE:HD11	1:A:32:LYS:HE2	0.76	1.58	21	4
1:A:89:LEU:O	1:A:94:GLY:N	0.75	2.19	24	1
1:A:67:TYR:CD2	1:A:98:ILE:O	0.75	2.39	12	17
1:A:55:MET:CG	1:A:55:MET:O	0.75	2.33	16	8
1:A:33:VAL:HG22	1:A:66:ARG:CG	0.75	2.10	3	4
1:A:43:ARG:C	1:A:43:ARG:CD	0.75	2.53	10	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:29:LEU:O	0.75	1.80	22	1
1:A:55:MET:O	1:A:55:MET:CG	0.75	2.34	8	9
1:A:44:HIS:CD2	1:A:112:LEU:CD2	0.75	2.70	9	7
1:A:64:LEU:HD21	1:A:95:LEU:HD23	0.75	1.58	20	3
1:A:52:LEU:HD12	1:A:86:VAL:HG21	0.75	1.56	11	4
1:A:31:GLN:O	1:A:34:THR:HG23	0.74	1.81	2	4
1:A:42:ILE:HG22	1:A:42:ILE:O	0.74	1.81	23	15
1:A:64:LEU:HD21	1:A:98:ILE:CG2	0.74	2.12	13	3
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:CD1	0.74	2.35	22	7
1:A:7:ASN:O	1:A:14:CYS:N	0.74	2.20	20	20
1:A:67:TYR:CD1	1:A:98:ILE:O	0.74	2.39	9	13
1:A:114:VAL:O	1:A:115:ALA:HB2	0.74	1.82	2	19
1:A:64:LEU:HB2	1:A:99:ILE:HD11	0.74	1.57	7	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:65:GLY:N	0.74	1.98	7	1
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD13	0.74	2.03	8	3
1:A:21:LEU:HD12	1:A:55:MET:HG3	0.74	1.58	9	2
1:A:2:LEU:HD12	1:A:25:THR:CB	0.73	2.13	21	4
1:A:17:LEU:HD13	1:A:18:THR:N	0.73	1.98	21	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:17:LEU:C	0.73	2.04	22	1
1:A:45:ILE:CD1	1:A:45:ILE:O	0.73	2.37	18	3
1:A:42:ILE:O	1:A:42:ILE:HG22	0.73	1.84	5	8
1:A:2:LEU:HD11	1:A:17:LEU:HD23	0.73	1.61	24	2
1:A:90:PHE:CB	1:A:96:PHE:CD1	0.73	2.72	9	24
1:A:55:MET:CE	1:A:55:MET:O	0.73	2.37	11	6
1:A:45:ILE:HG13	1:A:77:MET:HA	0.73	1.59	20	10
1:A:29:LEU:HD13	1:A:29:LEU:C	0.73	2.04	22	2
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:CD2	0.72	2.37	16	7
1:A:45:ILE:CD1	1:A:45:ILE:C	0.72	2.58	18	10
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:HD13	0.72	2.00	6	6
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:CD1	0.72	2.38	4	10
1:A:78:VAL:HG12	1:A:110:LEU:HD23	0.72	1.58	9	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:112:LEU:CD2	0.72	2.73	2	14
1:A:60:LEU:HD21	1:A:90:PHE:CE2	0.71	2.20	23	13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:CB	0.71	2.39	23	21
1:A:76:GLU:N	1:A:112:LEU:HD11	0.71	2.01	20	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HA	0.71	1.63	18	2
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD1	0.71	2.50	3	2
1:A:21:LEU:HD21	1:A:49:LEU:CD1	0.71	2.15	1	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:N	0.71	2.50	4	4
1:A:52:LEU:HD11	1:A:86:VAL:CG2	0.71	2.16	17	3
1:A:21:LEU:HA	1:A:25:THR:HG1	0.71	1.45	21	18
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:CD1	0.71	2.59	10	13
1:A:46:VAL:CG2	1:A:111:THR:HA	0.71	2.16	20	20
1:A:64:LEU:HD21	1:A:98:ILE:HG21	0.71	1.62	1	11
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:HE2	0.70	1.62	7	7
1:A:54:PHE:CE1	1:A:56:ASP:HB2	0.70	2.21	20	6
1:A:80:CYS:CB	1:A:110:LEU:HD11	0.70	2.16	9	1
1:A:60:LEU:CD1	1:A:90:PHE:CZ	0.70	2.75	17	1
1:A:2:LEU:HD22	1:A:25:THR:HB	0.70	1.64	15	11
1:A:52:LEU:HD11	1:A:86:VAL:HG21	0.70	1.62	17	5
1:A:33:VAL:HG12	1:A:37:LEU:HD13	0.70	1.64	14	2
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:CB	0.70	2.40	11	24
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:CE	0.70	2.75	16	1
1:A:22:ASP:CG	1:A:54:PHE:CE2	0.70	2.65	24	2
1:A:79:VAL:HG21	1:A:101:PHE:CZ	0.70	2.22	20	1
1:A:114:VAL:O	1:A:115:ALA:CB	0.69	2.40	2	19
1:A:37:LEU:HD22	1:A:69:GLN:HG2	0.69	1.62	9	1
1:A:2:LEU:HA	1:A:19:GLY:HA3	0.69	1.62	11	24
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:O	0.69	1.87	4	2
1:A:67:TYR:CD2	1:A:98:ILE:HD12	0.69	2.22	19	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:77:MET:HE3	0.69	1.63	14	1
1:A:2:LEU:HD13	1:A:25:THR:HB	0.69	1.62	17	12
1:A:79:VAL:CG2	1:A:101:PHE:CZ	0.69	2.76	20	3
1:A:29:LEU:HD12	1:A:62:VAL:HG13	0.69	1.63	16	4
1:A:17:LEU:O	1:A:17:LEU:HD22	0.69	1.88	7	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:66:ARG:HD3	0.69	1.63	15	2
1:A:68:LYS:CD	1:A:98:ILE:HD11	0.69	2.17	18	2
1:A:68:LYS:HD3	1:A:98:ILE:HD13	0.69	1.64	20	1
1:A:13:LEU:N	1:A:44:HIS:O	0.69	2.19	15	17
1:A:42:ILE:O	1:A:42:ILE:CG2	0.69	2.41	22	10
1:A:114:VAL:CG1	1:A:114:VAL:O	0.69	2.41	4	8
1:A:114:VAL:O	1:A:114:VAL:CG1	0.69	2.41	7	9
1:A:60:LEU:HD21	1:A:90:PHE:CE1	0.69	2.23	21	4
1:A:76:GLU:CG	1:A:112:LEU:HD21	0.69	2.18	5	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HD22	1:A:17:LEU:O	0.69	1.87	22	1
1:A:9:LYS:HG3	1:A:12:VAL:HG13	0.68	1.64	2	5
1:A:20:GLU:O	1:A:25:THR:HG21	0.68	1.88	16	8
1:A:79:VAL:CG1	1:A:101:PHE:CE2	0.68	2.76	23	9
1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:O	0.68	1.88	4	2
1:A:13:LEU:HD11	1:A:43:ARG:CG	0.68	2.18	10	1
1:A:80:CYS:HB3	1:A:110:LEU:HD21	0.68	1.64	16	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:101:PHE:CD2	0.68	2.77	14	17
1:A:33:VAL:HG11	1:A:66:ARG:HG2	0.68	1.66	12	2
1:A:62:VAL:HG22	1:A:66:ARG:NH1	0.68	2.02	23	1
1:A:82:ILE:CG1	1:A:86:VAL:HG12	0.68	2.18	24	2
1:A:55:MET:CE	1:A:55:MET:HA	0.68	2.19	10	2
1:A:29:LEU:HD22	1:A:32:LYS:HB3	0.67	1.65	1	5
1:A:45:ILE:HG12	1:A:77:MET:HA	0.67	1.64	9	12
1:A:67:TYR:CE1	1:A:77:MET:SD	0.67	2.87	11	3
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:HB2	0.67	2.25	21	2
1:A:82:ILE:HD13	1:A:101:PHE:CD1	0.67	2.24	20	17
1:A:44:HIS:CG	1:A:112:LEU:HG	0.67	2.24	22	7
1:A:37:LEU:HD21	1:A:69:GLN:CG	0.67	2.19	15	2
1:A:67:TYR:CD1	1:A:98:ILE:HD12	0.67	2.25	20	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:101:PHE:CD1	0.67	2.77	23	1
1:A:10:GLU:O	1:A:11:SER:OG	0.67	2.11	24	24
1:A:55:MET:HE2	1:A:86:VAL:HG22	0.67	1.66	21	5
1:A:76:GLU:O	1:A:112:LEU:CD1	0.67	2.42	17	7
1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:HD22	0.67	2.04	10	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:66:ARG:CD	0.67	2.19	15	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:101:PHE:CE2	0.67	2.74	20	20
1:A:112:LEU:HD11	1:A:114:VAL:HB	0.67	1.66	2	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:SD	0.67	2.88	24	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:52:LEU:HA	0.67	1.67	10	10
1:A:21:LEU:HD21	1:A:59:GLY:HA3	0.67	1.64	2	3
1:A:82:ILE:HG13	1:A:86:VAL:HG12	0.67	1.65	24	2
1:A:37:LEU:HD22	1:A:69:GLN:HG3	0.67	1.66	24	3
1:A:95:LEU:HD22	1:A:98:ILE:HB	0.67	1.67	14	3
1:A:29:LEU:HD13	1:A:33:VAL:CG2	0.67	2.20	20	1
1:A:80:CYS:HB3	1:A:110:LEU:HD11	0.67	1.67	9	1
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:HD22	0.67	1.88	24	1
1:A:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:O	0.66	1.90	24	8
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:HD12	0.66	1.91	19	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:CG	0.66	2.78	22	1
1:A:106:GLN:O	1:A:110:LEU:N	0.66	2.28	13	20

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:PHE:CE2	1:A:56:ASP:HB2	0.66	2.25	9	16
1:A:15:ILE:HB	1:A:47:LEU:HD13	0.66	1.65	3	1
1:A:76:GLU:HG3	1:A:112:LEU:HD12	0.66	1.68	12	6
1:A:54:PHE:CZ	1:A:56:ASP:HB2	0.66	2.26	16	24
1:A:34:THR:HG23	1:A:35:GLN:HE21	0.66	1.49	13	4
1:A:5:ASP:N	1:A:16:ARG:O	0.66	2.28	3	11
1:A:55:MET:HA	1:A:55:MET:CE	0.66	2.21	15	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:90:PHE:CZ	0.66	2.78	14	15
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:CG	0.66	2.44	4	8
1:A:20:GLU:O	1:A:25:THR:CB	0.66	2.44	23	16
1:A:112:LEU:HD13	1:A:112:LEU:O	0.66	1.89	24	3
1:A:90:PHE:HB3	1:A:96:PHE:CD1	0.66	2.25	4	24
1:A:12:VAL:CG2	1:A:46:VAL:CG2	0.65	2.75	23	24
1:A:106:GLN:NE2	1:A:109:LEU:HD23	0.65	2.07	9	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:101:PHE:CZ	0.65	2.80	11	6
1:A:13:LEU:HD12	1:A:44:HIS:O	0.65	1.91	21	13
1:A:49:LEU:HD21	1:A:52:LEU:HD23	0.65	1.67	3	2
1:A:33:VAL:HG22	1:A:66:ARG:HD2	0.65	1.69	7	2
1:A:17:LEU:HD11	1:A:29:LEU:HD22	0.65	1.68	13	1
1:A:33:VAL:O	1:A:37:LEU:N	0.65	2.28	14	12
1:A:22:ASP:OD1	1:A:54:PHE:CD2	0.65	2.50	11	2
1:A:95:LEU:O	1:A:96:PHE:C	0.65	2.35	24	1
1:A:23:HIS:HE2	1:A:24:HIS:CD2	0.65	2.08	5	7
1:A:22:ASP:OD2	1:A:54:PHE:CD2	0.65	2.49	21	9
1:A:14:CYS:C	1:A:15:ILE:HD12	0.65	2.13	14	21
1:A:64:LEU:HG	1:A:98:ILE:HD11	0.65	1.68	20	3
