



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:40 pm GMT

PDB ID : 1BU9
Title : SOLUTION STRUCTURE OF P18-INK4C, 21 STRUCTURES
Authors : Byeon, I.-J.L.; Li, J.; Tsai, M.-D.
Deposited on : 1998-09-15

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
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	:	trunk28760
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	recalc28949

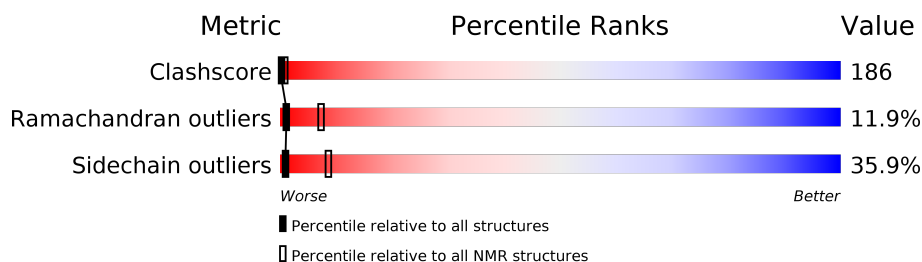
1 Overall quality at a glance

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 ≥ 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	168	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 18 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:8-A:162 (155)	0.34	18

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 6, 7, 10, 11, 14, 17, 18, 20
2	3, 4, 8, 9, 12, 13, 15, 16, 21
3	5, 19

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2537 atoms, of which 1262 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR).

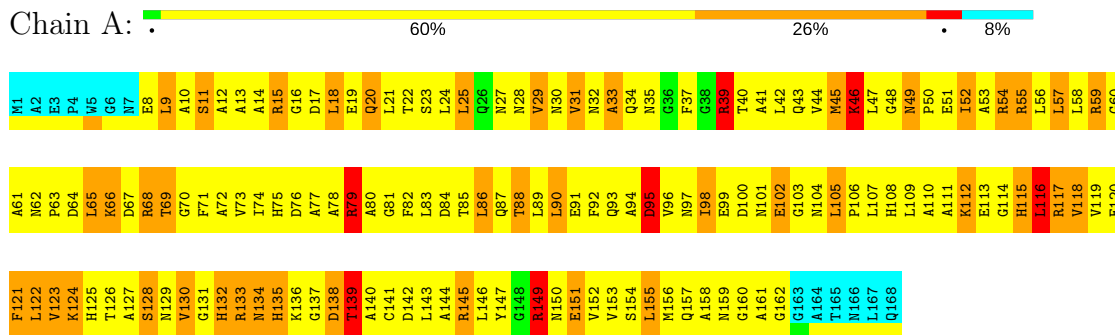
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	168	Total	C	H	N	O	S	0
			2537	784	1262	243	244	4	

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: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

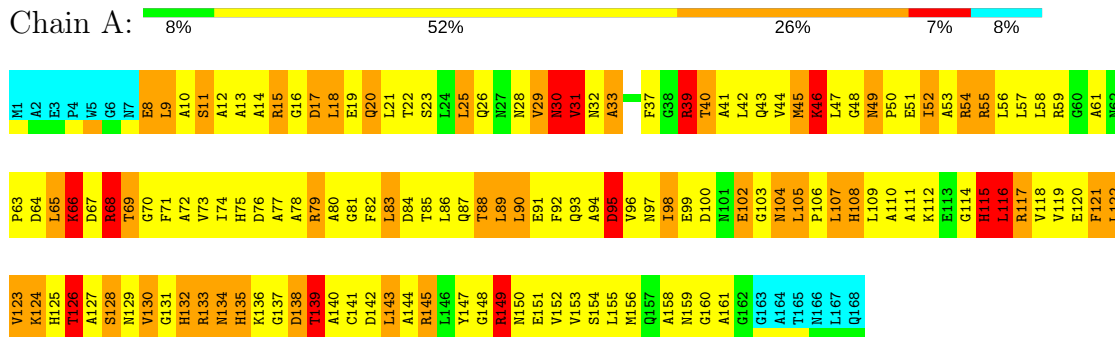


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

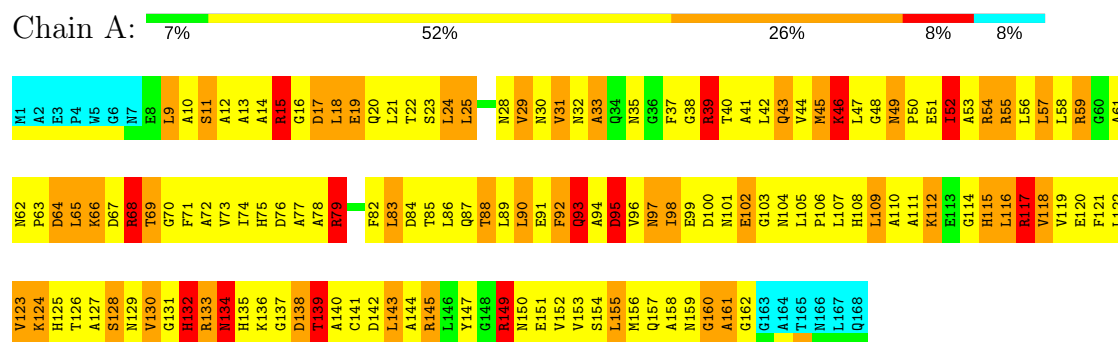
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



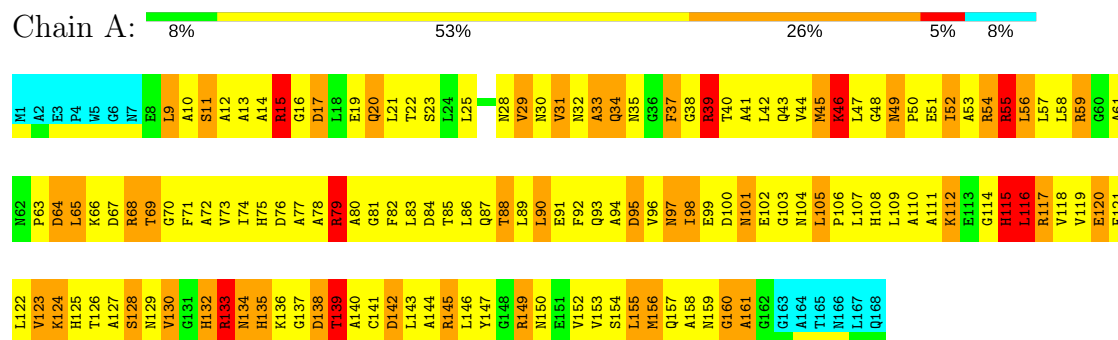
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



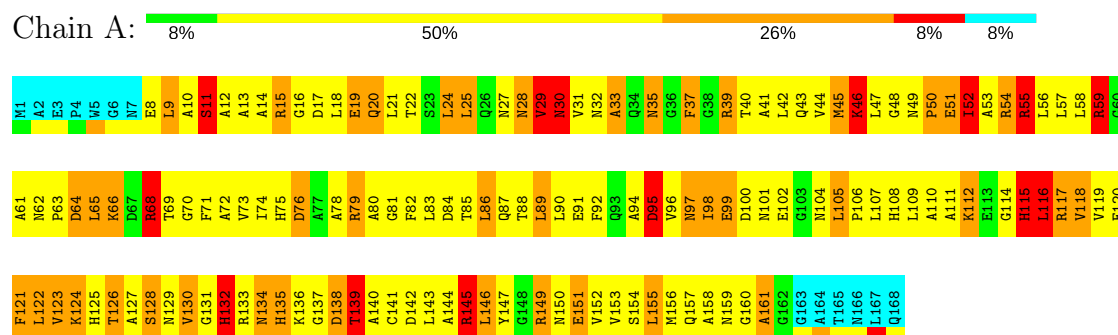
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



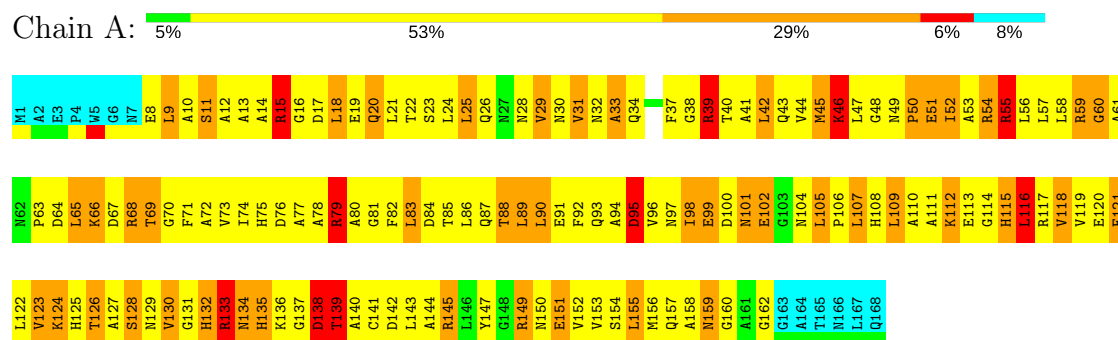
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



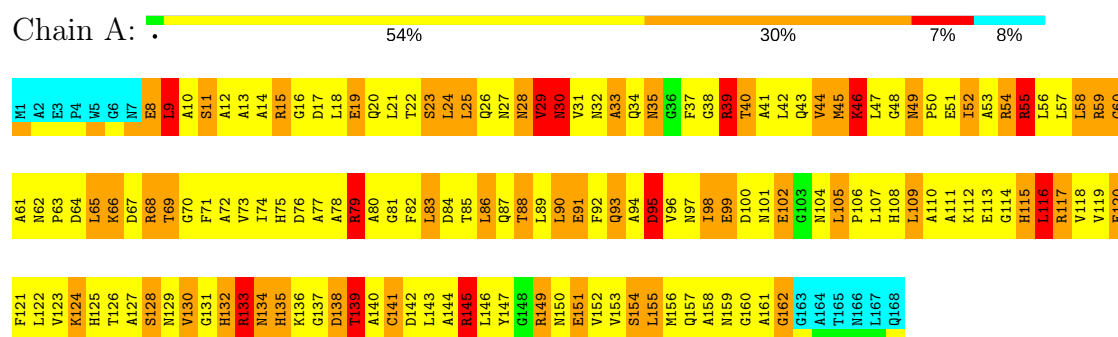
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



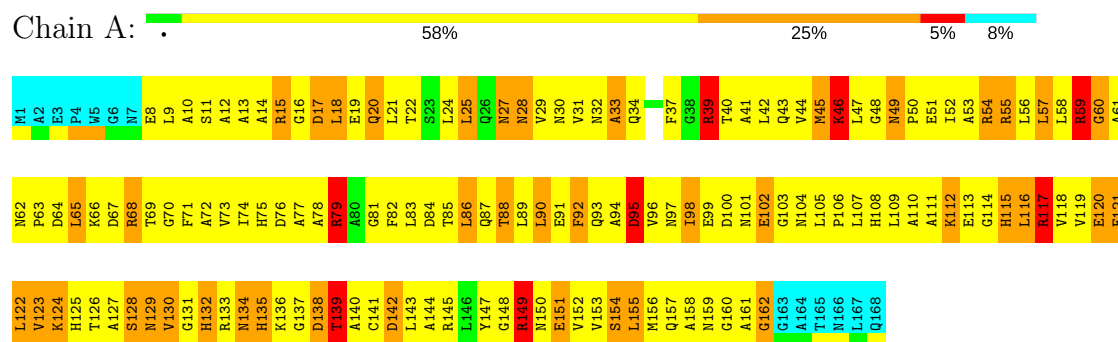
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



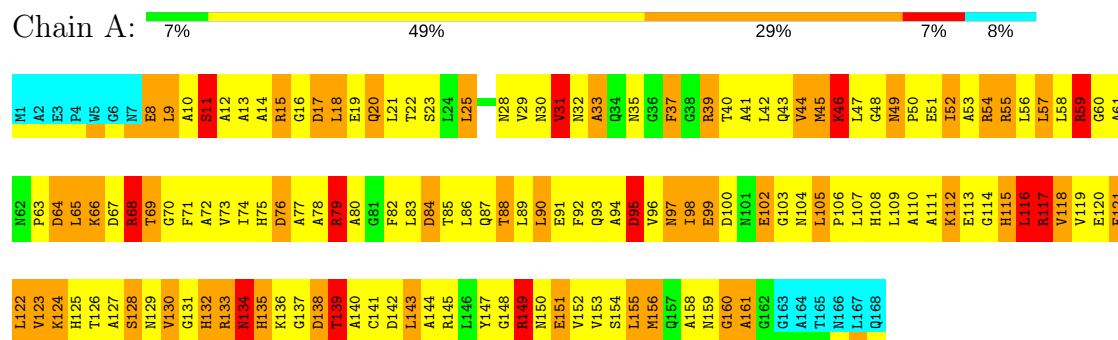
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



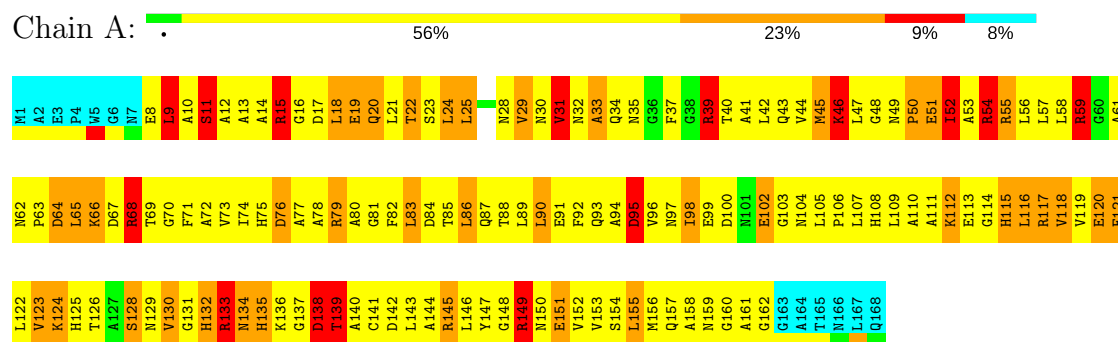
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



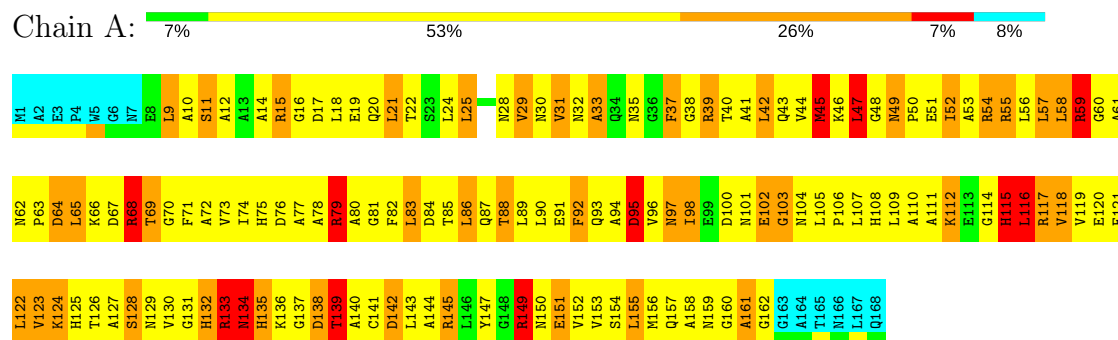
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



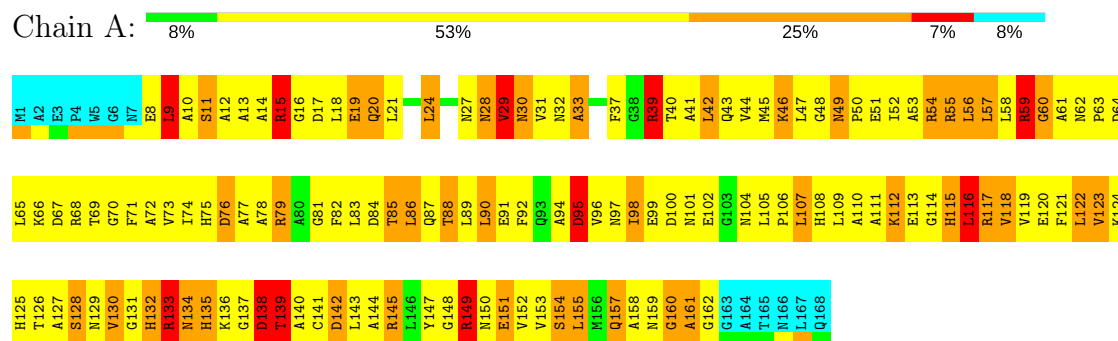
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



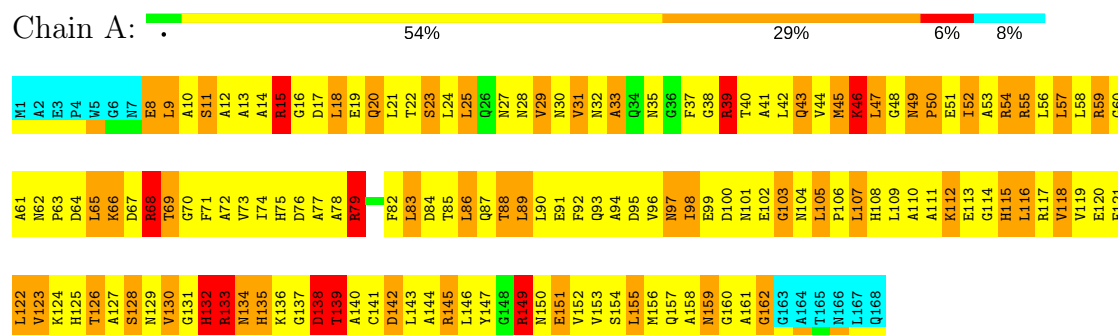
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



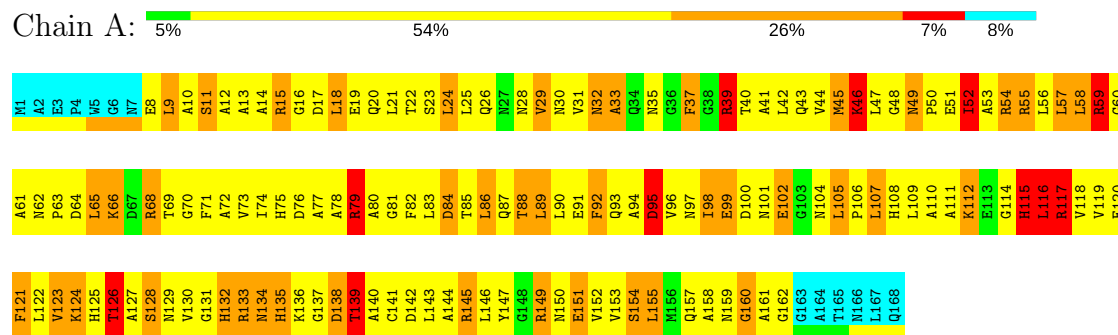
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.16 Score per residue for model 16

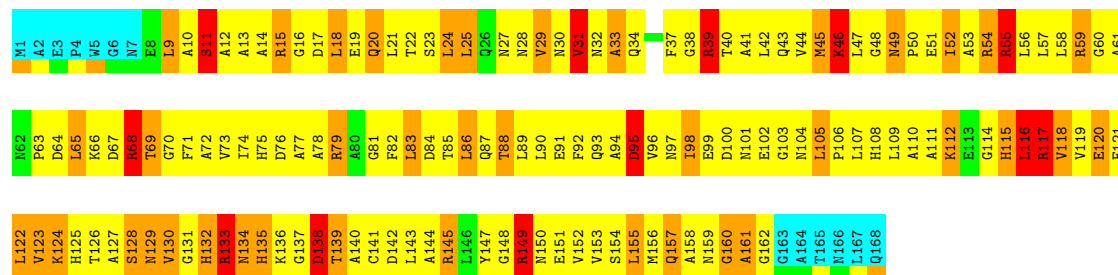
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

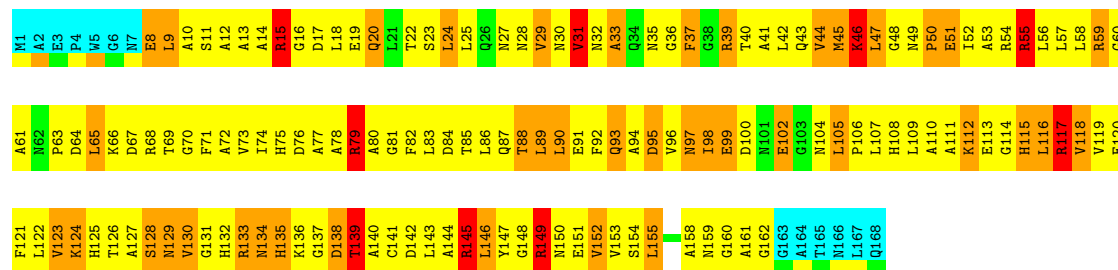
Chain A: 5% 57% 24% 7% 8%



4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

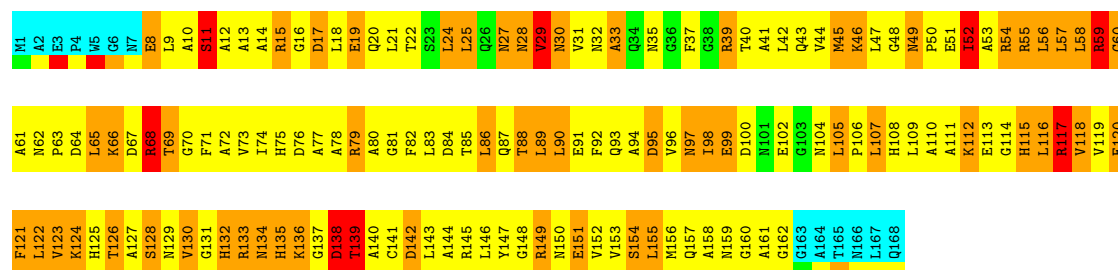
Chain A:  5% 57% 24% 5% 8%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

Chain A: 50% 33% 5% 8%



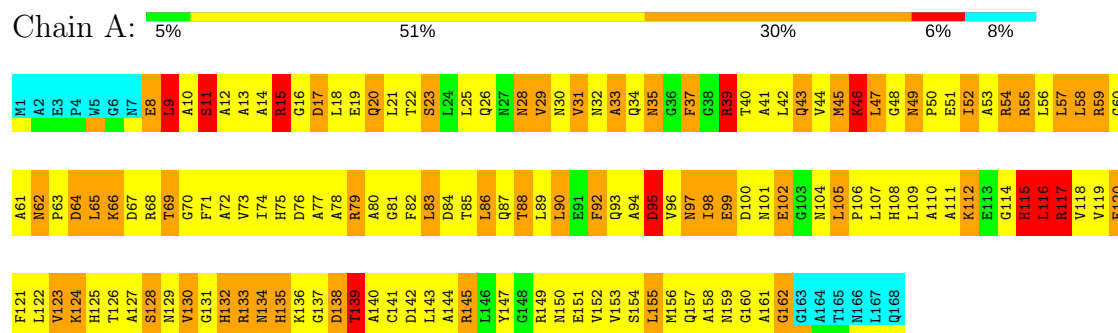
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING*.

Of the 50 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *CLOSEST TO MEAN STRUCTURE WHICH SHOWS GOOD AGREEMENT WITH THE CONSTRAINTS*.

