



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:44 pm GMT

PDB ID : 1CLH  
Title : THREE-DIMENSIONAL SOLUTION STRUCTURE OF ESCHERICHIA  
COLI PERIPLASMIC CYCLOPHILIN  
Authors : Clubb, R.T.; Wagner, G.  
Deposited on : 1993-12-20

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : trunk28760  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

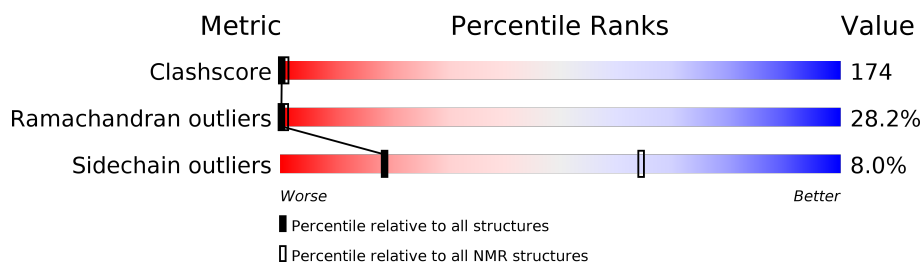
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

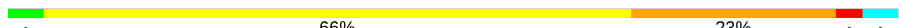
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	166	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 12 models. Model 3 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:5-A:116, A:120-A:166 (159)	0.62	3

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 2 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 5, 7, 9, 12
2	1, 4, 10, 11
Single-model clusters	6; 8

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2535 atoms, of which 1260 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called CYCLOPHILIN.

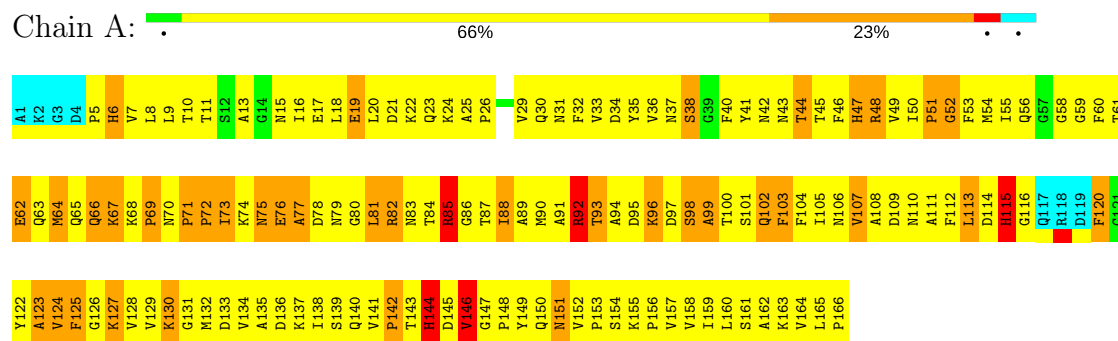
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	166	Total	C	H	N	O	S	0
			2535	805	1260	223	243	4	

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

#### • Molecule 1: CYCLOPHILIN

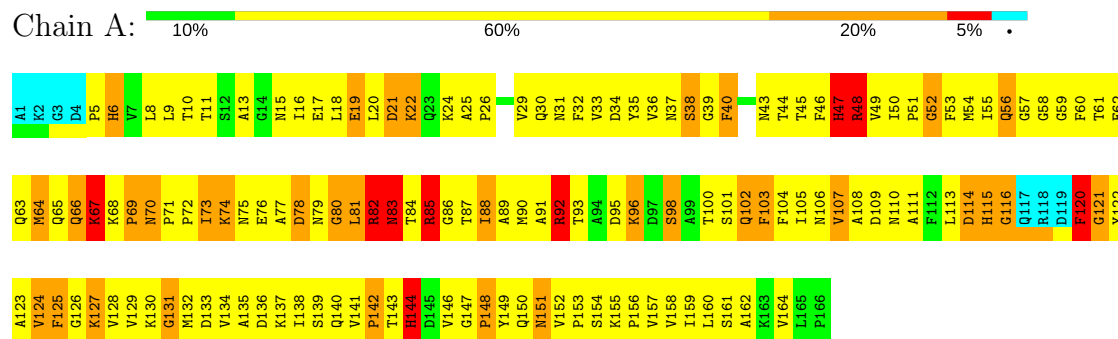


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

#### • Molecule 1: CYCLOPHILIN



### 4.2.2 Score per residue for model 2

#### • Molecule 1: CYCLOPHILIN



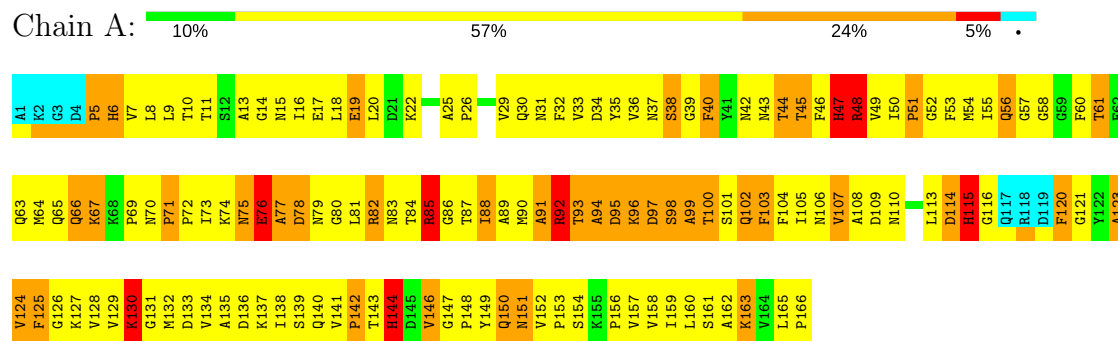
### 4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

#### • Molecule 1: CYCLOPHILIN



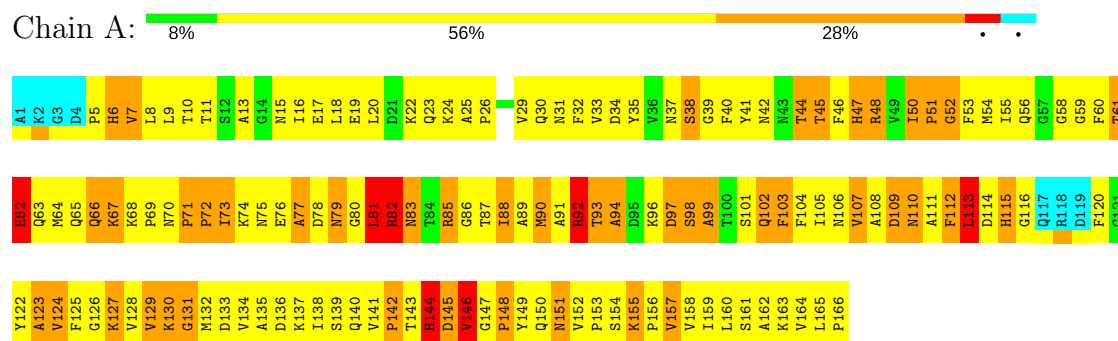
### 4.2.4 Score per residue for model 4

#### • Molecule 1: CYCLOPHILIN



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



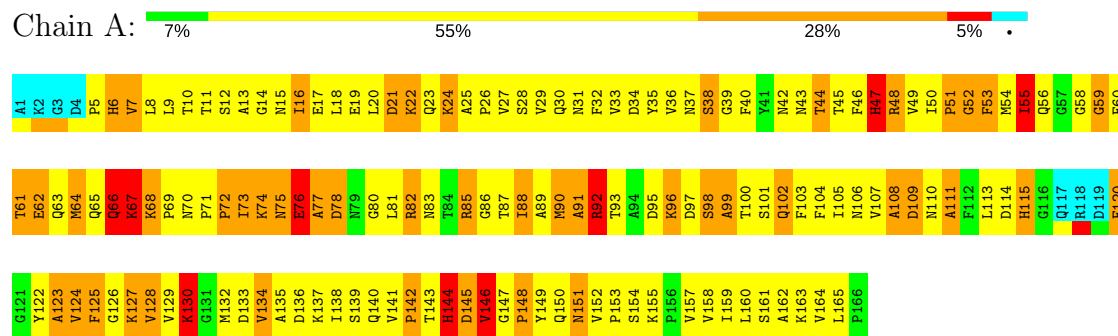
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