1:A:60:LEU:CD2	1:A:90:PHE:CE2	0.64	2.81	20	9
1:A:67:TYR:CE2	1:A:99:ILE:HA	0.64	2.27	9	9
1:A:44:HIS:CE1	1:A:112:LEU:CD1	0.64	2.77	9	5
1:A:48:ASN:HD22	1:A:48:ASN:N	0.64	1.90	1	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:81:ALA:HB3	0.64	1.69	3	1
1:A:9:LYS:C	1:A:11:SER:H	0.64	1.95	9	24
1:A:67:TYR:CE1	1:A:99:ILE:HA	0.64	2.27	23	11
1:A:3:GLY:O	1:A:17:LEU:HD23	0.64	1.93	17	4
1:A:64:LEU:HD13	1:A:64:LEU:C	0.64	2.13	7	1
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:CG	0.64	2.23	16	4
1:A:12:VAL:HG21	1:A:46:VAL:CG2	0.64	2.23	21	24
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:HB3	0.64	1.93	12	20
1:A:64:LEU:CD1	1:A:98:ILE:CG2	0.64	2.76	21	7
1:A:64:LEU:HD22	1:A:99:ILE:CD1	0.63	2.21	13	4
1:A:82:ILE:CD1	1:A:101:PHE:CE1	0.63	2.81	8	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:HB3	0.63	2.27	5	5
1:A:76:GLU:HG3	1:A:112:LEU:HD21	0.63	1.69	5	7
1:A:13:LEU:CD2	1:A:44:HIS:O	0.63	2.44	4	11
1:A:67:TYR:CE1	1:A:98:ILE:O	0.63	2.51	13	8
1:A:37:LEU:HD22	1:A:69:GLN:CG	0.63	2.23	6	2
1:A:112:LEU:HD13	1:A:114:VAL:N	0.63	2.08	7	6
1:A:46:VAL:CG1	1:A:46:VAL:O	0.63	2.45	1	12
1:A:78:VAL:CG1	1:A:110:LEU:HA	0.63	2.23	11	18
1:A:49:LEU:HD22	1:A:55:MET:SD	0.63	2.33	12	1
1:A:14:CYS:HB3	1:A:46:VAL:CG1	0.63	2.24	20	24
1:A:80:CYS:HB3	1:A:110:LEU:HD13	0.63	1.71	7	4
1:A:55:MET:CA	1:A:55:MET:HE3	0.63	2.22	10	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:110:LEU:HA	0.63	1.71	15	4
1:A:55:MET:HE3	1:A:55:MET:CA	0.63	2.22	15	1
1:A:21:LEU:O	1:A:21:LEU:HD13	0.62	1.94	9	1
1:A:43:ARG:CG	1:A:44:HIS:N	0.62	2.61	10	1
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:HD12	0.62	1.93	4	5
1:A:109:LEU:HD23	1:A:113:GLY:CA	0.62	2.24	14	12
1:A:4:ILE:HD12	1:A:5:ASP:H	0.62	1.53	11	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:HE2	0.62	2.29	16	1
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:HH12	0.62	1.51	1	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:O	0.62	1.95	7	6
1:A:45:ILE:H	1:A:45:ILE:HD12	0.62	1.54	8	7
1:A:43:ARG:HG2	1:A:44:HIS:N	0.62	2.09	10	1
1:A:6:MET:HA	1:A:14:CYS:O	0.62	1.94	23	24
1:A:112:LEU:CD1	1:A:114:VAL:N	0.62	2.62	2	6
1:A:96:PHE:CE1	1:A:101:PHE:HB2	0.62	2.29	19	11
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD23	0.62	1.71	10	5
1:A:46:VAL:HG22	1:A:110:LEU:C	0.62	2.15	9	21
1:A:56:ASP:HA	1:A:89:LEU:HD11	0.62	1.72	17	3
1:A:82:ILE:HD13	1:A:101:PHE:CZ	0.62	2.30	17	8
1:A:60:LEU:HD11	1:A:90:PHE:CZ	0.62	2.29	17	1
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:CD2	0.62	2.68	19	2
1:A:67:TYR:CE2	1:A:98:ILE:O	0.62	2.52	22	13
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:CG1	0.62	2.46	2	12
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:HD13	0.62	1.95	7	4
1:A:68:LYS:HD3	1:A:98:ILE:HD11	0.62	1.71	18	2
1:A:102:GLU:O	1:A:103:GLN:CD	0.62	2.38	20	1
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:SD	0.61	2.93	16	2
1:A:106:GLN:O	1:A:109:LEU:N	0.61	2.33	16	21
1:A:49:LEU:HD13	1:A:55:MET:SD	0.61	2.35	3	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LEU:HD21	1:A:52:LEU:HB2	0.61	1.72	17	9
1:A:31:GLN:O	1:A:34:THR:CG2	0.61	2.47	10	20
1:A:30:LYS:CD	1:A:66:ARG:HH21	0.61	2.07	12	1
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:HG3	0.61	2.31	6	5
1:A:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:H	0.61	1.56	9	6
1:A:20:GLU:O	1:A:25:THR:OG1	0.61	2.19	22	22
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:CD1	0.61	2.48	6	7
1:A:22:ASP:OD1	1:A:25:THR:N	0.61	2.29	12	2
1:A:63:ILE:HG23	1:A:66:ARG:NH2	0.61	2.10	19	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:SER:HB3	0.61	1.70	24	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HD13	0.61	1.73	1	5
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:CD1	0.61	2.68	6	7
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:SD	0.61	2.94	12	2
1:A:111:THR:C	1:A:112:LEU:HD12	0.61	2.15	22	7
1:A:67:TYR:CE2	1:A:99:ILE:O	0.61	2.54	9	2
1:A:7:ASN:O	1:A:13:LEU:CA	0.60	2.48	10	5
1:A:55:MET:CA	1:A:55:MET:CE	0.60	2.79	10	2
1:A:2:LEU:HD22	1:A:25:THR:CB	0.60	2.26	13	6
1:A:66:ARG:O	1:A:69:GLN:N	0.60	2.33	16	10
1:A:52:LEU:CD1	1:A:52:LEU:C	0.60	2.69	8	8
1:A:114:VAL:HG12	1:A:115:ALA:H	0.60	1.56	16	3
1:A:46:VAL:HG22	1:A:110:LEU:HG	0.60	1.73	24	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:43:ARG:HB3	0.60	2.26	12	4
1:A:20:GLU:OE2	1:A:54:PHE:CG	0.60	2.54	1	1
1:A:2:LEU:HD11	1:A:17:LEU:CD1	0.60	2.26	3	1
1:A:52:LEU:HD13	1:A:53:SER:N	0.60	2.10	8	9
1:A:67:TYR:CG	1:A:77:MET:HG3	0.60	2.31	6	5
1:A:42:ILE:CG2	1:A:42:ILE:O	0.60	2.50	11	12
1:A:82:ILE:HB	1:A:101:PHE:CE1	0.60	2.32	13	18
1:A:78:VAL:CG1	1:A:106:GLN:CD	0.60	2.70	22	9
1:A:98:ILE:CG2	1:A:99:ILE:HD12	0.60	2.25	3	3
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:CD	0.60	2.50	7	7
1:A:29:LEU:HD21	1:A:66:ARG:HD2	0.60	1.72	1	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:21:LEU:C	0.60	2.68	5	1
1:A:52:LEU:CD2	1:A:55:MET:CB	0.60	2.80	13	11
1:A:44:HIS:NE2	1:A:114:VAL:CG1	0.60	2.64	14	1
1:A:67:TYR:CE1	1:A:77:MET:CG	0.60	2.85	22	2
1:A:60:LEU:CD2	1:A:90:PHE:CE1	0.60	2.85	14	5
1:A:63:ILE:HG13	1:A:66:ARG:HH21	0.60	1.55	7	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:SER:CA	0.60	2.49	24	1
1:A:106:GLN:O	1:A:108:ALA:N	0.60	2.35	19	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:TYR:CG	1:A:98:ILE:HD12	0.60	2.32	20	3
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:HB3	0.60	2.32	10	3
1:A:15:ILE:HG22	1:A:17:LEU:CD2	0.60	2.25	10	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HD11	0.60	1.71	11	2
1:A:52:LEU:CD1	1:A:55:MET:CB	0.60	2.78	19	8
1:A:90:PHE:CB	1:A:96:PHE:CG	0.60	2.84	22	19
1:A:49:LEU:HD23	1:A:81:ALA:CB	0.60	2.26	3	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:95:LEU:CD2	0.60	2.26	19	3
1:A:67:TYR:CE1	1:A:77:MET:HG3	0.60	2.31	16	3
1:A:66:ARG:HE	1:A:66:ARG:N	0.60	1.95	18	1
1:A:23:HIS:NE2	1:A:24:HIS:NE2	0.59	2.50	2	15
1:A:79:VAL:HG13	1:A:101:PHE:CE2	0.59	2.31	9	6
1:A:3:GLY:O	1:A:4:ILE:HB	0.59	1.96	16	15
1:A:37:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HG3	0.59	1.74	15	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:79:VAL:HB	0.59	1.73	17	1
1:A:64:LEU:HA	1:A:99:ILE:HD11	0.59	1.73	17	4
1:A:35:GLN:N	1:A:35:GLN:NE2	0.59	2.50	13	3
1:A:9:LYS:CG	1:A:12:VAL:CG1	0.59	2.79	6	10
1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:VAL:HB	0.59	1.74	8	7
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CE1	0.59	2.33	20	19
1:A:23:HIS:N	1:A:58:SER:CB	0.59	2.65	16	17
1:A:99:ILE:O	1:A:100:ARG:C	0.59	2.41	20	24
1:A:9:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HG13	0.59	1.75	18	7
1:A:63:ILE:HG23	1:A:66:ARG:HH22	0.59	1.57	19	1
1:A:37:LEU:HD11	1:A:69:GLN:HG2	0.59	1.75	11	5
1:A:14:CYS:HB3	1:A:46:VAL:HG12	0.59	1.73	9	24
1:A:113:GLY:O	1:A:114:VAL:CG2	0.59	2.49	7	6
1:A:15:ILE:O	1:A:15:ILE:HG22	0.59	1.97	13	11
1:A:78:VAL:HG13	1:A:106:GLN:NE2	0.59	2.13	5	3
1:A:18:THR:HA	1:A:51:ASP:HB3	0.59	1.75	18	12
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:HG13	0.59	1.73	19	2
1:A:31:GLN:O	1:A:35:GLN:NE2	0.59	2.36	10	11
1:A:49:LEU:HD11	1:A:52:LEU:HB2	0.59	1.73	16	6
1:A:55:MET:CE	1:A:55:MET:CA	0.59	2.80	17	1
1:A:77:MET:N	1:A:77:MET:SD	0.59	2.75	18	1
1:A:33:VAL:HG12	1:A:69:GLN:HG2	0.59	1.73	19	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:SER:N	0.59	2.35	24	1
1:A:80:CYS:O	1:A:81:ALA:HB3	0.59	1.97	19	22
1:A:15:ILE:HG22	1:A:15:ILE:O	0.59	1.97	17	12
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:CD2	0.59	2.91	19	1
1:A:32:LYS:HE3	1:A:66:ARG:HH21	0.59	1.58	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG23	1:A:83:SER:H	0.59	1.57	4	10
1:A:76:GLU:OE1	1:A:78:VAL:HG23	0.59	1.98	9	1
1:A:6:MET:HG2	1:A:15:ILE:CD1	0.59	2.28	18	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:43:ARG:HE	0.59	1.58	7	3
1:A:102:GLU:CB	1:A:106:GLN:HB2	0.58	2.27	23	23
1:A:55:MET:HG2	1:A:55:MET:O	0.58	1.98	11	11
1:A:9:LYS:O	1:A:11:SER:N	0.58	2.36	9	24
1:A:49:LEU:HD11	1:A:52:LEU:CA	0.58	2.27	16	7