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

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

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.04±0.00	0±0/1193 (0.0±0.0%)	1.29±0.01	1±1/1614 (0.0±0.0%)
All	All	1.04	0/25053 (0.0%)	1.29	16/33894 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	10.2±0.9
All	All	0	214

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	132	HIS	N-CA-CB	-5.67	100.39	110.60	4	1
1	A	92	PHE	N-CA-CB	-5.61	100.50	110.60	16	9
1	A	115	HIS	N-CA-CB	-5.38	100.92	110.60	16	6

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	15	ARG	Sidechain	21
1	A	59	ARG	Sidechain	20
1	A	68	ARG	Sidechain	20
1	A	79	ARG	Sidechain	20
1	A	39	ARG	Sidechain	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	149	ARG	Sidechain	19
1	A	55	ARG	Sidechain	19
1	A	133	ARG	Sidechain	19
1	A	54	ARG	Sidechain	19
1	A	117	ARG	Sidechain	19
1	A	145	ARG	Sidechain	18

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	1178	1174	1174	436±16
All	All	24738	24654	24654	9163

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 186.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LEU:HD21	1:A:132:HIS:CD2	1.19	1.71	18	16
1:A:105:LEU:HD13	1:A:108:HIS:CE1	1.17	1.72	2	1
1:A:111:ALA:HB1	1:A:144:ALA:HB2	1.16	1.16	19	20
1:A:96:VAL:HG23	1:A:122:LEU:HD23	1.13	1.14	16	8
1:A:72:ALA:HB2	1:A:98:ILE:HD12	1.12	1.13	9	21
1:A:90:LEU:HD21	1:A:126:THR:HG22	1.10	1.22	20	4
1:A:42:LEU:HD23	1:A:65:LEU:HD12	1.09	1.20	3	8
1:A:107:LEU:HD21	1:A:119:VAL:HG13	1.09	1.12	4	5
1:A:13:ALA:HB2	1:A:21:LEU:HD21	1.06	1.11	6	6
1:A:78:ALA:HB2	1:A:86:LEU:HD11	1.06	1.14	20	19
1:A:14:ALA:HB2	1:A:44:VAL:HG23	1.04	1.18	15	13
1:A:47:LEU:HD23	1:A:85:THR:HG21	1.03	1.26	2	9
1:A:78:ALA:HB1	1:A:110:ALA:HB2	1.03	1.12	3	15
1:A:78:ALA:HB2	1:A:86:LEU:HD13	1.03	1.26	18	1
1:A:96:VAL:HG23	1:A:122:LEU:HD12	1.03	1.30	9	4
1:A:90:LEU:HD12	1:A:126:THR:HG23	1.02	1.08	16	1
1:A:90:LEU:HD11	1:A:126:THR:HG21	1.02	1.25	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD12	1:A:24:LEU:HD23	1.02	1.22	5	5
1:A:116:LEU:HD21	1:A:155:LEU:HD23	1.02	1.26	11	1
1:A:78:ALA:HB2	1:A:86:LEU:CD1	1.01	1.85	12	19
1:A:14:ALA:HB2	1:A:44:VAL:CG2	1.01	1.85	12	18
1:A:111:ALA:HB1	1:A:144:ALA:CB	1.00	1.86	18	10
1:A:111:ALA:CB	1:A:144:ALA:HB2	1.00	1.85	18	12
1:A:47:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CD2	0.99	1.92	14	2
1:A:21:LEU:HD12	1:A:56:LEU:HD21	0.99	1.02	4	1
1:A:73:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HD21	0.98	1.34	13	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:98:ILE:CG2	0.98	1.87	20	20
1:A:107:LEU:HD22	1:A:140:ALA:HB1	0.98	1.28	8	5
1:A:45:MET:SD	1:A:53:ALA:HB2	0.97	1.99	15	21
1:A:33:ALA:O	1:A:40:THR:HG23	0.97	1.58	20	3
1:A:30:ASN:CB	1:A:33:ALA:HB2	0.97	1.89	6	17
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:HD12	0.96	1.90	20	21
1:A:96:VAL:HG21	1:A:126:THR:CB	0.96	1.89	11	3
1:A:9:LEU:HD12	1:A:41:ALA:HB3	0.96	1.38	21	5
1:A:42:LEU:CD1	1:A:73:VAL:HG21	0.96	1.90	11	1
1:A:63:PRO:O	1:A:73:VAL:HG12	0.96	1.60	1	5
1:A:42:LEU:HD22	1:A:61:ALA:HB1	0.96	1.38	14	10
1:A:9:LEU:HD12	1:A:41:ALA:CB	0.95	1.90	17	6
1:A:90:LEU:HD22	1:A:126:THR:HG23	0.95	1.33	1	4
1:A:108:HIS:HB3	1:A:143:LEU:HD12	0.95	1.38	18	9
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:CE1	0.95	1.95	16	15
1:A:33:ALA:O	1:A:40:THR:HG22	0.95	1.62	4	13
1:A:90:LEU:HD12	1:A:121:PHE:CZ	0.95	1.95	7	1
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:CG	0.94	1.92	2	6
1:A:105:LEU:HD13	1:A:132:HIS:CD2	0.94	1.97	11	3
1:A:114:GLY:HA2	1:A:152:VAL:HG21	0.94	1.38	7	13
1:A:72:ALA:HB2	1:A:98:ILE:CD1	0.94	1.92	10	21
1:A:110:ALA:HB3	1:A:119:VAL:HG23	0.94	1.39	5	14
1:A:10:ALA:O	1:A:14:ALA:HB3	0.94	1.62	6	19
1:A:96:VAL:CG2	1:A:122:LEU:HD23	0.94	1.93	5	2
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:CG	0.93	1.98	14	7
1:A:42:LEU:HD12	1:A:65:LEU:HD12	0.93	1.37	11	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CG	0.93	1.99	14	2
1:A:90:LEU:HD13	1:A:91:GLU:N	0.93	1.78	4	9
1:A:47:LEU:HD13	1:A:76:ASP:O	0.93	1.64	6	8
1:A:105:LEU:HD21	1:A:132:HIS:NE2	0.93	1.78	9	12
1:A:39:ARG:HG2	1:A:44:VAL:HG12	0.92	1.41	18	2
1:A:90:LEU:HD21	1:A:126:THR:CG2	0.92	1.95	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CZ	0.91	2.00	8	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:121:PHE:CB	0.91	1.94	13	14
1:A:14:ALA:HB2	1:A:44:VAL:HB	0.91	1.41	7	12
1:A:96:VAL:HG23	1:A:122:LEU:CD1	0.90	1.96	14	4
1:A:107:LEU:HD21	1:A:119:VAL:CG1	0.90	1.97	4	2
1:A:39:ARG:CG	1:A:44:VAL:HG13	0.90	1.96	21	4
1:A:57:LEU:HA	1:A:61:ALA:HB3	0.90	1.44	9	20
1:A:57:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CD2	0.90	2.01	3	2
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:CD	0.89	1.88	10	4
1:A:96:VAL:HG21	1:A:126:THR:HB	0.89	1.43	4	3
1:A:107:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HB3	0.89	1.44	2	1
1:A:108:HIS:CE1	1:A:140:ALA:HB2	0.89	2.02	2	8
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:ARG:N	0.89	1.82	19	12
1:A:30:ASN:HB3	1:A:33:ALA:HB2	0.89	1.44	8	17
1:A:66:LYS:CE	1:A:98:ILE:HD11	0.89	1.97	17	11
1:A:120:GLU:O	1:A:123:VAL:HG12	0.89	1.67	17	19
1:A:149:ARG:O	1:A:153:VAL:HG23	0.89	1.67	13	21
1:A:9:LEU:HD23	1:A:41:ALA:CB	0.89	1.97	3	9
1:A:105:LEU:HD11	1:A:132:HIS:CD2	0.89	2.01	13	12
1:A:107:LEU:HD12	1:A:140:ALA:HB1	0.89	1.42	13	3
1:A:42:LEU:CD2	1:A:65:LEU:HD12	0.89	1.98	15	8
1:A:108:HIS:CE1	1:A:132:HIS:CD2	0.89	2.61	4	5
1:A:79:ARG:CG	1:A:109:LEU:HD23	0.88	1.98	6	10
1:A:90:LEU:HD13	1:A:121:PHE:CE2	0.88	2.04	21	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:56:LEU:HD21	0.88	1.45	15	1
1:A:90:LEU:HD11	1:A:126:THR:CG2	0.88	1.99	21	4
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:O	0.88	1.68	11	3
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:HD12	0.87	1.68	21	3
1:A:57:LEU:HD22	1:A:61:ALA:O	0.87	1.69	21	10
1:A:97:ASN:HA	1:A:105:LEU:HD13	0.87	1.43	4	2
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:CB	0.87	1.98	2	7
1:A:110:ALA:HB1	1:A:118:VAL:CG1	0.87	1.99	6	18
1:A:132:HIS:CE1	1:A:140:ALA:HB2	0.87	2.04	4	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:108:HIS:CE1	0.86	2.05	1	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:41:ALA:HB2	0.86	1.46	11	11
1:A:107:LEU:HD13	1:A:129:ASN:ND2	0.86	1.85	3	3
1:A:116:LEU:CD1	1:A:155:LEU:HD23	0.86	2.00	8	10
1:A:42:LEU:HD23	1:A:65:LEU:CD1	0.86	2.00	3	3
1:A:107:LEU:HD23	1:A:119:VAL:HG22	0.86	1.46	1	3
1:A:108:HIS:CD2	1:A:143:LEU:HD12	0.86	2.05	10	13
1:A:83:LEU:HD22	1:A:118:VAL:HA	0.86	1.48	18	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LEU:HD13	1:A:56:LEU:CD2	0.86	2.01	12	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:129:ASN:CG	0.86	1.91	6	4
1:A:107:LEU:HD13	1:A:122:LEU:CB	0.85	2.00	18	5
1:A:8:GLU:OE1	1:A:24:LEU:HD22	0.85	1.71	4	1
1:A:90:LEU:HD21	1:A:126:THR:HG21	0.85	1.46	3	2
1:A:71:PHE:CE2	1:A:109:LEU:HD21	0.85	2.06	3	5
1:A:13:ALA:CB	1:A:21:LEU:HD21	0.85	2.00	6	4
1:A:9:LEU:HD12	1:A:24:LEU:CD2	0.85	2.01	5	3
1:A:146:LEU:HD11	1:A:147:TYR:CE1	0.85	2.07	18	1
1:A:111:ALA:HA	1:A:152:VAL:HG11	0.84	1.48	12	21
1:A:97:ASN:C	1:A:105:LEU:HD22	0.84	1.91	21	10
1:A:42:LEU:O	1:A:42:LEU:HD13	0.84	1.73	18	3
1:A:42:LEU:HD13	1:A:61:ALA:HB1	0.84	1.47	5	3
1:A:99:GLU:CG	1:A:105:LEU:HD23	0.84	2.02	17	10
1:A:90:LEU:CD2	1:A:126:THR:HG22	0.84	2.01	20	5
1:A:71:PHE:HA	1:A:75:HIS:ND1	0.84	1.87	10	21
1:A:110:ALA:CB	1:A:119:VAL:HG23	0.84	2.01	5	17
1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:GLU:N	0.83	1.87	2	4
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:OE1	0.83	1.73	11	3
1:A:107:LEU:CD2	1:A:119:VAL:HG13	0.83	2.00	4	3
1:A:96:VAL:HG21	1:A:122:LEU:O	0.83	1.74	2	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:155:LEU:HD23	0.83	1.49	8	5
1:A:13:ALA:CB	1:A:41:ALA:HB1	0.83	2.04	14	9
1:A:90:LEU:CD1	1:A:126:THR:HG23	0.83	2.01	16	2
1:A:107:LEU:HD23	1:A:129:ASN:CG	0.83	1.94	2	5
1:A:47:LEU:HD22	1:A:77:ALA:HA	0.82	1.51	10	5
1:A:83:LEU:HD11	1:A:121:PHE:CG	0.82	2.10	17	10
1:A:28:ASN:O	1:A:29:VAL:HG13	0.82	1.73	19	20
1:A:39:ARG:HG2	1:A:44:VAL:HG13	0.82	1.50	4	5
1:A:41:ALA:HA	1:A:44:VAL:HG23	0.82	1.50	7	1
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:HD11	0.81	1.51	4	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:56:LEU:CD2	0.81	1.97	4	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:24:LEU:HD21	0.81	1.75	10	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:61:ALA:HB1	0.81	2.05	20	4
1:A:74:ILE:HD12	1:A:98:ILE:HG21	0.81	1.49	20	20
1:A:63:PRO:HB2	1:A:89:LEU:HD13	0.81	1.52	8	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:58:LEU:N	0.81	1.90	19	1
1:A:63:PRO:CB	1:A:89:LEU:HD13	0.81	2.05	8	1
1:A:39:ARG:CG	1:A:44:VAL:HG12	0.81	2.05	18	2
1:A:21:LEU:HD12	1:A:22:THR:N	0.80	1.91	10	3
1:A:63:PRO:HA	1:A:73:VAL:HG11	0.80	1.52	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:LEU:CD2	1:A:155:LEU:HD23	0.80	2.05	11	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:119:VAL:HG22	0.80	1.50	12	1
1:A:64:ASP:OD1	1:A:98:ILE:HD11	0.80	1.77	18	8
1:A:90:LEU:HD11	1:A:126:THR:HG22	0.80	1.54	10	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:85:THR:CG2	0.80	2.07	3	7
1:A:107:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HB3	0.80	1.53	4	4
1:A:74:ILE:HA	1:A:89:LEU:HD12	0.80	1.53	3	5
1:A:96:VAL:HG23	1:A:122:LEU:CD2	0.79	1.98	5	5
1:A:96:VAL:CG2	1:A:126:THR:HG21	0.79	2.07	11	2
1:A:42:LEU:CD1	1:A:65:LEU:HD12	0.79	2.06	11	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:76:ASP:HB3	0.79	1.52	1	8
1:A:79:ARG:HG3	1:A:109:LEU:HD23	0.79	1.51	13	8
1:A:105:LEU:HD11	1:A:132:HIS:CG	0.79	2.13	13	4
1:A:57:LEU:HD12	1:A:92:PHE:CD1	0.79	2.13	16	11
1:A:105:LEU:HB2	1:A:106:PRO:HD2	0.79	1.54	4	8
1:A:107:LEU:HD12	1:A:119:VAL:HG22	0.79	1.55	21	6
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ILE:HG22	0.79	1.78	14	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:51:GLU:CD	0.79	1.99	12	1
1:A:108:HIS:HD2	1:A:143:LEU:HD12	0.78	1.37	10	12
1:A:63:PRO:CB	1:A:89:LEU:HD23	0.78	2.08	10	3
1:A:108:HIS:ND1	1:A:140:ALA:HB2	0.78	1.94	1	12
1:A:16:GLY:N	1:A:46:LYS:HG3	0.78	1.93	10	8
1:A:83:LEU:HD22	1:A:86:LEU:HD11	0.78	1.55	9	1
1:A:74:ILE:CG1	1:A:89:LEU:HD12	0.78	2.09	8	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:55:ARG:O	0.78	1.79	21	2
1:A:66:LYS:HE3	1:A:98:ILE:HD11	0.78	1.55	3	8
1:A:30:ASN:HB2	1:A:33:ALA:HB2	0.78	1.53	16	17
1:A:74:ILE:HA	1:A:89:LEU:HD23	0.78	1.55	18	10
1:A:107:LEU:HD23	1:A:129:ASN:ND2	0.77	1.94	2	5
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:HG13	0.77	1.80	20	10
1:A:12:ALA:HB1	1:A:17:ASP:HB3	0.77	1.56	3	6
1:A:105:LEU:CD2	1:A:132:HIS:CD2	0.77	2.67	20	16
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD23	0.77	1.77	4	2
1:A:146:LEU:HD11	1:A:147:TYR:CD1	0.77	2.14	18	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:129:ASN:OD1	0.77	1.78	2	1
1:A:108:HIS:HB3	1:A:143:LEU:HD13	0.77	1.54	10	10
1:A:50:PRO:HA	1:A:85:THR:HG23	0.77	1.55	2	6
1:A:21:LEU:HD11	1:A:55:ARG:HB3	0.77	1.56	12	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:106:PRO:HG3	0.76	2.10	5	20
1:A:42:LEU:CG	1:A:61:ALA:HB1	0.76	2.10	13	6
1:A:83:LEU:HD11	1:A:121:PHE:HB3	0.76	1.55	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:VAL:HG12	1:A:160:GLY:O	0.76	1.80	2	3
1:A:108:HIS:O	1:A:111:ALA:HB3	0.76	1.80	18	12
1:A:114:GLY:CA	1:A:152:VAL:HG21	0.76	2.10	7	13
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:HD12	0.76	1.56	17	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CB	0.76	2.10	14	2
1:A:118:VAL:HG12	1:A:119:VAL:N	0.76	1.96	4	21
1:A:57:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CG	0.76	2.16	7	8
1:A:90:LEU:HD11	1:A:126:THR:HG23	0.76	1.58	7	1
1:A:86:LEU:HD13	1:A:121:PHE:CE1	0.76	2.16	9	1
1:A:42:LEU:HG	1:A:61:ALA:HB1	0.75	1.56	13	6
1:A:39:ARG:HD3	1:A:44:VAL:HG11	0.75	1.56	6	1
1:A:96:VAL:HG22	1:A:129:ASN:OD1	0.75	1.82	18	1
1:A:41:ALA:HA	1:A:44:VAL:HG22	0.75	1.58	2	19
1:A:107:LEU:HD21	1:A:156:MET:SD	0.75	2.22	21	3
1:A:13:ALA:HB2	1:A:21:LEU:CD1	0.75	2.12	19	1
1:A:97:ASN:HA	1:A:105:LEU:HD22	0.75	1.57	18	11
1:A:96:VAL:O	1:A:105:LEU:HD11	0.75	1.82	19	1
1:A:107:LEU:HD11	1:A:119:VAL:HG13	0.75	1.56	2	5
1:A:39:ARG:CZ	1:A:44:VAL:HG11	0.75	2.12	7	7
1:A:42:LEU:HD23	1:A:61:ALA:HB1	0.75	1.59	19	3
1:A:12:ALA:HB1	1:A:17:ASP:CB	0.74	2.11	9	20
1:A:105:LEU:CD2	1:A:108:HIS:CE1	0.74	2.69	1	3
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:GLN:N	0.74	1.97	9	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:132:HIS:HD2	0.74	1.41	10	10
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:HG3	0.74	1.57	10	3
1:A:132:HIS:ND1	1:A:133:ARG:N	0.74	2.36	11	4
1:A:74:ILE:HG12	1:A:89:LEU:HD12	0.74	1.57	8	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:85:THR:CA	0.74	2.12	11	21
1:A:57:LEU:HD21	1:A:92:PHE:HB2	0.74	1.57	6	2
1:A:74:ILE:HG22	1:A:106:PRO:CG	0.74	2.12	20	20
1:A:130:VAL:HG23	1:A:130:VAL:O	0.74	1.83	9	5
1:A:83:LEU:HD23	1:A:117:ARG:HD3	0.74	1.60	18	2
1:A:42:LEU:HD12	1:A:65:LEU:CD1	0.74	2.12	1	2
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:HG23	0.74	1.83	7	1
1:A:105:LEU:HG	1:A:108:HIS:ND1	0.74	1.97	3	3
1:A:64:ASP:HA	1:A:72:ALA:HB1	0.74	1.60	12	4
1:A:8:GLU:OE1	1:A:24:LEU:HD11	0.74	1.82	11	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HD11	0.74	1.58	8	1
1:A:39:ARG:NE	1:A:44:VAL:HG11	0.73	1.98	7	10
1:A:90:LEU:HD13	1:A:126:THR:HG22	0.73	1.58	5	2
1:A:90:LEU:HG	1:A:126:THR:HG22	0.73	1.58	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LEU:CG	1:A:56:LEU:HD21	0.73	2.12	19	4
1:A:17:ASP:O	1:A:21:LEU:HD23	0.73	1.83	4	3
1:A:105:LEU:HB2	1:A:108:HIS:CE1	0.73	2.19	11	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:85:THR:HG21	0.73	1.59	7	7
1:A:57:LEU:HD21	1:A:92:PHE:CB	0.73	2.14	6	2
1:A:90:LEU:HD13	1:A:121:PHE:CZ	0.73	2.18	21	1
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:HG21	0.73	1.84	1	5
1:A:128:SER:O	1:A:130:VAL:HG13	0.73	1.84	16	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:41:ALA:HB3	0.72	1.59	10	7
1:A:10:ALA:HA	1:A:44:VAL:HG21	0.72	1.59	8	17
1:A:47:LEU:CD2	1:A:85:THR:HG21	0.72	2.12	20	7
1:A:17:ASP:O	1:A:21:LEU:HD13	0.72	1.84	8	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:O	0.72	1.84	11	6
1:A:78:ALA:HB3	1:A:106:PRO:HB2	0.72	1.60	14	1
1:A:71:PHE:HA	1:A:75:HIS:CE1	0.72	2.20	19	21
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.72	1.84	11	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:122:LEU:HD13	0.72	1.62	15	2
1:A:110:ALA:HB3	1:A:119:VAL:CG2	0.72	2.14	5	12
1:A:130:VAL:O	1:A:130:VAL:HG23	0.71	1.83	21	8
1:A:57:LEU:CA	1:A:61:ALA:HB3	0.71	2.13	9	17
1:A:105:LEU:HD13	1:A:132:HIS:NE2	0.71	1.99	19	2
1:A:96:VAL:HG21	1:A:126:THR:CG2	0.71	2.15	11	2
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:C	0.71	2.05	19	4
1:A:90:LEU:CD2	1:A:126:THR:HG21	0.71	2.15	3	2
1:A:105:LEU:CB	1:A:108:HIS:CE1	0.71	2.73	11	1
1:A:83:LEU:HG	1:A:118:VAL:HG22	0.71	1.61	1	2
1:A:42:LEU:HD12	1:A:73:VAL:HG11	0.71	1.61	6	1
1:A:105:LEU:CG	1:A:108:HIS:CE1	0.71	2.74	1	10
1:A:13:ALA:CA	1:A:21:LEU:HD11	0.71	2.15	3	2
1:A:42:LEU:CD2	1:A:61:ALA:HB1	0.71	2.16	18	9
1:A:54:ARG:O	1:A:58:LEU:HD23	0.71	1.86	11	13
1:A:21:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	0.71	1.63	14	3
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:HD12	0.71	1.86	21	1
1:A:75:HIS:CD2	1:A:109:LEU:HD11	0.71	2.21	17	2
1:A:78:ALA:HB2	1:A:86:LEU:HD12	0.70	1.63	14	8
1:A:12:ALA:HB1	1:A:17:ASP:HB2	0.70	1.61	5	18
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:HD23	0.70	2.16	4	5
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:HB3	0.70	1.62	21	8
1:A:105:LEU:HB3	1:A:108:HIS:CE1	0.70	2.21	19	2
1:A:57:LEU:CD1	1:A:92:PHE:CG	0.70	2.74	9	11
1:A:99:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HD23	0.70	1.63	5	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:GLU:H	0.70	1.45	2	2
1:A:90:LEU:HD23	1:A:126:THR:HG22	0.70	1.61	4	7
1:A:13:ALA:HB2	1:A:21:LEU:CD2	0.70	2.05	6	1
1:A:74:ILE:HD11	1:A:95:ASP:N	0.70	2.00	2	1
1:A:57:LEU:HG	1:A:92:PHE:CG	0.70	2.22	19	12
1:A:21:LEU:CD2	1:A:56:LEU:HD21	0.70	2.16	16	3
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:HD13	0.70	2.06	18	1
1:A:107:LEU:HB2	1:A:122:LEU:HD22	0.70	1.62	20	2
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:CB	0.70	2.17	4	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:77:ALA:CA	0.70	2.17	9	4
1:A:90:LEU:HD23	1:A:91:GLU:N	0.70	2.01	16	1
1:A:70:GLY:O	1:A:100:ASP:HA	0.70	1.87	4	21
1:A:31:VAL:HG13	1:A:60:GLY:O	0.70	1.86	18	2
1:A:79:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	0.70	1.63	6	5
1:A:54:ARG:HD2	1:A:88:THR:HG23	0.70	1.63	2	4
1:A:45:MET:O	1:A:47:LEU:N	0.69	2.24	4	20
1:A:63:PRO:HB2	1:A:94:ALA:HB2	0.69	1.63	8	4
1:A:10:ALA:HB1	1:A:39:ARG:NH1	0.69	2.02	6	3
1:A:107:LEU:HD22	1:A:122:LEU:CB	0.69	2.16	2	1
1:A:117:ARG:HD2	1:A:118:VAL:HG23	0.69	1.62	9	3
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:HG22	0.69	1.87	11	4
1:A:86:LEU:HD23	1:A:121:PHE:CD1	0.69	2.22	18	1
1:A:97:ASN:C	1:A:105:LEU:HD11	0.69	2.08	11	1
1:A:63:PRO:HB2	1:A:89:LEU:HD23	0.69	1.64	15	3
1:A:74:ILE:CG2	1:A:106:PRO:CG	0.69	2.70	9	19
1:A:108:HIS:CB	1:A:143:LEU:HD12	0.69	2.17	18	4
1:A:116:LEU:HD11	1:A:155:LEU:CD2	0.69	2.16	8	3
1:A:105:LEU:HG	1:A:108:HIS:CE1	0.69	2.22	3	13
1:A:107:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD13	0.69	1.63	6	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:119:VAL:HG22	0.69	2.17	2	2
1:A:90:LEU:HD21	1:A:96:VAL:HG22	0.69	1.65	10	1
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD13	0.69	2.08	19	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:119:VAL:HG22	0.69	2.17	1	2
1:A:72:ALA:HB3	1:A:74:ILE:HG22	0.69	1.64	14	1
1:A:86:LEU:CD1	1:A:122:LEU:HD21	0.69	2.18	2	1
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:CD	0.69	2.08	11	2
1:A:57:LEU:CD1	1:A:92:PHE:CD1	0.69	2.76	10	11
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD22	0.69	1.86	8	2
1:A:9:LEU:HD13	1:A:41:ALA:HB2	0.69	1.65	19	1
1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:HD23	0.69	2.02	19	2
1:A:90:LEU:HD13	1:A:90:LEU:C	0.69	2.09	11	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HA	0.68	1.63	13	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:126:THR:CG2	0.68	2.18	14	2
1:A:83:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CG	0.68	2.76	6	9
1:A:154:SER:O	1:A:158:ALA:HB3	0.68	1.88	4	21
1:A:105:LEU:CD1	1:A:132:HIS:CD2	0.68	2.77	4	9
1:A:143:LEU:HD22	1:A:147:TYR:CE2	0.68	2.23	5	9
1:A:43:GLN:HG2	1:A:73:VAL:HG22	0.68	1.63	3	2
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD12	0.68	2.04	4	2
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:CD1	0.68	2.18	4	4
1:A:57:LEU:HD13	1:A:57:LEU:O	0.68	1.89	12	7
1:A:57:LEU:HD21	1:A:61:ALA:O	0.68	1.87	3	8
1:A:74:ILE:HD12	1:A:98:ILE:CB	0.68	2.18	20	6
1:A:121:PHE:CD1	1:A:125:HIS:CD2	0.68	2.81	17	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:126:THR:CG2	0.68	2.18	5	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:59:ARG:HG3	0.68	1.66	8	1
1:A:140:ALA:HB3	1:A:156:MET:CE	0.68	2.19	4	1
1:A:133:ARG:HB2	1:A:137:GLY:CA	0.68	2.19	5	1
1:A:138:ASP:HA	1:A:142:ASP:CB	0.67	2.19	1	21
1:A:49:ASN:N	1:A:49:ASN:OD1	0.67	2.26	12	9
1:A:39:ARG:HG3	1:A:44:VAL:HG13	0.67	1.65	21	2
1:A:10:ALA:HB2	1:A:35:ASN:HD21	0.67	1.47	9	1
1:A:71:PHE:CG	1:A:75:HIS:ND1	0.67	2.61	7	20
1:A:58:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CZ	0.67	2.25	14	13
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:HG2	0.67	1.64	1	4
1:A:98:ILE:O	1:A:106:PRO:CD	0.67	2.43	4	18
1:A:39:ARG:HD3	1:A:44:VAL:HG13	0.67	1.67	1	5
1:A:41:ALA:HA	1:A:44:VAL:CG2	0.67	2.19	21	15
1:A:21:LEU:HD22	1:A:56:LEU:HD21	0.67	1.67	20	5
1:A:107:LEU:HD13	1:A:129:ASN:OD1	0.67	1.89	3	6
1:A:142:ASP:O	1:A:146:LEU:HD12	0.67	1.90	3	5
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:OE2	0.67	1.87	10	2
1:A:98:ILE:O	1:A:106:PRO:HD2	0.67	1.89	20	20
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:HB2	0.67	1.66	17	3
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:C	0.67	2.08	8	6
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:HD11	0.67	1.90	7	8
1:A:21:LEU:HD13	1:A:56:LEU:HD21	0.67	1.66	12	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:41:ALA:HB1	0.67	1.66	3	3
1:A:110:ALA:HB1	1:A:118:VAL:HG12	0.67	1.67	6	14
1:A:77:ALA:CB	1:A:85:THR:HG22	0.67	2.20	4	5
1:A:90:LEU:HD12	1:A:126:THR:CG2	0.67	2.04	16	1
1:A:31:VAL:HG11	1:A:60:GLY:O	0.66	1.90	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:MET:HE1	1:A:85:THR:HG21	0.66	1.66	14	1
1:A:45:MET:HE1	1:A:47:LEU:HD23	0.66	1.68	6	3
1:A:96:VAL:HG13	1:A:97:ASN:HD22	0.66	1.50	20	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:119:VAL:HG22	0.66	1.67	16	3
1:A:45:MET:O	1:A:47:LEU:HD23	0.66	1.90	1	4
1:A:41:ALA:CA	1:A:44:VAL:HG23	0.66	2.19	7	1
1:A:45:MET:HE1	1:A:85:THR:CG2	0.66	2.20	14	13
1:A:78:ALA:CB	1:A:86:LEU:HD11	0.66	2.15	19	3
1:A:75:HIS:CD2	1:A:109:LEU:CD1	0.66	2.78	17	1
1:A:105:LEU:HB2	1:A:108:HIS:ND1	0.66	2.06	2	5
1:A:74:ILE:HG23	1:A:106:PRO:HG3	0.66	1.65	14	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:MET:H	0.66	1.49	21	2
1:A:137:GLY:O	1:A:139:THR:N	0.66	2.28	13	21
1:A:97:ASN:O	1:A:105:LEU:HD11	0.66	1.91	11	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:41:ALA:HB1	0.66	1.66	14	2
1:A:21:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD21	0.66	2.20	15	2
1:A:12:ALA:HB1	1:A:20:GLN:HB3	0.66	1.68	3	12
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:N	0.66	2.06	19	3
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD22	0.66	2.10	4	2
1:A:44:VAL:O	1:A:46:LYS:N	0.66	2.28	4	3
1:A:74:ILE:HG23	1:A:106:PRO:CG	0.66	2.21	14	1
1:A:97:ASN:HA	1:A:105:LEU:CD2	0.66	2.20	20	3
1:A:107:LEU:HD12	1:A:122:LEU:CB	0.66	2.21	12	3
1:A:108:HIS:CD2	1:A:140:ALA:N	0.66	2.63	14	20
1:A:106:PRO:CA	1:A:109:LEU:HD12	0.66	2.20	17	1
1:A:105:LEU:CD1	1:A:129:ASN:ND2	0.66	2.59	1	1
1:A:130:VAL:HG12	1:A:161:ALA:CB	0.66	2.21	1	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HB2	0.65	1.68	18	2
1:A:57:LEU:HD11	1:A:92:PHE:CG	0.65	2.25	13	5
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD13	0.65	2.11	11	1
1:A:57:LEU:O	1:A:57:LEU:HD13	0.65	1.91	15	3
1:A:30:ASN:O	1:A:33:ALA:N	0.65	2.25	13	4
1:A:47:LEU:CB	1:A:82:PHE:CD2	0.65	2.80	10	19
1:A:105:LEU:CB	1:A:106:PRO:HD2	0.65	2.21	18	14
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:HD23	0.65	2.07	3	2
1:A:9:LEU:HD13	1:A:41:ALA:CB	0.65	2.20	13	2
1:A:43:GLN:HA	1:A:73:VAL:HG22	0.65	1.68	14	5
1:A:86:LEU:CD1	1:A:121:PHE:CE1	0.65	2.80	9	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CB	0.65	2.22	7	8
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:C	0.65	2.11	17	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HG3	0.65	1.69	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:O	1:A:29:VAL:HG13	0.65	1.91	8	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:21:LEU:C	0.65	2.11	12	2
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:CB	0.65	2.45	10	4
1:A:96:VAL:HG23	1:A:122:LEU:HD22	0.65	1.68	3	2
1:A:134:ASN:ND2	1:A:143:LEU:HD11	0.65	2.07	7	1
1:A:132:HIS:CE1	1:A:140:ALA:CB	0.65	2.80	4	1
1:A:75:HIS:CD2	1:A:106:PRO:HD3	0.65	2.27	18	17
1:A:25:LEU:HD13	1:A:29:VAL:HG21	0.65	1.69	8	1
1:A:113:GLU:CB	1:A:115:HIS:CE1	0.65	2.80	15	11
1:A:9:LEU:CD1	1:A:41:ALA:HB2	0.65	2.22	19	1
1:A:78:ALA:HB1	1:A:110:ALA:CB	0.64	2.07	3	1
1:A:75:HIS:HA	1:A:106:PRO:HB3	0.64	1.69	9	19
1:A:9:LEU:HD23	1:A:24:LEU:HD23	0.64	1.69	13	2
1:A:105:LEU:CD1	1:A:108:HIS:ND1	0.64	2.61	20	4
1:A:108:HIS:HE1	1:A:132:HIS:CD2	0.64	2.11	17	5
1:A:129:ASN:HB3	1:A:132:HIS:CB	0.64	2.21	1	1
1:A:54:ARG:CG	1:A:58:LEU:CD2	0.64	2.75	20	14
1:A:78:ALA:CB	1:A:110:ALA:HB2	0.64	2.07	3	1
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:CE2	0.64	2.27	21	3
1:A:34:GLN:HG3	1:A:40:THR:HG22	0.64	1.67	17	1
1:A:58:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CZ	0.64	2.81	2	6