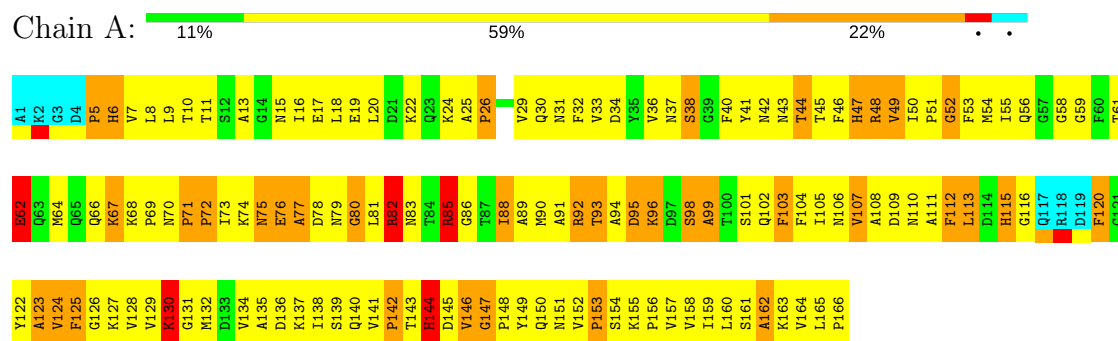
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



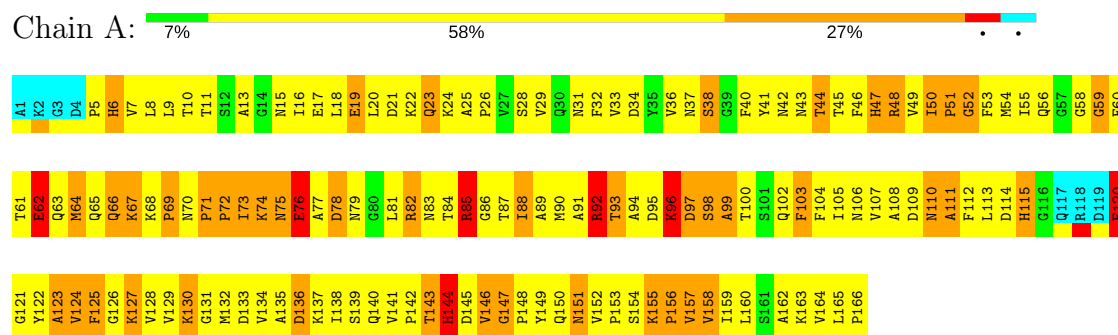
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



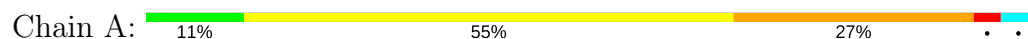
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: CYCLOPHILIN

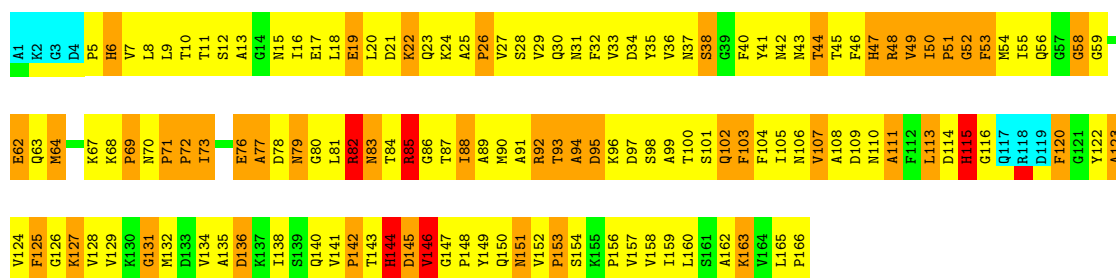


#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: CYCLOPHILIN



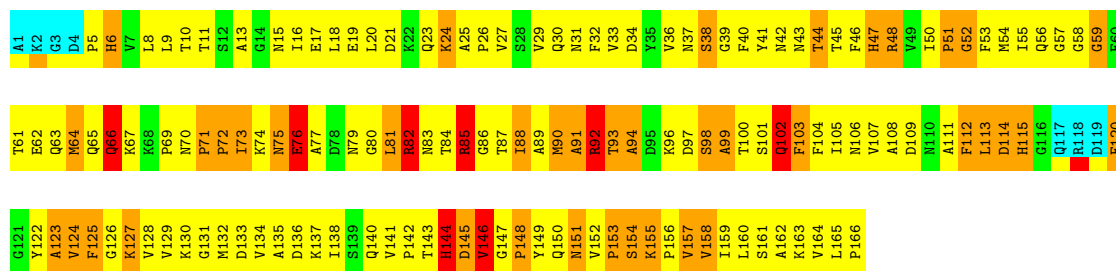




#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: CYCLOPHILIN

Chain A: 9% 58% 24% 5%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 12 were deposited, based on the following criterion: ?.

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or refinement.

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 [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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	0.72±0.00	0±0/1249 (0.0±0.0%)	1.07±0.01	8±0/1694 (0.5±0.0%)
All	All	0.72	0/14988 (0.0%)	1.07	96/20328 (0.5%)

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	85	ARG	NE-CZ-NH1	7.83	124.21	120.30	6	12
1	A	48	ARG	NE-CZ-NH1	7.72	124.16	120.30	8	12
1	A	92	ARG	NE-CZ-NH1	7.67	124.13	120.30	12	12
1	A	82	ARG	NE-CZ-NH1	7.55	124.07	120.30	2	12
1	A	115	HIS	CG-ND1-CE1	-5.66	98.34	105.70	8	12
1	A	47	HIS	CG-ND1-CE1	-5.58	98.44	105.70	2	12
1	A	6	HIS	CG-ND1-CE1	-5.57	98.46	105.70	3	12
1	A	144	HIS	CG-ND1-CE1	-5.47	98.58	105.70	9	12

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1221	1208	1208	422±55
All	All	14652	14496	14491	5064