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:HG2	0.58	2.33	17	3
1:A:78:VAL:HG21	1:A:109:LEU:O	0.58	1.98	7	3
1:A:17:LEU:HD13	1:A:17:LEU:O	0.58	1.98	9	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:CD1	0.58	2.27	13	2
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:CG1	0.58	2.29	20	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:12:VAL:O	0.58	1.98	21	15
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:CG	0.58	2.52	18	9
1:A:78:VAL:CG1	1:A:110:LEU:CD1	0.58	2.82	7	1
1:A:52:LEU:CD1	1:A:55:MET:HB3	0.58	2.28	19	8
1:A:52:LEU:CD2	1:A:55:MET:HB2	0.58	2.29	17	10
1:A:78:VAL:HG12	1:A:110:LEU:CD1	0.58	2.19	20	1
1:A:104:SER:O	1:A:106:GLN:N	0.58	2.37	9	23
1:A:109:LEU:HD23	1:A:113:GLY:HA3	0.58	1.75	4	11
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:HD23	0.58	2.14	24	6
1:A:109:LEU:HD13	1:A:113:GLY:HA3	0.58	1.75	7	1
1:A:102:GLU:HB3	1:A:106:GLN:HB2	0.58	1.76	9	1
1:A:22:ASP:OD2	1:A:22:ASP:N	0.58	2.37	24	5
1:A:14:CYS:HA	1:A:46:VAL:HG12	0.58	1.74	21	24
1:A:79:VAL:HG12	1:A:101:PHE:CE2	0.58	2.33	23	2
1:A:21:LEU:HD11	1:A:49:LEU:HD13	0.58	1.75	22	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:44:HIS:O	0.58	2.52	11	18
1:A:52:LEU:HD12	1:A:86:VAL:HG22	0.58	1.76	2	2
1:A:35:GLN:N	1:A:35:GLN:HE21	0.58	1.96	13	2
1:A:7:ASN:HB3	1:A:9:LYS:HZ3	0.58	1.58	20	2
1:A:36:SER:HB2	1:A:66:ARG:HH21	0.58	1.59	22	1
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:HB2	0.58	1.75	21	7
1:A:82:ILE:CG2	1:A:83:SER:N	0.58	2.66	8	12
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:HG2	0.58	1.76	15	4
1:A:102:GLU:O	1:A:103:GLN:CG	0.58	2.52	20	3
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:HD23	0.58	2.19	14	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:HG22	0.58	1.73	21	2
1:A:16:ARG:CD	1:A:48:ASN:OD1	0.58	2.51	24	2
1:A:45:ILE:CD1	1:A:78:VAL:H	0.58	2.12	20	23

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:VAL:HG11	1:A:99:ILE:CG2	0.57	2.28	1	3
1:A:64:LEU:CD1	1:A:99:ILE:CD1	0.57	2.82	12	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:52:LEU:HD22	0.57	1.76	20	1
1:A:29:LEU:HA	1:A:32:LYS:HG3	0.57	1.75	22	1
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:CD	0.57	2.29	7	1
1:A:39:LYS:O	1:A:40:ASP:CB	0.57	2.52	9	9
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:HG3	0.57	1.76	5	6
1:A:88:ARG:NH1	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.67	12	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:106:GLN:OE1	0.57	1.99	17	4
1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:HD12	0.57	2.14	5	8
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:HG3	0.57	2.35	16	3
1:A:60:LEU:HD11	1:A:90:PHE:CE2	0.57	2.33	17	1
1:A:2:LEU:C	1:A:2:LEU:CD2	0.57	2.73	21	2
1:A:76:GLU:CG	1:A:112:LEU:HD11	0.57	2.29	14	2
1:A:47:LEU:CD2	1:A:47:LEU:N	0.57	2.68	5	5
1:A:76:GLU:HG2	1:A:112:LEU:HD11	0.57	1.76	20	3
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD12	0.57	1.76	19	1
1:A:79:VAL:HG13	1:A:101:PHE:HA	0.57	1.75	20	1
1:A:82:ILE:HB	1:A:101:PHE:CD1	0.57	2.34	5	12
1:A:49:LEU:O	1:A:81:ALA:CB	0.57	2.52	21	13
1:A:49:LEU:HD22	1:A:55:MET:CE	0.57	2.30	12	2
1:A:47:LEU:C	1:A:48:ASN:CG	0.57	2.63	20	2
1:A:17:LEU:HD12	1:A:49:LEU:HD21	0.57	1.75	11	1
1:A:33:VAL:HG13	1:A:66:ARG:CZ	0.57	2.29	1	1
1:A:55:MET:O	1:A:55:MET:HG2	0.57	2.00	2	3
1:A:98:ILE:CD1	1:A:98:ILE:O	0.57	2.52	4	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:52:LEU:CB	0.57	2.30	16	6
1:A:52:LEU:HD21	1:A:86:VAL:HG21	0.57	1.77	17	1
1:A:2:LEU:HD22	1:A:25:THR:HA	0.56	1.76	18	6
1:A:20:GLU:C	1:A:25:THR:HG21	0.56	2.20	8	6
1:A:46:VAL:CG2	1:A:110:LEU:O	0.56	2.52	21	17
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CZ	0.56	2.35	20	23
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:HD22	0.56	2.00	22	2
1:A:23:HIS:CD2	1:A:24:HIS:CD2	0.56	2.93	23	11
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:CD2	0.56	2.65	10	7
1:A:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:N	0.56	2.15	9	5
1:A:2:LEU:CD1	1:A:25:THR:HA	0.56	2.30	21	4
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD1	0.56	2.69	7	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:114:VAL:CG2	0.56	2.82	17	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:N	0.56	2.15	5	3
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:CD1	0.56	2.54	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:LEU:HD11	1:A:69:GLN:CG	0.56	2.30	11	3
1:A:21:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HD21	0.56	1.78	15	2
1:A:2:LEU:HD11	1:A:17:LEU:HD12	0.56	1.78	18	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:49:LEU:CD1	0.56	2.30	22	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:77:MET:CE	0.56	2.31	14	2
1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:VAL:HG23	0.56	1.75	17	1
1:A:2:LEU:HD21	1:A:17:LEU:CD1	0.56	2.30	2	2
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:HB2	0.56	2.01	10	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:CB	0.56	2.88	21	1
1:A:49:LEU:CB	1:A:52:LEU:HD23	0.56	2.31	19	3
1:A:44:HIS:ND1	1:A:112:LEU:CD1	0.56	2.69	3	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:17:LEU:HD21	0.56	2.31	17	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:98:ILE:O	0.56	2.58	13	3
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:CD2	0.56	2.49	20	1
1:A:4:ILE:HG12	1:A:17:LEU:HD21	0.56	1.78	20	5
1:A:45:ILE:HG13	1:A:76:GLU:O	0.56	2.00	18	11
1:A:96:PHE:O	1:A:100:ARG:N	0.56	2.39	24	17
1:A:23:HIS:N	1:A:58:SER:HB2	0.56	2.16	12	19
1:A:12:VAL:HG21	1:A:111:THR:HA	0.56	1.78	2	4
1:A:76:GLU:CB	1:A:112:LEU:HD11	0.56	2.30	14	3
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:HD12	0.56	2.01	11	1
1:A:67:TYR:OH	1:A:100:ARG:CB	0.55	2.54	23	18
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:CD2	0.55	2.54	23	4
1:A:78:VAL:HG12	1:A:106:GLN:NE2	0.55	2.16	18	2
1:A:15:ILE:HG23	1:A:17:LEU:HD12	0.55	1.78	24	1
1:A:21:LEU:CB	1:A:55:MET:HA	0.55	2.32	20	14
1:A:78:VAL:HG12	1:A:106:GLN:OE1	0.55	2.01	23	4
1:A:64:LEU:O	1:A:68:LYS:CD	0.55	2.55	8	3
1:A:82:ILE:HD11	1:A:87:LYS:HB2	0.55	1.78	9	2
1:A:55:MET:SD	1:A:89:LEU:HD12	0.55	2.41	21	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:114:VAL:CB	0.55	2.32	2	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:43:ARG:CB	0.55	2.31	4	5
1:A:32:LYS:HA	1:A:35:GLN:NE2	0.55	2.17	12	7
1:A:55:MET:HE2	1:A:56:ASP:O	0.55	2.02	15	3
1:A:67:TYR:CE1	1:A:99:ILE:O	0.55	2.59	15	5
1:A:78:VAL:HG13	1:A:110:LEU:CD2	0.55	2.32	15	2
1:A:22:ASP:CG	1:A:54:PHE:CD2	0.55	2.80	19	3
1:A:14:CYS:CB	1:A:46:VAL:CG1	0.55	2.85	21	24
1:A:12:VAL:HA	1:A:44:HIS:O	0.55	2.00	5	11
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:CD1	0.55	2.95	8	6
1:A:65:GLY:HA3	1:A:66:ARG:HH21	0.55	1.60	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LEU:HD22	1:A:112:LEU:O	0.55	2.01	21	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:52:LEU:HD23	0.55	1.77	21	1
1:A:10:GLU:O	1:A:11:SER:CB	0.55	2.54	8	24
1:A:12:VAL:CA	1:A:44:HIS:HB2	0.55	2.31	22	12
1:A:55:MET:O	1:A:86:VAL:HG22	0.55	2.01	15	3
1:A:4:ILE:CD1	1:A:17:LEU:HD13	0.55	2.32	10	1
1:A:29:LEU:O	1:A:33:VAL:CG2	0.55	2.54	22	3
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CD1	0.55	2.37	8	17
1:A:17:LEU:HD13	1:A:49:LEU:HG	0.55	1.76	9	1
1:A:45:ILE:CG1	1:A:78:VAL:H	0.55	2.14	20	5
1:A:45:ILE:CD1	1:A:76:GLU:O	0.55	2.55	24	6
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:CD2	0.55	2.55	6	2
1:A:82:ILE:HD11	1:A:87:LYS:HB3	0.55	1.76	21	4
1:A:48:ASN:ND2	1:A:48:ASN:O	0.55	2.40	11	2
1:A:60:LEU:HD11	1:A:94:GLY:HA3	0.55	1.77	24	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:99:ILE:C	0.55	2.80	9	8
1:A:67:TYR:CE1	1:A:77:MET:HG2	0.55	2.37	22	2
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:HG3	0.55	2.34	17	4
1:A:55:MET:CE	1:A:55:MET:C	0.55	2.76	17	2
1:A:60:LEU:CD1	1:A:90:PHE:CE2	0.55	2.90	17	1
1:A:90:PHE:HB3	1:A:96:PHE:CG	0.55	2.37	23	23
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:HA	0.55	1.78	21	5
1:A:16:ARG:NE	1:A:48:ASN:ND2	0.55	2.55	7	5
1:A:9:LYS:CG	1:A:12:VAL:HG13	0.55	2.32	6	9