1:A:40:THR:O	1:A:44:VAL:HG13	0.64	1.93	14	2
1:A:13:ALA:CA	1:A:21:LEU:HD21	0.64	2.23	4	1
1:A:65:LEU:HD12	1:A:65:LEU:O	0.64	1.93	4	1
1:A:10:ALA:O	1:A:14:ALA:CB	0.64	2.46	4	10
1:A:37:PHE:O	1:A:37:PHE:CD1	0.64	2.51	6	4
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ILE:HD11	0.64	2.08	12	1
1:A:96:VAL:HG11	1:A:126:THR:HB	0.64	1.68	3	2
1:A:57:LEU:HD11	1:A:92:PHE:CD1	0.64	2.28	13	4
1:A:105:LEU:HD22	1:A:132:HIS:CD2	0.64	2.28	19	2
1:A:96:VAL:HG11	1:A:127:ALA:H	0.64	1.53	1	2
1:A:130:VAL:HG12	1:A:161:ALA:CA	0.64	2.23	1	7
1:A:39:ARG:HD3	1:A:39:ARG:O	0.64	1.92	2	5
1:A:18:LEU:HD22	1:A:51:GLU:OE2	0.64	1.93	18	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:44:VAL:HG23	0.64	2.12	15	4
1:A:85:THR:O	1:A:89:LEU:HD12	0.63	1.93	10	1
1:A:42:LEU:HG	1:A:73:VAL:HG21	0.63	1.69	5	3
1:A:71:PHE:CD1	1:A:75:HIS:ND1	0.63	2.67	19	18
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD23	0.63	2.07	2	1
1:A:57:LEU:CG	1:A:61:ALA:HB3	0.63	2.23	18	7
1:A:146:LEU:HD21	1:A:147:TYR:CZ	0.63	2.27	18	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:86:LEU:N	0.63	2.31	13	20
1:A:105:LEU:CD1	1:A:108:HIS:CE1	0.63	2.80	17	13
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ALA:HB2	0.63	1.93	13	4
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD12	0.63	2.13	18	1
1:A:138:ASP:HB2	1:A:143:LEU:HD21	0.63	1.68	1	5
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD22	0.63	1.54	8	4
1:A:64:ASP:O	1:A:66:LYS:N	0.63	2.31	14	19
1:A:79:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD23	0.63	1.70	14	4
1:A:86:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CE1	0.63	2.81	8	10
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD13	0.63	2.13	9	5
1:A:47:LEU:HB3	1:A:82:PHE:CG	0.63	2.28	9	19
1:A:97:ASN:CA	1:A:105:LEU:HD22	0.63	2.23	21	9
1:A:106:PRO:CA	1:A:109:LEU:HD11	0.63	2.22	4	1
1:A:108:HIS:CE1	1:A:132:HIS:CG	0.63	2.86	11	4
1:A:57:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CD2	0.63	2.81	19	1
1:A:74:ILE:HG22	1:A:106:PRO:HG3	0.63	1.70	20	3
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:H	0.63	1.52	18	3
1:A:107:LEU:HD23	1:A:122:LEU:CB	0.63	2.24	13	2
1:A:90:LEU:HD23	1:A:126:THR:CG2	0.63	2.24	15	3
1:A:145:ARG:HA	1:A:153:VAL:HG21	0.63	1.69	6	21
1:A:74:ILE:HD11	1:A:94:ALA:CB	0.63	2.23	8	1
1:A:14:ALA:HB2	1:A:44:VAL:CB	0.62	2.24	16	16
1:A:10:ALA:HB2	1:A:35:ASN:ND2	0.62	2.08	9	1
1:A:121:PHE:CD1	1:A:122:LEU:N	0.62	2.67	19	14
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:CG	0.62	2.52	21	17
1:A:97:ASN:HA	1:A:105:LEU:HD23	0.62	1.69	2	1
1:A:133:ARG:O	1:A:134:ASN:O	0.62	2.17	11	17
1:A:121:PHE:CD1	1:A:122:LEU:HD22	0.62	2.29	9	2
1:A:97:ASN:ND2	1:A:132:HIS:CE1	0.62	2.67	1	2
1:A:74:ILE:HG22	1:A:106:PRO:CB	0.62	2.24	19	19
1:A:45:MET:HE2	1:A:47:LEU:HD13	0.62	1.71	7	6
1:A:153:VAL:HG12	1:A:157:GLN:NE2	0.62	2.09	16	4
1:A:47:LEU:HB3	1:A:82:PHE:CD2	0.62	2.30	21	16
1:A:57:LEU:HA	1:A:61:ALA:CB	0.62	2.25	19	20
1:A:57:LEU:CD2	1:A:61:ALA:HB3	0.62	2.24	3	6
1:A:107:LEU:HB3	1:A:132:HIS:CE1	0.62	2.29	4	1
1:A:143:LEU:N	1:A:143:LEU:CD2	0.62	2.62	1	1
1:A:72:ALA:O	1:A:75:HIS:N	0.62	2.32	7	20
1:A:9:LEU:CD1	1:A:29:VAL:HG12	0.62	2.24	16	5
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:HG23	0.62	2.25	18	13
1:A:39:ARG:NE	1:A:44:VAL:CG1	0.62	2.63	13	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:PHE:CA	1:A:75:HIS:HD1	0.62	2.08	10	3
1:A:129:ASN:ND2	1:A:140:ALA:HB3	0.62	2.10	16	5
1:A:39:ARG:NH1	1:A:44:VAL:HG11	0.61	2.10	20	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:N	0.61	2.68	9	4
1:A:66:LYS:CE	1:A:98:ILE:CD1	0.61	2.78	12	9
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:HD13	0.61	2.26	8	3
1:A:145:ARG:CA	1:A:153:VAL:HG21	0.61	2.25	6	5
1:A:9:LEU:CD1	1:A:24:LEU:HD23	0.61	2.13	5	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:29:VAL:HG21	0.61	1.72	21	1
1:A:86:LEU:HD11	1:A:122:LEU:HD21	0.61	1.72	2	1
1:A:75:HIS:CE1	1:A:99:GLU:O	0.61	2.53	2	3
1:A:39:ARG:CG	1:A:44:VAL:CG1	0.61	2.78	2	5
1:A:107:LEU:CD1	1:A:119:VAL:HG13	0.61	2.24	7	3
1:A:83:LEU:HD22	1:A:118:VAL:CA	0.61	2.25	3	6
1:A:63:PRO:HB2	1:A:94:ALA:HB1	0.61	1.72	6	13
1:A:116:LEU:HD13	1:A:151:GLU:HB3	0.61	1.72	10	5
1:A:143:LEU:O	1:A:147:TYR:CD2	0.61	2.53	18	21
1:A:74:ILE:CA	1:A:89:LEU:HD12	0.61	2.23	3	1
1:A:42:LEU:HB2	1:A:56:LEU:HD11	0.61	1.73	13	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD1	0.61	2.68	21	8
1:A:96:VAL:CG2	1:A:126:THR:CG2	0.61	2.77	11	2
1:A:75:HIS:CG	1:A:109:LEU:CD2	0.61	2.82	5	2
1:A:39:ARG:CD	1:A:44:VAL:CG1	0.61	2.77	13	5
1:A:133:ARG:CA	1:A:139:THR:HG22	0.61	2.26	5	13
1:A:45:MET:HE1	1:A:85:THR:HG23	0.61	1.72	18	4
1:A:47:LEU:HD12	1:A:85:THR:CG2	0.61	2.25	13	7
1:A:42:LEU:HD11	1:A:61:ALA:HB1	0.61	1.73	7	1
1:A:126:THR:O	1:A:127:ALA:HB2	0.61	1.95	10	1
1:A:14:ALA:C	1:A:46:LYS:CG	0.61	2.69	12	2
1:A:129:ASN:HB2	1:A:132:HIS:CG	0.61	2.31	7	5
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:CD1	0.61	2.78	11	7
1:A:13:ALA:N	1:A:21:LEU:HD21	0.61	2.11	4	1
1:A:29:VAL:O	1:A:31:VAL:N	0.61	2.33	13	5
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:CG2	0.61	2.79	21	16
1:A:57:LEU:HG	1:A:61:ALA:HB3	0.61	1.71	3	7
1:A:111:ALA:CA	1:A:119:VAL:HG21	0.61	2.26	4	2
1:A:63:PRO:CG	1:A:94:ALA:HA	0.61	2.26	1	18
1:A:86:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HD11	0.61	1.72	4	3
1:A:98:ILE:CG2	1:A:98:ILE:O	0.60	2.49	19	10
1:A:105:LEU:HD12	1:A:108:HIS:ND1	0.60	2.11	20	4
1:A:54:ARG:CG	1:A:58:LEU:HD21	0.60	2.25	14	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:THR:O	1:A:92:PHE:CD2	0.60	2.54	8	6
1:A:74:ILE:CD1	1:A:98:ILE:HG21	0.60	2.24	20	3
1:A:42:LEU:HD22	1:A:61:ALA:CB	0.60	2.25	16	5
1:A:71:PHE:CB	1:A:75:HIS:HD1	0.60	2.07	17	2
1:A:99:GLU:CG	1:A:132:HIS:NE2	0.60	2.64	19	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:132:HIS:CE1	0.60	2.54	9	9
1:A:108:HIS:NE2	1:A:140:ALA:N	0.60	2.49	13	13
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:OE2	0.60	1.96	11	2
1:A:18:LEU:HD21	1:A:51:GLU:HB3	0.60	1.72	4	1
1:A:105:LEU:HB3	1:A:108:HIS:ND1	0.60	2.11	11	1
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:CB	0.60	2.49	21	5
1:A:57:LEU:CD1	1:A:57:LEU:C	0.60	2.70	10	3
1:A:50:PRO:CB	1:A:85:THR:HA	0.60	2.26	17	21
1:A:9:LEU:CD2	1:A:41:ALA:CB	0.60	2.79	6	4
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:CG2	0.60	2.50	7	8
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:C	0.60	2.17	4	3
1:A:37:PHE:CB	1:A:39:ARG:NH2	0.60	2.65	2	3
1:A:83:LEU:HD13	1:A:87:GLN:HG3	0.60	1.72	9	1
1:A:71:PHE:HA	1:A:75:HIS:HD1	0.60	1.52	10	2
1:A:102:GLU:CA	1:A:135:HIS:CE1	0.60	2.84	11	8
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:CD1	0.60	2.79	12	12
1:A:47:LEU:CD2	1:A:82:PHE:CB	0.60	2.80	14	2
1:A:129:ASN:ND2	1:A:132:HIS:CE1	0.60	2.70	4	1
1:A:123:VAL:O	1:A:127:ALA:HB2	0.60	1.96	8	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD13	0.60	1.72	10	1
1:A:63:PRO:CB	1:A:94:ALA:HB2	0.60	2.26	10	18
1:A:144:ALA:HB1	1:A:152:VAL:HB	0.60	1.73	1	7
1:A:13:ALA:N	1:A:21:LEU:HD11	0.60	2.11	3	2
1:A:39:ARG:O	1:A:39:ARG:CD	0.60	2.50	3	5
1:A:39:ARG:O	1:A:39:ARG:HD3	0.60	1.97	21	4
1:A:46:LYS:CB	1:A:52:ILE:HD12	0.60	2.27	5	10
1:A:71:PHE:CD1	1:A:75:HIS:CE1	0.60	2.89	7	9
1:A:9:LEU:CD1	1:A:21:LEU:CD1	0.60	2.80	15	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:98:ILE:CD1	0.60	2.27	7	9
1:A:90:LEU:HD23	1:A:121:PHE:CZ	0.60	2.31	17	1
1:A:40:THR:HG21	1:A:65:LEU:HD13	0.60	1.72	2	1
1:A:108:HIS:CG	1:A:140:ALA:HA	0.60	2.30	1	15
1:A:74:ILE:O	1:A:77:ALA:HB3	0.60	1.97	12	6
1:A:80:ALA:HB3	1:A:82:PHE:CE2	0.60	2.31	4	8
1:A:9:LEU:CD1	1:A:41:ALA:CB	0.60	2.80	19	7
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:ARG:H	0.60	1.52	9	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ARG:N	1:A:39:ARG:CD	0.60	2.65	16	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:21:LEU:HD13	0.60	1.73	19	1
1:A:110:ALA:HB1	1:A:118:VAL:HG11	0.60	1.72	20	7
1:A:63:PRO:O	1:A:73:VAL:CG1	0.60	2.50	7	6
1:A:71:PHE:CA	1:A:75:HIS:ND1	0.59	2.65	10	14
1:A:57:LEU:HG	1:A:92:PHE:CD2	0.59	2.32	16	13
1:A:79:ARG:CB	1:A:109:LEU:HD23	0.59	2.26	14	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:CD1	0.59	2.32	8	9
1:A:21:LEU:CD1	1:A:22:THR:N	0.59	2.65	9	3
1:A:44:VAL:O	1:A:45:MET:C	0.59	2.40	17	20
1:A:47:LEU:HB2	1:A:82:PHE:CD2	0.59	2.32	6	18
1:A:9:LEU:O	1:A:13:ALA:HB3	0.59	1.97	15	7
1:A:83:LEU:HD23	1:A:86:LEU:HB3	0.59	1.74	4	7
1:A:107:LEU:CD2	1:A:122:LEU:CB	0.59	2.80	10	2
1:A:44:VAL:CG2	1:A:45:MET:N	0.59	2.66	9	12
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:CD1	0.59	2.48	21	12
1:A:107:LEU:HD22	1:A:140:ALA:CB	0.59	2.17	8	5
1:A:35:ASN:CB	1:A:39:ARG:NH1	0.59	2.65	16	3
1:A:10:ALA:CB	1:A:39:ARG:CZ	0.59	2.80	6	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:21:LEU:HD11	0.59	1.73	2	2
1:A:90:LEU:HD22	1:A:121:PHE:CZ	0.59	2.31	21	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:49:ASN:N	0.59	2.34	20	8
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:CD2	0.59	2.55	8	19
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:O	0.59	2.55	17	3
1:A:97:ASN:O	1:A:105:LEU:HD22	0.59	1.96	21	4
1:A:42:LEU:HD23	1:A:61:ALA:CB	0.59	2.27	13	1
1:A:90:LEU:HD21	1:A:125:HIS:HB3	0.59	1.74	17	2
1:A:12:ALA:HB2	1:A:20:GLN:HG2	0.59	1.75	14	9
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:HA	0.59	1.98	9	19
1:A:129:ASN:ND2	1:A:140:ALA:CB	0.59	2.66	2	3
1:A:74:ILE:HG13	1:A:89:LEU:HD23	0.59	1.72	11	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:CB	0.59	2.50	14	1
1:A:21:LEU:O	1:A:25:LEU:HD23	0.59	1.97	8	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CE1	0.59	2.31	8	1
1:A:143:LEU:HD23	1:A:143:LEU:N	0.59	2.12	1	3
1:A:74:ILE:HD11	1:A:94:ALA:HB1	0.59	1.75	4	5
1:A:98:ILE:O	1:A:105:LEU:CB	0.59	2.51	1	4
1:A:129:ASN:HD21	1:A:140:ALA:HB3	0.59	1.58	12	6
1:A:149:ARG:CD	1:A:152:VAL:CG2	0.59	2.80	11	5
1:A:133:ARG:HB3	1:A:137:GLY:CA	0.59	2.28	9	16
1:A:105:LEU:HD13	1:A:132:HIS:HD2	0.59	1.56	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:ARG:CG	1:A:88:THR:HG23	0.59	2.28	6	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:55:ARG:O	0.59	1.97	14	1
1:A:66:LYS:HG3	1:A:70:GLY:O	0.59	1.98	2	1
1:A:108:HIS:CD2	1:A:140:ALA:CA	0.59	2.85	7	17
1:A:57:LEU:HD13	1:A:57:LEU:C	0.59	2.18	13	6
1:A:129:ASN:CG	1:A:132:HIS:CG	0.59	2.76	4	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HD22	0.59	1.73	10	2
1:A:54:ARG:HG3	1:A:58:LEU:CD2	0.59	2.28	12	14
1:A:8:GLU:OE2	1:A:12:ALA:HB2	0.59	1.97	13	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:92:PHE:CD1	0.59	2.32	1	6
1:A:69:THR:O	1:A:71:PHE:CD1	0.59	2.56	9	7
1:A:54:ARG:HG2	1:A:58:LEU:HD21	0.58	1.75	14	5
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:CE1	0.58	2.56	14	14
1:A:88:THR:HG22	1:A:92:PHE:CE2	0.58	2.33	16	2
1:A:57:LEU:O	1:A:92:PHE:CE1	0.58	2.56	6	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:129:ASN:HB2	0.58	1.75	1	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:89:LEU:CD1	0.58	2.27	8	1
1:A:138:ASP:CA	1:A:142:ASP:HB3	0.58	2.28	9	2
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:CG2	0.58	2.51	11	4
1:A:42:LEU:HD12	1:A:53:ALA:HB1	0.58	1.73	16	1
1:A:128:SER:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.58	1.74	15	3
1:A:40:THR:O	1:A:44:VAL:CG2	0.58	2.51	7	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:CD2	0.58	2.33	21	1
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:HD2	0.58	1.75	11	2
1:A:110:ALA:HB1	1:A:115:HIS:HB2	0.58	1.75	10	6
1:A:75:HIS:CA	1:A:106:PRO:HB3	0.58	2.29	9	14
1:A:45:MET:O	1:A:47:LEU:HD13	0.58	1.97	18	3
1:A:129:ASN:O	1:A:131:GLY:N	0.58	2.36	5	11
1:A:102:GLU:HA	1:A:135:HIS:CE1	0.58	2.33	11	13
1:A:10:ALA:HB1	1:A:39:ARG:CZ	0.58	2.28	6	1
1:A:57:LEU:O	1:A:92:PHE:CE2	0.58	2.56	14	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB3	0.58	1.74	4	1
1:A:90:LEU:CD1	1:A:126:THR:CG2	0.58	2.81	10	3
1:A:114:GLY:O	1:A:116:LEU:N	0.58	2.37	2	21
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:CB	0.58	2.51	11	17
1:A:133:ARG:HG2	1:A:139:THR:HG22	0.58	1.75	21	14
1:A:146:LEU:CD1	1:A:147:TYR:CD1	0.58	2.87	18	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:151:GLU:HB3	0.58	1.75	19	1
1:A:12:ALA:HB2	1:A:20:GLN:NE2	0.58	2.14	7	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:89:LEU:N	0.58	2.65	8	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ASN:CB	0.58	2.50	13	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LEU:HD22	1:A:132:HIS:HD2	0.58	1.59	11	1
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:HB2	0.58	1.99	21	5
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:HE1	0.58	1.52	15	2
1:A:39:ARG:CD	1:A:39:ARG:N	0.58	2.66	4	4
1:A:111:ALA:HB2	1:A:119:VAL:HG21	0.58	1.75	9	2
1:A:73:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HD21	0.58	1.75	2	2
1:A:63:PRO:HA	1:A:73:VAL:CG1	0.58	2.28	7	5
1:A:45:MET:HE2	1:A:47:LEU:HD23	0.58	1.75	19	2
1:A:96:VAL:HG22	1:A:129:ASN:ND2	0.58	2.12	20	1
1:A:96:VAL:HG13	1:A:122:LEU:HD23	0.58	1.74	10	2
1:A:90:LEU:CG	1:A:126:THR:CG2	0.58	2.82	3	3
1:A:47:LEU:CB	1:A:82:PHE:CG	0.58	2.87	9	14
1:A:105:LEU:CD1	1:A:132:HIS:NE2	0.58	2.67	4	1
1:A:66:LYS:CD	1:A:70:GLY:O	0.58	2.52	4	10
1:A:37:PHE:CB	1:A:39:ARG:CZ	0.58	2.82	8	3
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD12	0.58	1.98	1	2
1:A:130:VAL:HG12	1:A:161:ALA:HA	0.58	1.76	13	7
1:A:50:PRO:HB3	1:A:85:THR:HA	0.58	1.75	5	17
1:A:113:GLU:HB3	1:A:115:HIS:CE1	0.57	2.34	13	11
1:A:10:ALA:CB	1:A:39:ARG:NE	0.57	2.67	6	1
1:A:143:LEU:CD2	1:A:147:TYR:CE2	0.57	2.87	10	8
1:A:113:GLU:CB	1:A:115:HIS:NE2	0.57	2.67	18	8
1:A:14:ALA:O	1:A:46:LYS:CE	0.57	2.53	18	20
1:A:57:LEU:CG	1:A:92:PHE:CG	0.57	2.87	19	12
1:A:118:VAL:CG1	1:A:119:VAL:N	0.57	2.67	11	20
1:A:49:ASN:OD1	1:A:52:ILE:HD11	0.57	1.99	19	10
1:A:73:VAL:CG2	1:A:89:LEU:HD21	0.57	2.21	13	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:98:ILE:HG22	0.57	1.76	19	1
1:A:126:THR:O	1:A:127:ALA:HB3	0.57	1.98	8	1
1:A:66:LYS:HG2	1:A:72:ALA:N	0.57	2.14	4	3
1:A:57:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CD2	0.57	2.35	14	2
1:A:108:HIS:N	1:A:108:HIS:ND1	0.57	2.53	1	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:51:GLU:CG	0.57	2.30	12	1
1:A:108:HIS:HB3	1:A:143:LEU:CD1	0.57	2.29	8	18
1:A:90:LEU:CD2	1:A:126:THR:CG2	0.57	2.80	3	4
1:A:99:GLU:HG2	1:A:105:LEU:HD23	0.57	1.74	17	2
1:A:21:LEU:HD21	1:A:56:LEU:HD21	0.57	1.76	19	1
1:A:74:ILE:HG23	1:A:106:PRO:HD3	0.57	1.77	14	1
1:A:70:GLY:O	1:A:100:ASP:CA	0.57	2.52	9	10
1:A:105:LEU:CD1	1:A:107:LEU:CB	0.57	2.83	10	1
1:A:75:HIS:O	1:A:79:ARG:N	0.57	2.38	15	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ARG:HD3	1:A:44:VAL:CG1	0.57	2.29	3	9
1:A:116:LEU:HD13	1:A:117:ARG:N	0.57	2.15	11	1
1:A:70:GLY:O	1:A:100:ASP:CB	0.57	2.53	20	6
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:N	0.57	2.36	12	16
1:A:64:ASP:O	1:A:65:LEU:C	0.57	2.43	4	14
1:A:54:ARG:C	1:A:58:LEU:HD23	0.57	2.20	6	9
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:CG2	0.57	2.52	7	6
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ILE:CG1	0.57	2.67	12	1
1:A:66:LYS:HG2	1:A:70:GLY:CA	0.57	2.30	2	1
1:A:63:PRO:CB	1:A:94:ALA:CB	0.57	2.83	7	18
1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:MET:N	0.57	2.15	4	10
1:A:16:GLY:N	1:A:46:LYS:CD	0.57	2.68	2	8
1:A:42:LEU:CD2	1:A:61:ALA:CB	0.57	2.83	13	1
1:A:63:PRO:HG2	1:A:94:ALA:CA	0.57	2.30	13	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:HE2	0.57	1.60	21	1
1:A:108:HIS:ND1	1:A:140:ALA:CB	0.57	2.67	1	2
1:A:72:ALA:O	1:A:75:HIS:HB2	0.57	2.00	21	21
1:A:109:LEU:O	1:A:112:LYS:N	0.57	2.38	4	21
1:A:149:ARG:CD	1:A:149:ARG:N	0.57	2.67	3	4
1:A:16:GLY:N	1:A:46:LYS:HD2	0.57	2.15	5	13
1:A:112:LYS:HG2	1:A:147:TYR:CE2	0.57	2.35	9	14
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ARG:N	0.57	2.38	15	15
1:A:66:LYS:HD3	1:A:72:ALA:N	0.57	2.15	9	7
1:A:63:PRO:HB2	1:A:94:ALA:CB	0.56	2.30	14	21
1:A:57:LEU:CD2	1:A:61:ALA:O	0.56	2.53	11	16
1:A:39:ARG:CD	1:A:39:ARG:O	0.56	2.53	11	3
1:A:45:MET:SD	1:A:53:ALA:N	0.56	2.78	12	1
1:A:98:ILE:HG22	1:A:106:PRO:CD	0.56	2.30	2	11
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:CB	0.56	2.54	13	5
1:A:90:LEU:CD2	1:A:125:HIS:CB	0.56	2.82	14	2
1:A:105:LEU:CB	1:A:108:HIS:ND1	0.56	2.68	11	1
1:A:123:VAL:HG11	1:A:155:LEU:HD12	0.56	1.77	16	1
1:A:47:LEU:O	1:A:82:PHE:CD1	0.56	2.58	6	2
1:A:74:ILE:HG23	1:A:106:PRO:CD	0.56	2.30	14	1
1:A:37:PHE:C	1:A:37:PHE:CD1	0.56	2.78	21	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:73:VAL:HG22	0.56	1.76	21	4
1:A:47:LEU:CD1	1:A:76:ASP:O	0.56	2.53	16	8
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:CD2	0.56	2.83	19	6
1:A:42:LEU:HD11	1:A:61:ALA:CB	0.56	2.30	20	1
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:N	0.56	2.16	7	2
1:A:143:LEU:HD22	1:A:147:TYR:OH	0.56	2.00	19	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HD11	0.56	1.77	3	2
1:A:57:LEU:HD22	1:A:92:PHE:HB3	0.56	1.78	17	3
1:A:66:LYS:CD	1:A:72:ALA:N	0.56	2.68	9	7
1:A:108:HIS:NE2	1:A:132:HIS:O	0.56	2.38	4	3
1:A:9:LEU:HD23	1:A:24:LEU:HD12	0.56	1.78	7	1
1:A:77:ALA:O	1:A:82:PHE:N	0.56	2.37	21	17
1:A:66:LYS:CG	1:A:70:GLY:O	0.56	2.54	2	4
1:A:149:ARG:CD	1:A:152:VAL:HG21	0.56	2.31	9	6
1:A:113:GLU:HB2	1:A:115:HIS:CE1	0.56	2.36	6	5
1:A:56:LEU:O	1:A:60:GLY:N	0.56	2.38	19	1
1:A:123:VAL:HG12	1:A:124:LYS:HG2	0.56	1.75	20	1
1:A:13:ALA:CB	1:A:21:LEU:HD11	0.56	2.31	2	1
1:A:138:ASP:HA	1:A:142:ASP:HB2	0.56	1.77	1	18
1:A:108:HIS:CE1	1:A:140:ALA:CB	0.56	2.88	1	2
1:A:25:LEU:HD21	1:A:59:ARG:HB2	0.56	1.77	5	1
1:A:108:HIS:CD2	1:A:139:THR:C	0.56	2.79	1	19
1:A:83:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CB	0.56	2.80	21	6
1:A:79:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD23	0.56	1.76	19	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:ARG:N	0.56	2.66	19	4
1:A:75:HIS:CG	1:A:109:LEU:HD11	0.56	2.35	1	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HD22	0.56	2.30	10	2
1:A:124:LYS:O	1:A:126:THR:N	0.56	2.39	10	8
1:A:121:PHE:CD1	1:A:121:PHE:C	0.56	2.79	8	9
1:A:54:ARG:O	1:A:58:LEU:CD2	0.56	2.54	3	11
1:A:50:PRO:O	1:A:88:THR:HG21	0.56	2.01	17	6
1:A:54:ARG:O	1:A:57:LEU:N	0.56	2.39	19	3
1:A:105:LEU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	0.56	1.76	5	10
1:A:9:LEU:CD2	1:A:24:LEU:HD23	0.56	2.30	20	4
1:A:107:LEU:CB	1:A:122:LEU:HD22	0.56	2.30	20	1
1:A:96:VAL:O	1:A:129:ASN:ND2	0.56	2.38	20	1
1:A:90:LEU:HD12	1:A:90:LEU:C	0.56	2.20	1	1
1:A:124:LYS:C	1:A:125:HIS:CG	0.56	2.78	10	15
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:N	0.56	2.16	17	8
1:A:39:ARG:CZ	1:A:44:VAL:CG1	0.56	2.84	7	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:98:ILE:HB	0.55	1.78	20	5
1:A:45:MET:HG3	1:A:47:LEU:HD21	0.55	1.76	19	1
1:A:65:LEU:O	1:A:65:LEU:HD12	0.55	2.01	20	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:75:HIS:N	0.55	2.69	14	1
1:A:53:ALA:O	1:A:56:LEU:N	0.55	2.39	6	11
1:A:134:ASN:OD1	1:A:137:GLY:N	0.55	2.39	6	12
1:A:141:CYS:O	1:A:145:ARG:CB	0.55	2.55	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LYS:CD	1:A:98:ILE:HD11	0.55	2.31	14	3
1:A:45:MET:HE1	1:A:47:LEU:HD22	0.55	1.78	5	4
1:A:132:HIS:HD1	1:A:133:ARG:N	0.55	2.00	11	2
1:A:39:ARG:HG2	1:A:44:VAL:CG1	0.55	2.30	16	1
1:A:58:LEU:N	1:A:58:LEU:CD2	0.55	2.65	19	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:131:GLY:N	0.55	2.68	4	2
1:A:14:ALA:HB2	1:A:44:VAL:HG21	0.55	1.75	12	1
1:A:63:PRO:HG2	1:A:94:ALA:HA	0.55	1.78	20	20
1:A:111:ALA:CA	1:A:152:VAL:HG11	0.55	2.30	6	5
1:A:90:LEU:CD1	1:A:126:THR:HG21	0.55	2.17	21	1
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:ND2	0.55	2.39	10	1
1:A:124:LYS:HB3	1:A:125:HIS:CD2	0.55	2.36	14	18
1:A:31:VAL:CG1	1:A:60:GLY:O	0.55	2.55	17	5
1:A:97:ASN:CG	1:A:132:HIS:CE1	0.55	2.80	14	10
1:A:104:ASN:OD1	1:A:134:ASN:CB	0.55	2.55	18	4
1:A:66:LYS:HE2	1:A:72:ALA:HB2	0.55	1.77	7	1
1:A:83:LEU:HB2	1:A:118:VAL:HG22	0.55	1.79	9	2
1:A:124:LYS:C	1:A:125:HIS:CD2	0.55	2.80	9	5
1:A:71:PHE:CD2	1:A:109:LEU:HD21	0.55	2.37	3	1
1:A:140:ALA:HB3	1:A:156:MET:HE1	0.55	1.79	4	3
1:A:65:LEU:O	1:A:65:LEU:CD1	0.55	2.55	20	1
1:A:45:MET:CE	1:A:85:THR:CG2	0.55	2.84	14	1
1:A:21:LEU:HA	1:A:24:LEU:HD12	0.55	1.77	4	1
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:NE2	0.55	2.39	10	6
1:A:150:ASN:O	1:A:153:VAL:N	0.55	2.40	17	21
1:A:32:ASN:O	1:A:33:ALA:O	0.55	2.25	7	19
1:A:62:ASN:O	1:A:65:LEU:HD12	0.55	2.02	12	5
1:A:138:ASP:CA	1:A:142:ASP:HB2	0.55	2.30	1	9
1:A:77:ALA:HB1	1:A:85:THR:HG22	0.55	1.77	4	2
1:A:90:LEU:HD21	1:A:125:HIS:CB	0.55	2.31	14	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ILE:CD1	0.55	2.70	12	1
1:A:73:VAL:HB	1:A:89:LEU:HD21	0.55	1.78	10	2
1:A:47:LEU:O	1:A:48:GLY:C	0.55	2.45	14	21
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:CG	0.55	2.55	2	6
1:A:149:ARG:N	1:A:149:ARG:CD	0.55	2.70	16	9
1:A:123:VAL:HG13	1:A:124:LYS:HD3	0.55	1.79	14	5
1:A:86:LEU:HD12	1:A:86:LEU:C	0.55	2.21	9	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HD21	0.55	1.77	3	3
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ILE:HB	0.55	2.02	15	16
1:A:12:ALA:CB	1:A:17:ASP:HB2	0.55	2.32	5	17
1:A:102:GLU:C	1:A:135:HIS:CD2	0.55	2.80	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ILE:CD1	1:A:94:ALA:HB1	0.55	2.32	10	2
1:A:143:LEU:CD2	1:A:147:TYR:OH	0.55	2.55	3	8
1:A:105:LEU:HD11	1:A:108:HIS:CE1	0.55	2.37	18	8
1:A:116:LEU:CD1	1:A:117:ARG:N	0.55	2.70	11	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:151:GLU:N	0.55	2.40	8	6
1:A:100:ASP:N	1:A:100:ASP:OD1	0.55	2.40	2	1
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:HD12	0.55	2.23	10	2
1:A:124:LYS:HG2	1:A:125:HIS:CE1	0.55	2.36	15	8
1:A:133:ARG:CB	1:A:137:GLY:HA2	0.55	2.32	5	21
1:A:134:ASN:OD1	1:A:138:ASP:N	0.55	2.39	11	16
1:A:46:LYS:O	1:A:48:GLY:N	0.55	2.40	12	3
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:CD1	0.55	2.55	12	7
1:A:45:MET:HB2	1:A:52:ILE:CG2	0.55	2.32	18	17
1:A:133:ARG:CG	1:A:139:THR:HG22	0.55	2.32	3	11
1:A:129:ASN:CB	1:A:132:HIS:HB2	0.55	2.32	18	5
1:A:45:MET:HE1	1:A:47:LEU:CD2	0.55	2.31	17	3
1:A:92:PHE:O	1:A:93:GLN:CG	0.55	2.55	16	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:77:ALA:HA	0.55	1.79	2	2
1:A:108:HIS:CD2	1:A:140:ALA:HA	0.54	2.36	6	12
1:A:30:ASN:O	1:A:32:ASN:N	0.54	2.39	15	17
1:A:75:HIS:NE2	1:A:99:GLU:O	0.54	2.39	14	3
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CD2	0.54	2.70	3	2
1:A:100:ASP:OD1	1:A:103:GLY:N	0.54	2.40	2	9
1:A:22:THR:HG23	1:A:55:ARG:NH2	0.54	2.17	6	1
1:A:57:LEU:HG	1:A:92:PHE:CD1	0.54	2.37	19	1
1:A:40:THR:O	1:A:44:VAL:HG22	0.54	2.01	7	1
1:A:154:SER:O	1:A:158:ALA:CB	0.54	2.55	4	20
1:A:43:GLN:NE2	1:A:65:LEU:O	0.54	2.40	3	3
1:A:45:MET:O	1:A:46:LYS:C	0.54	2.43	7	14
1:A:77:ALA:HB1	1:A:86:LEU:CA	0.54	2.32	14	3
1:A:116:LEU:HD13	1:A:151:GLU:CG	0.54	2.32	7	3
1:A:75:HIS:O	1:A:79:ARG:CB	0.54	2.55	19	9
1:A:134:ASN:OD1	1:A:136:LYS:N	0.54	2.40	19	2
1:A:9:LEU:O	1:A:13:ALA:CB	0.54	2.55	15	4
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:C	0.54	2.80	8	3
1:A:46:LYS:HB2	1:A:52:ILE:HD12	0.54	1.78	10	5
1:A:89:LEU:O	1:A:92:PHE:N	0.54	2.41	9	9
1:A:40:THR:O	1:A:43:GLN:N	0.54	2.40	12	14
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ILE:N	0.54	2.40	8	10
1:A:132:HIS:CE1	1:A:133:ARG:C	0.54	2.81	11	3
1:A:66:LYS:HG3	1:A:70:GLY:C	0.54	2.23	2	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:CYS:HB3	1:A:156:MET:HE2	0.54	1.79	19	3
1:A:97:ASN:O	1:A:132:HIS:NE2	0.54	2.41	19	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:61:ALA:CB	0.54	2.82	20	1
1:A:141:CYS:SG	1:A:142:ASP:N	0.54	2.80	7	20
1:A:133:ARG:HB3	1:A:137:GLY:HA2	0.54	1.77	1	16
1:A:83:LEU:CD2	1:A:117:ARG:O	0.54	2.55	17	5
1:A:75:HIS:N	1:A:106:PRO:HB3	0.54	2.17	2	11
1:A:97:ASN:CB	1:A:132:HIS:CE1	0.54	2.89	19	6
1:A:43:GLN:NE2	1:A:67:ASP:CB	0.54	2.69	17	1
1:A:97:ASN:O	1:A:105:LEU:CD2	0.54	2.55	9	5
1:A:42:LEU:HD13	1:A:61:ALA:CB	0.54	2.28	5	4
1:A:149:ARG:HD2	1:A:152:VAL:HG21	0.54	1.77	9	2
1:A:105:LEU:HB2	1:A:106:PRO:CD	0.54	2.33	17	8
1:A:72:ALA:HB3	1:A:98:ILE:CG2	0.54	2.33	15	15