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 174.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:PHE:CE2	1.69	1.16	1	3
1:A:6:HIS:CD2	1:A:19:GLU:HG2	1.62	1.17	4	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:17:GLU:HG2	1.59	1.11	1	2
1:A:88:ILE:HG23	1:A:126:GLY:CA	1.58	1.24	5	10
1:A:19:GLU:CD	1:A:127:LYS:HB2	1.57	1.17	11	4
1:A:107:VAL:HG12	1:A:132:MET:CE	1.57	1.19	5	8
1:A:56:GLN:CB	1:A:104:PHE:HA	1.56	1.27	10	1
1:A:92:ARG:HB3	1:A:99:ALA:CB	1.54	1.32	8	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:54:MET:HG3	1.53	1.27	11	1
1:A:59:GLY:CA	1:A:67:LYS:HE3	1.50	1.34	5	1
1:A:19:GLU:CD	1:A:127:LYS:HB3	1.49	1.15	2	2
1:A:5:PRO:O	1:A:6:HIS:CD2	1.48	1.65	12	10
1:A:85:ARG:HB2	1:A:107:VAL:C	1.46	1.11	11	1
1:A:81:LEU:C	1:A:82:ARG:HD3	1.44	1.03	3	1
1:A:17:GLU:HB2	1:A:129:VAL:CG1	1.44	1.40	3	2
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:CA	1.44	1.42	11	12
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:CD	1.43	1.65	3	1
1:A:107:VAL:CG1	1:A:132:MET:HE1	1.43	1.43	5	5
1:A:107:VAL:CG1	1:A:132:MET:CE	1.42	1.97	5	5
1:A:95:ASP:O	1:A:96:LYS:CG	1.41	1.68	1	2
1:A:77:ALA:HB1	1:A:115:HIS:CD2	1.41	1.50	9	3
1:A:81:LEU:HD12	1:A:82:ARG:NH1	1.40	1.24	1	1
1:A:70:ASN:HA	1:A:100:THR:CG2	1.40	1.46	7	2
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:CG	1.39	1.85	4	4
1:A:71:PRO:HD2	1:A:100:THR:CB	1.39	1.47	1	1
1:A:92:ARG:CB	1:A:99:ALA:CA	1.39	2.01	8	2
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:CB	1.39	1.69	10	6
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:HB3	1.39	1.27	4	1
1:A:56:GLN:O	1:A:104:PHE:CA	1.37	1.73	6	3
1:A:92:ARG:CG	1:A:99:ALA:N	1.37	1.88	8	2
1:A:98:SER:CA	1:A:99:ALA:O	1.36	1.73	4	1
1:A:77:ALA:C	1:A:115:HIS:CD2	1.36	1.98	9	3
1:A:56:GLN:C	1:A:104:PHE:HA	1.36	1.40	6	3
1:A:92:ARG:CB	1:A:99:ALA:HA	1.36	1.48	8	2
1:A:6:HIS:CD2	1:A:19:GLU:CG	1.36	2.08	4	4
1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:NH1	1.36	1.34	1	1
1:A:70:ASN:OD1	1:A:71:PRO:HD3	1.36	1.13	2	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:17:GLU:OE1	1.35	1.17	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ILE:HD11	1:A:99:ALA:O	1.35	1.21	7	5
1:A:19:GLU:CG	1:A:127:LYS:HB2	1.34	1.51	3	4
1:A:17:GLU:CB	1:A:129:VAL:CG1	1.34	2.02	3	3
1:A:22:LYS:HD2	1:A:23:GLN:N	1.34	1.34	11	1
1:A:5:PRO:C	1:A:6:HIS:HD2	1.33	1.23	12	8
1:A:56:GLN:O	1:A:104:PHE:HA	1.33	1.14	4	3
1:A:15:ASN:O	1:A:134:VAL:HG21	1.33	1.23	4	8
1:A:63:GLN:O	1:A:64:MET:CG	1.33	1.74	10	8
1:A:115:HIS:CE1	1:A:122:TYR:O	1.33	1.81	9	3
1:A:77:ALA:CB	1:A:115:HIS:CD2	1.33	2.12	9	3
1:A:19:GLU:CG	1:A:127:LYS:O	1.33	1.76	2	2
1:A:71:PRO:CD	1:A:100:THR:HB	1.33	1.51	1	1
1:A:81:LEU:C	1:A:82:ARG:CD	1.32	1.93	3	1
1:A:85:ARG:HB2	1:A:107:VAL:O	1.32	1.13	11	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:99:ALA:N	1.32	0.96	8	2
1:A:56:GLN:HB2	1:A:104:PHE:CA	1.32	1.51	10	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:96:LYS:HB3	1.32	1.16	7	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:17:GLU:CG	1.32	2.08	1	1
1:A:17:GLU:CB	1:A:129:VAL:HG11	1.31	1.54	3	2
1:A:86:GLY:HA2	1:A:106:ASN:ND2	1.30	1.41	7	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:161:SER:O	1.30	1.22	1	6
1:A:88:ILE:CG2	1:A:126:GLY:HA3	1.30	1.56	3	5
1:A:30:GLN:O	1:A:33:VAL:HG12	1.30	1.27	12	4
1:A:85:ARG:CB	1:A:107:VAL:C	1.30	1.98	11	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:O	1.29	1.15	3	2
1:A:5:PRO:O	1:A:6:HIS:HD2	1.29	1.04	4	10
1:A:72:PRO:HB3	1:A:99:ALA:O	1.29	1.11	6	1
1:A:29:VAL:CA	1:A:32:PHE:CE2	1.29	2.13	1	3
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:HB2	1.29	1.28	2	12
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:HG2	1.29	1.23	9	1
1:A:61:THR:HG21	1:A:65:GLN:OE1	1.28	1.20	7	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:153:PRO:HA	1.28	1.57	12	12
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:OE1	1.28	1.15	3	2
1:A:61:THR:CG2	1:A:67:LYS:CD	1.27	2.10	2	1
1:A:70:ASN:O	1:A:72:PRO:HD3	1.27	1.27	2	7
1:A:76:GLU:OE1	1:A:123:ALA:HB1	1.27	1.14	4	2
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:HG2	1.26	1.10	3	1
1:A:20:LEU:O	1:A:21:ASP:OD1	1.26	1.54	11	1
1:A:47:HIS:HB2	1:A:56:GLN:OE1	1.26	1.29	1	1
1:A:138:ILE:O	1:A:141:VAL:HG22	1.25	1.29	9	10
1:A:85:ARG:O	1:A:85:ARG:HD2	1.25	1.32	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:HIS:CB	1:A:120:PHE:O	1.25	1.83	5	1
1:A:75:ASN:HD22	1:A:96:LYS:NZ	1.25	1.26	2	1
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASN:OD1	1.24	1.53	1	9
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:HD1	1.24	1.14	2	1
1:A:154:SER:O	1:A:156:PRO:HD3	1.24	1.33	1	6
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:HD3	1.23	1.04	8	2
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:HB3	1.23	1.19	10	2
1:A:19:GLU:CD	1:A:127:LYS:CB	1.23	2.06	3	6
1:A:49:VAL:CG1	1:A:54:MET:CG	1.23	2.16	11	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:98:SER:O	1.23	1.32	5	2
1:A:63:GLN:O	1:A:64:MET:HG2	1.22	1.00	11	4
1:A:112:PHE:O	1:A:113:LEU:HD12	1.22	1.34	12	1
1:A:31:ASN:HA	1:A:34:ASP:OD2	1.22	1.27	9	6
1:A:88:ILE:CG2	1:A:126:GLY:CA	1.21	2.18	5	5
1:A:92:ARG:CB	1:A:99:ALA:CB	1.21	2.18	8	1
1:A:47:HIS:CE1	1:A:56:GLN:OE1	1.21	1.93	6	1
1:A:73:ILE:CG1	1:A:98:SER:O	1.21	1.86	5	3
1:A:115:HIS:CA	1:A:120:PHE:O	1.21	1.88	5	1
1:A:85:ARG:CB	1:A:107:VAL:O	1.21	1.87	11	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:49:VAL:N	1.21	1.49	11	1
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:CD	1.21	1.88	8	2
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:CB	1.20	1.86	7	10
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:HH11	1.20	1.49	1	1
1:A:8:LEU:O	1:A:162:ALA:HA	1.20	1.31	9	7
1:A:90:MET:O	1:A:123:ALA:HB3	1.20	1.37	5	7
1:A:48:ARG:NH2	1:A:51:PRO:CA	1.20	2.03	2	1
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:N	1.19	1.76	6	5
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:CG	1.19	1.89	3	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:HB3	1.19	1.72	4	1
1:A:59:GLY:CA	1:A:67:LYS:CE	1.19	2.20	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:115:HIS:CD2	1.19	1.94	9	2
1:A:43:ASN:HA	1:A:159:ILE:O	1.19	1.35	8	5
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:CG	1.18	1.91	9	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:HG23	1.18	1.39	10	3
1:A:53:PHE:CE1	1:A:110:ASN:OD1	1.18	1.96	11	1
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:HG2	1.18	1.41	4	2
1:A:96:LYS:O	1:A:97:ASP:OD1	1.17	1.61	6	3
1:A:42:ASN:O	1:A:43:ASN:OD1	1.17	1.62	4	2
1:A:81:LEU:CD1	1:A:82:ARG:NH1	1.17	2.06	1	1
1:A:150:GLN:O	1:A:151:ASN:OD1	1.17	1.58	9	2
1:A:5:PRO:C	1:A:6:HIS:CD2	1.17	2.17	8	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:THR:O	1:A:106:ASN:OD1	1.17	1.63	4	2
1:A:72:PRO:CB	1:A:98:SER:HA	1.17	1.68	2	4
1:A:76:GLU:OE1	1:A:123:ALA:HB2	1.17	1.37	7	1
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:CA	1.17	1.93	10	5
1:A:26:PRO:O	1:A:29:VAL:HG22	1.16	1.36	8	9
1:A:63:GLN:O	1:A:64:MET:HG3	1.16	0.94	3	4
1:A:89:ALA:CB	1:A:124:VAL:HA	1.16	1.70	3	12
1:A:78:ASP:HB3	1:A:115:HIS:CD2	1.16	1.75	2	4
1:A:18:LEU:O	1:A:20:LEU:CD1	1.16	1.94	2	2
1:A:56:GLN:O	1:A:105:ILE:N	1.16	1.79	1	3
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ASP:OD1	1.16	1.60	7	2
1:A:83:ASN:OD1	1:A:127:LYS:HD3	1.15	1.38	3	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:HD13	1.15	1.40	6	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ARG:HG3	1.15	1.37	7	1
1:A:24:LYS:NZ	1:A:81:LEU:HD21	1.15	1.55	9	1
1:A:108:ALA:O	1:A:110:ASN:ND2	1.15	1.78	11	1
1:A:48:ARG:O	1:A:49:VAL:HG23	1.15	1.42	11	3
1:A:155:LYS:HB3	1:A:156:PRO:CD	1.14	1.72	5	2
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:HA	1.14	1.15	7	3