1:A:64:LEU:CD2	1:A:95:LEU:HD23	0.55	2.32	19	2
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD22	0.55	2.16	1	3
1:A:21:LEU:CD1	1:A:55:MET:HA	0.55	2.32	5	4
1:A:60:LEU:HD11	1:A:90:PHE:CE1	0.55	2.37	3	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:44:HIS:O	0.55	2.02	12	5
1:A:80:CYS:HB3	1:A:110:LEU:CD2	0.55	2.32	19	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:MET:CE	0.54	2.55	20	6
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:HB3	0.54	1.79	15	5
1:A:55:MET:CE	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.85	6	9
1:A:77:MET:O	1:A:77:MET:CE	0.54	2.55	6	1
1:A:10:GLU:C	1:A:11:SER:OG	0.54	2.46	6	24
1:A:44:HIS:HD1	1:A:112:LEU:HD13	0.54	1.61	20	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD21	0.54	1.77	24	1
1:A:111:THR:HG22	1:A:112:LEU:HD12	0.54	1.78	7	4
1:A:2:LEU:HG	1:A:17:LEU:HD21	0.54	1.77	17	1
1:A:102:GLU:C	1:A:103:GLN:HG2	0.54	2.22	20	1
1:A:22:ASP:HB3	1:A:54:PHE:CE2	0.54	2.36	11	11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:VAL:HA	1:A:110:LEU:HD22	0.54	1.79	18	4
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:HB3	0.54	2.36	12	4
1:A:21:LEU:HA	1:A:25:THR:OG1	0.54	2.00	21	12
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:O	0.54	2.03	5	1
1:A:55:MET:SD	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.93	19	3
1:A:109:LEU:HD23	1:A:113:GLY:HA2	0.54	1.80	24	1
1:A:90:PHE:CB	1:A:96:PHE:CE1	0.54	2.90	20	22
1:A:44:HIS:CD2	1:A:112:LEU:HG	0.54	2.37	2	7
1:A:32:LYS:CE	1:A:66:ARG:HH21	0.54	2.16	2	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:98:ILE:HG21	0.54	1.78	3	1
1:A:67:TYR:O	1:A:77:MET:SD	0.54	2.65	16	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:SER:CB	0.54	2.56	24	1
1:A:17:LEU:O	1:A:49:LEU:HD23	0.54	2.03	24	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:THR:N	0.54	2.18	3	1
1:A:20:GLU:O	1:A:25:THR:CG2	0.54	2.55	16	5
1:A:80:CYS:HA	1:A:101:PHE:CE1	0.54	2.38	19	3
1:A:55:MET:CE	1:A:56:ASP:N	0.54	2.71	17	1
1:A:12:VAL:HG22	1:A:46:VAL:HG23	0.54	1.78	14	14
1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:N	0.54	2.01	5	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:55:MET:HA	0.54	1.79	5	3
1:A:29:LEU:HD22	1:A:32:LYS:HG3	0.54	1.79	22	1
1:A:32:LYS:CB	1:A:32:LYS:NZ	0.54	2.71	22	1
1:A:45:ILE:O	1:A:46:VAL:HG23	0.53	2.03	22	24
1:A:26:ALA:HB1	1:A:62:VAL:HG11	0.53	1.80	17	6
1:A:12:VAL:HA	1:A:44:HIS:HB2	0.53	1.80	22	10
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:ND2	0.53	2.57	9	3
1:A:80:CYS:SG	1:A:110:LEU:HD21	0.53	2.43	19	1
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:HD13	0.53	2.24	17	2
1:A:29:LEU:HD11	1:A:32:LYS:HE2	0.53	1.78	24	1
1:A:6:MET:CG	1:A:15:ILE:CD1	0.53	2.87	3	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:CB	0.53	2.32	11	1
1:A:76:GLU:O	1:A:112:LEU:HD12	0.53	2.03	17	8
1:A:49:LEU:H	1:A:81:ALA:HB3	0.53	1.63	22	8
1:A:2:LEU:HD21	1:A:17:LEU:HD22	0.53	1.78	20	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD11	0.53	1.80	3	3
1:A:22:ASP:N	1:A:25:THR:OG1	0.53	2.39	11	4
1:A:9:LYS:CB	1:A:12:VAL:HG12	0.53	2.34	21	9
1:A:17:LEU:CD2	1:A:17:LEU:C	0.53	2.73	9	2
1:A:78:VAL:CG1	1:A:106:GLN:OE1	0.53	2.57	23	5
1:A:3:GLY:O	1:A:17:LEU:HD22	0.53	2.03	21	1
1:A:37:LEU:O	1:A:38:GLU:CG	0.53	2.57	2	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:O	1:A:9:LYS:CD	0.53	2.57	4	13
1:A:45:ILE:HD11	1:A:78:VAL:HB	0.53	1.79	21	3
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CG	0.53	2.39	5	16
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:HG3	0.53	2.38	13	3
1:A:32:LYS:O	1:A:35:GLN:HG3	0.53	2.04	24	6
1:A:57:SER:CB	1:A:89:LEU:HD22	0.53	2.33	3	1
1:A:20:GLU:CB	1:A:25:THR:HG21	0.53	2.34	7	3
1:A:77:MET:SD	1:A:77:MET:C	0.53	2.88	11	3
1:A:13:LEU:HD22	1:A:45:ILE:HA	0.53	1.81	24	5
1:A:22:ASP:CG	1:A:25:THR:HG23	0.53	2.25	12	2
1:A:55:MET:SD	1:A:86:VAL:CG1	0.53	2.95	19	3
1:A:110:LEU:C	1:A:112:LEU:H	0.52	2.07	9	21
1:A:21:LEU:CB	1:A:55:MET:CE	0.52	2.87	4	2
1:A:31:GLN:C	1:A:35:GLN:NE2	0.52	2.63	23	3
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:HG3	0.52	2.03	21	13
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:CG1	0.52	2.57	19	3
1:A:78:VAL:CG1	1:A:106:GLN:NE2	0.52	2.73	18	2
1:A:67:TYR:OH	1:A:77:MET:HE2	0.52	2.04	22	1
1:A:27:GLU:O	1:A:30:LYS:CB	0.52	2.57	7	13
1:A:112:LEU:HD23	1:A:112:LEU:O	0.52	2.04	10	4
1:A:14:CYS:HA	1:A:46:VAL:CG1	0.52	2.35	21	18
1:A:109:LEU:HD22	1:A:113:GLY:HA2	0.52	1.81	12	1
1:A:9:LYS:C	1:A:11:SER:N	0.52	2.63	9	24
1:A:3:GLY:O	1:A:17:LEU:CD1	0.52	2.58	18	3
1:A:77:MET:O	1:A:77:MET:HG2	0.52	2.04	22	3
1:A:33:VAL:CG2	1:A:66:ARG:CD	0.52	2.88	18	1
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.52	2.40	10	22
1:A:28:THR:O	1:A:31:GLN:CG	0.52	2.57	18	10
1:A:52:LEU:CD2	1:A:55:MET:SD	0.52	2.97	3	4
1:A:17:LEU:CD2	1:A:17:LEU:N	0.52	2.73	10	1
1:A:90:PHE:HB2	1:A:96:PHE:CD2	0.52	2.40	5	17
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:CE	0.52	2.34	23	8
1:A:4:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD13	0.52	1.79	10	1
1:A:19:GLY:CA	1:A:51:ASP:OD1	0.52	2.58	2	4
1:A:54:PHE:CD1	1:A:54:PHE:C	0.52	2.83	18	4
1:A:76:GLU:HB2	1:A:112:LEU:HD21	0.52	1.82	14	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:98:ILE:HG21	0.52	2.33	13	5
1:A:43:ARG:C	1:A:43:ARG:HD2	0.52	2.24	10	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:114:VAL:HG21	0.51	2.35	17	1
1:A:79:VAL:HB	1:A:101:PHE:CD2	0.51	2.40	19	2
1:A:13:LEU:CD2	1:A:45:ILE:HA	0.51	2.34	24	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:HA	0.51	1.81	22	4
1:A:112:LEU:HD11	1:A:114:VAL:C	0.51	2.24	22	5
1:A:52:LEU:HD21	1:A:55:MET:HB3	0.51	1.77	17	8
1:A:20:GLU:HB3	1:A:25:THR:HG21	0.51	1.82	7	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:32:LYS:HB3	0.51	1.81	21	6
1:A:37:LEU:CD1	1:A:69:GLN:CG	0.51	2.89	20	2
1:A:87:LYS:HG3	1:A:96:PHE:CZ	0.51	2.39	24	1
1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLY:N	0.51	2.20	2	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:13:LEU:H	0.51	1.60	4	7
1:A:9:LYS:CG	1:A:14:CYS:SG	0.51	2.99	15	3
1:A:33:VAL:HG12	1:A:37:LEU:CD1	0.51	2.36	14	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:110:LEU:HA	0.51	2.36	24	4
1:A:4:ILE:CD1	1:A:17:LEU:HD22	0.51	2.35	16	3
1:A:67:TYR:CD2	1:A:77:MET:CE	0.51	2.93	16	1
1:A:55:MET:HE2	1:A:55:MET:C	0.51	2.26	17	1
1:A:27:GLU:O	1:A:30:LYS:N	0.51	2.43	18	23
1:A:20:GLU:CD	1:A:54:PHE:CB	0.51	2.79	12	2
1:A:77:MET:CG	1:A:77:MET:O	0.51	2.59	6	1
1:A:67:TYR:OH	1:A:77:MET:CE	0.51	2.58	22	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:98:ILE:HG23	0.51	2.36	10	3
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:C	0.51	2.26	12	2
1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:OD2	0.51	2.43	22	3
1:A:87:LYS:CE	1:A:88:ARG:N	0.51	2.74	11	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:HG2	0.51	2.41	22	1
1:A:75:GLY:O	1:A:76:GLU:CD	0.51	2.48	2	16
1:A:57:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD22	0.51	1.81	3	1
1:A:80:CYS:C	1:A:101:PHE:CE1	0.51	2.84	24	1
1:A:17:LEU:O	1:A:49:LEU:CD2	0.51	2.59	1	2
1:A:12:VAL:C	1:A:13:LEU:HD13	0.51	2.24	3	6
1:A:80:CYS:CB	1:A:103:GLN:HB2	0.51	2.35	20	1
1:A:28:THR:O	1:A:32:LYS:HD3	0.51	2.06	22	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:99:ILE:CG1	0.51	2.36	24	3
1:A:22:ASP:CB	1:A:54:PHE:CE2	0.51	2.94	11	2
1:A:79:VAL:O	1:A:106:GLN:NE2	0.51	2.44	12	2
1:A:55:MET:CE	1:A:56:ASP:O	0.51	2.59	17	1
1:A:55:MET:O	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.59	21	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:25:THR:HB	0.51	2.33	23	2
1:A:89:LEU:O	1:A:93:SER:C	0.51	2.49	24	1
1:A:55:MET:O	1:A:55:MET:CE	0.50	2.55	1	2
1:A:112:LEU:CD1	1:A:114:VAL:HB	0.50	2.36	2	1
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:HE2	0.50	1.83	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:CG	0.50	2.94	6	1
1:A:76:GLU:CD	1:A:112:LEU:HA	0.50	2.26	9	1
1:A:46:VAL:HA	1:A:110:LEU:CD2	0.50	2.36	13	1
1:A:110:LEU:C	1:A:112:LEU:N	0.50	2.63	21	24
1:A:9:LYS:CE	1:A:14:CYS:SG	0.50	2.99	12	4