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ARG:CG	0.54	2.56	1	11
1:A:81:GLY:HA3	1:A:115:HIS:CE1	0.54	2.38	17	3
1:A:107:LEU:CD1	1:A:129:ASN:OD1	0.54	2.55	11	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:47:LEU:CD1	0.54	2.32	11	2
1:A:111:ALA:HA	1:A:152:VAL:CG1	0.54	2.33	4	5
1:A:105:LEU:CD2	1:A:132:HIS:NE2	0.54	2.69	7	6
1:A:131:GLY:O	1:A:139:THR:CG2	0.54	2.55	4	1
1:A:65:LEU:CD1	1:A:65:LEU:O	0.54	2.55	4	1
1:A:52:ILE:O	1:A:56:LEU:CD2	0.54	2.55	3	1
1:A:80:ALA:O	1:A:115:HIS:NE2	0.54	2.41	12	12
1:A:100:ASP:OD1	1:A:104:ASN:N	0.54	2.41	11	7
1:A:64:ASP:CG	1:A:98:ILE:CG1	0.54	2.76	13	9
1:A:90:LEU:CD1	1:A:91:GLU:N	0.54	2.67	15	8
1:A:97:ASN:OD1	1:A:132:HIS:ND1	0.54	2.40	13	4
1:A:90:LEU:CG	1:A:126:THR:HG22	0.54	2.31	2	5
1:A:107:LEU:CD1	1:A:122:LEU:CB	0.54	2.85	4	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:61:ALA:HB3	0.54	1.79	11	6
1:A:49:ASN:OD1	1:A:52:ILE:CD1	0.54	2.56	19	11
1:A:42:LEU:HD11	1:A:73:VAL:HG11	0.54	1.79	19	2
1:A:18:LEU:HD11	1:A:51:GLU:CG	0.54	2.32	13	2
1:A:41:ALA:O	1:A:45:MET:N	0.54	2.37	7	9
1:A:74:ILE:CG1	1:A:89:LEU:HD23	0.54	2.32	11	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:39:ARG:NH1	0.54	2.76	8	3
1:A:45:MET:HE3	1:A:47:LEU:CD1	0.54	2.33	12	1
1:A:99:GLU:CD	1:A:132:HIS:HE2	0.54	2.06	10	1
1:A:65:LEU:HB2	1:A:73:VAL:HG23	0.54	1.80	12	2
1:A:104:ASN:OD1	1:A:104:ASN:N	0.54	2.39	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ASP:OD1	1:A:98:ILE:CD1	0.54	2.54	1	5
1:A:79:ARG:CD	1:A:109:LEU:HD23	0.54	2.33	19	1
1:A:98:ILE:O	1:A:105:LEU:HB3	0.54	2.03	10	12
1:A:99:GLU:HA	1:A:105:LEU:HA	0.54	1.79	17	18
1:A:116:LEU:HD22	1:A:151:GLU:OE2	0.54	2.02	18	1
1:A:105:LEU:CG	1:A:132:HIS:CD2	0.54	2.91	4	5
1:A:74:ILE:HA	1:A:89:LEU:HD22	0.54	1.79	11	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:ALA:CB	0.53	2.33	19	15
1:A:73:VAL:CG1	1:A:89:LEU:HD21	0.53	2.33	9	2
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:HD2	0.53	2.24	6	4
1:A:87:GLN:HG2	1:A:121:PHE:CE1	0.53	2.38	13	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:121:PHE:CB	0.53	2.86	17	2
1:A:98:ILE:CD1	1:A:98:ILE:C	0.53	2.76	17	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD22	0.53	1.80	20	2
1:A:42:LEU:HD12	1:A:73:VAL:HG21	0.53	1.76	11	2
1:A:57:LEU:O	1:A:57:LEU:HD12	0.53	2.03	6	1
1:A:69:THR:O	1:A:101:ASN:N	0.53	2.41	14	3
1:A:129:ASN:ND2	1:A:132:HIS:NE2	0.53	2.56	4	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:155:LEU:CD2	0.53	2.79	8	1
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:CD2	0.53	2.56	2	1
1:A:134:ASN:OD1	1:A:134:ASN:N	0.53	2.41	10	4
1:A:105:LEU:CD1	1:A:107:LEU:HB3	0.53	2.32	18	4
1:A:124:LYS:O	1:A:125:HIS:CB	0.53	2.57	9	14
1:A:33:ALA:O	1:A:40:THR:CG2	0.53	2.55	7	5
1:A:97:ASN:HB3	1:A:132:HIS:CE1	0.53	2.38	16	6
1:A:25:LEU:CD2	1:A:55:ARG:O	0.53	2.55	17	4
1:A:62:ASN:O	1:A:65:LEU:CG	0.53	2.57	21	6
1:A:37:PHE:CD1	1:A:39:ARG:HG3	0.53	2.37	14	4
1:A:8:GLU:HB3	1:A:24:LEU:HD21	0.53	1.79	16	2
1:A:39:ARG:HD2	1:A:39:ARG:C	0.53	2.24	1	4
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:OE1	0.53	2.56	9	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:59:ARG:CD	0.53	2.33	9	1
1:A:39:ARG:C	1:A:39:ARG:CD	0.53	2.77	14	6
1:A:57:LEU:HD13	1:A:92:PHE:HB2	0.53	1.80	17	3
1:A:57:LEU:HD13	1:A:61:ALA:HB3	0.53	1.80	6	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:129:ASN:HB2	0.53	2.33	20	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:132:HIS:ND1	0.53	2.41	20	2
1:A:9:LEU:HD11	1:A:29:VAL:HG12	0.53	1.80	14	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:108:HIS:NE2	0.53	2.18	1	1
1:A:66:LYS:CG	1:A:72:ALA:N	0.53	2.71	10	3
1:A:99:GLU:CA	1:A:104:ASN:O	0.53	2.56	10	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ASN:O	1:A:29:VAL:CG1	0.53	2.57	15	12
1:A:105:LEU:CB	1:A:106:PRO:CD	0.53	2.86	18	12
1:A:50:PRO:HB3	1:A:85:THR:N	0.53	2.17	11	15
1:A:45:MET:CA	1:A:52:ILE:HG21	0.53	2.34	4	4
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:H	0.53	1.61	1	2
1:A:89:LEU:O	1:A:94:ALA:N	0.53	2.42	1	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:61:ALA:C	0.53	2.24	5	1
1:A:11:SER:OG	1:A:12:ALA:N	0.53	2.41	10	4
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:CG1	0.53	2.56	9	9
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:CB	0.53	2.57	13	1
1:A:108:HIS:O	1:A:111:ALA:N	0.53	2.41	4	2
1:A:90:LEU:CD2	1:A:126:THR:HG23	0.53	2.22	1	1
1:A:83:LEU:O	1:A:87:GLN:HG3	0.53	2.02	13	21
1:A:103:GLY:O	1:A:134:ASN:CB	0.53	2.56	14	2
1:A:88:THR:O	1:A:92:PHE:HB2	0.53	2.03	15	11
1:A:98:ILE:O	1:A:106:PRO:HD3	0.53	2.03	13	10
1:A:45:MET:HB2	1:A:52:ILE:HG22	0.53	1.80	6	13
1:A:97:ASN:ND2	1:A:129:ASN:OD1	0.53	2.42	20	2
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD1	0.53	2.77	13	2
1:A:57:LEU:O	1:A:60:GLY:N	0.53	2.42	19	6
1:A:57:LEU:HD23	1:A:61:ALA:H	0.53	1.64	14	4
1:A:90:LEU:HG	1:A:126:THR:HG23	0.53	1.79	8	2
1:A:42:LEU:CD2	1:A:62:ASN:O	0.53	2.56	8	2
1:A:58:LEU:HG	1:A:92:PHE:CZ	0.53	2.39	9	1
1:A:75:HIS:NE2	1:A:104:ASN:O	0.53	2.42	10	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:132:HIS:HD2	0.53	2.17	3	2
1:A:43:GLN:NE2	1:A:71:PHE:O	0.53	2.41	3	1
1:A:78:ALA:CB	1:A:86:LEU:HD13	0.53	2.17	18	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:74:ILE:CG2	0.53	2.32	14	1
1:A:108:HIS:O	1:A:111:ALA:CB	0.53	2.56	17	2
1:A:66:LYS:HE3	1:A:98:ILE:CD1	0.53	2.34	13	3
1:A:63:PRO:C	1:A:73:VAL:CG1	0.53	2.76	13	3
1:A:130:VAL:CG2	1:A:130:VAL:O	0.53	2.56	21	8
1:A:130:VAL:HG12	1:A:161:ALA:HB2	0.53	1.80	1	3
1:A:39:ARG:HB3	1:A:44:VAL:HG12	0.53	1.79	5	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:129:ASN:CB	0.53	2.57	8	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:92:PHE:CE1	0.53	2.91	8	1
1:A:70:GLY:CA	1:A:101:ASN:OD1	0.53	2.57	12	1
1:A:108:HIS:CD2	1:A:143:LEU:CD1	0.53	2.89	10	3
1:A:39:ARG:NE	1:A:67:ASP:CB	0.53	2.72	10	1
1:A:133:ARG:CA	1:A:137:GLY:HA2	0.53	2.34	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:LEU:O	1:A:45:MET:HG2	0.53	2.04	7	17
1:A:138:ASP:CA	1:A:142:ASP:CB	0.53	2.86	2	8
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:CG1	0.53	2.56	3	9
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:HD13	0.53	2.04	3	7
1:A:44:VAL:O	1:A:45:MET:O	0.53	2.26	14	10
1:A:43:GLN:NE2	1:A:66:LYS:O	0.53	2.42	8	10
1:A:105:LEU:HB2	1:A:132:HIS:CD2	0.53	2.38	11	1
1:A:62:ASN:O	1:A:65:LEU:HG	0.53	2.04	20	6
1:A:67:ASP:OD1	1:A:71:PHE:N	0.53	2.42	6	2
1:A:105:LEU:HD23	1:A:108:HIS:CE1	0.53	2.39	19	1
1:A:66:LYS:HG2	1:A:70:GLY:HA2	0.53	1.80	2	3
1:A:58:LEU:HD13	1:A:92:PHE:HZ	0.53	1.54	8	1
1:A:87:GLN:NE2	1:A:121:PHE:CD2	0.53	2.77	9	1
1:A:92:PHE:O	1:A:93:GLN:HB2	0.52	2.04	2	11
1:A:103:GLY:O	1:A:132:HIS:CE1	0.52	2.61	11	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:56:LEU:HD21	0.52	1.80	16	2
1:A:42:LEU:CD2	1:A:53:ALA:HB1	0.52	2.33	19	1
1:A:106:PRO:C	1:A:109:LEU:CD1	0.52	2.77	4	1
1:A:106:PRO:O	1:A:109:LEU:CD1	0.52	2.57	4	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:59:ARG:CD	0.52	2.87	9	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HB3	0.52	2.34	10	1
1:A:67:ASP:O	1:A:70:GLY:N	0.52	2.42	12	4
1:A:66:LYS:HD2	1:A:70:GLY:O	0.52	2.05	15	8
1:A:47:LEU:HD21	1:A:76:ASP:HB3	0.52	1.80	12	3
1:A:63:PRO:CG	1:A:92:PHE:O	0.52	2.57	8	1
1:A:8:GLU:O	1:A:11:SER:CB	0.52	2.58	7	4
1:A:39:ARG:HG3	1:A:44:VAL:CG1	0.52	2.34	8	2
1:A:37:PHE:CG	1:A:39:ARG:CZ	0.52	2.92	2	3
1:A:130:VAL:O	1:A:130:VAL:CG2	0.52	2.57	5	1
1:A:45:MET:SD	1:A:52:ILE:CG2	0.52	2.97	12	1
1:A:121:PHE:O	1:A:124:LYS:O	0.52	2.28	10	11
1:A:66:LYS:HG2	1:A:70:GLY:O	0.52	2.05	10	3
1:A:57:LEU:HD11	1:A:92:PHE:HB3	0.52	1.82	21	10
1:A:78:ALA:O	1:A:79:ARG:C	0.52	2.48	8	20
1:A:45:MET:CB	1:A:52:ILE:HG22	0.52	2.34	18	8
1:A:39:ARG:HD2	1:A:39:ARG:O	0.52	2.04	13	4
1:A:51:GLU:O	1:A:54:ARG:HB2	0.52	2.05	6	1
1:A:54:ARG:CG	1:A:88:THR:CG2	0.52	2.87	6	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:73:VAL:HG11	0.52	2.34	6	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:118:VAL:HA	0.52	1.80	9	1
1:A:54:ARG:HG2	1:A:58:LEU:CD2	0.52	2.35	20	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HG23	0.52	1.81	18	9
1:A:129:ASN:OD1	1:A:129:ASN:N	0.52	2.41	18	3
1:A:90:LEU:O	1:A:93:GLN:N	0.52	2.42	20	9
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:N	0.52	2.43	19	4
1:A:81:GLY:CA	1:A:115:HIS:NE2	0.52	2.72	17	2
1:A:46:LYS:HB3	1:A:52:ILE:CD1	0.52	2.35	9	5
1:A:45:MET:HG3	1:A:47:LEU:CD2	0.52	2.35	19	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:73:VAL:CG2	0.52	2.57	21	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:46:LYS:HG2	0.52	1.81	12	7
1:A:99:GLU:HA	1:A:105:LEU:CA	0.52	2.35	4	7
1:A:114:GLY:CA	1:A:149:ARG:HG2	0.52	2.34	16	13
1:A:108:HIS:O	1:A:112:LYS:N	0.52	2.42	6	8
1:A:97:ASN:C	1:A:105:LEU:CD2	0.52	2.78	12	5
1:A:39:ARG:CD	1:A:39:ARG:C	0.52	2.78	11	3
1:A:150:ASN:OD1	1:A:150:ASN:N	0.52	2.42	1	4
1:A:107:LEU:CD2	1:A:156:MET:SD	0.52	2.98	19	2
1:A:108:HIS:CE1	1:A:132:HIS:O	0.52	2.62	4	1
1:A:68:ARG:O	1:A:101:ASN:ND2	0.52	2.43	12	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:101:ASN:N	0.52	2.43	10	3
1:A:16:GLY:CA	1:A:46:LYS:HG3	0.52	2.35	8	5
1:A:53:ALA:O	1:A:54:ARG:C	0.52	2.48	12	14
1:A:10:ALA:CA	1:A:44:VAL:HG21	0.52	2.35	13	2
1:A:90:LEU:HD23	1:A:90:LEU:C	0.52	2.25	16	1
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ARG:CZ	0.52	2.35	21	5
1:A:54:ARG:HG3	1:A:58:LEU:CD1	0.52	2.35	19	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:106:PRO:HD3	0.52	2.34	14	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:39:ARG:HD2	0.52	2.40	2	3
1:A:155:LEU:O	1:A:159:ASN:ND2	0.52	2.42	13	8
1:A:94:ALA:O	1:A:96:VAL:N	0.52	2.43	11	6
1:A:50:PRO:CB	1:A:85:THR:CA	0.52	2.87	1	5
1:A:66:LYS:NZ	1:A:100:ASP:O	0.52	2.43	15	1
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:CB	0.52	2.57	9	2
1:A:156:MET:HB3	1:A:161:ALA:HB3	0.52	1.81	2	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HB2	0.52	1.82	13	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:121:PHE:HB2	0.52	1.81	11	3
1:A:100:ASP:OD1	1:A:102:GLU:N	0.52	2.41	4	6
1:A:153:VAL:CG1	1:A:157:GLN:NE2	0.52	2.73	8	5
1:A:22:THR:HG22	1:A:26:GLN:OE1	0.52	2.04	16	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:132:HIS:CG	0.52	2.39	20	1
1:A:19:GLU:O	1:A:22:THR:N	0.52	2.43	19	8
1:A:18:LEU:CD2	1:A:51:GLU:OE2	0.52	2.58	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ALA:O	1:A:115:HIS:N	0.52	2.41	21	10
1:A:104:ASN:HD22	1:A:143:LEU:HD11	0.52	1.64	20	3
1:A:96:VAL:HG13	1:A:122:LEU:CD1	0.52	2.35	11	1
1:A:150:ASN:N	1:A:150:ASN:OD1	0.52	2.42	14	4
1:A:121:PHE:C	1:A:121:PHE:CD1	0.52	2.82	20	7
1:A:63:PRO:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.52	2.87	15	2
1:A:9:LEU:HD11	1:A:21:LEU:CD1	0.52	2.35	15	1
1:A:39:ARG:CZ	1:A:67:ASP:OD2	0.51	2.57	10	1
1:A:115:HIS:HB3	1:A:118:VAL:HB	0.51	1.82	16	21
1:A:99:GLU:HA	1:A:104:ASN:O	0.51	2.05	21	7
1:A:128:SER:O	1:A:130:VAL:N	0.51	2.42	12	3
1:A:143:LEU:CD2	1:A:147:TYR:CZ	0.51	2.93	20	6
1:A:49:ASN:O	1:A:52:ILE:HG13	0.51	2.04	14	18
1:A:138:ASP:HA	1:A:142:ASP:HB3	0.51	1.83	20	9
1:A:51:GLU:HA	1:A:54:ARG:HB2	0.51	1.82	11	3
1:A:45:MET:O	1:A:47:LEU:CD2	0.51	2.58	19	2
1:A:39:ARG:NH1	1:A:44:VAL:CG1	0.51	2.73	20	3
1:A:47:LEU:CD2	1:A:82:PHE:CD2	0.51	2.83	14	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:129:ASN:CB	0.51	2.35	1	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:118:VAL:HA	0.51	2.35	9	1
1:A:66:LYS:HG2	1:A:71:PHE:C	0.51	2.26	10	3
1:A:74:ILE:CB	1:A:106:PRO:HG3	0.51	2.36	20	14
1:A:83:LEU:O	1:A:87:GLN:N	0.51	2.43	1	9
1:A:79:ARG:CG	1:A:109:LEU:CD2	0.51	2.83	6	4
1:A:10:ALA:HA	1:A:44:VAL:CG2	0.51	2.35	15	3
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ARG:HG2	0.51	2.05	8	8
1:A:74:ILE:N	1:A:89:LEU:CD2	0.51	2.74	11	1
1:A:35:ASN:HB2	1:A:39:ARG:NH1	0.51	2.20	16	2
1:A:64:ASP:OD1	1:A:98:ILE:CG1	0.51	2.58	1	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:82:PHE:CE2	0.51	2.93	4	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:39:ARG:NH1	0.51	2.79	8	3
1:A:138:ASP:O	1:A:143:LEU:HD21	0.51	2.04	1	1
1:A:14:ALA:O	1:A:46:LYS:NZ	0.51	2.42	13	2
1:A:67:ASP:OD1	1:A:71:PHE:HB2	0.51	2.05	6	4
1:A:115:HIS:HB3	1:A:118:VAL:CG1	0.51	2.36	1	6
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:CD1	0.51	2.79	11	1
1:A:66:LYS:CG	1:A:70:GLY:C	0.51	2.78	2	6
1:A:51:GLU:OE1	1:A:51:GLU:CA	0.51	2.57	4	1
1:A:133:ARG:O	1:A:133:ARG:CG	0.51	2.58	5	1
1:A:112:LYS:HD2	1:A:147:TYR:CZ	0.51	2.39	18	4
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:GLU:OE2	0.51	2.43	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD1	0.51	2.79	15	4
1:A:74:ILE:CA	1:A:89:LEU:HD23	0.51	2.36	2	3
1:A:9:LEU:HD23	1:A:24:LEU:CD2	0.51	2.34	13	1
1:A:99:GLU:OE2	1:A:132:HIS:NE2	0.51	2.43	20	1
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:HG	0.51	1.81	1	2
1:A:145:ARG:CD	1:A:153:VAL:HG11	0.51	2.36	1	1
1:A:39:ARG:NE	1:A:67:ASP:HB2	0.51	2.21	10	1
1:A:64:ASP:O	1:A:64:ASP:OD1	0.51	2.27	1	7
1:A:15:ARG:O	1:A:15:ARG:NE	0.51	2.43	17	1
1:A:79:ARG:HG3	1:A:109:LEU:CD2	0.51	2.35	6	3
1:A:66:LYS:HG3	1:A:71:PHE:N	0.51	2.21	5	8
1:A:119:VAL:HA	1:A:122:LEU:HD12	0.51	1.82	6	1
1:A:67:ASP:N	1:A:67:ASP:OD1	0.51	2.41	6	1
1:A:121:PHE:CD2	1:A:125:HIS:CD2	0.51	2.99	19	4
1:A:96:VAL:O	1:A:105:LEU:HD22	0.51	2.05	20	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:122:LEU:HB3	0.51	2.33	4	2
1:A:133:ARG:CB	1:A:139:THR:HG22	0.51	2.35	5	3
1:A:96:VAL:CG2	1:A:122:LEU:O	0.51	2.56	2	1
1:A:32:ASN:O	1:A:34:GLN:NE2	0.51	2.44	3	1
1:A:46:LYS:O	1:A:49:ASN:O	0.51	2.29	18	3
1:A:132:HIS:ND1	1:A:132:HIS:C	0.51	2.64	6	2
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:CD	0.51	2.35	19	1
1:A:45:MET:HE1	1:A:47:LEU:CD1	0.51	2.35	15	3
1:A:104:ASN:CG	1:A:134:ASN:ND2	0.51	2.64	7	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:56:LEU:HD23	0.51	1.77	12	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:52:ILE:CG1	0.51	2.79	21	17
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:N	0.51	2.20	3	2
1:A:47:LEU:CD1	1:A:76:ASP:C	0.51	2.79	16	4
1:A:125:HIS:O	1:A:126:THR:O	0.51	2.29	6	4
1:A:151:GLU:CA	1:A:151:GLU:OE1	0.51	2.58	14	2
1:A:150:ASN:HA	1:A:153:VAL:HB	0.51	1.82	8	20
1:A:87:GLN:HG2	1:A:121:PHE:CE2	0.51	2.41	12	9
1:A:148:GLY:O	1:A:150:ASN:N	0.51	2.43	8	5
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:GLU:OE1	0.51	2.43	6	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:108:HIS:ND1	0.51	2.21	19	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:151:GLU:O	0.51	2.06	7	3
1:A:9:LEU:HD11	1:A:29:VAL:CG1	0.51	2.36	9	2
1:A:132:HIS:HB3	1:A:139:THR:HB	0.51	1.83	4	1
1:A:112:LYS:HD2	1:A:147:TYR:CE2	0.51	2.41	2	6
1:A:149:ARG:HD2	1:A:152:VAL:CG2	0.51	2.36	11	3
1:A:14:ALA:C	1:A:46:LYS:HG2	0.51	2.25	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HA	0.51	2.36	14	12
1:A:73:VAL:CG1	1:A:89:LEU:HD11	0.51	2.32	8	1
1:A:110:ALA:O	1:A:114:GLY:N	0.51	2.42	16	5
1:A:112:LYS:HA	1:A:147:TYR:CD2	0.51	2.41	21	11
1:A:99:GLU:HG2	1:A:105:LEU:CD2	0.51	2.36	17	2
1:A:99:GLU:HG3	1:A:132:HIS:NE2	0.51	2.20	19	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:61:ALA:HB1	0.51	1.83	7	1
1:A:108:HIS:CE1	1:A:140:ALA:N	0.51	2.79	1	1
1:A:123:VAL:HG21	1:A:159:ASN:HB2	0.51	1.83	8	1
1:A:53:ALA:HA	1:A:56:LEU:HD12	0.51	1.82	12	1
1:A:51:GLU:HA	1:A:54:ARG:HB3	0.50	1.82	19	9
1:A:51:GLU:O	1:A:52:ILE:C	0.50	2.49	6	21
1:A:35:ASN:OD1	1:A:36:GLY:N	0.50	2.42	18	1
1:A:131:GLY:O	1:A:132:HIS:C	0.50	2.48	11	5
1:A:18:LEU:HD23	1:A:49:ASN:ND2	0.50	2.21	9	3
1:A:63:PRO:O	1:A:73:VAL:HG13	0.50	2.06	8	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:59:ARG:CD	0.50	2.36	12	1
1:A:78:ALA:CB	1:A:86:LEU:CD1	0.50	2.79	3	8
1:A:30:ASN:HB3	1:A:33:ALA:CB	0.50	2.32	1	7
1:A:12:ALA:HB1	1:A:20:GLN:CB	0.50	2.36	3	1
1:A:45:MET:HE1	1:A:47:LEU:HD12	0.50	1.83	18	1
1:A:123:VAL:O	1:A:128:SER:OG	0.50	2.30	2	6
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ASN:HB2	0.50	2.06	19	7
1:A:107:LEU:CD2	1:A:129:ASN:CG	0.50	2.79	7	1
1:A:10:ALA:HB2	1:A:35:ASN:OD1	0.50	2.07	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:124:LYS:N	0.50	2.45	12	7
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ARG:CD	0.50	2.36	13	5
1:A:127:ALA:O	1:A:128:SER:O	0.50	2.30	2	18
1:A:83:LEU:CD1	1:A:118:VAL:HA	0.50	2.36	2	10
1:A:141:CYS:HB3	1:A:156:MET:HE3	0.50	1.82	20	4
1:A:107:LEU:HD13	1:A:129:ASN:CB	0.50	2.36	6	1
1:A:98:ILE:O	1:A:105:LEU:HD12	0.50	2.07	19	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:56:LEU:N	0.50	2.67	19	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:73:VAL:HG22	0.50	2.35	5	2
1:A:80:ALA:C	1:A:115:HIS:HE2	0.50	2.10	1	2
1:A:145:ARG:HD2	1:A:153:VAL:HG11	0.50	1.82	1	1
1:A:129:ASN:C	1:A:129:ASN:ND2	0.50	2.64	8	1
1:A:138:ASP:CB	1:A:142:ASP:HB3	0.50	2.35	9	2
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:HG	0.50	2.06	2	4
1:A:46:LYS:HB2	1:A:52:ILE:CD1	0.50	2.36	12	5
1:A:86:LEU:HD21	1:A:122:LEU:CD2	0.50	2.37	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ALA:HA	1:A:21:LEU:HD11	0.50	1.83	1	4
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD2	0.50	2.80	8	2
1:A:121:PHE:HD1	1:A:122:LEU:HD22	0.50	1.66	9	3
1:A:43:GLN:HG3	1:A:73:VAL:CG2	0.50	2.36	5	2
1:A:96:VAL:HG11	1:A:127:ALA:HB3	0.50	1.83	1	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ILE:HG12	0.50	2.22	12	1
1:A:138:ASP:HB3	1:A:142:ASP:HB3	0.50	1.84	9	16
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:O	0.50	2.29	18	8
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:HG23	0.50	2.05	17	5
1:A:47:LEU:HB2	1:A:82:PHE:CE2	0.50	2.42	5	8
1:A:9:LEU:CD2	1:A:24:LEU:CD2	0.50	2.89	11	3
1:A:9:LEU:HD12	1:A:29:VAL:HG12	0.50	1.84	16	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:132:HIS:CG	0.50	2.64	8	1
1:A:114:GLY:CA	1:A:149:ARG:HG3	0.50	2.37	10	7
1:A:21:LEU:HD23	1:A:56:LEU:CD2	0.50	2.36	3	1
1:A:9:LEU:O	1:A:13:ALA:N	0.50	2.45	9	5
1:A:10:ALA:N	1:A:41:ALA:HB2	0.50	2.22	16	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:86:LEU:CB	0.50	2.37	16	2
1:A:145:ARG:N	1:A:153:VAL:CG2	0.50	2.75	6	1
1:A:98:ILE:C	1:A:105:LEU:HD12	0.50	2.27	19	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:155:LEU:HD23	0.50	1.82	14	2
1:A:96:VAL:HG11	1:A:128:SER:N	0.50	2.22	8	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:86:LEU:HD21	0.50	1.83	9	1
1:A:14:ALA:O	1:A:46:LYS:HE3	0.50	2.07	2	19
1:A:30:ASN:O	1:A:31:VAL:C	0.50	2.49	15	17
1:A:50:PRO:HB3	1:A:85:THR:OG1	0.50	2.07	20	14
1:A:89:LEU:C	1:A:94:ALA:CB	0.50	2.80	18	9
1:A:22:THR:O	1:A:25:LEU:N	0.50	2.44	18	4
1:A:66:LYS:HD3	1:A:72:ALA:CA	0.50	2.37	9	5
1:A:104:ASN:N	1:A:104:ASN:OD1	0.50	2.44	5	1
1:A:38:GLY:O	1:A:43:GLN:NE2	0.50	2.45	12	1
1:A:96:VAL:HG11	1:A:126:THR:OG1	0.50	2.07	2	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:126:THR:CG2	0.50	2.37	7	5
1:A:54:ARG:O	1:A:58:LEU:N	0.50	2.45	6	3
1:A:13:ALA:O	1:A:46:LYS:N	0.50	2.40	16	4
1:A:40:THR:OG1	1:A:43:GLN:NE2	0.50	2.44	19	1
1:A:66:LYS:NZ	1:A:98:ILE:HD11	0.50	2.21	7	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:107:LEU:C	0.50	2.79	4	1
1:A:112:LYS:HG2	1:A:147:TYR:CD2	0.50	2.42	9	2
1:A:46:LYS:CB	1:A:52:ILE:CD1	0.50	2.90	5	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:90:LEU:C	0.50	2.79	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ALA:HB1	1:A:119:VAL:HG23	0.49	1.82	2	3
1:A:51:GLU:HA	1:A:54:ARG:CB	0.49	2.37	8	14
1:A:149:ARG:HB3	1:A:152:VAL:CG2	0.49	2.37	18	8
1:A:57:LEU:CD1	1:A:57:LEU:O	0.49	2.60	16	4
1:A:92:PHE:O	1:A:93:GLN:CB	0.49	2.60	2	4
1:A:97:ASN:HA	1:A:105:LEU:HD21	0.49	1.83	11	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HB2	0.49	2.37	16	1
1:A:96:VAL:HG11	1:A:128:SER:H	0.49	1.67	8	1
1:A:21:LEU:O	1:A:25:LEU:CD2	0.49	2.60	8	1
1:A:129:ASN:HB2	1:A:132:HIS:CB	0.49	2.38	2	6
1:A:107:LEU:CD2	1:A:129:ASN:ND2	0.49	2.75	18	2
1:A:57:LEU:HB3	1:A:92:PHE:CD2	0.49	2.42	7	4
1:A:62:ASN:ND2	1:A:65:LEU:HG	0.49	2.22	11	2
1:A:45:MET:SD	1:A:53:ALA:CB	0.49	2.97	12	3
1:A:43:GLN:CA	1:A:73:VAL:HG22	0.49	2.38	14	4
1:A:68:ARG:HD2	1:A:69:THR:HG23	0.49	1.83	19	1
1:A:99:GLU:HB3	1:A:104:ASN:N	0.49	2.22	14	1
1:A:8:GLU:CD	1:A:24:LEU:HD22	0.49	2.26	4	1
1:A:116:LEU:O	1:A:117:ARG:C	0.49	2.49	3	21
1:A:138:ASP:HB2	1:A:143:LEU:CD2	0.49	2.38	18	5
1:A:86:LEU:HD22	1:A:121:PHE:CD2	0.49	2.43	13	2
1:A:97:ASN:CG	1:A:129:ASN:ND2	0.49	2.64	17	1
1:A:132:HIS:C	1:A:132:HIS:ND1	0.49	2.65	11	1
1:A:98:ILE:C	1:A:98:ILE:HD13	0.49	2.26	11	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:28:ASN:N	0.49	2.45	15	2
1:A:54:ARG:CA	1:A:58:LEU:HD23	0.49	2.37	6	1
1:A:39:ARG:CG	1:A:39:ARG:O	0.49	2.60	21	4
1:A:37:PHE:CD1	1:A:39:ARG:HG2	0.49	2.43	1	2
1:A:88:THR:O	1:A:92:PHE:N	0.49	2.43	15	5
1:A:115:HIS:HB3	1:A:118:VAL:CB	0.49	2.37	1	20
1:A:100:ASP:CG	1:A:101:ASN:N	0.49	2.66	15	11
1:A:57:LEU:HB3	1:A:92:PHE:CD1	0.49	2.42	18	1
1:A:129:ASN:HB2	1:A:132:HIS:HB2	0.49	1.84	9	10
1:A:86:LEU:HD23	1:A:121:PHE:CE1	0.49	2.42	4	1
1:A:133:ARG:HB2	1:A:137:GLY:HA2	0.49	1.84	5	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:132:HIS:HB2	0.49	2.07	10	1
1:A:116:LEU:O	1:A:118:VAL:N	0.49	2.45	8	19
1:A:149:ARG:HD2	1:A:149:ARG:N	0.49	2.22	7	4
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:HB2	0.49	2.06	2	16
1:A:13:ALA:CA	1:A:21:LEU:HD13	0.49	2.38	19	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:73:VAL:HG11	0.49	1.84	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ALA:HB2	1:A:20:GLN:CD	0.49	2.27	7	2
1:A:23:SER:O	1:A:26:GLN:CG	0.49	2.61	21	1
1:A:123:VAL:HG11	1:A:159:ASN:OD1	0.49	2.07	8	1
1:A:74:ILE:HB	1:A:106:PRO:HG3	0.49	1.84	9	9
1:A:113:GLU:O	1:A:149:ARG:NE	0.49	2.43	13	1
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ARG:NE	0.49	2.22	13	4
1:A:83:LEU:HD21	1:A:121:PHE:CD1	0.49	2.41	14	2
1:A:31:VAL:HG13	1:A:32:ASN:ND2	0.49	2.23	16	1
1:A:54:ARG:HG3	1:A:88:THR:HG23	0.49	1.83	6	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:125:HIS:HB2	0.49	2.38	14	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:129:ASN:ND2	0.49	2.70	3	1
1:A:142:ASP:O	1:A:146:LEU:CD1	0.49	2.60	3	2
1:A:57:LEU:CD1	1:A:92:PHE:CD2	0.49	2.88	3	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.81	6	4
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:HD13	0.49	2.07	16	2
1:A:42:LEU:O	1:A:45:MET:CG	0.49	2.61	7	2
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:CD1	0.49	2.58	21	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:129:ASN:HB2	0.49	2.08	8	1
1:A:37:PHE:CE1	1:A:68:ARG:HD2	0.49	2.43	2	1
1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:THR:OG1	0.49	2.08	10	5
1:A:41:ALA:CA	1:A:44:VAL:HG22	0.49	2.37	6	4
1:A:42:LEU:CD1	1:A:42:LEU:C	0.49	2.80	1	4
1:A:63:PRO:CB	1:A:89:LEU:HG	0.49	2.37	13	3
1:A:46:LYS:HB3	1:A:52:ILE:HD12	0.49	1.85	9	3
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:N	0.49	2.75	19	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:29:VAL:N	0.49	2.46	4	2
1:A:149:ARG:O	1:A:153:VAL:CG2	0.49	2.56	3	11
1:A:122:LEU:O	1:A:126:THR:OG1	0.49	2.30	5	6
1:A:83:LEU:HD12	1:A:86:LEU:HB3	0.49	1.83	8	4
1:A:107:LEU:HB3	1:A:129:ASN:ND2	0.49	2.23	3	1
1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:THR:CB	0.49	2.38	1	8
1:A:133:ARG:HA	1:A:139:THR:HG22	0.49	1.83	2	9
1:A:8:GLU:OE1	1:A:24:LEU:HD13	0.49	2.07	13	1
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:H	0.49	1.68	20	2
1:A:35:ASN:OD1	1:A:37:PHE:CB	0.49	2.61	7	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:129:ASN:HB2	0.49	2.38	1	1
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD23	0.49	2.08	1	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:59:ARG:CG	0.49	2.37	8	1
1:A:12:ALA:CA	1:A:17:ASP:HB2	0.49	2.38	1	17
1:A:39:ARG:O	1:A:39:ARG:HD2	0.49	2.08	3	3
1:A:159:ASN:O	1:A:160:GLY:O	0.49	2.31	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:ASN:CG	1:A:135:HIS:N	0.49	2.66	9	6
1:A:102:GLU:HG2	1:A:135:HIS:CE1	0.49	2.43	13	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:138:ASP:N	0.49	2.45	17	3
1:A:66:LYS:HG3	1:A:70:GLY:HA2	0.49	1.83	14	3
1:A:39:ARG:HB3	1:A:44:VAL:CG1	0.49	2.38	15	1