1:A:48:ARG:NH2	1:A:51:PRO:N	1.14	1.94	2	1
1:A:90:MET:SD	1:A:91:ALA:O	1.14	2.04	5	2
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:CD1	1.14	1.99	2	2
1:A:85:ARG:HB3	1:A:108:ALA:C	1.13	1.63	11	5
1:A:47:HIS:NE2	1:A:56:GLN:OE1	1.12	1.80	6	1
1:A:5:PRO:CB	1:A:20:LEU:O	1.13	1.97	2	2
1:A:90:MET:SD	1:A:102:GLN:O	1.12	2.07	4	4
1:A:109:ASP:O	1:A:110:ASN:OD1	1.12	1.64	7	1
1:A:48:ARG:NH2	1:A:141:VAL:O	1.12	1.81	4	1
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:NZ	1.12	1.82	2	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:67:LYS:HD2	1.12	1.71	2	1
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:CA	1.12	1.73	2	3
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:HG3	1.12	1.45	5	1
1:A:126:GLY:O	1:A:127:LYS:HG3	1.12	1.41	6	6
1:A:48:ARG:NH2	1:A:51:PRO:HA	1.12	1.59	2	1
1:A:59:GLY:HA2	1:A:67:LYS:CD	1.12	1.74	9	2
1:A:16:ILE:O	1:A:17:GLU:OE1	1.11	1.68	10	1
1:A:48:ARG:HB3	1:A:56:GLN:NE2	1.11	1.59	3	2
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:HB2	1.11	1.28	11	3
1:A:90:MET:CE	1:A:99:ALA:HB1	1.11	1.75	12	5
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:HG21	1.11	1.46	5	4
1:A:9:LEU:O	1:A:15:ASN:ND2	1.11	1.83	2	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:CD1	1:A:104:PHE:O	1.10	1.98	11	3
1:A:72:PRO:HG3	1:A:100:THR:HG22	1.10	1.21	6	3
1:A:17:GLU:HB3	1:A:129:VAL:HG11	1.10	1.20	3	2
1:A:112:PHE:O	1:A:113:LEU:CD1	1.10	1.99	12	1
1:A:77:ALA:CA	1:A:115:HIS:CD2	1.10	2.33	9	1
1:A:8:LEU:CG	1:A:17:GLU:HG2	1.10	1.74	3	2
1:A:40:PHE:O	1:A:41:TYR:CD1	1.10	2.05	3	2
1:A:143:THR:HA	1:A:154:SER:H	1.10	0.99	7	10
1:A:107:VAL:HG12	1:A:132:MET:HE1	1.10	1.12	4	5
1:A:30:GLN:O	1:A:33:VAL:CG1	1.10	1.97	12	4
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:HD3	1.10	1.77	1	1
1:A:87:THR:HG22	1:A:127:LYS:HG2	1.09	1.16	7	5
1:A:62:GLU:HG2	1:A:63:GLN:N	1.09	1.62	5	3
1:A:56:GLN:CB	1:A:57:GLY:HA2	1.09	1.77	1	3
1:A:127:LYS:HG2	1:A:128:VAL:H	1.09	0.93	12	2
1:A:11:THR:HG22	1:A:159:ILE:HG12	1.09	1.23	3	12
1:A:123:ALA:O	1:A:124:VAL:HG23	1.09	1.47	8	12
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:CD2	1.09	2.05	9	3
1:A:70:ASN:OD1	1:A:71:PRO:CD	1.09	1.99	2	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:HA	1.09	1.09	10	11
1:A:56:GLN:CG	1:A:104:PHE:HA	1.09	1.77	2	3
1:A:92:ARG:CD	1:A:93:THR:N	1.09	2.15	5	2
1:A:138:ILE:O	1:A:141:VAL:HG12	1.09	1.47	6	2
1:A:92:ARG:CG	1:A:99:ALA:H	1.09	1.61	6	2
1:A:10:THR:HG22	1:A:160:LEU:HD12	1.08	1.25	3	10
1:A:61:THR:CG2	1:A:67:LYS:HD3	1.08	1.75	2	1
1:A:155:LYS:HB2	1:A:156:PRO:CD	1.08	1.79	10	1
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:HG3	1.08	1.60	4	4
1:A:9:LEU:O	1:A:16:ILE:HG12	1.08	1.47	8	3
1:A:59:GLY:CA	1:A:67:LYS:HD3	1.08	1.76	9	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:HG2	1.08	1.21	11	4
1:A:61:THR:HB	1:A:65:GLN:CB	1.08	1.77	7	1
1:A:107:VAL:HG12	1:A:132:MET:HE3	1.08	1.12	2	3
1:A:62:GLU:HG2	1:A:63:GLN:H	1.08	1.01	2	3
1:A:56:GLN:HG2	1:A:104:PHE:CA	1.07	1.77	2	4
1:A:8:LEU:HB2	1:A:163:LYS:O	1.07	1.45	2	2
1:A:48:ARG:CG	1:A:151:ASN:O	1.07	2.01	11	1
1:A:77:ALA:O	1:A:115:HIS:NE2	1.07	1.87	9	1
1:A:156:PRO:O	1:A:157:VAL:HG23	1.07	1.49	12	3
1:A:48:ARG:HB3	1:A:56:GLN:HE21	1.07	0.93	3	1
1:A:86:GLY:CA	1:A:106:ASN:HD21	1.07	1.60	7	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HA	1:A:164:VAL:HG12	1.07	1.21	7	2
1:A:87:THR:HG22	1:A:127:LYS:NZ	1.07	1.63	5	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:HG2	1.07	1.50	9	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:67:LYS:CD	1.07	1.78	2	1
1:A:73:ILE:CD1	1:A:99:ALA:O	1.06	2.01	7	7
1:A:39:GLY:N	1:A:42:ASN:OD1	1.06	1.87	7	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:GLN:HG2	1.06	1.49	7	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:104:PHE:O	1.06	1.49	10	5
1:A:67:LYS:H	1:A:67:LYS:CD	1.06	1.63	7	2
1:A:62:GLU:HG3	1:A:63:GLN:H	1.06	0.95	11	2
1:A:19:GLU:OE2	1:A:19:GLU:O	1.06	1.72	8	5
1:A:47:HIS:O	1:A:48:ARG:HG2	1.06	1.49	6	1
1:A:48:ARG:HG3	1:A:49:VAL:H	1.06	1.03	1	3
1:A:59:GLY:HA2	1:A:67:LYS:CE	1.06	1.77	5	1
1:A:88:ILE:HG23	1:A:126:GLY:HA2	1.06	1.18	5	2
1:A:89:ALA:HA	1:A:124:VAL:HA	1.05	1.27	11	12
1:A:19:GLU:CG	1:A:127:LYS:CB	1.05	2.33	3	3
1:A:92:ARG:HG2	1:A:93:THR:N	1.05	1.52	11	4
1:A:67:LYS:H	1:A:67:LYS:HD2	1.05	0.92	7	1
1:A:155:LYS:CB	1:A:156:PRO:HD3	1.05	1.78	10	2
1:A:98:SER:HA	1:A:99:ALA:C	1.05	1.64	4	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:63:GLN:H	1.05	1.62	5	5
1:A:56:GLN:HB2	1:A:57:GLY:HA2	1.05	1.09	6	2
1:A:145:ASP:OD1	1:A:150:GLN:HG2	1.05	1.52	9	1
1:A:148:PRO:O	1:A:150:GLN:OE1	1.05	1.72	10	1
1:A:76:GLU:OE1	1:A:123:ALA:CB	1.05	2.03	7	3
1:A:48:ARG:HG2	1:A:151:ASN:O	1.05	1.50	11	1
1:A:92:ARG:CG	1:A:93:THR:H	1.05	1.64	11	4
1:A:154:SER:O	1:A:155:LYS:HG3	1.04	1.51	10	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:54:MET:HE2	1.04	1.87	6	1
1:A:31:ASN:CA	1:A:34:ASP:OD2	1.04	2.04	9	2
1:A:115:HIS:HA	1:A:120:PHE:O	1.04	1.42	5	2
1:A:90:MET:HE3	1:A:99:ALA:HB1	1.04	1.18	12	3
1:A:17:GLU:HG2	1:A:129:VAL:HG11	1.04	1.19	4	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:17:GLU:HG2	1.04	1.19	2	1
1:A:60:PHE:HB3	1:A:64:MET:HA	1.04	1.19	4	4
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:CG	1.04	2.05	3	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:CG	1.04	1.82	3	4
1:A:47:HIS:CE1	1:A:59:GLY:HA2	1.04	1.86	7	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	1.04	1.19	11	1
1:A:56:GLN:HB3	1:A:57:GLY:HA2	1.04	1.22	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:GLN:O	1:A:34:ASP:OD1	1.04	1.75	1	2
1:A:92:ARG:CB	1:A:99:ALA:HB2	1.04	1.79	8	1
1:A:67:LYS:HD3	1:A:67:LYS:H	1.04	0.98	3	1
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:PHE:CD2	1.04	1.88	11	5
1:A:48:ARG:HD3	1:A:49:VAL:CA	1.04	1.81	11	1
1:A:70:ASN:HA	1:A:100:THR:HG21	1.04	1.09	7	4
1:A:115:HIS:HB3	1:A:120:PHE:HB2	1.04	1.12	9	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:120:PHE:CZ	1.04	2.11	9	1
1:A:76:GLU:HG3	1:A:79:ASN:ND2	1.04	1.65	2	1
1:A:76:GLU:CG	1:A:79:ASN:HD21	1.04	1.64	2	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:HG3	1.03	1.54	10	3
1:A:89:ALA:HB1	1:A:123:ALA:O	1.03	1.53	6	12
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:PRO:HD2	1.03	1.20	8	5
1:A:75:ASN:OD1	1:A:96:LYS:CB	1.03	2.05	7	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:HG2	1.03	1.83	6	4
1:A:56:GLN:HA	1:A:104:PHE:CB	1.03	1.82	6	2
1:A:72:PRO:CB	1:A:99:ALA:O	1.03	2.06	6	1
1:A:26:PRO:O	1:A:29:VAL:CG2	1.03	2.04	8	9
1:A:76:GLU:O	1:A:79:ASN:OD1	1.03	1.77	1	2
1:A:92:ARG:CG	1:A:99:ALA:CA	1.03	2.34	8	3
1:A:47:HIS:CE1	1:A:59:GLY:CA	1.03	2.41	7	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:166:PRO:HD2	1.03	1.29	4	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:CD	1.03	1.83	1	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:CG	1.03	2.06	10	3
1:A:95:ASP:O	1:A:96:LYS:HG3	1.03	0.82	8	2
1:A:56:GLN:CB	1:A:104:PHE:CA	1.02	2.22	10	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:O	1.02	1.90	10	1
1:A:90:MET:O	1:A:123:ALA:CB	1.02	2.07	7	5
1:A:18:LEU:O	1:A:20:LEU:HD12	1.02	1.49	2	2
1:A:48:ARG:O	1:A:56:GLN:OE1	1.02	1.77	8	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:163:LYS:O	1.02	1.53	7	1
1:A:17:GLU:CG	1:A:129:VAL:HG11	1.02	1.84	4	1
1:A:126:GLY:O	1:A:127:LYS:CG	1.02	2.06	7	6
1:A:115:HIS:NE2	1:A:122:TYR:O	1.02	1.92	9	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:105:ILE:HD11	1.02	1.32	4	12
1:A:53:PHE:O	1:A:54:MET:HG3	1.02	1.53	3	3
1:A:82:ARG:O	1:A:82:ARG:NE	1.02	1.92	12	1
1:A:107:VAL:CG1	1:A:132:MET:HE3	1.02	1.85	5	3
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:OE2	1.02	1.90	5	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:158:VAL:HA	1.01	1.16	11	11
1:A:70:ASN:O	1:A:72:PRO:CD	1.01	2.08	2	6