1:A:21:LEU:O	1:A:56:ASP:N	0.50	2.37	8	2
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:CD2	0.50	2.79	7	2
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:HB3	0.50	2.41	23	2
1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:VAL:O	0.50	2.07	15	4
1:A:34:THR:CG2	1:A:35:GLN:NE2	0.50	2.68	18	1
1:A:62:VAL:O	1:A:66:ARG:NE	0.50	2.45	23	2
1:A:88:ARG:NE	1:A:89:LEU:HD12	0.50	2.21	20	1
1:A:48:ASN:C	1:A:48:ASN:ND2	0.50	2.64	22	1
1:A:22:ASP:C	1:A:24:HIS:N	0.50	2.65	9	14
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:HE2	0.50	1.82	3	1
1:A:12:VAL:HG22	1:A:46:VAL:CG2	0.50	2.36	10	21
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:C	0.50	2.27	7	1
1:A:80:CYS:CA	1:A:101:PHE:CE1	0.50	2.95	19	3
1:A:55:MET:HE2	1:A:56:ASP:N	0.50	2.21	17	1
1:A:102:GLU:O	1:A:103:GLN:HG2	0.50	2.04	20	1
1:A:12:VAL:HG11	1:A:111:THR:CG2	0.50	2.31	2	1
1:A:67:TYR:OH	1:A:100:ARG:CG	0.50	2.59	24	2
1:A:13:LEU:HD12	1:A:43:ARG:HD2	0.50	1.83	12	3
1:A:29:LEU:HA	1:A:32:LYS:CD	0.50	2.37	22	1
1:A:14:CYS:CB	1:A:46:VAL:HG12	0.50	2.36	23	24
1:A:82:ILE:HG21	1:A:103:GLN:HG2	0.50	1.83	3	2
1:A:90:PHE:CD2	1:A:96:PHE:CE1	0.50	2.99	14	3
1:A:5:ASP:CB	1:A:16:ARG:O	0.50	2.60	11	3
1:A:77:MET:SD	1:A:78:VAL:N	0.50	2.84	11	5
1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	0.50	1.59	14	4
1:A:39:LYS:O	1:A:40:ASP:CG	0.50	2.50	10	24
1:A:52:LEU:HG	1:A:86:VAL:HG11	0.50	1.83	2	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:78:VAL:CG2	0.50	2.60	9	1
1:A:67:TYR:OH	1:A:99:ILE:C	0.50	2.50	22	8
1:A:80:CYS:N	1:A:110:LEU:HD21	0.50	2.22	9	1
1:A:82:ILE:CG1	1:A:87:LYS:HB2	0.50	2.37	19	2
1:A:3:GLY:O	1:A:17:LEU:CD2	0.50	2.59	17	1
1:A:79:VAL:HG11	1:A:99:ILE:HG23	0.50	1.82	24	1
1:A:106:GLN:C	1:A:108:ALA:N	0.50	2.65	19	24
1:A:64:LEU:HG	1:A:98:ILE:CG2	0.50	2.37	12	5
1:A:67:TYR:CZ	1:A:98:ILE:C	0.50	2.85	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:HIS:CB	1:A:112:LEU:HD22	0.50	2.36	6	1
1:A:22:ASP:N	1:A:22:ASP:OD1	0.50	2.45	11	3
1:A:15:ILE:HD11	1:A:32:LYS:CE	0.50	2.35	21	1
1:A:32:LYS:HZ3	1:A:32:LYS:HB3	0.50	1.66	22	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD22	0.49	1.83	2	6
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:O	0.49	2.60	12	1
1:A:82:ILE:HG13	1:A:86:VAL:CG1	0.49	2.35	24	1
1:A:87:LYS:HG3	1:A:96:PHE:CE2	0.49	2.41	24	1
1:A:104:SER:O	1:A:105:GLU:C	0.49	2.51	9	22
1:A:29:LEU:CD1	1:A:66:ARG:HH21	0.49	2.19	3	1
1:A:45:ILE:CG1	1:A:76:GLU:O	0.49	2.60	24	2
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:HG2	0.49	2.42	8	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD23	0.49	1.83	14	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:33:VAL:CG2	0.49	2.89	20	1
1:A:106:GLN:O	1:A:107:GLN:C	0.49	2.50	24	23
1:A:106:GLN:CG	1:A:106:GLN:O	0.49	2.60	20	8
1:A:37:LEU:CD2	1:A:69:GLN:CG	0.49	2.91	15	1
1:A:111:THR:CG2	1:A:114:VAL:O	0.49	2.61	16	1
1:A:6:MET:HG3	1:A:15:ILE:HD11	0.49	1.83	20	1
1:A:36:SER:HA	1:A:43:ARG:HH21	0.49	1.66	10	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HG2	0.49	1.84	15	2
1:A:77:MET:O	1:A:77:MET:CG	0.49	2.61	22	1
1:A:60:LEU:HD11	1:A:90:PHE:CD1	0.49	2.43	14	1
1:A:39:LYS:HG2	1:A:40:ASP:N	0.49	2.22	21	2
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:CE	0.49	2.95	23	1
1:A:60:LEU:CD1	1:A:90:PHE:CE1	0.49	2.96	14	2
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:HD22	0.49	2.08	15	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:98:ILE:CG2	0.49	2.91	4	3
1:A:2:LEU:CD2	1:A:25:THR:HB	0.49	2.38	13	3
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD22	0.49	2.08	15	2
1:A:114:VAL:HG12	1:A:115:ALA:N	0.49	2.22	16	1
1:A:104:SER:C	1:A:106:GLN:N	0.49	2.67	9	23
1:A:31:GLN:O	1:A:35:GLN:HG2	0.49	2.08	2	4
1:A:44:HIS:CG	1:A:112:LEU:HD13	0.49	2.42	3	1
1:A:77:MET:C	1:A:77:MET:SD	0.49	2.92	3	1
1:A:12:VAL:CB	1:A:44:HIS:HB2	0.49	2.38	24	11
1:A:82:ILE:HD13	1:A:101:PHE:CG	0.49	2.42	23	4
1:A:37:LEU:CD1	1:A:69:GLN:CD	0.49	2.81	8	1
1:A:67:TYR:CD1	1:A:99:ILE:HD13	0.49	2.43	16	1
1:A:5:ASP:O	1:A:15:ILE:HA	0.48	2.08	4	14
1:A:22:ASP:O	1:A:24:HIS:N	0.48	2.46	9	6

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:VAL:O	1:A:115:ALA:C	0.48	2.51	16	4
1:A:52:LEU:HG	1:A:86:VAL:HG21	0.48	1.85	14	3
1:A:60:LEU:HD12	1:A:90:PHE:CZ	0.48	2.42	17	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:101:PHE:CE1	0.48	2.43	23	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:66:ARG:HH21	0.48	1.67	12	1
1:A:76:GLU:C	1:A:112:LEU:HD21	0.48	2.29	14	1
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:CE	0.48	2.38	3	2
1:A:67:TYR:CD2	1:A:99:ILE:HA	0.48	2.43	7	3
1:A:110:LEU:O	1:A:112:LEU:N	0.48	2.46	21	2
1:A:12:VAL:CG2	1:A:45:ILE:O	0.48	2.61	14	4
1:A:82:ILE:CD1	1:A:101:PHE:CG	0.48	2.97	23	1
1:A:2:LEU:HD21	1:A:17:LEU:HD11	0.48	1.85	2	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:29:LEU:O	0.48	2.08	8	2
1:A:45:ILE:HD11	1:A:76:GLU:O	0.48	2.08	24	2
1:A:106:GLN:HG3	1:A:106:GLN:O	0.48	2.08	8	7
1:A:78:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD23	0.48	1.85	15	2
1:A:56:ASP:C	1:A:89:LEU:CD1	0.48	2.82	15	1
1:A:47:LEU:O	1:A:110:LEU:HD13	0.48	2.09	14	1
1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:CZ	0.48	2.91	1	1
1:A:102:GLU:HB3	1:A:106:GLN:CB	0.48	2.39	23	19
1:A:8:VAL:C	1:A:9:LYS:HG2	0.48	2.28	23	4
1:A:22:ASP:O	1:A:26:ALA:CB	0.48	2.62	11	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:99:ILE:HG13	0.48	2.43	14	2
1:A:21:LEU:HD22	1:A:49:LEU:CD1	0.48	2.34	6	1
1:A:45:ILE:CD1	1:A:78:VAL:N	0.48	2.72	15	7
1:A:8:VAL:O	1:A:9:LYS:NZ	0.48	2.45	9	1
1:A:79:VAL:HG13	1:A:101:PHE:CG	0.48	2.42	14	2
1:A:29:LEU:HD13	1:A:33:VAL:HG23	0.48	1.83	20	1
1:A:88:ARG:HD3	1:A:89:LEU:N	0.48	2.24	20	5
1:A:29:LEU:HD11	1:A:66:ARG:HH21	0.48	1.69	3	1
1:A:85:ALA:O	1:A:88:ARG:NE	0.48	2.47	5	6
1:A:22:ASP:OD1	1:A:24:HIS:HB2	0.48	2.08	23	4
1:A:55:MET:HE2	1:A:86:VAL:CG2	0.48	2.39	6	2
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLN:NE2	0.48	2.47	9	2
1:A:7:ASN:CB	1:A:9:LYS:HZ3	0.48	2.21	20	1
1:A:54:PHE:CD2	1:A:55:MET:N	0.47	2.82	24	7
1:A:9:LYS:HB2	1:A:12:VAL:HG12	0.47	1.85	23	17
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:CE	0.47	2.39	9	4
1:A:102:GLU:CB	1:A:106:GLN:CB	0.47	2.92	23	6
1:A:2:LEU:HD21	1:A:17:LEU:HD12	0.47	1.85	6	1
1:A:47:LEU:O	1:A:80:CYS:SG	0.47	2.72	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ASP:OD1	1:A:58:SER:N	0.47	2.47	6	2
1:A:49:LEU:HD13	1:A:52:LEU:CD2	0.47	2.39	11	2
1:A:33:VAL:CG1	1:A:37:LEU:HD13	0.47	2.35	14	1
1:A:90:PHE:CD2	1:A:99:ILE:HG21	0.47	2.43	20	1
1:A:59:GLY:O	1:A:63:ILE:HD12	0.47	2.10	15	6
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:N	0.47	2.48	23	2
1:A:4:ILE:CD1	1:A:17:LEU:CD1	0.47	2.93	10	1
1:A:102:GLU:OE1	1:A:106:GLN:N	0.47	2.47	24	4
1:A:90:PHE:CG	1:A:96:PHE:CE1	0.47	3.01	13	8
1:A:49:LEU:CD1	1:A:55:MET:CE	0.47	2.92	3	1
1:A:79:VAL:O	1:A:106:GLN:OE1	0.47	2.32	9	4
1:A:102:GLU:C	1:A:103:GLN:CG	0.47	2.83	9	4
1:A:17:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HB2	0.47	1.86	3	1
1:A:23:HIS:H	1:A:58:SER:CB	0.47	2.22	18	7
1:A:82:ILE:HG12	1:A:87:LYS:CB	0.47	2.39	8	11
1:A:106:GLN:O	1:A:106:GLN:CG	0.47	2.62	19	11
1:A:67:TYR:CZ	1:A:99:ILE:HA	0.47	2.45	9	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:49:LEU:CD1	0.47	2.40	22	1
1:A:21:LEU:CB	1:A:55:MET:HG3	0.47	2.39	3	2
1:A:22:ASP:OD1	1:A:22:ASP:N	0.47	2.47	3	2
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:CE	0.47	2.97	6	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:110:LEU:CA	0.47	2.39	21	3
1:A:90:PHE:CD1	1:A:99:ILE:HG13	0.47	2.43	18	1
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:CA	0.47	2.62	21	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:90:PHE:CZ	0.47	2.44	24	1
1:A:65:GLY:C	1:A:66:ARG:NH2	0.47	2.68	1	1
1:A:80:CYS:O	1:A:81:ALA:CB	0.47	2.63	19	5
1:A:6:MET:CG	1:A:15:ILE:HD13	0.47	2.40	3	1
1:A:5:ASP:HB2	1:A:16:ARG:O	0.47	2.09	22	6
1:A:57:SER:N	1:A:89:LEU:HD21	0.47	2.25	17	2
1:A:2:LEU:CG	1:A:17:LEU:HD21	0.47	2.40	17	1