1:A:12:ALA:CB	1:A:20:GLN:CG	0.49	2.91	7	2
1:A:67:ASP:CG	1:A:68:ARG:N	0.49	2.67	14	3
1:A:108:HIS:CD2	1:A:143:LEU:HG	0.49	2.43	1	1
1:A:96:VAL:CG1	1:A:127:ALA:HB3	0.49	2.38	1	1
1:A:105:LEU:HD12	1:A:105:LEU:N	0.49	2.22	2	1
1:A:96:VAL:HB	1:A:128:SER:OG	0.48	2.07	10	1
1:A:48:GLY:HA2	1:A:82:PHE:CE1	0.48	2.43	11	6
1:A:83:LEU:O	1:A:84:ASP:C	0.48	2.50	13	18
1:A:97:ASN:ND2	1:A:129:ASN:CG	0.48	2.66	18	1
1:A:39:ARG:HD3	1:A:39:ARG:C	0.48	2.29	19	4
1:A:107:LEU:HG	1:A:122:LEU:HD22	0.48	1.85	6	2
1:A:10:ALA:CB	1:A:35:ASN:OD1	0.48	2.60	21	3
1:A:71:PHE:CE1	1:A:100:ASP:HB2	0.48	2.43	14	4
1:A:107:LEU:HG	1:A:140:ALA:CB	0.48	2.38	17	2
1:A:66:LYS:HD2	1:A:98:ILE:HD11	0.48	1.85	2	2
1:A:74:ILE:HG12	1:A:89:LEU:HD23	0.48	1.85	4	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:65:LEU:CB	0.48	2.61	21	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:59:ARG:HD2	0.48	2.39	12	2
1:A:54:ARG:NH2	1:A:92:PHE:CZ	0.48	2.81	9	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:55:ARG:HB3	0.48	1.84	10	1
1:A:114:GLY:CA	1:A:149:ARG:CG	0.48	2.91	20	8
1:A:29:VAL:O	1:A:30:ASN:C	0.48	2.51	19	4
1:A:107:LEU:CG	1:A:122:LEU:HD22	0.48	2.38	6	1
1:A:124:LYS:O	1:A:125:HIS:CG	0.48	2.66	19	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:61:ALA:N	0.48	2.24	14	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:65:LEU:HB3	0.48	2.07	21	1
1:A:115:HIS:O	1:A:118:VAL:HB	0.48	2.08	15	21
1:A:100:ASP:N	1:A:104:ASN:O	0.48	2.47	3	8
1:A:54:ARG:HG3	1:A:58:LEU:HD21	0.48	1.85	5	5
1:A:39:ARG:HB2	1:A:43:GLN:CG	0.48	2.38	16	2
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:N	0.48	2.24	19	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:29:VAL:HG21	0.48	1.84	15	1
1:A:15:ARG:CB	1:A:17:ASP:OD1	0.48	2.60	1	1
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:CA	0.48	2.61	10	2
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:HB3	0.48	2.09	14	3
1:A:12:ALA:CB	1:A:20:GLN:HB3	0.48	2.39	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ALA:C	1:A:46:LYS:HD2	0.48	2.29	3	13
1:A:138:ASP:O	1:A:139:THR:O	0.48	2.31	15	16
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ARG:HD3	0.48	2.09	11	2
1:A:43:GLN:CG	1:A:65:LEU:HB3	0.48	2.39	11	1
1:A:83:LEU:O	1:A:86:LEU:HG	0.48	2.09	9	1
1:A:40:THR:CG2	1:A:65:LEU:HD13	0.48	2.39	2	1
1:A:132:HIS:O	1:A:139:THR:HB	0.48	2.09	10	9
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:HG12	0.48	2.08	15	9
1:A:54:ARG:O	1:A:55:ARG:C	0.48	2.51	7	17
1:A:39:ARG:HB2	1:A:43:GLN:CB	0.48	2.38	11	5
1:A:8:GLU:O	1:A:11:SER:HB2	0.48	2.09	7	6
1:A:42:LEU:CD1	1:A:73:VAL:CG2	0.48	2.80	11	1
1:A:70:GLY:O	1:A:100:ASP:HB2	0.48	2.08	9	8
1:A:96:VAL:CG2	1:A:126:THR:HB	0.48	2.39	6	2
1:A:15:ARG:NE	1:A:15:ARG:O	0.48	2.46	6	1
1:A:134:ASN:OD1	1:A:135:HIS:N	0.48	2.46	19	2
1:A:54:ARG:HA	1:A:57:LEU:HB3	0.48	1.85	19	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HG3	0.48	1.84	20	2
1:A:17:ASP:N	1:A:17:ASP:OD1	0.48	2.45	7	2
1:A:71:PHE:CE1	1:A:100:ASP:CB	0.48	2.96	14	2
1:A:62:ASN:O	1:A:65:LEU:CD1	0.48	2.60	12	2
1:A:45:MET:O	1:A:47:LEU:HD22	0.48	2.09	12	1
1:A:39:ARG:CD	1:A:67:ASP:CB	0.48	2.92	10	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HB3	0.48	1.85	17	2
1:A:57:LEU:O	1:A:59:ARG:N	0.48	2.46	19	2
1:A:66:LYS:HD2	1:A:72:ALA:N	0.48	2.23	15	1
1:A:21:LEU:CD1	1:A:21:LEU:C	0.48	2.80	12	1
1:A:74:ILE:O	1:A:75:HIS:C	0.48	2.51	10	8
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ALA:C	0.48	2.52	4	18
1:A:17:ASP:HB3	1:A:20:GLN:CB	0.48	2.39	13	10
1:A:40:THR:O	1:A:41:ALA:C	0.48	2.52	15	15
1:A:133:ARG:HA	1:A:139:THR:CA	0.48	2.38	20	16
1:A:83:LEU:CD1	1:A:121:PHE:CG	0.48	2.92	17	2
1:A:96:VAL:CG1	1:A:122:LEU:HD23	0.48	2.39	6	1
1:A:37:PHE:CD2	1:A:39:ARG:HG2	0.48	2.44	20	2
1:A:105:LEU:CG	1:A:106:PRO:HD2	0.48	2.38	19	1
1:A:99:GLU:CD	1:A:132:HIS:NE2	0.48	2.67	20	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:55:ARG:CD	0.48	2.39	5	1
1:A:121:PHE:O	1:A:123:VAL:N	0.48	2.46	12	1
1:A:12:ALA:CB	1:A:20:GLN:HG2	0.48	2.39	3	15
1:A:144:ALA:O	1:A:149:ARG:O	0.48	2.32	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:CD2	1:A:41:ALA:HB3	0.48	2.38	3	4
1:A:75:HIS:O	1:A:79:ARG:HB2	0.48	2.09	20	11
1:A:63:PRO:O	1:A:74:ILE:HG13	0.48	2.08	13	3
1:A:90:LEU:CD2	1:A:125:HIS:HB3	0.48	2.39	17	2
1:A:13:ALA:CB	1:A:21:LEU:HD13	0.48	2.38	19	1
1:A:40:THR:OG1	1:A:43:GLN:OE1	0.48	2.30	21	1
1:A:37:PHE:HB2	1:A:39:ARG:NH2	0.48	2.23	8	3
1:A:35:ASN:ND2	1:A:39:ARG:O	0.48	2.45	9	1
1:A:54:ARG:CG	1:A:58:LEU:HD23	0.48	2.38	2	1
1:A:82:PHE:O	1:A:85:THR:HB	0.48	2.09	1	12
1:A:104:ASN:ND2	1:A:134:ASN:HB2	0.48	2.24	19	1
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:HD12	0.48	1.67	19	2
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:HD13	0.48	1.85	21	2
1:A:47:LEU:HB3	1:A:82:PHE:CE2	0.48	2.44	14	2
1:A:143:LEU:HD22	1:A:147:TYR:HE2	0.47	1.67	5	4
1:A:54:ARG:HG3	1:A:92:PHE:CE2	0.47	2.44	12	4
1:A:16:GLY:HA2	1:A:46:LYS:CB	0.47	2.39	9	9
1:A:64:ASP:CG	1:A:98:ILE:HG12	0.47	2.30	13	3
1:A:39:ARG:HA	1:A:43:GLN:NE2	0.47	2.24	5	6
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:CG	0.47	2.52	16	7
1:A:19:GLU:CD	1:A:20:GLN:N	0.47	2.68	6	1
1:A:78:ALA:HB3	1:A:106:PRO:CB	0.47	2.34	14	1
1:A:111:ALA:N	1:A:119:VAL:HG21	0.47	2.24	4	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:69:THR:N	0.47	2.22	9	2
1:A:47:LEU:HB3	1:A:82:PHE:CB	0.47	2.39	13	5
1:A:120:GLU:O	1:A:124:LYS:HG2	0.47	2.09	20	2
1:A:116:LEU:CD1	1:A:116:LEU:C	0.47	2.83	11	1
1:A:96:VAL:CG1	1:A:126:THR:HB	0.47	2.39	2	2
1:A:97:ASN:CA	1:A:132:HIS:CE1	0.47	2.97	19	1
1:A:57:LEU:CG	1:A:92:PHE:CD2	0.47	2.97	19	1
1:A:57:LEU:HB3	1:A:92:PHE:CE2	0.47	2.43	1	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:C	0.47	2.28	13	1
1:A:67:ASP:C	1:A:67:ASP:OD1	0.47	2.52	13	2
1:A:129:ASN:O	1:A:132:HIS:HB2	0.47	2.09	4	2
1:A:129:ASN:ND2	1:A:132:HIS:CD2	0.47	2.82	4	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:151:GLU:OE1	0.47	2.33	5	2
1:A:124:LYS:HB3	1:A:125:HIS:NE2	0.47	2.24	12	2
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:HG	0.47	2.39	2	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:140:ALA:HB1	0.47	2.33	10	1
1:A:156:MET:CA	1:A:161:ALA:HB3	0.47	2.39	1	5
1:A:66:LYS:HD3	1:A:70:GLY:O	0.47	2.09	13	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:VAL:HA	1:A:161:ALA:CB	0.47	2.40	2	7
1:A:45:MET:CB	1:A:52:ILE:CG2	0.47	2.92	18	6
1:A:123:VAL:HA	1:A:128:SER:OG	0.47	2.09	11	11
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.47	2.30	11	1
1:A:110:ALA:HB1	1:A:115:HIS:CB	0.47	2.39	12	3
1:A:99:GLU:OE1	1:A:103:GLY:O	0.47	2.33	20	1
1:A:22:THR:O	1:A:25:LEU:HB2	0.47	2.09	8	2
1:A:75:HIS:CD2	1:A:106:PRO:CD	0.47	2.97	3	5
1:A:90:LEU:N	1:A:94:ALA:HB3	0.47	2.24	9	2
1:A:148:GLY:O	1:A:149:ARG:C	0.47	2.52	9	4
1:A:99:GLU:CA	1:A:105:LEU:HD23	0.47	2.40	8	2
1:A:66:LYS:CG	1:A:70:GLY:HA2	0.47	2.38	20	7
1:A:107:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HB3	0.47	1.85	16	1
1:A:57:LEU:CA	1:A:61:ALA:CB	0.47	2.90	19	2
1:A:129:ASN:O	1:A:130:VAL:C	0.47	2.52	7	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:132:HIS:NE2	0.47	2.19	4	1
1:A:75:HIS:HA	1:A:109:LEU:HD12	0.47	1.87	1	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:128:SER:O	0.47	2.42	8	1
1:A:107:LEU:CG	1:A:119:VAL:HG22	0.47	2.31	12	1
1:A:126:THR:O	1:A:127:ALA:CB	0.47	2.63	10	2
1:A:130:VAL:HA	1:A:161:ALA:CA	0.47	2.39	3	6
1:A:72:ALA:O	1:A:73:VAL:C	0.47	2.53	15	20
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ALA:CB	0.47	2.61	13	2
1:A:118:VAL:O	1:A:121:PHE:N	0.47	2.43	1	5
1:A:125:HIS:O	1:A:126:THR:OG1	0.47	2.30	6	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:CD	0.47	2.83	19	1
1:A:69:THR:HB	1:A:71:PHE:CE1	0.47	2.45	20	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:53:ALA:CA	0.47	2.40	14	1
1:A:102:GLU:HA	1:A:135:HIS:ND1	0.47	2.24	9	1
1:A:103:GLY:O	1:A:105:LEU:HD12	0.47	2.10	2	1
1:A:39:ARG:CD	1:A:67:ASP:HB2	0.47	2.39	10	1
1:A:98:ILE:HG23	1:A:98:ILE:O	0.47	2.10	6	6
1:A:43:GLN:OE1	1:A:66:LYS:O	0.47	2.32	19	3
1:A:54:ARG:HA	1:A:57:LEU:HB2	0.47	1.86	11	7
1:A:50:PRO:O	1:A:52:ILE:N	0.47	2.48	5	4
1:A:66:LYS:HB3	1:A:70:GLY:HA2	0.47	1.86	13	2
1:A:95:ASP:CB	1:A:98:ILE:HB	0.47	2.38	17	4
1:A:116:LEU:HD21	1:A:155:LEU:CD2	0.47	2.18	11	1
1:A:28:ASN:C	1:A:29:VAL:HG13	0.47	2.30	15	1
1:A:105:LEU:HD12	1:A:108:HIS:CE1	0.47	2.45	8	2
1:A:108:HIS:ND1	1:A:132:HIS:NE2	0.47	2.62	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:CD1	1:A:59:ARG:HG3	0.47	2.40	8	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HD13	0.47	1.85	12	1
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:ILE:N	0.47	2.25	8	11
1:A:153:VAL:HG13	1:A:157:GLN:NE2	0.47	2.25	11	4
1:A:31:VAL:CG1	1:A:32:ASN:ND2	0.47	2.78	18	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:91:GLU:CA	0.47	2.39	4	6
1:A:34:GLN:HG3	1:A:40:THR:CG2	0.47	2.40	17	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:44:VAL:HB	0.47	2.40	20	4
1:A:104:ASN:OD1	1:A:134:ASN:HB2	0.47	2.10	16	3
1:A:74:ILE:HA	1:A:89:LEU:CD2	0.47	2.40	5	4
1:A:57:LEU:HG	1:A:92:PHE:CB	0.47	2.40	9	4
1:A:17:ASP:OD1	1:A:17:ASP:N	0.47	2.47	4	4
1:A:103:GLY:O	1:A:105:LEU:HD23	0.47	2.10	3	1
1:A:52:ILE:O	1:A:56:LEU:HD21	0.47	2.09	3	1
1:A:69:THR:HB	1:A:71:PHE:CD1	0.47	2.45	3	1
1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:THR:HB	0.47	1.86	17	9
1:A:110:ALA:CB	1:A:115:HIS:HB2	0.47	2.40	16	2
1:A:106:PRO:CA	1:A:109:LEU:CD1	0.47	2.90	4	1
1:A:45:MET:HA	1:A:52:ILE:HG21	0.47	1.87	4	1
1:A:54:ARG:HG3	1:A:58:LEU:HD22	0.47	1.86	10	2
1:A:108:HIS:NE2	1:A:132:HIS:CG	0.47	2.83	11	2
1:A:10:ALA:CB	1:A:39:ARG:NH1	0.47	2.78	13	3
1:A:15:ARG:N	1:A:46:LYS:HD2	0.47	2.25	5	5
1:A:43:GLN:O	1:A:76:ASP:OD1	0.47	2.33	20	2
1:A:45:MET:C	1:A:52:ILE:HG21	0.47	2.30	4	1
1:A:39:ARG:CD	1:A:67:ASP:OD2	0.47	2.63	12	1
1:A:130:VAL:O	1:A:161:ALA:HA	0.46	2.09	10	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:52:ILE:HG13	0.46	2.09	2	16
1:A:109:LEU:O	1:A:110:ALA:C	0.46	2.53	5	21
1:A:43:GLN:OE1	1:A:65:LEU:O	0.46	2.33	2	5
1:A:130:VAL:O	1:A:161:ALA:O	0.46	2.33	7	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:HB	0.46	2.10	14	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:GLN:HG3	0.46	2.10	10	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:156:MET:SD	0.46	2.73	3	4
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:C	0.46	2.81	18	1
1:A:101:ASN:O	1:A:101:ASN:OD1	0.46	2.33	17	1
1:A:65:LEU:HD11	1:A:73:VAL:CG2	0.46	2.40	20	1
1:A:45:MET:HA	1:A:52:ILE:CG2	0.46	2.40	4	1
1:A:96:VAL:HG21	1:A:126:THR:OG1	0.46	2.10	2	2
1:A:85:THR:O	1:A:88:THR:OG1	0.46	2.33	9	1
1:A:39:ARG:NH1	1:A:67:ASP:OD2	0.46	2.48	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:GLN:CD	1:A:65:LEU:O	0.46	2.54	16	9
1:A:63:PRO:O	1:A:73:VAL:HB	0.46	2.11	11	5
1:A:46:LYS:HA	1:A:46:LYS:CE	0.46	2.40	16	5
1:A:15:ARG:CG	1:A:17:ASP:OD1	0.46	2.63	17	2
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:HG21	0.46	2.40	4	5
1:A:96:VAL:HB	1:A:126:THR:CB	0.46	2.41	19	3
1:A:97:ASN:C	1:A:105:LEU:CD1	0.46	2.84	19	1
1:A:67:ASP:OD1	1:A:67:ASP:C	0.46	2.53	8	8
1:A:14:ALA:CB	1:A:44:VAL:CG2	0.46	2.79	15	1
1:A:131:GLY:C	1:A:133:ARG:N	0.46	2.68	4	1
1:A:133:ARG:O	1:A:133:ARG:HG2	0.46	2.09	5	1
1:A:98:ILE:C	1:A:105:LEU:HD23	0.46	2.31	8	1
1:A:21:LEU:HG	1:A:22:THR:N	0.46	2.25	12	1
1:A:98:ILE:HG22	1:A:106:PRO:HG3	0.46	1.87	2	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:117:ARG:CD	0.46	2.37	18	1
1:A:141:CYS:CB	1:A:162:GLY:HA2	0.46	2.40	7	6
1:A:47:LEU:HG	1:A:76:ASP:O	0.46	2.10	8	6
1:A:39:ARG:CA	1:A:67:ASP:OD1	0.46	2.63	20	1
1:A:122:LEU:H	1:A:122:LEU:HD22	0.46	1.70	2	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:95:ASP:N	0.46	2.75	2	1
1:A:141:CYS:HB3	1:A:156:MET:CE	0.46	2.41	14	3
1:A:83:LEU:O	1:A:85:THR:N	0.46	2.49	13	4
1:A:99:GLU:HG2	1:A:105:LEU:HD22	0.46	1.86	3	1
1:A:80:ALA:O	1:A:115:HIS:CE1	0.46	2.69	16	3
1:A:99:GLU:HA	1:A:105:LEU:HD23	0.46	1.87	13	3
1:A:149:ARG:N	1:A:149:ARG:HD2	0.46	2.25	13	3
1:A:30:ASN:O	1:A:33:ALA:HB2	0.46	2.11	13	3
1:A:95:ASP:HB3	1:A:98:ILE:HB	0.46	1.87	8	3
1:A:161:ALA:O	1:A:162:GLY:O	0.46	2.33	14	3
1:A:89:LEU:O	1:A:94:ALA:CB	0.46	2.63	1	1
1:A:22:THR:OG1	1:A:55:ARG:CG	0.46	2.63	5	1
1:A:45:MET:O	1:A:45:MET:HG3	0.46	2.11	8	1
1:A:139:THR:OG1	1:A:141:CYS:SG	0.46	2.74	13	5
1:A:150:ASN:O	1:A:154:SER:N	0.46	2.49	20	9
1:A:75:HIS:O	1:A:76:ASP:C	0.46	2.54	11	12
1:A:42:LEU:O	1:A:45:MET:SD	0.46	2.73	11	5
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:GLU:N	0.46	2.25	18	3
1:A:31:VAL:HG12	1:A:32:ASN:ND2	0.46	2.25	18	1
1:A:39:ARG:C	1:A:39:ARG:HD2	0.46	2.30	17	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:107:LEU:O	0.46	2.61	11	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:122:LEU:CB	0.46	2.41	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:O	1:A:86:LEU:N	0.46	2.48	6	2
1:A:116:LEU:HG	1:A:155:LEU:HD23	0.46	1.87	19	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:132:HIS:ND1	0.46	2.69	12	2
1:A:66:LYS:CE	1:A:72:ALA:HB2	0.46	2.41	7	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:GLN:CG	0.46	2.63	4	1
1:A:45:MET:CA	1:A:52:ILE:CG2	0.46	2.94	4	1
1:A:82:PHE:O	1:A:85:THR:N	0.46	2.47	1	1
1:A:118:VAL:O	1:A:121:PHE:HB3	0.46	2.10	10	12
1:A:96:VAL:CG1	1:A:128:SER:HB2	0.46	2.41	10	1
1:A:63:PRO:CA	1:A:89:LEU:HD23	0.46	2.39	10	1
1:A:87:GLN:O	1:A:91:GLU:HB2	0.46	2.11	13	13
1:A:107:LEU:HD22	1:A:129:ASN:HD21	0.46	1.70	3	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:151:GLU:HB2	0.46	1.88	13	1
1:A:10:ALA:HB2	1:A:39:ARG:NE	0.46	2.26	17	2
1:A:83:LEU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.46	2.10	17	2
1:A:31:VAL:HG13	1:A:32:ASN:HD22	0.46	1.68	16	1
1:A:67:ASP:OD1	1:A:71:PHE:O	0.46	2.33	6	1
1:A:57:LEU:O	1:A:57:LEU:CD1	0.46	2.61	15	1
1:A:144:ALA:C	1:A:153:VAL:CG2	0.46	2.83	4	1
1:A:10:ALA:O	1:A:14:ALA:N	0.46	2.47	21	4
1:A:37:PHE:O	1:A:68:ARG:CD	0.46	2.63	5	1
1:A:12:ALA:HB2	1:A:20:GLN:CG	0.46	2.40	2	1
1:A:114:GLY:HA3	1:A:149:ARG:CD	0.46	2.41	10	1
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:GLN:OE1	0.46	2.34	10	2
1:A:84:ASP:O	1:A:87:GLN:HB2	0.46	2.11	18	16
1:A:19:GLU:O	1:A:20:GLN:C	0.46	2.54	20	18
1:A:50:PRO:C	1:A:52:ILE:N	0.46	2.69	6	5
1:A:43:GLN:OE1	1:A:71:PHE:O	0.46	2.34	16	2
1:A:124:LYS:HB2	1:A:125:HIS:CD2	0.46	2.46	20	2
1:A:39:ARG:HB2	1:A:43:GLN:NE2	0.46	2.24	16	1
1:A:92:PHE:O	1:A:93:GLN:HG3	0.46	2.11	16	1
1:A:83:LEU:HG	1:A:118:VAL:HA	0.46	1.87	21	4
1:A:43:GLN:HG2	1:A:65:LEU:O	0.46	2.11	19	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:59:ARG:HD3	0.46	2.41	9	1
1:A:138:ASP:C	1:A:139:THR:O	0.46	2.54	15	15
1:A:57:LEU:O	1:A:58:LEU:C	0.46	2.54	19	5
1:A:123:VAL:HG21	1:A:159:ASN:CB	0.46	2.40	11	2
1:A:110:ALA:CA	1:A:115:HIS:HB2	0.46	2.39	1	3
1:A:34:GLN:HG2	1:A:39:ARG:N	0.46	2.26	7	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:53:ALA:HA	0.46	1.88	14	1
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:OD1	0.46	2.34	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:MET:SD	1:A:52:ILE:HG22	0.46	2.51	12	1
1:A:75:HIS:O	1:A:77:ALA:N	0.46	2.49	9	1
1:A:75:HIS:CE1	1:A:99:GLU:C	0.46	2.89	2	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:129:ASN:OD1	0.46	2.11	10	1
1:A:39:ARG:O	1:A:40:THR:C	0.46	2.54	18	4
1:A:45:MET:CE	1:A:53:ALA:HB2	0.46	2.41	11	3
1:A:88:THR:HG22	1:A:92:PHE:CD2	0.46	2.46	8	2
1:A:39:ARG:CD	1:A:44:VAL:HG12	0.46	2.41	19	1
1:A:31:VAL:CG1	1:A:56:LEU:HB3	0.46	2.41	7	1
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD23	0.46	2.26	21	2
1:A:47:LEU:HA	1:A:85:THR:HG21	0.46	1.88	1	1
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:HB2	0.46	2.11	2	2
1:A:98:ILE:HG22	1:A:106:PRO:CG	0.46	2.41	2	1
1:A:95:ASP:C	1:A:97:ASN:N	0.45	2.69	1	18
1:A:85:THR:HA	1:A:88:THR:OG1	0.45	2.11	6	7
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:C	0.45	2.53	20	4
1:A:66:LYS:HG3	1:A:70:GLY:CA	0.45	2.41	11	3
1:A:129:ASN:CG	1:A:129:ASN:O	0.45	2.54	14	3
1:A:104:ASN:CG	1:A:134:ASN:HB2	0.45	2.32	4	1
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:CG	0.45	2.41	1	1
1:A:58:LEU:HD21	1:A:92:PHE:CZ	0.45	2.45	9	2
1:A:63:PRO:CG	1:A:94:ALA:CA	0.45	2.94	2	16
1:A:129:ASN:O	1:A:130:VAL:O	0.45	2.34	3	1
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:LYS:HG2	0.45	2.40	13	2
1:A:108:HIS:CG	1:A:140:ALA:CA	0.45	3.00	11	7
1:A:41:ALA:O	1:A:45:MET:CB	0.45	2.64	15	1
1:A:71:PHE:CD1	1:A:100:ASP:HB2	0.45	2.46	14	2
1:A:129:ASN:CA	1:A:132:HIS:HB2	0.45	2.41	1	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:55:ARG:HD3	0.45	1.88	5	1
1:A:102:GLU:CB	1:A:135:HIS:CE1	0.45	2.99	10	2
1:A:114:GLY:CA	1:A:149:ARG:HD2	0.45	2.42	10	3
1:A:111:ALA:CA	1:A:144:ALA:HB2	0.45	2.41	10	2
1:A:39:ARG:C	1:A:39:ARG:HD3	0.45	2.31	3	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:59:ARG:HD3	0.45	1.89	12	2
1:A:37:PHE:C	1:A:39:ARG:N	0.45	2.69	6	2
1:A:113:GLU:HB2	1:A:115:HIS:NE2	0.45	2.26	15	2
1:A:99:GLU:CG	1:A:105:LEU:HB3	0.45	2.41	20	1
1:A:129:ASN:ND2	1:A:132:HIS:CB	0.45	2.79	5	2
1:A:64:ASP:OD1	1:A:98:ILE:HD12	0.45	2.11	14	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:HB3	0.45	2.41	9	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:129:ASN:OD1	0.45	2.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:CD2	1:A:51:GLU:HG3	0.45	2.38	2	1
1:A:107:LEU:HB3	1:A:140:ALA:CB	0.45	2.42	10	1
1:A:114:GLY:HA3	1:A:149:ARG:CG	0.45	2.41	16	6
1:A:141:CYS:O	1:A:145:ARG:HB3	0.45	2.11	17	4
1:A:124:LYS:O	1:A:125:HIS:HB2	0.45	2.11	7	11
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:OD1	0.45	2.34	2	3
1:A:117:ARG:CD	1:A:118:VAL:N	0.45	2.80	17	2
1:A:131:GLY:O	1:A:132:HIS:O	0.45	2.34	11	1
1:A:124:LYS:HG2	1:A:125:HIS:NE2	0.45	2.27	1	3
1:A:116:LEU:HG	1:A:117:ARG:N	0.45	2.27	14	2
1:A:15:ARG:CD	1:A:15:ARG:O	0.45	2.64	14	1
1:A:132:HIS:HE1	1:A:140:ALA:HB2	0.45	1.65	4	1
1:A:62:ASN:CB	1:A:65:LEU:HG	0.45	2.42	2	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:140:ALA:HB1	0.45	2.42	12	1
1:A:83:LEU:HD13	1:A:87:GLN:CG	0.45	2.40	9	1
1:A:35:ASN:O	1:A:38:GLY:N	0.45	2.43	3	4
1:A:130:VAL:CA	1:A:161:ALA:HA	0.45	2.41	17	3
1:A:83:LEU:CD2	1:A:121:PHE:HB2	0.45	2.40	17	1
1:A:37:PHE:O	1:A:38:GLY:C	0.45	2.55	7	4
1:A:62:ASN:HB2	1:A:65:LEU:CD2	0.45	2.41	4	2
1:A:39:ARG:NH1	1:A:39:ARG:HG2	0.45	2.25	1	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:46:LYS:HG2	0.45	2.41	12	6
1:A:13:ALA:O	1:A:46:LYS:HG2	0.45	2.12	18	2
1:A:28:ASN:C	1:A:29:VAL:HG22	0.45	2.32	19	2
1:A:54:ARG:HB2	1:A:88:THR:CG2	0.45	2.41	14	4
1:A:78:ALA:CB	1:A:86:LEU:HD12	0.45	2.40	8	2
1:A:83:LEU:HA	1:A:86:LEU:HB2	0.45	1.89	16	5
1:A:79:ARG:HD2	1:A:109:LEU:CD2	0.45	2.42	19	1
1:A:121:PHE:O	1:A:122:LEU:C	0.45	2.55	12	3
1:A:21:LEU:O	1:A:25:LEU:N	0.45	2.50	7	1
1:A:35:ASN:OD1	1:A:37:PHE:HB3	0.45	2.11	7	1
1:A:39:ARG:HD3	1:A:67:ASP:OD2	0.45	2.12	12	1
1:A:98:ILE:CG2	1:A:106:PRO:HD3	0.45	2.42	2	1
1:A:84:ASP:OD1	1:A:84:ASP:N	0.45	2.48	18	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:HB2	0.45	2.42	17	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:98:ILE:CG1	0.45	2.42	17	1
1:A:46:LYS:N	1:A:52:ILE:HG21	0.45	2.27	16	2
1:A:97:ASN:ND2	1:A:129:ASN:CB	0.45	2.80	7	1
1:A:100:ASP:C	1:A:100:ASP:OD1	0.45	2.55	4	1
1:A:159:ASN:O	1:A:160:GLY:C	0.45	2.56	21	15
1:A:130:VAL:HA	1:A:161:ALA:HA	0.45	1.89	4	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CD1	0.45	2.99	18	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:C	0.45	2.55	18	5
1:A:141:CYS:O	1:A:145:ARG:HB2	0.45	2.12	13	7
1:A:37:PHE:CB	1:A:39:ARG:NE	0.45	2.80	13	1
1:A:42:LEU:HG	1:A:61:ALA:CB	0.45	2.38	13	1
1:A:104:ASN:ND2	1:A:134:ASN:ND2	0.45	2.64	7	1
1:A:89:LEU:O	1:A:94:ALA:HB2	0.45	2.12	1	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LEU:C	0.45	2.55	15	10
1:A:64:ASP:C	1:A:64:ASP:OD1	0.45	2.55	8	2
1:A:63:PRO:CG	1:A:94:ALA:CB	0.45	2.94	6	6
1:A:95:ASP:O	1:A:96:VAL:C	0.45	2.53	8	9
1:A:62:ASN:OD1	1:A:64:ASP:CG	0.45	2.56	11	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:41:ALA:CB	0.45	2.42	4	2
1:A:46:LYS:C	1:A:47:LEU:HG	0.45	2.33	19	1
1:A:65:LEU:CD1	1:A:73:VAL:HG23	0.45	2.42	20	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:O	0.45	2.65	14	1
1:A:139:THR:HG23	1:A:142:ASP:OD2	0.45	2.12	4	1
1:A:37:PHE:CE1	1:A:68:ARG:NE	0.45	2.84	1	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:50:PRO:HD2	0.45	2.11	5	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:86:LEU:HB3	0.45	2.41	9	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:86:LEU:N	0.45	2.27	9	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:65:LEU:O	0.45	2.65	10	3
1:A:89:LEU:C	1:A:94:ALA:HB2	0.45	2.32	3	6
1:A:15:ARG:HG3	1:A:17:ASP:OD1	0.45	2.12	6	3
1:A:112:LYS:HE2	1:A:147:TYR:CE1	0.45	2.47	15	2
1:A:110:ALA:CB	1:A:118:VAL:CG1	0.45	2.95	16	2
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ARG:HG2	0.45	1.89	6	1
1:A:64:ASP:CG	1:A:98:ILE:HG13	0.45	2.33	6	2
1:A:17:ASP:O	1:A:21:LEU:CD2	0.45	2.64	21	1
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:GLN:CD	0.45	2.56	21	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD23	0.45	2.41	12	1
1:A:54:ARG:HG3	1:A:92:PHE:CZ	0.45	2.47	12	1
1:A:66:LYS:HG2	1:A:70:GLY:C	0.44	2.33	4	3
1:A:30:ASN:O	1:A:33:ALA:CB	0.44	2.65	13	3
1:A:25:LEU:HD13	1:A:56:LEU:HD22	0.44	1.89	19	1
1:A:42:LEU:O	1:A:73:VAL:HG11	0.44	2.11	14	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:HG21	0.44	2.12	14	1
1:A:131:GLY:O	1:A:139:THR:HB	0.44	2.12	4	1
1:A:75:HIS:CD2	1:A:105:LEU:HA	0.44	2.48	10	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:128:SER:HB3	0.44	2.28	10	1
1:A:65:LEU:HB2	1:A:73:VAL:CG2	0.44	2.42	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ALA:CB	1:A:17:ASP:CB	0.44	2.93	9	2
1:A:63:PRO:HB3	1:A:89:LEU:HG	0.44	1.89	6	5
1:A:43:GLN:O	1:A:76:ASP:CG	0.44	2.55	9	3
1:A:57:LEU:CG	1:A:92:PHE:HB3	0.44	2.42	9	2
1:A:67:ASP:OD2	1:A:69:THR:OG1	0.44	2.36	7	1
1:A:21:LEU:CG	1:A:22:THR:N	0.44	2.80	12	2
1:A:93:GLN:O	1:A:94:ALA:C	0.44	2.55	2	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:GLU:C	0.44	2.56	15	15
1:A:102:GLU:CG	1:A:135:HIS:CE1	0.44	3.01	11	1
1:A:112:LYS:HD3	1:A:147:TYR:CZ	0.44	2.47	16	1
1:A:61:ALA:O	1:A:63:PRO:HD3	0.44	2.13	6	2
1:A:69:THR:O	1:A:70:GLY:C	0.44	2.55	6	5
1:A:57:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CG	0.44	3.00	19	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:51:GLU:CG	0.44	2.43	21	2
1:A:74:ILE:HG22	1:A:75:HIS:N	0.44	2.26	14	1
1:A:143:LEU:HD22	1:A:147:TYR:CZ	0.44	2.47	5	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:52:ILE:CG1	0.44	2.64	19	10
1:A:125:HIS:O	1:A:126:THR:C	0.44	2.56	16	3
1:A:9:LEU:O	1:A:11:SER:N	0.44	2.50	1	5
1:A:28:ASN:C	1:A:28:ASN:OD1	0.44	2.55	7	2
1:A:41:ALA:O	1:A:45:MET:HB3	0.44	2.12	15	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:HG13	0.44	2.12	14	1
1:A:101:ASN:O	1:A:101:ASN:CG	0.44	2.56	4	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:24:LEU:CD2	0.44	2.57	4	1
1:A:139:THR:O	1:A:143:LEU:HG	0.44	2.13	2	2
1:A:103:GLY:O	1:A:134:ASN:HA	0.44	2.13	10	2
1:A:21:LEU:CD1	1:A:55:ARG:HB3	0.44	2.43	10	1
1:A:54:ARG:O	1:A:58:LEU:HB2	0.44	2.12	12	5
1:A:109:LEU:C	1:A:111:ALA:N	0.44	2.69	3	14
1:A:106:PRO:HA	1:A:109:LEU:HB2	0.44	1.88	18	3
1:A:113:GLU:HB2	1:A:115:HIS:CD2	0.44	2.47	7	2
1:A:132:HIS:HE1	1:A:134:ASN:HA	0.44	1.72	11	3
1:A:142:ASP:O	1:A:146:LEU:HD23	0.44	2.11	16	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD22	0.44	2.43	19	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:58:LEU:H	0.44	1.67	19	1
1:A:95:ASP:HB3	1:A:98:ILE:CB	0.44	2.43	8	1
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:HD12	0.44	2.42	12	1
1:A:98:ILE:CD1	1:A:99:GLU:N	0.44	2.73	2	1
1:A:103:GLY:O	1:A:134:ASN:CA	0.44	2.66	10	1
1:A:109:LEU:O	1:A:111:ALA:N	0.44	2.51	3	5
1:A:145:ARG:HA	1:A:153:VAL:CG2	0.44	2.42	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:THR:O	1:A:23:SER:C	0.44	2.56	11	9
1:A:47:LEU:HG	1:A:76:ASP:C	0.44	2.33	18	1
1:A:157:GLN:CG	1:A:162:GLY:HA3	0.44	2.43	12	5
1:A:37:PHE:O	1:A:68:ARG:NE	0.44	2.51	4	1
1:A:45:MET:O	1:A:52:ILE:HG21	0.44	2.12	4	2