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ALA:O	1:A:29:VAL:HG13	1.01	1.55	11	7
1:A:85:ARG:O	1:A:85:ARG:CD	1.01	2.06	11	1
1:A:128:VAL:HG21	1:A:132:MET:CE	1.01	1.84	7	1
1:A:70:ASN:HA	1:A:100:THR:HG22	1.01	1.32	7	2
1:A:73:ILE:O	1:A:97:ASP:HB3	1.01	1.55	4	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:17:GLU:HG2	1.01	1.25	1	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:17:GLU:HG2	1.01	1.84	2	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:HB3	1.01	1.54	10	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:CB	1.01	2.24	4	1
1:A:98:SER:HA	1:A:99:ALA:O	1.01	0.78	4	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:HD11	1.01	1.55	5	2
1:A:23:GLN:OE1	1:A:24:LYS:NZ	1.01	1.92	2	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:165:LEU:HD22	1.01	1.31	5	1
1:A:47:HIS:CB	1:A:56:GLN:OE1	1.01	2.08	1	1
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:HB3	1.01	1.56	8	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:C	1.01	1.75	3	2
1:A:61:THR:CB	1:A:65:GLN:HB3	1.01	1.85	7	1
1:A:78:ASP:O	1:A:79:ASN:OD1	1.00	1.78	5	3
1:A:61:THR:CG2	1:A:65:GLN:OE1	1.00	2.08	7	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:96:LYS:NZ	1.00	2.09	2	2
1:A:24:LYS:CD	1:A:81:LEU:HD11	1.00	1.86	9	1
1:A:67:LYS:HD3	1:A:67:LYS:N	1.00	1.70	3	1
1:A:59:GLY:HA3	1:A:67:LYS:HE3	1.00	1.05	5	1
1:A:59:GLY:HA2	1:A:67:LYS:HD3	1.00	1.05	9	2
1:A:128:VAL:HG21	1:A:132:MET:HE2	1.00	1.05	7	1
1:A:53:PHE:O	1:A:54:MET:CG	1.00	2.10	3	4
1:A:70:ASN:CA	1:A:100:THR:HG21	1.00	1.86	7	4
1:A:48:ARG:HB2	1:A:153:PRO:HD3	1.00	1.27	4	3
1:A:8:LEU:CD1	1:A:17:GLU:OE1	1.00	2.10	11	3
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:CD	1.00	2.39	1	1
1:A:155:LYS:HB3	1:A:156:PRO:HD3	1.00	1.29	12	1
1:A:60:PHE:HB3	1:A:64:MET:CA	0.99	1.87	1	1
1:A:6:HIS:ND1	1:A:129:VAL:HG21	0.99	1.71	9	3
1:A:8:LEU:HD11	1:A:17:GLU:HG2	0.99	1.00	1	1
1:A:87:THR:HA	1:A:127:LYS:HA	0.99	1.32	6	9
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:NZ	0.99	1.70	1	1
1:A:62:GLU:HG3	1:A:63:GLN:N	0.99	1.72	11	2
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ASP:CG	0.99	2.01	7	3
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:HG2	0.99	1.57	5	2
1:A:62:GLU:OE2	1:A:63:GLN:HG2	0.99	1.57	10	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:93:THR:H	0.99	1.18	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ARG:CB	1:A:108:ALA:N	0.99	2.25	11	2
1:A:15:ASN:O	1:A:134:VAL:CG2	0.99	2.09	11	2
1:A:145:ASP:OD1	1:A:150:GLN:HG3	0.98	1.57	10	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:153:PRO:HB3	0.98	1.33	4	1
1:A:49:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	0.98	1.00	11	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ARG:CG	0.98	2.11	7	1
1:A:91:ALA:CB	1:A:102:GLN:OE1	0.98	2.11	3	2
1:A:59:GLY:HA2	1:A:67:LYS:HE3	0.98	1.29	5	1
1:A:19:GLU:O	1:A:19:GLU:OE2	0.98	1.79	3	1
1:A:67:LYS:N	1:A:67:LYS:HD2	0.98	1.73	7	1
1:A:68:LYS:HB3	1:A:69:PRO:CD	0.98	1.87	7	2
1:A:70:ASN:CA	1:A:100:THR:CG2	0.98	2.42	7	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:88:ILE:HG21	0.97	1.32	2	5
1:A:72:PRO:CB	1:A:98:SER:CA	0.97	2.38	2	2
1:A:87:THR:HA	1:A:127:LYS:CA	0.97	1.88	11	6
1:A:61:THR:HG22	1:A:67:LYS:HD3	0.97	1.30	2	1
1:A:143:THR:HA	1:A:154:SER:N	0.97	1.75	7	9
1:A:87:THR:CA	1:A:127:LYS:HA	0.97	1.88	11	5
1:A:19:GLU:HB3	1:A:129:VAL:CG1	0.97	1.89	2	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:54:MET:CG	0.97	1.84	11	1
1:A:78:ASP:O	1:A:80:GLY:HA2	0.97	1.59	6	1
1:A:87:THR:CG2	1:A:127:LYS:NZ	0.97	2.27	5	1
1:A:56:GLN:HA	1:A:104:PHE:HB2	0.97	1.32	6	2
1:A:132:MET:O	1:A:136:ASP:CB	0.97	2.13	7	2
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HG2	0.97	1.34	3	4
1:A:61:THR:HB	1:A:65:GLN:HB3	0.97	0.99	7	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:17:GLU:CG	0.97	1.75	1	1
1:A:95:ASP:C	1:A:96:LYS:HG3	0.97	1.76	1	2
1:A:48:ARG:HG3	1:A:49:VAL:N	0.96	1.74	2	3
1:A:72:PRO:HB2	1:A:98:SER:HA	0.96	1.31	2	1
1:A:85:ARG:HB3	1:A:108:ALA:CA	0.96	1.90	11	6
1:A:75:ASN:OD1	1:A:120:PHE:HZ	0.96	1.36	9	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:HB3	0.96	1.37	5	1
1:A:136:ASP:C	1:A:140:GLN:OE1	0.96	2.03	11	6
1:A:155:LYS:CB	1:A:156:PRO:HD2	0.96	1.89	5	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:99:ALA:CA	0.96	1.89	8	2
1:A:43:ASN:OD1	1:A:160:LEU:O	0.96	1.83	9	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:CB	0.96	2.13	10	1
1:A:88:ILE:HD11	1:A:103:PHE:HB2	0.96	1.31	1	12
1:A:115:HIS:HB2	1:A:120:PHE:O	0.96	1.58	5	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:VAL:HG23	0.96	1.61	7	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:PRO:O	1:A:150:GLN:CD	0.96	2.05	10	1
1:A:31:ASN:O	1:A:34:ASP:HB2	0.96	1.60	12	11
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:HD2	0.95	1.60	11	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:127:LYS:NZ	0.95	1.99	7	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:105:ILE:O	0.95	1.61	2	4
1:A:146:VAL:CB	1:A:149:TYR:O	0.95	2.14	2	2
1:A:76:GLU:OE2	1:A:123:ALA:CB	0.95	2.14	11	1
1:A:163:LYS:O	1:A:165:LEU:CD1	0.95	2.15	5	1
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:N	0.95	1.77	5	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:162:ALA:HB2	0.95	1.36	1	6
1:A:48:ARG:CG	1:A:49:VAL:H	0.95	1.73	2	3
1:A:22:LYS:CD	1:A:23:GLN:N	0.95	2.30	11	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:29:VAL:HG11	0.95	1.37	8	8
1:A:20:LEU:HA	1:A:125:PHE:O	0.95	1.62	9	5
1:A:53:PHE:CZ	1:A:54:MET:CE	0.95	2.50	6	4
1:A:127:LYS:HG2	1:A:128:VAL:N	0.95	1.69	12	2
1:A:45:THR:O	1:A:46:PHE:CD1	0.94	2.20	12	9
1:A:88:ILE:HG23	1:A:126:GLY:HA3	0.94	0.96	5	10
1:A:71:PRO:HB2	1:A:72:PRO:O	0.94	1.60	7	2
1:A:7:VAL:O	1:A:17:GLU:HG3	0.94	1.62	4	1
1:A:155:LYS:HB3	1:A:156:PRO:HD2	0.94	0.95	5	1
1:A:48:ARG:HH22	1:A:51:PRO:CA	0.94	1.69	2	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:PHE:CE1	0.94	2.21	3	1
1:A:132:MET:O	1:A:136:ASP:HB2	0.94	1.63	7	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:CB	0.94	2.51	4	1
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:HD3	0.94	1.35	3	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:54:MET:CE	0.94	2.50	5	4
1:A:72:PRO:HB3	1:A:100:THR:HG22	0.94	1.38	4	1
1:A:60:PHE:CB	1:A:64:MET:HA	0.94	1.92	1	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:78:ASP:OD1	0.94	1.86	10	1
1:A:146:VAL:CG2	1:A:149:TYR:O	0.94	2.16	2	7
1:A:6:HIS:CA	1:A:18:LEU:O	0.93	2.16	9	4
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:CG	0.93	2.17	5	2
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD3	0.93	0.97	1	1
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:HA	0.93	1.37	10	1
1:A:92:ARG:HD2	1:A:92:ARG:C	0.93	1.84	5	1
1:A:68:LYS:HB3	1:A:69:PRO:HD3	0.93	1.40	7	2
1:A:146:VAL:HB	1:A:149:TYR:O	0.93	1.63	2	3
1:A:89:ALA:CA	1:A:124:VAL:HA	0.93	1.93	11	12
1:A:148:PRO:O	1:A:149:TYR:CD1	0.93	2.22	2	1
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLN:OE1	0.93	1.87	6	2