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:HD23	0.47	2.09	23	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:99:ILE:O	0.47	2.63	24	1
1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CZ	0.47	2.78	1	1
1:A:111:THR:CG2	1:A:112:LEU:HD12	0.47	2.40	13	5
1:A:82:ILE:CD1	1:A:87:LYS:HB3	0.47	2.39	21	4
1:A:78:VAL:HG22	1:A:106:GLN:NE2	0.47	2.24	15	1
1:A:82:ILE:HG22	1:A:103:GLN:HA	0.47	1.86	16	1
1:A:100:ARG:CZ	1:A:101:PHE:O	0.47	2.62	17	1
1:A:34:THR:HA	1:A:37:LEU:HD22	0.47	1.86	20	1
1:A:28:THR:O	1:A:31:GLN:CD	0.47	2.53	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ASN:ND2	1:A:48:ASN:N	0.47	2.62	1	1
1:A:77:MET:HG2	1:A:77:MET:O	0.47	2.08	6	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:48:ASN:C	0.47	2.67	11	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:78:VAL:O	0.47	2.10	7	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:99:ILE:CA	0.47	2.97	13	4
1:A:79:VAL:HG13	1:A:79:VAL:O	0.47	2.09	11	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:55:MET:SD	0.46	3.03	3	2
1:A:65:GLY:CA	1:A:66:ARG:HH21	0.46	2.22	18	1
1:A:55:MET:O	1:A:89:LEU:HD11	0.46	2.09	21	1
1:A:28:THR:O	1:A:31:GLN:NE2	0.46	2.48	9	4
1:A:46:VAL:HG22	1:A:110:LEU:HD22	0.46	1.86	13	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:112:LEU:CD2	0.46	2.40	14	1
1:A:48:ASN:HB3	1:A:110:LEU:HD11	0.46	1.87	17	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:99:ILE:HG21	0.46	2.45	20	1
1:A:95:LEU:C	1:A:97:LYS:N	0.46	2.64	24	1
1:A:67:TYR:OH	1:A:99:ILE:O	0.46	2.33	12	2
1:A:112:LEU:O	1:A:114:VAL:N	0.46	2.49	14	6
1:A:82:ILE:CD1	1:A:86:VAL:HG12	0.46	2.40	2	4
1:A:2:LEU:HD11	1:A:17:LEU:HD11	0.46	1.88	3	1
1:A:106:GLN:O	1:A:106:GLN:HG3	0.46	2.10	17	5
1:A:54:PHE:O	1:A:55:MET:C	0.46	2.53	12	14
1:A:54:PHE:CE2	1:A:56:ASP:CB	0.46	2.98	9	2
1:A:13:LEU:HD22	1:A:13:LEU:H	0.46	1.71	9	4
1:A:67:TYR:CZ	1:A:77:MET:O	0.46	2.69	9	1
1:A:109:LEU:O	1:A:112:LEU:N	0.46	2.44	21	4
1:A:76:GLU:HB2	1:A:112:LEU:CD2	0.46	2.40	14	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:CD	0.46	2.63	17	1
1:A:21:LEU:CB	1:A:55:MET:SD	0.46	3.03	10	3
1:A:19:GLY:O	1:A:51:ASP:O	0.46	2.34	7	9
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:N	0.46	2.26	7	1
1:A:23:HIS:N	1:A:58:SER:HB3	0.46	2.26	8	1
1:A:36:SER:OG	1:A:43:ARG:NH2	0.46	2.49	10	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:66:ARG:NH2	0.46	2.78	12	1
1:A:76:GLU:CG	1:A:112:LEU:CD1	0.46	2.93	14	1
1:A:8:VAL:C	1:A:9:LYS:CD	0.46	2.83	15	7
1:A:80:CYS:HB3	1:A:110:LEU:CD1	0.46	2.41	5	2
1:A:33:VAL:HG12	1:A:69:GLN:NE2	0.46	2.26	5	1
1:A:33:VAL:CG2	1:A:66:ARG:HG3	0.46	2.40	15	1
1:A:64:LEU:CA	1:A:99:ILE:HD11	0.46	2.41	17	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:101:PHE:CB	0.46	2.98	24	2
1:A:88:ARG:CD	1:A:89:LEU:HD12	0.46	2.41	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ILE:C	1:A:43:ARG:HD3	0.46	2.31	21	1
1:A:9:LYS:CB	1:A:12:VAL:CG1	0.46	2.94	6	6
1:A:82:ILE:HD12	1:A:101:PHE:CZ	0.46	2.45	11	1
1:A:85:ALA:O	1:A:86:VAL:HG23	0.46	2.11	12	1
1:A:101:PHE:O	1:A:102:GLU:CD	0.46	2.54	20	1
1:A:82:ILE:HG21	1:A:102:GLU:HB3	0.46	1.87	20	1
1:A:103:GLN:NE2	1:A:106:GLN:NE2	0.46	2.64	20	1
1:A:2:LEU:HD11	1:A:17:LEU:CD2	0.46	2.39	24	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:29:LEU:CD1	0.46	2.34	4	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:HD13	0.46	1.87	13	1
1:A:77:MET:HG3	1:A:77:MET:O	0.46	2.10	17	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:28:THR:HG21	0.46	1.87	18	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:110:LEU:HD22	0.46	2.41	19	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:MET:O	0.46	2.34	6	9
1:A:29:LEU:CD1	1:A:32:LYS:HB3	0.46	2.41	9	3
1:A:32:LYS:HZ2	1:A:35:GLN:CB	0.46	2.24	11	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:101:PHE:CE2	0.46	2.45	13	3
1:A:31:GLN:HG2	1:A:32:LYS:N	0.46	2.26	22	4
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD1	0.46	2.84	16	1
1:A:55:MET:HB3	1:A:86:VAL:CG2	0.45	2.41	3	3
1:A:5:ASP:OD2	1:A:6:MET:N	0.45	2.49	3	1
1:A:6:MET:CE	1:A:32:LYS:HZ3	0.45	2.24	4	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:43:ARG:NE	0.45	2.25	6	2
1:A:81:ALA:O	1:A:82:ILE:O	0.45	2.34	17	1
1:A:66:ARG:CZ	1:A:66:ARG:HB2	0.45	2.41	19	1
1:A:28:THR:O	1:A:31:GLN:HG2	0.45	2.10	1	5
1:A:67:TYR:HA	1:A:77:MET:CB	0.45	2.42	1	3
1:A:2:LEU:HD23	1:A:2:LEU:O	0.45	2.10	5	1
1:A:56:ASP:CG	1:A:57:SER:N	0.45	2.69	8	3
1:A:111:THR:CG2	1:A:111:THR:O	0.45	2.64	23	4
1:A:49:LEU:HD13	1:A:52:LEU:HD23	0.45	1.88	11	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:77:MET:CE	0.45	2.41	15	1
1:A:29:LEU:CA	1:A:32:LYS:CG	0.45	2.88	22	1
1:A:33:VAL:CG1	1:A:66:ARG:HG2	0.45	2.42	17	1
1:A:103:GLN:OE1	1:A:106:GLN:CD	0.45	2.54	20	1
1:A:113:GLY:O	1:A:114:VAL:O	0.45	2.35	24	1
1:A:78:VAL:C	1:A:79:VAL:CG2	0.45	2.84	19	2
1:A:102:GLU:OE1	1:A:106:GLN:NE2	0.45	2.49	21	1
1:A:32:LYS:HB3	1:A:32:LYS:NZ	0.45	2.27	22	1
1:A:20:GLU:OE2	1:A:54:PHE:CB	0.45	2.64	1	1
1:A:16:ARG:NE	1:A:48:ASN:OD1	0.45	2.48	6	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:THR:OG1	1:A:35:GLN:NE2	0.45	2.50	5	3
1:A:20:GLU:CG	1:A:54:PHE:HB3	0.45	2.41	3	5
1:A:67:TYR:CE1	1:A:99:ILE:C	0.45	2.90	6	1
1:A:53:SER:O	1:A:55:MET:HE3	0.45	2.12	13	4
1:A:82:ILE:CD1	1:A:87:LYS:CB	0.45	2.91	9	1
1:A:102:GLU:CD	1:A:106:GLN:NE2	0.45	2.70	21	1
1:A:22:ASP:HB3	1:A:54:PHE:CD2	0.45	2.47	23	1
1:A:41:ASP:CG	1:A:42:ILE:N	0.45	2.70	18	6
1:A:29:LEU:HD23	1:A:63:ILE:HG13	0.45	1.87	2	1
1:A:51:ASP:O	1:A:51:ASP:OD1	0.45	2.35	5	3
1:A:52:LEU:HD11	1:A:55:MET:HE1	0.45	1.89	5	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:106:GLN:CD	0.45	2.32	6	1
1:A:76:GLU:HG3	1:A:112:LEU:HD22	0.45	1.87	21	3
1:A:7:ASN:N	1:A:14:CYS:O	0.45	2.48	11	3
1:A:47:LEU:O	1:A:48:ASN:CG	0.45	2.55	20	1
1:A:2:LEU:HD23	1:A:3:GLY:N	0.45	2.26	21	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:29:LEU:C	0.45	2.78	22	1
1:A:112:LEU:C	1:A:114:VAL:N	0.45	2.70	14	7
1:A:33:VAL:O	1:A:36:SER:N	0.45	2.48	2	3
1:A:53:SER:OG	1:A:54:PHE:N	0.45	2.48	6	2
1:A:79:VAL:HG12	1:A:101:PHE:CZ	0.45	2.47	23	2
1:A:82:ILE:HG21	1:A:102:GLU:CB	0.45	2.41	20	1
1:A:11:SER:O	1:A:43:ARG:HD2	0.45	2.11	23	2
1:A:83:SER:CB	1:A:84:PRO:CD	0.45	2.94	2	2
1:A:67:TYR:CE2	1:A:98:ILE:HA	0.45	2.46	4	1
1:A:61:GLY:O	1:A:65:GLY:N	0.45	2.49	9	2
1:A:6:MET:HG3	1:A:15:ILE:CD1	0.45	2.42	20	1
1:A:15:ILE:CB	1:A:47:LEU:HD13	0.45	2.41	3	1
1:A:32:LYS:O	1:A:35:GLN:CG	0.45	2.64	4	1
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:HG	0.45	2.11	12	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:13:LEU:O	0.45	2.12	12	1
1:A:15:ILE:CG2	1:A:15:ILE:O	0.45	2.65	21	4
1:A:39:LYS:CE	1:A:40:ASP:H	0.45	2.25	21	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:49:LEU:O	0.44	2.12	5	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:62:VAL:CG2	0.44	2.42	17	2
1:A:45:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	0.44	1.88	17	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:20:GLU:O	0.44	2.65	19	1
1:A:4:ILE:HG12	1:A:17:LEU:CD2	0.44	2.42	21	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:101:PHE:CD1	0.44	2.47	23	1
1:A:66:ARG:HB3	1:A:66:ARG:CZ	0.44	2.42	24	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:29:LEU:N	0.44	2.80	6	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HD13	1:A:49:LEU:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:43:ARG:HG2	0.44	1.87	10	1
1:A:52:LEU:CD1	1:A:86:VAL:HG21	0.44	2.40	17	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:42:ILE:N	0.44	2.51	18	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:99:ILE:HG12	0.44	2.41	19	2
1:A:9:LYS:HB2	1:A:12:VAL:CG1	0.44	2.42	2	13
1:A:76:GLU:N	1:A:112:LEU:CD1	0.44	2.80	3	2
1:A:87:LYS:O	1:A:91:ASP:HB2	0.44	2.12	23	5
1:A:33:VAL:CG2	1:A:66:ARG:HD3	0.44	2.42	18	2
1:A:95:LEU:HG	1:A:98:ILE:CG2	0.44	2.42	20	9
1:A:102:GLU:OE1	1:A:103:GLN:N	0.44	2.51	7	3
1:A:15:ILE:N	1:A:46:VAL:O	0.44	2.46	3	1
1:A:7:ASN:HB3	1:A:14:CYS:SG	0.44	2.52	3	2
1:A:2:LEU:HD22	1:A:25:THR:CA	0.44	2.42	18	3
1:A:111:THR:O	1:A:111:THR:CG2	0.44	2.65	15	2