1:A:8:GLU:CD	1:A:24:LEU:CD2	0.44	2.86	4	1
1:A:138:ASP:CB	1:A:143:LEU:CD2	0.44	2.96	1	1
1:A:138:ASP:O	1:A:143:LEU:CD2	0.44	2.66	1	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:132:HIS:CB	0.44	2.66	10	1
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:C	0.44	2.55	12	5
1:A:67:ASP:OD2	1:A:71:PHE:HB2	0.44	2.12	15	3
1:A:133:ARG:HG2	1:A:139:THR:CG2	0.44	2.42	18	10
1:A:8:GLU:O	1:A:9:LEU:C	0.44	2.55	9	5
1:A:132:HIS:ND1	1:A:133:ARG:C	0.44	2.70	11	2
1:A:42:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD12	0.44	2.43	11	1
1:A:54:ARG:HA	1:A:57:LEU:CB	0.44	2.42	19	1
1:A:44:VAL:O	1:A:45:MET:HG3	0.44	2.13	4	2
1:A:37:PHE:O	1:A:68:ARG:CG	0.44	2.66	4	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:51:GLU:HB3	0.44	1.90	5	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:50:PRO:CD	0.44	2.65	5	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:87:GLN:HE21	0.44	1.72	9	1
1:A:83:LEU:C	1:A:85:THR:N	0.44	2.70	18	17
1:A:46:LYS:C	1:A:48:GLY:N	0.44	2.70	18	5
1:A:130:VAL:CG1	1:A:161:ALA:HA	0.44	2.42	1	3
1:A:123:VAL:HA	1:A:128:SER:CB	0.44	2.42	4	3
1:A:90:LEU:CD1	1:A:90:LEU:C	0.44	2.80	6	2
1:A:66:LYS:HE2	1:A:98:ILE:HD12	0.44	1.88	7	1
1:A:21:LEU:CD1	1:A:21:LEU:N	0.44	2.81	8	1
1:A:103:GLY:C	1:A:104:ASN:OD1	0.44	2.57	10	1
1:A:66:LYS:HG3	1:A:72:ALA:CA	0.44	2.42	10	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:109:LEU:CD1	0.44	2.42	10	1
1:A:79:ARG:O	1:A:115:HIS:NE2	0.44	2.50	10	1
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:C	0.44	2.55	4	4
1:A:40:THR:HG21	1:A:65:LEU:HD22	0.44	1.90	3	2
1:A:146:LEU:HG	1:A:147:TYR:N	0.44	2.27	18	1
1:A:63:PRO:HG2	1:A:94:ALA:N	0.44	2.27	13	2
1:A:75:HIS:CG	1:A:109:LEU:HD21	0.44	2.48	5	2
1:A:145:ARG:HD2	1:A:153:VAL:HG21	0.44	1.90	15	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:29:VAL:HG21	0.44	1.89	2	2
1:A:79:ARG:HB2	1:A:109:LEU:CD2	0.44	2.40	14	1
1:A:45:MET:O	1:A:46:LYS:HB2	0.44	2.13	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:PHE:CZ	1:A:68:ARG:NE	0.44	2.86	1	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:73:VAL:CG2	0.44	2.95	5	1
1:A:89:LEU:O	1:A:92:PHE:C	0.44	2.56	12	1
1:A:69:THR:O	1:A:101:ASN:ND2	0.43	2.43	10	1
1:A:43:GLN:HG2	1:A:73:VAL:CG2	0.43	2.41	3	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ASN:CG	0.43	2.57	13	1
1:A:57:LEU:C	1:A:59:ARG:N	0.43	2.70	19	2
1:A:108:HIS:O	1:A:109:LEU:C	0.43	2.56	4	2
1:A:74:ILE:HA	1:A:89:LEU:CD1	0.43	2.42	7	2
1:A:42:LEU:CD1	1:A:53:ALA:HB1	0.43	2.43	16	2
1:A:39:ARG:HG3	1:A:39:ARG:O	0.43	2.12	6	1
1:A:51:GLU:O	1:A:54:ARG:HB3	0.43	2.11	19	3
1:A:99:GLU:HA	1:A:105:LEU:HB3	0.43	1.90	4	2
1:A:124:LYS:O	1:A:125:HIS:CD2	0.43	2.70	9	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.43	2.81	4	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:129:ASN:OD1	0.43	2.12	1	1
1:A:82:PHE:O	1:A:85:THR:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:85:THR:O	1:A:88:THR:N	0.43	2.50	9	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:ASN:C	0.43	2.56	19	3
1:A:90:LEU:O	1:A:91:GLU:C	0.43	2.56	20	9
1:A:46:LYS:HE2	1:A:46:LYS:HA	0.43	1.90	6	3
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:HB2	0.43	2.13	8	2
1:A:127:ALA:O	1:A:128:SER:C	0.43	2.56	16	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:107:LEU:HB2	0.43	1.90	19	1
1:A:134:ASN:OD1	1:A:134:ASN:C	0.43	2.57	19	1
1:A:37:PHE:O	1:A:39:ARG:HG2	0.43	2.13	5	2
1:A:154:SER:O	1:A:158:ALA:N	0.43	2.49	4	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:129:ASN:C	0.43	2.56	5	1
1:A:145:ARG:CD	1:A:145:ARG:C	0.43	2.86	5	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:86:LEU:CD2	0.43	2.43	9	1
1:A:107:LEU:HB3	1:A:140:ALA:HB2	0.43	1.90	10	1
1:A:78:ALA:O	1:A:115:HIS:CD2	0.43	2.71	10	1
1:A:30:ASN:C	1:A:32:ASN:N	0.43	2.71	15	5
1:A:154:SER:O	1:A:155:LEU:C	0.43	2.55	15	13
1:A:133:ARG:HA	1:A:139:THR:HA	0.43	1.90	8	6
1:A:117:ARG:HD2	1:A:118:VAL:N	0.43	2.27	17	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.43	2.80	11	1
1:A:112:LYS:HE2	1:A:147:TYR:CZ	0.43	2.48	11	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:108:HIS:HE1	0.43	1.74	16	2
1:A:134:ASN:C	1:A:134:ASN:OD1	0.43	2.57	20	2
1:A:116:LEU:HD13	1:A:151:GLU:C	0.43	2.34	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:PHE:CD2	1:A:122:LEU:N	0.43	2.86	21	1
1:A:46:LYS:O	1:A:47:LEU:CG	0.43	2.67	21	1
1:A:124:LYS:O	1:A:125:HIS:ND1	0.43	2.51	5	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:66:LYS:C	0.43	2.56	16	2
1:A:45:MET:HG3	1:A:45:MET:O	0.43	2.13	16	4
1:A:90:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CZ	0.43	3.00	17	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:118:VAL:HG23	0.43	2.42	16	1
1:A:57:LEU:CB	1:A:61:ALA:HB3	0.43	2.44	6	1
1:A:54:ARG:HG2	1:A:88:THR:CG2	0.43	2.43	6	1
1:A:99:GLU:CA	1:A:105:LEU:HB3	0.43	2.44	20	1
1:A:32:ASN:OD1	1:A:62:ASN:ND2	0.43	2.52	7	1
1:A:63:PRO:O	1:A:89:LEU:CD1	0.43	2.67	8	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HD3	0.43	1.91	2	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:85:THR:CB	0.43	2.42	10	2
1:A:100:ASP:OD2	1:A:102:GLU:HB2	0.43	2.14	19	2
1:A:62:ASN:OD1	1:A:64:ASP:OD2	0.43	2.36	11	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:98:ILE:HD11	0.43	1.91	11	2
1:A:118:VAL:HG12	1:A:119:VAL:H	0.43	1.71	6	7
1:A:120:GLU:HA	1:A:155:LEU:CD1	0.43	2.43	19	1
1:A:142:ASP:O	1:A:146:LEU:HD13	0.43	2.13	14	1
1:A:64:ASP:CG	1:A:98:ILE:HG21	0.43	2.33	14	1
1:A:39:ARG:O	1:A:39:ARG:HG2	0.43	2.13	21	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HD21	0.43	2.44	21	1
1:A:133:ARG:HB2	1:A:137:GLY:O	0.43	2.13	5	1
1:A:106:PRO:CA	1:A:109:LEU:HG	0.43	2.44	2	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:HIS:C	0.43	2.57	16	6
1:A:133:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	0.43	1.91	17	3
1:A:155:LEU:O	1:A:159:ASN:HB2	0.43	2.14	15	9
1:A:83:LEU:HD11	1:A:121:PHE:CD2	0.43	2.48	7	2
1:A:99:GLU:CG	1:A:105:LEU:HD12	0.43	2.44	11	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:151:GLU:CB	0.43	2.44	7	1
1:A:155:LEU:O	1:A:159:ASN:CG	0.43	2.57	9	3
1:A:129:ASN:ND2	1:A:132:HIS:HB3	0.43	2.27	21	1
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ARG:NH2	0.43	2.28	21	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:62:ASN:O	0.43	2.12	5	1
1:A:107:LEU:CG	1:A:122:LEU:HD13	0.43	2.43	12	1
1:A:142:ASP:C	1:A:143:LEU:HD23	0.43	2.34	9	1
1:A:15:ARG:C	1:A:46:LYS:CD	0.43	2.87	2	1
1:A:103:GLY:O	1:A:134:ASN:HB2	0.43	2.14	10	1
1:A:116:LEU:C	1:A:118:VAL:N	0.43	2.72	4	15
1:A:151:GLU:O	1:A:155:LEU:HB2	0.43	2.13	7	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ARG:HG3	1:A:15:ARG:O	0.43	2.13	11	2
1:A:116:LEU:CG	1:A:117:ARG:N	0.43	2.79	7	1
1:A:141:CYS:SG	1:A:162:GLY:C	0.43	2.97	7	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:HD23	0.43	2.14	7	1
1:A:129:ASN:C	1:A:129:ASN:OD1	0.43	2.57	21	1
1:A:44:VAL:C	1:A:45:MET:CG	0.43	2.87	21	1
1:A:98:ILE:N	1:A:105:LEU:HD22	0.43	2.29	8	1
1:A:156:MET:O	1:A:157:GLN:C	0.43	2.57	14	6
1:A:62:ASN:HB2	1:A:65:LEU:CD1	0.43	2.43	13	1
1:A:116:LEU:HG	1:A:155:LEU:CD2	0.43	2.43	19	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:76:ASP:C	0.43	2.34	5	1
1:A:18:LEU:O	1:A:21:LEU:HG	0.43	2.13	12	1
1:A:119:VAL:O	1:A:120:GLU:C	0.43	2.57	9	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:63:PRO:HD3	0.43	2.43	2	1
1:A:73:VAL:CB	1:A:89:LEU:HD21	0.43	2.43	10	2
1:A:145:ARG:CA	1:A:153:VAL:CG2	0.43	2.97	1	5
1:A:83:LEU:HD22	1:A:117:ARG:O	0.43	2.13	17	1
1:A:68:ARG:HG3	1:A:69:THR:N	0.43	2.29	17	2
1:A:138:ASP:HB3	1:A:142:ASP:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:108:HIS:NE2	1:A:139:THR:C	0.43	2.72	1	1
1:A:31:VAL:HG23	1:A:32:ASN:HD22	0.43	1.73	8	1
1:A:132:HIS:C	1:A:139:THR:HB	0.43	2.34	3	3
1:A:111:ALA:O	1:A:112:LYS:C	0.43	2.57	20	4
1:A:9:LEU:C	1:A:11:SER:N	0.43	2.72	6	5
1:A:149:ARG:HB3	1:A:152:VAL:HG21	0.43	1.90	18	3
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.43	2.82	13	2
1:A:31:VAL:O	1:A:40:THR:HB	0.43	2.13	19	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:C	0.43	2.35	17	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:100:ASP:C	0.43	2.57	7	3
1:A:93:GLN:HG3	1:A:93:GLN:O	0.43	2.13	16	1
1:A:16:GLY:O	1:A:18:LEU:N	0.43	2.52	19	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD23	0.43	2.29	19	1
1:A:104:ASN:ND2	1:A:143:LEU:HD11	0.43	2.29	15	2
1:A:105:LEU:HD12	1:A:107:LEU:HB3	0.43	1.91	7	1
1:A:70:GLY:C	1:A:100:ASP:HA	0.43	2.35	14	1
1:A:45:MET:C	1:A:47:LEU:N	0.43	2.72	14	2
1:A:90:LEU:HD21	1:A:126:THR:HG23	0.43	1.89	21	1
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:HG2	0.43	2.13	8	1
1:A:99:GLU:HB3	1:A:104:ASN:O	0.42	2.14	19	2
1:A:96:VAL:HG11	1:A:127:ALA:N	0.42	2.25	1	2
1:A:102:GLU:O	1:A:135:HIS:ND1	0.42	2.51	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HA	0.42	2.29	21	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:51:GLU:CG	0.42	2.81	2	1
1:A:150:ASN:C	1:A:152:VAL:N	0.42	2.73	4	12
1:A:17:ASP:CG	1:A:20:GLN:OE1	0.42	2.57	3	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:121:PHE:HB2	0.42	2.44	11	1
1:A:64:ASP:CG	1:A:64:ASP:O	0.42	2.57	7	2
1:A:105:LEU:HD12	1:A:129:ASN:OD1	0.42	2.15	8	1
1:A:128:SER:HB3	1:A:130:VAL:CG1	0.42	2.43	12	1
1:A:103:GLY:O	1:A:104:ASN:C	0.42	2.57	2	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:51:GLU:HG3	0.42	2.41	2	1
1:A:8:GLU:O	1:A:11:SER:HB3	0.42	2.14	18	3
1:A:112:LYS:CE	1:A:147:TYR:OH	0.42	2.67	16	1
1:A:23:SER:O	1:A:26:GLN:HG2	0.42	2.14	16	3
1:A:43:GLN:O	1:A:76:ASP:OD2	0.42	2.38	6	1
1:A:130:VAL:HA	1:A:161:ALA:O	0.42	2.14	19	1
1:A:156:MET:HA	1:A:161:ALA:HB3	0.42	1.91	7	1
1:A:63:PRO:HB3	1:A:89:LEU:HA	0.42	1.91	14	1
1:A:104:ASN:OD1	1:A:104:ASN:C	0.42	2.56	21	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:HG3	0.42	2.44	21	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:151:GLU:C	0.42	2.35	1	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:28:ASN:C	0.42	2.57	8	2
1:A:75:HIS:NE2	1:A:106:PRO:HD3	0.42	2.30	8	2
1:A:107:LEU:CG	1:A:122:LEU:HG	0.42	2.44	8	1
1:A:107:LEU:CG	1:A:140:ALA:CB	0.42	2.98	10	1
1:A:64:ASP:CB	1:A:98:ILE:HG13	0.42	2.45	5	2
1:A:42:LEU:HG	1:A:73:VAL:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:67:ASP:HB3	0.42	2.29	17	3
1:A:56:LEU:O	1:A:57:LEU:C	0.42	2.56	9	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:42:LEU:O	0.42	2.13	19	1
1:A:15:ARG:C	1:A:46:LYS:HD3	0.42	2.35	14	2
1:A:79:ARG:O	1:A:113:GLU:HG3	0.42	2.14	14	1
1:A:95:ASP:O	1:A:97:ASN:N	0.42	2.52	14	2
1:A:40:THR:HG23	1:A:43:GLN:OE1	0.42	2.14	8	1
1:A:156:MET:CB	1:A:161:ALA:HB3	0.42	2.44	2	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HG21	0.42	1.91	2	1
1:A:21:LEU:CD1	1:A:55:ARG:CB	0.42	2.97	10	1
1:A:8:GLU:O	1:A:12:ALA:N	0.42	2.53	13	1
1:A:19:GLU:O	1:A:22:THR:HB	0.42	2.14	5	5
1:A:23:SER:O	1:A:26:GLN:HG3	0.42	2.14	6	1
1:A:104:ASN:OD1	1:A:134:ASN:HB3	0.42	2.14	9	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:H	0.42	2.28	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:LEU:C	1:A:147:TYR:CD2	0.42	2.93	12	2
1:A:41:ALA:O	1:A:44:VAL:HG22	0.42	2.13	5	1
1:A:63:PRO:HG3	1:A:92:PHE:O	0.42	2.13	8	1
1:A:14:ALA:C	1:A:46:LYS:HG3	0.42	2.34	12	1
1:A:96:VAL:HG11	1:A:126:THR:CB	0.42	2.45	2	1
1:A:73:VAL:HB	1:A:89:LEU:CD2	0.42	2.44	10	1
1:A:112:LYS:HE2	1:A:147:TYR:OH	0.42	2.14	3	1
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:LYS:HD3	0.42	2.44	9	3
1:A:40:THR:O	1:A:42:LEU:N	0.42	2.53	21	4
1:A:40:THR:C	1:A:42:LEU:N	0.42	2.73	20	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:HB2	0.42	2.14	7	2
1:A:49:ASN:CG	1:A:52:ILE:HD11	0.42	2.35	4	3
1:A:75:HIS:CE1	1:A:100:ASP:HB3	0.42	2.49	21	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:82:PHE:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:75:HIS:HE1	1:A:100:ASP:CB	0.42	2.28	10	1
1:A:51:GLU:O	1:A:54:ARG:N	0.42	2.53	18	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD13	0.42	2.13	13	1
1:A:114:GLY:HA3	1:A:149:ARG:HG3	0.42	1.91	20	2
1:A:54:ARG:HG3	1:A:88:THR:CG2	0.42	2.43	6	1
1:A:72:ALA:C	1:A:74:ILE:N	0.42	2.73	19	3
1:A:112:LYS:CG	1:A:147:TYR:CE2	0.42	3.02	4	1
1:A:98:ILE:O	1:A:105:LEU:HB2	0.42	2.14	1	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:39:ARG:HB3	0.42	2.48	1	1
1:A:63:PRO:HG3	1:A:94:ALA:HA	0.42	1.92	1	1
1:A:86:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD21	0.42	1.91	2	1
1:A:104:ASN:C	1:A:105:LEU:HD23	0.42	2.34	3	1
1:A:39:ARG:CZ	1:A:76:ASP:OD2	0.42	2.67	18	1
1:A:8:GLU:O	1:A:11:SER:N	0.42	2.53	13	2
1:A:73:VAL:O	1:A:74:ILE:C	0.42	2.58	11	1
1:A:104:ASN:N	1:A:134:ASN:HB2	0.42	2.29	4	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:121:PHE:CD2	0.42	3.02	21	1
1:A:39:ARG:HB2	1:A:43:GLN:HB3	0.42	1.90	21	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:92:PHE:CB	0.42	2.45	2	2
1:A:47:LEU:CD2	1:A:77:ALA:HA	0.42	2.43	2	1
1:A:153:VAL:O	1:A:154:SER:C	0.42	2.57	18	1
1:A:39:ARG:HD2	1:A:67:ASP:CB	0.42	2.44	18	1
1:A:99:GLU:HG2	1:A:105:LEU:CG	0.42	2.45	17	1
1:A:67:ASP:OD1	1:A:69:THR:N	0.42	2.51	17	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:100:ASP:N	0.42	2.53	11	2
1:A:96:VAL:HB	1:A:126:THR:HB	0.42	1.91	15	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ASN:HB3	0.42	2.15	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LYS:HD2	1:A:99:GLU:O	0.42	2.15	20	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:126:THR:HG23	0.42	1.89	14	1
1:A:80:ALA:C	1:A:115:HIS:NE2	0.42	2.73	21	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:N	0.42	2.30	5	1
1:A:74:ILE:HG13	1:A:89:LEU:HD12	0.42	1.85	8	1
1:A:45:MET:SD	1:A:52:ILE:HB	0.42	2.54	12	1
1:A:58:LEU:CG	1:A:92:PHE:CZ	0.42	3.03	9	1
1:A:130:VAL:O	1:A:161:ALA:C	0.42	2.58	10	1
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ARG:HG3	0.42	2.13	13	3
1:A:141:CYS:N	1:A:156:MET:HE1	0.42	2.30	11	1
1:A:69:THR:C	1:A:71:PHE:N	0.42	2.72	15	1
1:A:111:ALA:N	1:A:119:VAL:CG2	0.42	2.82	4	1
1:A:118:VAL:O	1:A:119:VAL:C	0.42	2.58	1	1
1:A:106:PRO:O	1:A:109:LEU:HB2	0.42	2.15	8	2
1:A:107:LEU:CB	1:A:122:LEU:HG	0.42	2.45	8	1
1:A:22:THR:O	1:A:25:LEU:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:HG13	0.42	2.45	12	1
1:A:141:CYS:SG	1:A:162:GLY:HA2	0.41	2.55	10	4
1:A:98:ILE:C	1:A:105:LEU:HB3	0.41	2.34	10	1
1:A:115:HIS:HB3	1:A:118:VAL:HG11	0.41	1.92	17	2
1:A:125:HIS:C	1:A:126:THR:OG1	0.41	2.58	15	2
1:A:156:MET:SD	1:A:161:ALA:HB1	0.41	2.55	15	1
1:A:57:LEU:CD1	1:A:92:PHE:HB3	0.41	2.45	15	1
1:A:23:SER:HA	1:A:26:GLN:NE2	0.41	2.30	20	2
1:A:45:MET:O	1:A:45:MET:HE2	0.41	2.14	7	1
1:A:78:ALA:O	1:A:110:ALA:CA	0.41	2.68	14	1
1:A:106:PRO:O	1:A:109:LEU:HD13	0.41	2.14	4	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:46:LYS:NZ	0.41	2.30	4	1
1:A:85:THR:C	1:A:87:GLN:N	0.41	2.72	9	1
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LEU:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:85:THR:HG21	0.41	1.92	17	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HA	0.41	1.89	16	1
1:A:21:LEU:HG	1:A:56:LEU:CD2	0.41	2.41	19	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:61:ALA:CB	0.41	2.44	7	1
1:A:23:SER:O	1:A:24:LEU:C	0.41	2.59	14	1
1:A:42:LEU:HA	1:A:56:LEU:HD12	0.41	1.92	14	1
1:A:39:ARG:HD2	1:A:67:ASP:CG	0.41	2.35	12	1
1:A:87:GLN:O	1:A:88:THR:C	0.41	2.57	15	3
1:A:45:MET:HE3	1:A:53:ALA:HB2	0.41	1.91	11	1
1:A:74:ILE:HG22	1:A:106:PRO:HB2	0.41	1.88	19	5
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:ALA:HB3	0.41	1.92	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LYS:NZ	1:A:70:GLY:O	0.41	2.41	14	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:HG	0.41	2.16	4	1
1:A:130:VAL:CB	1:A:161:ALA:HA	0.41	2.45	21	3
1:A:108:HIS:CG	1:A:143:LEU:HD12	0.41	2.47	8	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:98:ILE:CG1	0.41	2.98	12	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:52:ILE:HG12	0.41	2.45	9	1
1:A:89:LEU:C	1:A:94:ALA:HB3	0.41	2.36	9	1
1:A:75:HIS:NE2	1:A:99:GLU:C	0.41	2.73	10	1
1:A:63:PRO:HG3	1:A:93:GLN:O	0.41	2.15	10	1
1:A:130:VAL:HA	1:A:161:ALA:HB1	0.41	1.91	3	2
1:A:15:ARG:O	1:A:15:ARG:HG3	0.41	2.15	3	2
1:A:11:SER:O	1:A:15:ARG:HG3	0.41	2.16	18	1
1:A:141:CYS:SG	1:A:142:ASP:OD1	0.41	2.78	17	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:39:ARG:HB3	0.41	2.51	6	2
1:A:39:ARG:N	1:A:39:ARG:HD3	0.41	2.31	16	1
1:A:41:ALA:C	1:A:44:VAL:HG23	0.41	2.34	7	1
1:A:143:LEU:HA	1:A:143:LEU:HD23	0.41	1.73	21	1
1:A:63:PRO:HG3	1:A:94:ALA:CA	0.41	2.45	1	1
1:A:97:ASN:O	1:A:99:GLU:HG3	0.41	2.15	1	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HD12	0.41	1.91	8	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:118:VAL:CA	0.41	2.46	9	1
1:A:62:ASN:HB2	1:A:65:LEU:HG	0.41	1.92	2	1
1:A:139:THR:C	1:A:141:CYS:N	0.41	2.73	10	1
1:A:77:ALA:O	1:A:82:PHE:HB2	0.41	2.14	10	2
1:A:99:GLU:C	1:A:104:ASN:O	0.41	2.58	10	1
1:A:63:PRO:CG	1:A:94:ALA:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:62:ASN:HA	1:A:63:PRO:HD2	0.41	1.79	11	1
1:A:37:PHE:CD2	1:A:39:ARG:NE	0.41	2.88	16	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:117:ARG:O	0.41	2.68	6	1
1:A:115:HIS:O	1:A:119:VAL:N	0.41	2.48	15	1
1:A:42:LEU:C	1:A:45:MET:HG2	0.41	2.35	15	1
1:A:71:PHE:CZ	1:A:109:LEU:HD21	0.41	2.50	15	1
1:A:64:ASP:HA	1:A:98:ILE:HG13	0.41	1.92	15	1
1:A:63:PRO:HB3	1:A:89:LEU:CG	0.41	2.45	9	2
1:A:134:ASN:ND2	1:A:138:ASP:O	0.41	2.54	20	1
1:A:92:PHE:O	1:A:93:GLN:C	0.41	2.59	20	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:N	0.41	2.51	7	1
1:A:31:VAL:HG11	1:A:56:LEU:HB3	0.41	1.92	7	1
1:A:129:ASN:HB3	1:A:132:HIS:CG	0.41	2.50	1	1
1:A:153:VAL:HG12	1:A:157:GLN:HE21	0.41	1.74	8	1
1:A:98:ILE:C	1:A:105:LEU:CD2	0.41	2.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:LEU:HD12	1:A:140:ALA:CB	0.41	2.38	10	1
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:HB2	0.41	2.15	19	2
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:N	0.41	2.52	17	1
1:A:144:ALA:O	1:A:149:ARG:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:15:ARG:CG	1:A:15:ARG:O	0.41	2.68	14	2
1:A:116:LEU:CD1	1:A:151:GLU:OE2	0.41	2.68	19	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:132:HIS:NE2	0.41	2.31	20	1
1:A:67:ASP:CG	1:A:71:PHE:HB2	0.41	2.36	14	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:129:ASN:HD22	0.41	1.76	4	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:104:ASN:OD1	0.41	2.39	12	1
1:A:42:LEU:O	1:A:42:LEU:CD1	0.41	2.59	18	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:45:MET:O	0.41	2.16	13	1
1:A:22:THR:CG2	1:A:55:ARG:NH2	0.41	2.83	6	1
1:A:23:SER:O	1:A:26:GLN:N	0.41	2.48	15	1
1:A:15:ARG:HD2	1:A:15:ARG:O	0.41	2.15	14	1
1:A:150:ASN:O	1:A:153:VAL:HB	0.41	2.16	3	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:86:LEU:HD12	0.41	1.92	18	1
1:A:51:GLU:HA	1:A:54:ARG:NE	0.41	2.30	6	1
1:A:66:LYS:HB2	1:A:66:LYS:NZ	0.41	2.30	7	1
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD1	0.41	2.83	14	1
1:A:52:ILE:HG22	1:A:53:ALA:N	0.41	2.30	14	1
1:A:39:ARG:HE	1:A:44:VAL:HG11	0.41	1.74	8	1
1:A:69:THR:C	1:A:101:ASN:HB2	0.41	2.36	12	1
1:A:74:ILE:HB	1:A:98:ILE:HG21	0.41	1.92	12	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:LEU:C	0.41	2.59	9	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:103:GLY:C	0.41	2.59	2	1
1:A:99:GLU:HG2	1:A:103:GLY:O	0.41	2.15	3	1
1:A:35:ASN:HB2	1:A:39:ARG:O	0.41	2.16	18	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:42:LEU:HA	0.41	1.73	13	1
1:A:15:ARG:C	1:A:46:LYS:HD2	0.41	2.36	19	3
1:A:58:LEU:O	1:A:59:ARG:C	0.41	2.59	16	1
1:A:131:GLY:HA2	1:A:133:ARG:NH1	0.41	2.31	19	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASN:HB2	0.41	2.16	19	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD22	0.41	2.29	15	1
1:A:12:ALA:O	1:A:13:ALA:C	0.41	2.59	7	1
1:A:104:ASN:HA	1:A:134:ASN:OD1	0.41	2.16	7	1
1:A:75:HIS:HD2	1:A:106:PRO:HD3	0.41	1.76	14	1
1:A:45:MET:CE	1:A:47:LEU:HA	0.41	2.46	14	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:98:ILE:CG2	0.41	2.69	14	1
1:A:75:HIS:CG	1:A:109:LEU:HD22	0.41	2.50	5	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:122:LEU:HG	0.41	1.93	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:N	0.41	2.31	12	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:51:GLU:CD	0.41	2.84	12	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:46:LYS:HE2	0.41	1.93	9	1
1:A:8:GLU:CA	1:A:11:SER:HB2	0.41	2.45	13	1
1:A:8:GLU:HA	1:A:11:SER:HB2	0.41	1.91	13	1
1:A:81:GLY:HA3	1:A:115:HIS:NE2	0.41	2.31	17	1
1:A:108:HIS:ND1	1:A:108:HIS:N	0.41	2.68	11	1
1:A:75:HIS:CD2	1:A:106:PRO:HB3	0.41	2.51	15	1
1:A:78:ALA:CB	1:A:106:PRO:HB2	0.41	2.40	14	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:82:PHE:CD2	0.41	2.51	14	1
1:A:129:ASN:ND2	1:A:140:ALA:HB2	0.41	2.31	2	1
1:A:54:ARG:HD2	1:A:88:THR:CG2	0.41	2.42	2	1
1:A:109:LEU:O	1:A:112:LYS:HB2	0.40	2.16	3	2
1:A:137:GLY:O	1:A:138:ASP:C	0.40	2.58	17	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:91:GLU:N	0.40	2.81	16	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:29:VAL:CG1	0.40	2.96	16	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:159:ASN:OD1	0.40	2.16	6	1
1:A:132:HIS:CE1	1:A:134:ASN:N	0.40	2.89	6	1
1:A:99:GLU:HG2	1:A:105:LEU:HB2	0.40	1.92	19	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:61:ALA:C	0.40	2.89	5	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:21:LEU:N	0.40	2.31	8	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:119:VAL:CG2	0.40	2.41	9	1
1:A:96:VAL:CG2	1:A:129:ASN:OD1	0.40	2.64	18	1
1:A:43:GLN:HG2	1:A:67:ASP:OD2	0.40	2.16	20	1
1:A:113:GLU:OE1	1:A:113:GLU:CA	0.40	2.69	14	1
1:A:12:ALA:HA	1:A:17:ASP:CG	0.40	2.36	4	1
1:A:109:LEU:HA	1:A:112:LYS:HB2	0.40	1.93	9	1
1:A:39:ARG:HD3	1:A:67:ASP:CB	0.40	2.46	10	1
1:A:74:ILE:HG21	1:A:106:PRO:HG3	0.40	1.88	12	2
1:A:43:GLN:NE2	1:A:65:LEU:HB3	0.40	2.30	19	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:92:PHE:CD2	0.40	2.50	19	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:98:ILE:CG1	0.40	2.46	14	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:CD1	0.40	2.69	4	1
1:A:40:THR:CG2	1:A:65:LEU:HD22	0.40	2.47	1	1
1:A:99:GLU:N	1:A:105:LEU:HD23	0.40	2.32	8	1
1:A:22:THR:HA	1:A:25:LEU:HB2	0.40	1.92	8	1
1:A:32:ASN:ND2	1:A:32:ASN:N	0.40	2.67	12	1
1:A:14:ALA:O	1:A:46:LYS:CG	0.40	2.69	12	1
1:A:78:ALA:O	1:A:81:GLY:N	0.40	2.55	10	1
1:A:42:LEU:O	1:A:42:LEU:HD22	0.40	2.16	18	1
1:A:81:GLY:CA	1:A:115:HIS:CE1	0.40	3.05	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:HD11	1:A:117:ARG:O	0.40	2.17	6	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:99:GLU:O	0.40	2.17	20	1
1:A:31:VAL:HB	1:A:60:GLY:O	0.40	2.17	7	1
1:A:71:PHE:CD1	1:A:100:ASP:CB	0.40	3.04	14	1
1:A:64:ASP:OD1	1:A:98:ILE:HG13	0.40	2.16	14	1
1:A:20:GLN:O	1:A:24:LEU:HD12	0.40	2.17	4	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:45:MET:H	0.40	2.26	4	1
1:A:147:TYR:CB	1:A:149:ARG:HD3	0.40	2.46	8	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:98:ILE:HD13	0.40	1.92	8	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:92:PHE:CZ	0.40	2.90	8	1
1:A:75:HIS:C	1:A:77:ALA:N	0.40	2.75	9	1
1:A:22:THR:OG1	1:A:55:ARG:HG2	0.40	2.17	10	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:155:LEU:CD2	0.40	2.92	11	1
1:A:132:HIS:CE1	1:A:134:ASN:HA	0.40	2.52	11	1
1:A:39:ARG:HB2	1:A:43:GLN:HB2	0.40	1.94	11	1
1:A:67:ASP:O	1:A:68:ARG:C	0.40	2.58	11	1
1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:OD1	0.40	2.55	16	1
1:A:157:GLN:HA	1:A:162:GLY:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:HD23	0.40	2.37	19	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:HA	0.40	1.73	15	1
1:A:32:ASN:O	1:A:33:ALA:C	0.40	2.59	20	1
1:A:121:PHE:C	1:A:123:VAL:N	0.40	2.75	12	1
1:A:40:THR:N	1:A:43:GLN:HB2	0.40	2.31	12	1
1:A:31:VAL:HG13	1:A:61:ALA:HA	0.40	1.93	2	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:122:LEU:CD1	0.40	2.47	2	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	155/168 (92%)	95±4 (61±2%)	42±4 (27±3%)	18±3 (12±2%)	1	7
All	All	3255/3528 (92%)	1995 (61%)	874 (27%)	386 (12%)	1	7