*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:161:SER:O	0.93	2.16	1	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:HG2	0.93	1.37	1	1
1:A:136:ASP:O	1:A:140:GLN:OE1	0.92	1.87	11	5
1:A:143:THR:HA	1:A:153:PRO:HA	0.92	1.41	9	7
1:A:48:ARG:HD3	1:A:153:PRO:CB	0.92	1.93	4	1
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:OE1	0.92	2.00	9	1
1:A:136:ASP:O	1:A:140:GLN:HG2	0.92	1.64	8	6
1:A:9:LEU:HD13	1:A:46:PHE:HZ	0.92	1.23	7	2
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:HG3	0.92	1.64	11	1
1:A:144:HIS:CD2	1:A:152:VAL:O	0.92	2.22	9	8
1:A:17:GLU:HB2	1:A:129:VAL:HG12	0.92	1.41	3	1
1:A:106:ASN:O	1:A:132:MET:HE1	0.92	1.64	2	4
1:A:86:GLY:CA	1:A:106:ASN:ND2	0.92	2.28	7	1
1:A:86:GLY:C	1:A:127:LYS:HG3	0.92	1.85	10	2
1:A:127:LYS:CG	1:A:128:VAL:H	0.92	1.76	10	2
1:A:130:LYS:HE3	1:A:130:LYS:HA	0.91	1.42	4	1
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:CE2	0.91	2.23	9	2
1:A:102:GLN:OE1	1:A:103:PHE:N	0.91	2.03	12	1
1:A:8:LEU:O	1:A:162:ALA:CA	0.91	2.17	9	2
1:A:6:HIS:CD2	1:A:19:GLU:HG3	0.91	1.99	5	2
1:A:126:GLY:C	1:A:127:LYS:HG3	0.91	1.83	1	6
1:A:90:MET:HB2	1:A:123:ALA:HB3	0.91	1.40	1	3
1:A:92:ARG:HB2	1:A:99:ALA:HA	0.91	0.93	8	2
1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HD2	0.91	1.26	6	1
1:A:47:HIS:O	1:A:153:PRO:HD2	0.91	1.64	1	2
1:A:50:ILE:HD13	1:A:53:PHE:HD2	0.91	1.23	7	2
1:A:61:THR:HB	1:A:67:LYS:CE	0.91	1.95	10	2
1:A:61:THR:HG23	1:A:67:LYS:HD2	0.91	1.35	2	1
1:A:29:VAL:O	1:A:32:PHE:HB3	0.91	1.63	10	5
1:A:92:ARG:NH1	1:A:93:THR:HB	0.91	1.81	3	1
1:A:45:THR:HA	1:A:159:ILE:HG13	0.91	1.40	9	12
1:A:146:VAL:HG23	1:A:149:TYR:O	0.91	1.64	12	11
1:A:85:ARG:CB	1:A:108:ALA:CA	0.91	2.47	11	2
1:A:17:GLU:CB	1:A:129:VAL:HG12	0.90	1.91	3	2
1:A:24:LYS:HE3	1:A:24:LYS:HA	0.90	1.42	7	1
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:CB	0.90	2.17	8	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:67:LYS:CD	0.90	1.85	2	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:40:PHE:HB2	0.90	1.44	8	1
1:A:9:LEU:HG	1:A:162:ALA:HB2	0.90	1.42	4	4
1:A:75:ASN:ND2	1:A:97:ASP:OD1	0.90	2.03	7	1
1:A:5:PRO:O	1:A:19:GLU:HG3	0.90	1.66	5	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:MET:HB3	1:A:136:ASP:OD2	0.90	1.67	7	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:54:MET:HE1	0.90	2.02	5	1
1:A:81:LEU:CA	1:A:82:ARG:HD3	0.90	1.95	3	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:22:LYS:C	0.90	1.87	11	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:N	0.90	1.82	5	2
1:A:77:ALA:CA	1:A:115:HIS:NE2	0.90	2.34	9	1
1:A:83:ASN:OD1	1:A:127:LYS:CD	0.90	2.19	3	1
1:A:76:GLU:HG2	1:A:77:ALA:N	0.89	1.82	3	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:82:ARG:HH11	0.89	1.08	1	1
1:A:53:PHE:HD1	1:A:54:MET:HG2	0.89	1.26	12	1
1:A:6:HIS:HB2	1:A:165:LEU:HD23	0.89	1.41	7	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:CG2	0.89	2.21	10	4
1:A:75:ASN:HD22	1:A:96:LYS:HZ1	0.89	0.97	2	1
1:A:63:GLN:C	1:A:64:MET:HG3	0.89	1.86	10	4
1:A:61:THR:HB	1:A:67:LYS:NZ	0.89	1.83	10	1
1:A:86:GLY:O	1:A:128:VAL:HG23	0.89	1.67	5	5
1:A:77:ALA:C	1:A:115:HIS:HD2	0.89	1.44	9	2
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:HB2	0.89	1.67	2	4
1:A:130:LYS:CD	1:A:130:LYS:O	0.89	2.21	3	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:18:LEU:HB2	0.89	1.43	9	1
1:A:154:SER:O	1:A:156:PRO:CD	0.89	2.18	2	5
1:A:41:TYR:O	1:A:44:THR:HG23	0.89	1.66	12	3
1:A:90:MET:HB3	1:A:123:ALA:HB3	0.89	1.45	4	7
1:A:56:GLN:O	1:A:104:PHE:C	0.89	2.12	6	3
1:A:56:GLN:CB	1:A:57:GLY:CA	0.89	2.51	4	3
1:A:48:ARG:NH2	1:A:50:ILE:C	0.89	2.26	2	1
1:A:47:HIS:CD2	1:A:48:ARG:HG2	0.88	2.03	3	3
1:A:17:GLU:O	1:A:129:VAL:HG12	0.88	1.68	4	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:VAL:CG1	0.88	2.22	11	3
1:A:85:ARG:CG	1:A:107:VAL:O	0.88	2.21	11	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:132:MET:HE2	0.88	1.96	7	1
1:A:6:HIS:O	1:A:164:VAL:HA	0.88	1.67	7	2
1:A:92:ARG:HD3	1:A:98:SER:OG	0.88	1.68	8	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:CG	0.88	2.51	10	3
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:CG	0.88	2.20	5	4
1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HH11	0.88	0.72	1	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:CA	0.88	2.21	10	7
1:A:49:VAL:HG22	1:A:50:ILE:O	0.88	1.68	4	2
1:A:137:LYS:O	1:A:137:LYS:HD3	0.88	1.68	10	1
1:A:45:THR:O	1:A:159:ILE:HD11	0.88	1.67	12	10
1:A:22:LYS:HD3	1:A:22:LYS:O	0.88	1.67	6	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:HE1	1:A:110:ASN:OD1	0.88	1.51	11	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:122:TYR:CE1	0.88	2.03	10	2
1:A:132:MET:HG3	1:A:136:ASP:OD1	0.88	1.67	9	1
1:A:90:MET:SD	1:A:99:ALA:HB1	0.88	2.08	7	6
1:A:76:GLU:HG3	1:A:123:ALA:HB2	0.88	1.43	3	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:CG2	0.88	2.22	5	4
1:A:61:THR:HB	1:A:65:GLN:O	0.88	1.68	8	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:17:GLU:OE2	0.88	2.22	12	1
1:A:17:GLU:HG2	1:A:129:VAL:CG1	0.88	1.98	4	1
1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:N	0.87	1.83	3	2
1:A:50:ILE:HD12	1:A:53:PHE:HB3	0.87	1.41	10	2
1:A:49:VAL:HG12	1:A:55:ILE:HA	0.87	1.46	6	1
1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE3	0.87	1.43	6	1
1:A:87:THR:CG2	1:A:127:LYS:HZ1	0.87	1.82	5	1
1:A:6:HIS:HA	1:A:18:LEU:O	0.87	1.69	9	6
1:A:107:VAL:HG12	1:A:132:MET:SD	0.87	2.09	7	3
1:A:55:ILE:HD11	1:A:135:ALA:HB1	0.87	1.45	10	3
1:A:113:LEU:HD11	1:A:122:TYR:CD2	0.87	2.05	9	2
1:A:6:HIS:HB2	1:A:165:LEU:O	0.87	1.69	5	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:56:GLN:HE21	0.87	1.82	3	1
1:A:137:LYS:HD3	1:A:137:LYS:O	0.87	1.68	2	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:HB2	0.87	1.47	7	1
1:A:30:GLN:HE21	1:A:30:GLN:HA	0.87	1.29	2	1
1:A:154:SER:O	1:A:155:LYS:CG	0.87	2.23	10	1
1:A:61:THR:C	1:A:62:GLU:HG2	0.87	1.90	3	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:49:VAL:N	0.87	2.37	11	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:CE2	0.87	2.61	7	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:CG	0.86	2.00	6	3
1:A:53:PHE:CZ	1:A:110:ASN:OD1	0.86	2.28	11	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:129:VAL:HG23	0.86	1.69	5	1
1:A:59:GLY:HA3	1:A:67:LYS:CE	0.86	1.92	5	1
1:A:19:GLU:O	1:A:126:GLY:HA2	0.86	1.70	9	6
1:A:49:VAL:HG12	1:A:54:MET:CG	0.86	1.90	11	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:HG23	0.86	1.69	2	5
1:A:130:LYS:HD3	1:A:130:LYS:C	0.86	1.91	3	1
1:A:32:PHE:O	1:A:36:VAL:HG23	0.86	1.69	7	7
1:A:82:ARG:O	1:A:83:ASN:ND2	0.86	2.08	10	5
1:A:89:ALA:HB3	1:A:104:PHE:CZ	0.86	2.06	3	6
1:A:78:ASP:CB	1:A:115:HIS:CD2	0.86	2.57	2	2
1:A:137:LYS:O	1:A:141:VAL:HG13	0.86	1.70	7	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:127:LYS:O	0.86	1.69	6	6