1:A:49:LEU:HB3	1:A:52:LEU:HD23	0.44	1.89	19	1
1:A:46:VAL:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.44	2.42	21	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:99:ILE:HG12	0.44	2.47	3	1
1:A:64:LEU:O	1:A:68:LYS:HD2	0.44	2.13	8	2
1:A:57:SER:N	1:A:89:LEU:CD2	0.44	2.81	17	1
1:A:14:CYS:HA	1:A:46:VAL:O	0.44	2.12	3	4
1:A:33:VAL:CG1	1:A:66:ARG:CD	0.44	2.95	7	1
1:A:102:GLU:N	1:A:106:GLN:OE1	0.44	2.51	9	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HB	0.44	2.43	18	3
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:HD13	0.44	1.89	18	1
1:A:19:GLY:O	1:A:51:ASP:OD1	0.44	2.35	22	4
1:A:17:LEU:CD1	1:A:49:LEU:CG	0.44	2.96	9	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:48:ASN:OD1	0.44	2.13	24	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:109:LEU:O	0.44	2.65	7	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:CD1	0.44	2.84	7	1
1:A:12:VAL:HB	1:A:44:HIS:HB2	0.44	1.90	9	3
1:A:112:LEU:HG	1:A:112:LEU:O	0.44	2.12	15	2
1:A:17:LEU:HD13	1:A:49:LEU:HD21	0.44	1.85	11	1
1:A:62:VAL:O	1:A:66:ARG:CZ	0.44	2.66	18	1
1:A:17:LEU:O	1:A:49:LEU:HG	0.43	2.12	1	1
1:A:67:TYR:HA	1:A:77:MET:CG	0.43	2.42	4	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:77:MET:CE	0.43	2.43	4	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:99:ILE:O	0.43	2.71	9	2
1:A:52:LEU:HD21	1:A:55:MET:HE2	0.43	1.89	18	1
1:A:15:ILE:CG2	1:A:17:LEU:HD23	0.43	2.42	19	1
1:A:88:ARG:CD	1:A:89:LEU:N	0.43	2.81	18	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:HG	1:A:44:HIS:O	0.43	2.13	8	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:99:ILE:HD11	0.43	2.43	19	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:98:ILE:HB	0.43	1.88	24	1
1:A:77:MET:CE	1:A:78:VAL:O	0.43	2.66	1	1
1:A:76:GLU:HG3	1:A:112:LEU:CD2	0.43	2.43	8	4
1:A:52:LEU:CG	1:A:86:VAL:HG21	0.43	2.43	14	3
1:A:80:CYS:SG	1:A:81:ALA:N	0.43	2.92	9	1
1:A:66:ARG:NH1	1:A:69:GLN:OE1	0.43	2.51	17	1
1:A:7:ASN:ND2	1:A:9:LYS:NZ	0.43	2.67	20	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:66:ARG:CZ	0.43	2.43	24	1
1:A:90:PHE:O	1:A:96:PHE:HB2	0.43	2.13	24	1
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD13	0.43	2.13	1	1
1:A:66:ARG:HA	1:A:66:ARG:CZ	0.43	2.43	1	1
1:A:76:GLU:HG2	1:A:112:LEU:HD21	0.43	1.90	19	2
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:CD2	0.43	2.42	7	2
1:A:45:ILE:CD1	1:A:77:MET:HA	0.43	2.43	17	3
1:A:52:LEU:CD2	1:A:55:MET:HB3	0.43	2.43	13	5
1:A:44:HIS:CG	1:A:112:LEU:HD12	0.43	2.49	14	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:77:MET:HE2	0.43	1.90	15	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:48:ASN:O	0.43	2.56	1	2
1:A:43:ARG:N	1:A:43:ARG:HD3	0.43	2.28	15	4
1:A:67:TYR:CE1	1:A:99:ILE:CA	0.43	3.01	5	4
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LYS:N	0.43	2.51	7	2
1:A:54:PHE:CE1	1:A:56:ASP:CG	0.43	2.92	18	1
1:A:106:GLN:HG2	1:A:110:LEU:CD2	0.43	2.43	19	1
1:A:37:LEU:HG	1:A:69:GLN:CG	0.43	2.43	20	2
1:A:67:TYR:CE1	1:A:77:MET:HB3	0.43	2.49	5	1
1:A:112:LEU:HD21	1:A:115:ALA:HA	0.43	1.91	6	1
1:A:100:ARG:NH1	1:A:101:PHE:O	0.43	2.51	7	1
1:A:52:LEU:CD1	1:A:55:MET:HE2	0.43	2.40	7	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:49:LEU:HG	0.43	2.44	9	2
1:A:68:LYS:HD3	1:A:98:ILE:CD1	0.43	2.43	9	2
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:OD1	0.43	2.52	14	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:66:ARG:HD3	0.43	1.90	15	1
1:A:76:GLU:CA	1:A:112:LEU:HD11	0.43	2.44	17	1
1:A:35:GLN:CD	1:A:36:SER:N	0.43	2.72	20	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:LYS:N	0.43	2.52	20	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:98:ILE:CG2	0.43	2.94	22	1
1:A:57:SER:HA	1:A:60:LEU:HB2	0.43	1.90	12	4
1:A:36:SER:HA	1:A:43:ARG:NH2	0.43	2.29	10	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:5:ASP:N	0.43	2.82	18	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:GLU:CG	1:A:106:GLN:HB2	0.43	2.43	21	3
1:A:95:LEU:HB3	1:A:98:ILE:CG2	0.43	2.44	24	1
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:CG	0.43	2.44	3	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:99:ILE:HD11	0.43	2.38	5	1
1:A:51:ASP:O	1:A:51:ASP:OD2	0.43	2.37	23	2
1:A:35:GLN:CG	1:A:36:SER:N	0.43	2.82	7	1
1:A:55:MET:CG	1:A:86:VAL:HG22	0.43	2.43	7	3
1:A:21:LEU:C	1:A:22:ASP:OD2	0.43	2.57	18	3
1:A:47:LEU:C	1:A:48:ASN:ND2	0.43	2.72	20	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:51:ASP:C	0.43	2.57	23	1
1:A:21:LEU:C	1:A:22:ASP:OD1	0.43	2.57	6	3
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:CG	0.43	2.44	4	2
1:A:13:LEU:CD2	1:A:43:ARG:HD2	0.43	2.44	6	1
1:A:100:ARG:CD	1:A:100:ARG:C	0.43	2.88	7	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:43:ARG:HD2	0.43	2.44	9	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:98:ILE:HD12	0.43	1.90	13	1
1:A:101:PHE:C	1:A:102:GLU:CG	0.43	2.86	20	1
1:A:90:PHE:HA	1:A:94:GLY:HA3	0.43	1.90	24	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:C	0.42	2.57	3	1
1:A:51:ASP:C	1:A:51:ASP:OD2	0.42	2.57	6	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:113:GLY:CA	0.42	2.43	7	1
1:A:33:VAL:CG1	1:A:66:ARG:HG3	0.42	2.44	20	4
1:A:79:VAL:C	1:A:106:GLN:OE1	0.42	2.58	14	1
1:A:2:LEU:CG	1:A:17:LEU:HD12	0.42	2.44	2	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:62:VAL:HG22	0.42	1.89	10	2
1:A:20:GLU:HG2	1:A:54:PHE:CB	0.42	2.45	11	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:47:LEU:N	0.42	2.81	12	1
1:A:15:ILE:O	1:A:15:ILE:CG2	0.42	2.66	17	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:66:ARG:NH2	0.42	2.82	24	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:51:ASP:O	0.42	2.38	18	2
1:A:33:VAL:HG12	1:A:69:GLN:HE21	0.42	1.74	5	1
1:A:14:CYS:CA	1:A:46:VAL:HG12	0.42	2.43	23	6
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:SD	0.42	2.54	10	1
1:A:9:LYS:N	1:A:12:VAL:O	0.42	2.52	10	1
1:A:76:GLU:C	1:A:77:MET:HE3	0.42	2.34	18	1
1:A:66:ARG:C	1:A:68:LYS:N	0.42	2.72	20	1
1:A:67:TYR:CE1	1:A:98:ILE:C	0.42	2.93	20	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:MET:HE2	0.42	2.14	2	1
1:A:67:TYR:CG	1:A:77:MET:HB3	0.42	2.48	9	1
1:A:75:GLY:C	1:A:76:GLU:HG2	0.42	2.33	20	2
1:A:80:CYS:CB	1:A:110:LEU:CD2	0.42	2.97	19	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD22	1:A:32:LYS:CB	0.42	2.39	1	1
1:A:82:ILE:CG1	1:A:87:LYS:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:55:MET:SD	1:A:86:VAL:HA	0.42	2.54	2	4
1:A:99:ILE:O	1:A:100:ARG:O	0.42	2.37	23	6
1:A:29:LEU:HD11	1:A:66:ARG:NH2	0.42	2.30	3	1
1:A:67:TYR:CD1	1:A:77:MET:HG2	0.42	2.50	4	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:HD12	0.42	1.90	14	1
1:A:55:MET:C	1:A:55:MET:CE	0.42	2.87	15	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:40:ASP:N	0.42	2.82	17	1
1:A:79:VAL:HB	1:A:101:PHE:CE2	0.42	2.49	19	1
1:A:103:GLN:OE1	1:A:103:GLN:HA	0.42	2.15	20	1
1:A:9:LYS:HG2	1:A:12:VAL:CG1	0.42	2.44	21	3
1:A:29:LEU:C	1:A:32:LYS:HG2	0.42	2.34	22	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:77:MET:CG	0.42	3.02	22	1
1:A:111:THR:HG21	1:A:115:ALA:CB	0.42	2.44	2	1
1:A:20:GLU:OE1	1:A:22:ASP:OD1	0.42	2.37	4	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:77:MET:HE3	0.42	2.45	4	2
1:A:87:LYS:HG2	1:A:87:LYS:O	0.42	2.15	10	1
1:A:85:ALA:O	1:A:88:ARG:CZ	0.42	2.67	23	2
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLN:CB	0.42	2.67	20	1
1:A:75:GLY:C	1:A:76:GLU:CG	0.42	2.87	17	6
1:A:21:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD21	0.42	2.44	15	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:98:ILE:HG13	0.42	2.45	20	2
1:A:15:ILE:CG2	1:A:17:LEU:HD21	0.42	2.33	10	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:5:ASP:N	0.42	2.25	11	1
1:A:37:LEU:CD2	1:A:69:GLN:HG2	0.42	2.45	15	2
1:A:21:LEU:O	1:A:54:PHE:CD2	0.42	2.73	22	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:55:MET:CE	0.42	2.45	3	1
1:A:75:GLY:O	1:A:76:GLU:OE1	0.42	2.38	15	2
1:A:43:ARG:HD3	1:A:43:ARG:N	0.42	2.29	14	1
1:A:80:CYS:CB	1:A:110:LEU:HD21	0.42	2.44	19	1