All 43 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	115	HIS	21
1	A	134	ASN	21
1	A	33	ALA	21
1	A	116	LEU	21
1	A	65	LEU	20
1	A	46	LYS	19
1	A	128	SER	19
1	A	45	MET	18
1	A	139	THR	18
1	A	130	VAL	17
1	A	95	ASP	17
1	A	132	HIS	17
1	A	31	VAL	14
1	A	81	GLY	14
1	A	149	ARG	11
1	A	160	GLY	9
1	A	161	ALA	9
1	A	60	GLY	9
1	A	11	SER	9
1	A	99	GLU	8
1	A	28	ASN	7
1	A	138	ASP	7
1	A	52	ILE	6
1	A	126	THR	6
1	A	9	LEU	6
1	A	50	PRO	5
1	A	30	ASN	5
1	A	162	GLY	5
1	A	17	ASP	4
1	A	29	VAL	4
1	A	102	GLU	3
1	A	103	GLY	3
1	A	22	THR	2
1	A	47	LEU	2
1	A	122	LEU	1
1	A	35	ASN	1
1	A	66	LYS	1
1	A	118	VAL	1
1	A	93	GLN	1
1	A	127	ALA	1
1	A	109	LEU	1
1	A	57	LEU	1
1	A	108	HIS	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	121/130 (93%)	78±4 (64±3%)	43±4 (36±3%)	1 8
All	All	2541/2730 (93%)	1628 (64%)	913 (36%)	1 8