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:HD13	1:A:104:PHE:O	0.86	1.69	11	2
1:A:61:THR:CG2	1:A:67:LYS:HE3	0.85	2.01	6	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:153:PRO:HB3	0.85	1.99	4	1
1:A:155:LYS:HB2	1:A:156:PRO:HD3	0.85	0.90	10	1
1:A:148:PRO:HG2	1:A:149:TYR:CD1	0.85	2.06	6	1
1:A:104:PHE:CZ	1:A:122:TYR:HB3	0.85	2.07	8	4
1:A:78:ASP:HB3	1:A:115:HIS:HD2	0.85	1.30	7	3
1:A:72:PRO:O	1:A:73:ILE:HG23	0.85	1.72	8	4
1:A:76:GLU:OE1	1:A:124:VAL:N	0.85	2.09	10	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:115:HIS:CE1	0.85	2.06	12	1
1:A:55:ILE:O	1:A:56:GLN:HG2	0.85	1.71	10	1
1:A:70:ASN:HB3	1:A:71:PRO:HD2	0.85	1.48	12	8
1:A:48:ARG:CB	1:A:56:GLN:NE2	0.85	2.39	3	1
1:A:48:ARG:HB2	1:A:152:VAL:HA	0.85	1.47	1	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:OE2	0.85	1.71	9	4
1:A:7:VAL:HG12	1:A:18:LEU:HB2	0.85	1.46	8	6
1:A:24:LYS:HD3	1:A:79:ASN:HA	0.85	1.46	11	1
1:A:112:PHE:HD1	1:A:112:PHE:O	0.85	1.55	6	1
1:A:30:GLN:NE2	1:A:34:ASP:OD1	0.85	2.07	5	2
1:A:85:ARG:HB3	1:A:109:ASP:OD1	0.85	1.70	12	1
1:A:85:ARG:HG2	1:A:108:ALA:HA	0.85	1.47	11	1
1:A:90:MET:HG2	1:A:125:PHE:CD1	0.85	2.05	2	1
1:A:44:THR:O	1:A:45:THR:HG23	0.84	1.73	4	12
1:A:36:VAL:HA	1:A:41:TYR:CE2	0.84	2.08	9	2
1:A:85:ARG:CB	1:A:108:ALA:C	0.84	2.46	11	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:115:HIS:NE2	0.84	1.86	12	3
1:A:74:LYS:HA	1:A:97:ASP:CG	0.84	1.93	4	2
1:A:102:GLN:OE1	1:A:102:GLN:C	0.84	2.15	8	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:VAL:CG2	0.84	2.26	7	4
1:A:24:LYS:HZ1	1:A:81:LEU:HD21	0.84	1.30	9	1
1:A:137:LYS:HD3	1:A:137:LYS:C	0.84	1.92	2	1
1:A:56:GLN:HB2	1:A:104:PHE:CB	0.84	2.02	10	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:76:GLU:O	0.84	1.96	7	2
1:A:56:GLN:HG2	1:A:104:PHE:HB2	0.83	1.48	12	5
1:A:88:ILE:CB	1:A:126:GLY:HA3	0.83	2.02	5	3
1:A:47:HIS:NE2	1:A:59:GLY:HA2	0.83	1.88	7	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:165:LEU:HD13	0.83	1.50	5	1
1:A:31:ASN:HA	1:A:34:ASP:OD1	0.83	1.73	12	1
1:A:17:GLU:HB2	1:A:129:VAL:HG13	0.83	1.50	3	2
1:A:78:ASP:HB3	1:A:120:PHE:CE2	0.83	2.08	7	1
1:A:56:GLN:HG2	1:A:104:PHE:CB	0.83	2.03	3	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:CE1	0.83	2.66	10	2
1:A:11:THR:CG2	1:A:159:ILE:HG12	0.83	2.03	3	3
1:A:53:PHE:CD2	1:A:54:MET:HE2	0.83	2.09	5	3
1:A:143:THR:CA	1:A:154:SER:H	0.83	1.83	7	6
1:A:6:HIS:CB	1:A:18:LEU:O	0.83	2.26	9	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HB2	0.83	2.02	11	6
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:HG2	0.83	2.03	10	3
1:A:138:ILE:O	1:A:141:VAL:CG2	0.83	2.24	7	7
1:A:89:ALA:CB	1:A:124:VAL:CA	0.83	2.57	3	10
1:A:22:LYS:HD3	1:A:22:LYS:C	0.83	1.94	6	1
1:A:115:HIS:NE2	1:A:120:PHE:CZ	0.83	2.47	7	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:153:PRO:HD3	0.83	2.04	1	2
1:A:92:ARG:HB3	1:A:99:ALA:HB2	0.83	0.85	8	1
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:HD2	0.82	1.70	3	1
1:A:66:GLN:OE1	1:A:66:GLN:C	0.82	2.18	12	1
1:A:47:HIS:CE1	1:A:56:GLN:O	0.82	2.32	11	2
1:A:132:MET:O	1:A:136:ASP:CG	0.82	2.18	8	4
1:A:40:PHE:O	1:A:44:THR:HG23	0.82	1.73	1	5
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:NH1	0.82	2.24	1	1
1:A:92:ARG:NH1	1:A:93:THR:O	0.82	2.11	12	1
1:A:17:GLU:HG2	1:A:130:LYS:O	0.82	1.73	8	1
1:A:48:ARG:HG2	1:A:56:GLN:NE2	0.82	1.90	12	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:18:LEU:HB2	0.82	2.04	9	2
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:CG	0.82	2.17	3	2
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASN:CG	0.82	2.18	3	6
1:A:102:GLN:OE1	1:A:102:GLN:O	0.82	1.98	8	2
1:A:143:THR:CB	1:A:153:PRO:HA	0.82	2.04	7	7
1:A:75:ASN:N	1:A:97:ASP:OD1	0.82	2.11	7	1
1:A:143:THR:CA	1:A:153:PRO:HA	0.82	2.04	9	7
1:A:76:GLU:CG	1:A:123:ALA:HB2	0.82	2.04	3	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CG	0.82	2.33	11	1
1:A:9:LEU:HA	1:A:161:SER:O	0.82	1.74	7	4
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASN:ND2	0.82	2.13	3	1
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:HA	0.82	1.75	11	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:ASP:O	0.82	1.97	11	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:54:MET:HE2	0.82	2.10	6	1
1:A:146:VAL:HG21	1:A:152:VAL:CG2	0.82	2.03	6	12
1:A:30:GLN:NE2	1:A:30:GLN:HA	0.82	1.89	2	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:O	0.81	2.32	5	2
1:A:45:THR:CA	1:A:159:ILE:HG13	0.81	2.05	9	9
1:A:115:HIS:HE1	1:A:122:TYR:O	0.81	1.55	12	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:THR:CG2	1:A:127:LYS:HG2	0.81	1.99	11	3
1:A:83:ASN:OD1	1:A:87:THR:CG2	0.81	2.27	1	1
1:A:56:GLN:HB3	1:A:103:PHE:O	0.81	1.76	8	6
1:A:136:ASP:O	1:A:139:SER:N	0.81	2.13	7	6
1:A:76:GLU:HG2	1:A:77:ALA:H	0.81	1.35	3	1
1:A:18:LEU:HD21	1:A:105:ILE:CD1	0.81	2.05	1	10
1:A:165:LEU:HB3	1:A:166:PRO:HD3	0.81	1.53	6	1
1:A:47:HIS:O	1:A:153:PRO:CD	0.81	2.27	1	2
1:A:79:ASN:O	1:A:79:ASN:ND2	0.81	2.13	1	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:66:GLN:HG2	0.81	2.09	8	1
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:HB3	0.81	1.74	2	2
1:A:85:ARG:HB3	1:A:108:ALA:N	0.81	1.86	11	2
1:A:9:LEU:HG	1:A:162:ALA:CB	0.81	2.06	4	5