1:A:80:CYS:CB	1:A:110:LEU:HD13	0.42	2.45	20	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:42:ILE:HA	0.42	1.73	21	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:55:MET:CG	0.42	2.45	21	1
1:A:103:GLN:C	1:A:105:GLU:N	0.42	2.73	15	2
1:A:15:ILE:CD1	1:A:32:LYS:HE2	0.42	2.45	17	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:29:LEU:HD22	0.42	2.45	19	1
1:A:42:ILE:HA	1:A:42:ILE:HD12	0.41	1.74	22	1
1:A:37:LEU:O	1:A:38:GLU:HG2	0.41	2.15	23	1
1:A:37:LEU:CD1	1:A:69:GLN:HG2	0.41	2.44	20	2
1:A:49:LEU:HD23	1:A:81:ALA:O	0.41	2.15	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:VAL:CG1	1:A:110:LEU:HD21	0.41	2.44	24	1
1:A:26:ALA:O	1:A:62:VAL:CG2	0.41	2.62	3	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:89:LEU:HD12	0.41	2.31	12	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:28:THR:HG21	0.41	2.45	13	1
1:A:56:ASP:C	1:A:89:LEU:HD13	0.41	2.35	15	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:62:VAL:CG1	0.41	2.40	16	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:C	0.41	2.89	21	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:98:ILE:C	0.41	2.94	4	1
1:A:102:GLU:OE2	1:A:106:GLN:N	0.41	2.54	18	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:25:THR:CB	0.41	2.98	23	1
1:A:49:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HD23	0.41	1.92	1	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:110:LEU:CD1	0.41	2.44	3	2
1:A:51:ASP:OD2	1:A:51:ASP:O	0.41	2.38	3	1
1:A:77:MET:SD	1:A:78:VAL:O	0.41	2.79	15	2
1:A:32:LYS:HG3	1:A:66:ARG:CZ	0.41	2.45	9	1
1:A:15:ILE:O	1:A:17:LEU:CD2	0.41	2.69	10	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:78:VAL:O	0.41	2.15	11	1
1:A:31:GLN:CG	1:A:32:LYS:N	0.41	2.84	22	1
1:A:14:CYS:SG	1:A:46:VAL:HG11	0.41	2.56	24	1
1:A:30:LYS:O	1:A:33:VAL:HG23	0.41	2.16	1	1
1:A:55:MET:HE1	1:A:86:VAL:CG2	0.41	2.46	5	1
1:A:63:ILE:CG1	1:A:66:ARG:NH2	0.41	2.83	10	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:ILE:CB	0.41	2.45	13	2
1:A:14:CYS:HA	1:A:46:VAL:CB	0.41	2.45	18	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:98:ILE:CG1	0.41	2.98	19	2
1:A:42:ILE:HA	1:A:42:ILE:HD13	0.41	1.69	23	1
1:A:5:ASP:HB3	1:A:16:ARG:CB	0.41	2.45	17	2
1:A:18:THR:CA	1:A:51:ASP:HB3	0.41	2.45	14	1
1:A:66:ARG:O	1:A:77:MET:SD	0.41	2.79	19	1
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLN:HB2	0.41	2.15	20	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:110:LEU:C	0.41	2.36	24	1
1:A:17:LEU:O	1:A:49:LEU:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLN:OE1	0.41	2.39	2	2
1:A:44:HIS:NE2	1:A:112:LEU:HD22	0.41	2.31	3	1
1:A:60:LEU:HA	1:A:60:LEU:HD22	0.41	1.76	5	1
1:A:46:VAL:HG21	1:A:111:THR:HA	0.41	1.91	6	1
1:A:45:ILE:N	1:A:45:ILE:CD1	0.41	2.84	6	1
1:A:22:ASP:HA	1:A:58:SER:HB2	0.41	1.93	12	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:THR:H	0.41	1.70	17	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:63:ILE:HD13	0.41	1.92	19	1
1:A:9:LYS:CD	1:A:14:CYS:SG	0.41	3.08	23	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:PHE:O	1:A:94:GLY:O	0.41	2.39	24	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:32:LYS:HG2	0.41	2.46	1	1
1:A:23:HIS:O	1:A:27:GLU:CD	0.41	2.59	7	1
1:A:21:LEU:HA	1:A:21:LEU:HD13	0.41	1.76	7	2
1:A:35:GLN:N	1:A:35:GLN:CD	0.41	2.74	18	1
1:A:48:ASN:HB3	1:A:80:CYS:SG	0.41	2.56	20	1
1:A:64:LEU:CG	1:A:98:ILE:HG21	0.41	2.46	21	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:102:GLU:O	0.41	2.69	23	1
1:A:77:MET:SD	1:A:77:MET:O	0.41	2.79	6	1
1:A:23:HIS:O	1:A:27:GLU:OE1	0.41	2.38	16	2
1:A:21:LEU:O	1:A:21:LEU:HD22	0.41	2.13	19	1
1:A:95:LEU:O	1:A:98:ILE:HG23	0.41	2.16	19	1
1:A:48:ASN:C	1:A:48:ASN:OD1	0.40	2.59	4	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:59:GLY:HA3	0.40	2.46	19	1
1:A:10:GLU:C	1:A:11:SER:HG	0.40	2.14	20	1
1:A:76:GLU:CG	1:A:112:LEU:HD22	0.40	2.45	21	1
1:A:37:LEU:O	1:A:38:GLU:OE2	0.40	2.39	21	1
1:A:21:LEU:HB3	1:A:55:MET:CA	0.40	2.46	21	2
1:A:44:HIS:CG	1:A:112:LEU:CD2	0.40	2.90	6	1
1:A:19:GLY:O	1:A:20:GLU:OE1	0.40	2.39	9	1
1:A:67:TYR:CZ	1:A:99:ILE:CA	0.40	3.04	9	1
1:A:88:ARG:CD	1:A:89:LEU:HG	0.40	2.47	9	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:49:LEU:CD2	0.40	2.93	11	1
1:A:54:PHE:C	1:A:54:PHE:CD1	0.40	2.94	13	1
1:A:111:THR:HG21	1:A:115:ALA:O	0.40	2.16	15	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:106:GLN:OE1	0.40	2.17	21	1
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:CA	0.40	2.46	22	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:98:ILE:CB	0.40	2.46	24	1
1:A:112:LEU:CG	1:A:112:LEU:O	0.40	2.69	6	1
1:A:55:MET:HB3	1:A:55:MET:HE2	0.40	1.39	23	1
1:A:87:LYS:CG	1:A:96:PHE:CZ	0.40	3.05	24	1
1:A:97:LYS:O	1:A:100:ARG:CZ	0.40	2.69	24	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:114:VAL:HB	0.40	2.46	3	1
1:A:22:ASP:C	1:A:24:HIS:H	0.40	2.20	11	1
1:A:64:LEU:CG	1:A:98:ILE:CG2	0.40	2.99	21	2
1:A:13:LEU:O	1:A:15:ILE:HD13	0.40	2.15	17	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:HG3	0.40	2.17	21	1
1:A:46:VAL:HA	1:A:78:VAL:HG12	0.40	1.93	21	1
1:A:21:LEU:HB2	1:A:55:MET:SD	0.40	2.56	3	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:66:ARG:HH22	0.40	1.77	8	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:HA	0.40	1.79	9	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:CE	1:A:30:LYS:O	0.40	2.69	11	1
1:A:57:SER:CA	1:A:60:LEU:HB2	0.40	2.45	12	1
1:A:56:ASP:OD1	1:A:58:SER:OG	0.40	2.36	13	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HG21	0.40	2.46	16	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:17:LEU:HD23	0.40	2.45	22	1
1:A:56:ASP:O	1:A:89:LEU:HD11	0.40	2.16	22	1
1:A:62:VAL:O	1:A:66:ARG:CD	0.40	2.70	23	1

## 6.3 Torsion angles

### 6.3.1 Protein backbone

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	109/116 (94%)	76±2 (69±2%)	18±2 (17±2%)	15±1 (14±1%)	<b>1</b>	<b>5</b>
All	All	2616/2784 (94%)	1815 (69%)	435 (17%)	366 (14%)	<b>1</b>	<b>5</b>

All 28 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	107	GLN	24
1	A	104	SER	24
1	A	100	ARG	24
1	A	112	LEU	24
1	A	46	VAL	24
1	A	11	SER	24
1	A	40	ASP	24
1	A	55	MET	24
1	A	105	GLU	23
1	A	4	ILE	23
1	A	41	ASP	23
1	A	115	ALA	22
1	A	114	VAL	16
1	A	82	ILE	14
1	A	48	ASN	11

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	54	PHE	9
1	A	2	LEU	7
1	A	42	ILE	7
1	A	79	VAL	4
1	A	86	VAL	3
1	A	75	GLY	3
1	A	111	THR	2
1	A	23	HIS	2
1	A	103	GLN	1
1	A	113	GLY	1
1	A	96	PHE	1
1	A	67	TYR	1
1	A	102	GLU	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	96/102 (94%)	48±3 (50±3%)	48±3 (50±3%)	0 1
All	All	2304/2448 (94%)	1144 (50%)	1160 (50%)	0 1

All 80 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	45	ILE	24
1	A	60	LEU	24
1	A	13	LEU	24
1	A	88	ARG	24
1	A	11	SER	24
1	A	96	PHE	24
1	A	83	SER	24
1	A	102	GLU	24
1	A	27	GLU	24
1	A	91	ASP	24
1	A	62	VAL	24
1	A	98	ILE	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	49	LEU	24
1	A	109	LEU	23
1	A	7	ASN	23
1	A	34	THR	23
1	A	4	ILE	23
1	A	9	LYS	23
1	A	36	SER	23
1	A	111	THR	22
1	A	30	LYS	22
1	A	8	VAL	22
1	A	50	GLU	22
1	A	21	LEU	22
1	A	66	ARG	21
1	A	28	THR	21
1	A	16	ARG	21
1	A	55	MET	21
1	A	52	LEU	20
1	A	37	LEU	20
1	A	14	CYS	20
1	A	5	ASP	20
1	A	77	MET	19
1	A	64	LEU	19
1	A	22	ASP	19
1	A	69	GLN	18
1	A	100	ARG	18
1	A	20	GLU	18
1	A	39	LYS	18
1	A	58	SER	17
1	A	101	PHE	17
1	A	17	LEU	16
1	A	87	LYS	16
1	A	43	ARG	16
1	A	2	LEU	15
1	A	112	LEU	15
1	A	31	GLN	14
1	A	63	ILE	13
1	A	29	LEU	13
1	A	93	SER	11
1	A	18	THR	11
1	A	76	GLU	11
1	A	68	LYS	10
1	A	48	ASN	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	47	LEU	9
1	A	42	ILE	9
1	A	110	LEU	9
1	A	97	LYS	8
1	A	78	VAL	6
1	A	32	LYS	5
1	A	57	SER	5
1	A	54	PHE	4
1	A	89	LEU	4
1	A	99	ILE	4
1	A	105	GLU	4
1	A	114	VAL	4
1	A	82	ILE	4
1	A	92	MET	4
1	A	95	LEU	3
1	A	38	GLU	3
1	A	25	THR	3
1	A	56	ASP	2
1	A	107	GLN	2
1	A	6	MET	2
1	A	86	VAL	2
1	A	53	SER	2
1	A	80	CYS	1
1	A	15	ILE	1
1	A	103	GLN	1
1	A	46	VAL	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers

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

No chemical shift data were provided