All 97 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	136	LYS	21
1	A	88	THR	21
1	A	138	ASP	21
1	A	139	THR	21
1	A	59	ARG	21
1	A	98	ILE	21
1	A	155	LEU	21
1	A	69	THR	21
1	A	123	VAL	20
1	A	135	HIS	20
1	A	112	LYS	19
1	A	46	LYS	19
1	A	25	LEU	18
1	A	95	ASP	18
1	A	124	LYS	18
1	A	9	LEU	17
1	A	29	VAL	17
1	A	11	SER	17
1	A	49	ASN	17
1	A	52	ILE	17
1	A	90	LEU	16
1	A	68	ARG	15
1	A	20	GLN	15
1	A	39	ARG	15
1	A	86	LEU	15
1	A	79	ARG	15
1	A	105	LEU	15
1	A	116	LEU	14
1	A	55	ARG	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	66	LYS	13
1	A	118	VAL	13
1	A	18	LEU	13
1	A	121	PHE	12
1	A	57	LEU	12
1	A	151	GLU	12
1	A	122	LEU	11
1	A	133	ARG	11
1	A	117	ARG	11
1	A	24	LEU	11
1	A	15	ARG	10
1	A	8	GLU	10
1	A	102	GLU	10
1	A	83	LEU	10
1	A	97	ASN	10
1	A	19	GLU	10
1	A	89	LEU	10
1	A	37	PHE	9
1	A	58	LEU	9
1	A	120	GLU	9
1	A	64	ASP	9
1	A	142	ASP	7
1	A	34	GLN	7
1	A	107	LEU	7
1	A	154	SER	6
1	A	149	ARG	6
1	A	76	ASP	6
1	A	27	ASN	6
1	A	51	GLU	5
1	A	93	GLN	5
1	A	30	ASN	5
1	A	132	HIS	5
1	A	156	MET	5
1	A	43	GLN	5
1	A	17	ASP	5
1	A	31	VAL	5
1	A	145	ARG	5
1	A	44	VAL	4
1	A	126	THR	4
1	A	129	ASN	4
1	A	35	ASN	4
1	A	101	ASN	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	157	GLN	4
1	A	23	SER	4
1	A	40	THR	4
1	A	42	LEU	4
1	A	109	LEU	4
1	A	134	ASN	4
1	A	56	LEU	3
1	A	146	LEU	3
1	A	47	LEU	3
1	A	143	LEU	3
1	A	45	MET	2
1	A	65	LEU	2
1	A	84	ASP	2
1	A	159	ASN	2
1	A	85	THR	2
1	A	141	CYS	2
1	A	91	GLU	2
1	A	21	LEU	2
1	A	62	ASN	1
1	A	100	ASP	1
1	A	32	ASN	1
1	A	108	HIS	1
1	A	104	ASN	1
1	A	128	SER	1
1	A	54	ARG	1
1	A	152	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