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:HG13	0.81	1.76	11	1
1:A:81:LEU:HA	1:A:82:ARG:HH11	0.81	1.35	3	1
1:A:86:GLY:HA2	1:A:106:ASN:HD21	0.81	0.71	7	1
1:A:90:MET:HB3	1:A:123:ALA:CB	0.81	2.06	6	8
1:A:11:THR:HG21	1:A:46:PHE:CE2	0.81	2.10	8	7
1:A:157:VAL:O	1:A:158:VAL:HG23	0.81	1.76	10	4
1:A:49:VAL:CG2	1:A:55:ILE:HA	0.81	2.05	2	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:113:LEU:H	0.81	1.35	8	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:OE2	0.81	1.75	12	1
1:A:19:GLU:OE2	1:A:126:GLY:C	0.81	2.20	3	6
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:OE2	0.80	1.97	9	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:CB	0.80	2.06	7	8
1:A:56:GLN:C	1:A:104:PHE:CA	0.80	2.43	1	3
1:A:70:ASN:OD1	1:A:100:THR:HG21	0.80	1.76	7	1
1:A:54:MET:HG2	1:A:55:ILE:N	0.80	1.90	7	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:54:MET:O	0.80	1.76	1	2
1:A:53:PHE:C	1:A:54:MET:HG3	0.80	1.96	3	4
1:A:7:VAL:O	1:A:17:GLU:HA	0.80	1.77	3	3
1:A:77:ALA:HB3	1:A:120:PHE:CE1	0.80	2.11	1	3
1:A:48:ARG:HD2	1:A:153:PRO:CD	0.80	2.07	1	1
1:A:5:PRO:HB2	1:A:20:LEU:O	0.80	1.76	2	2
1:A:92:ARG:HA	1:A:99:ALA:H	0.80	1.36	4	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:122:TYR:CD2	0.80	2.12	11	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:42:ASN:OD1	0.80	2.29	5	2
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:LEU:HD13	0.80	1.36	1	1
1:A:75:ASN:C	1:A:76:GLU:HG2	0.80	1.96	9	1
1:A:78:ASP:C	1:A:79:ASN:OD1	0.79	2.20	11	3
1:A:67:LYS:O	1:A:69:PRO:HD3	0.79	1.76	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:GLN:CG	1:A:105:ILE:HG13	0.79	2.06	10	1
1:A:123:ALA:O	1:A:124:VAL:CG2	0.79	2.29	4	12
1:A:48:ARG:O	1:A:49:VAL:CG2	0.79	2.30	2	3
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:CD2	0.79	2.70	7	1
1:A:148:PRO:O	1:A:150:GLN:NE2	0.79	2.16	10	1
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:OD1	0.79	1.98	3	2
1:A:65:GLN:O	1:A:66:GLN:O	0.79	1.99	7	2
1:A:89:ALA:HB2	1:A:124:VAL:HG22	0.79	1.54	12	9
1:A:46:PHE:CD1	1:A:159:ILE:HD11	0.79	2.12	8	6
1:A:18:LEU:CD1	1:A:128:VAL:HG22	0.79	2.08	6	4
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:HG12	0.79	1.77	8	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:PRO:CD	0.79	2.07	12	5
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ASN:CG	0.79	2.20	7	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:CD	0.79	2.21	9	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:122:TYR:CD1	0.79	2.13	10	2
1:A:110:ASN:O	1:A:112:PHE:CD2	0.79	2.35	10	2
1:A:96:LYS:CD	1:A:97:ASP:N	0.79	2.45	10	1
1:A:63:GLN:C	1:A:64:MET:HG2	0.79	1.96	6	3
1:A:44:THR:HA	1:A:62:GLU:OE2	0.79	1.78	7	1
1:A:48:ARG:C	1:A:56:GLN:OE1	0.79	2.20	8	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:125:PHE:HE2	0.79	1.35	1	3
1:A:106:ASN:O	1:A:132:MET:CE	0.79	2.30	2	4
1:A:39:GLY:HA2	1:A:42:ASN:OD1	0.79	1.77	5	1
1:A:156:PRO:O	1:A:157:VAL:CG2	0.79	2.31	12	3
1:A:5:PRO:HB3	1:A:20:LEU:O	0.79	1.77	2	1
1:A:45:THR:O	1:A:159:ILE:CD1	0.78	2.29	12	7
1:A:72:PRO:CB	1:A:100:THR:HG22	0.78	2.09	4	1
1:A:115:HIS:HA	1:A:120:PHE:C	0.78	1.99	5	1
1:A:137:LYS:C	1:A:137:LYS:HD3	0.78	1.97	10	1
1:A:47:HIS:CD2	1:A:48:ARG:HG3	0.78	2.13	7	3
1:A:48:ARG:HD2	1:A:153:PRO:HD3	0.78	1.55	1	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:135:ALA:HB1	0.78	2.08	5	4
1:A:112:PHE:O	1:A:112:PHE:CD1	0.78	2.35	6	5
1:A:92:ARG:CG	1:A:99:ALA:HA	0.78	2.09	9	3
1:A:104:PHE:CE2	1:A:122:TYR:HB3	0.78	2.13	7	2
1:A:68:LYS:CB	1:A:69:PRO:CD	0.78	2.60	7	2
1:A:73:ILE:HG12	1:A:98:SER:O	0.78	1.78	1	3
1:A:46:PHE:CE1	1:A:159:ILE:HD11	0.78	2.13	11	10
1:A:10:THR:HG22	1:A:160:LEU:CD1	0.78	2.07	7	6
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:OE1	0.78	1.76	11	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:O	0.78	2.00	1	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:HIS:HB3	1:A:18:LEU:O	0.78	1.78	9	2
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:CB	0.78	2.32	5	3
1:A:35:TYR:CE1	1:A:69:PRO:HB3	0.78	2.13	7	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:123:ALA:HB2	0.78	1.79	11	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:162:ALA:HB2	0.78	2.09	2	7
1:A:47:HIS:NE2	1:A:48:ARG:HG2	0.78	1.93	3	2
1:A:23:GLN:OE1	1:A:24:LYS:HB2	0.78	1.78	10	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:23:GLN:CA	0.78	2.08	11	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:GLN:CG	0.78	2.29	7	1
1:A:50:ILE:O	1:A:51:PRO:O	0.78	2.02	4	1
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:CG	0.78	2.31	7	6
1:A:48:ARG:HE	1:A:151:ASN:HB2	0.78	1.39	11	1
1:A:88:ILE:HD11	1:A:103:PHE:CB	0.78	2.09	1	11
1:A:148:PRO:HG2	1:A:149:TYR:HD1	0.78	1.36	6	1
1:A:56:GLN:HB2	1:A:104:PHE:HA	0.77	0.78	10	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:105:ILE:HB	0.77	1.56	1	6
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CD1	0.77	2.37	11	1
1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:CD	0.77	1.92	6	1
1:A:57:GLY:O	1:A:103:PHE:O	0.77	2.00	1	3
1:A:6:HIS:CE1	1:A:19:GLU:HB3	0.77	2.15	8	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:105:ILE:O	0.77	2.32	2	2
1:A:60:PHE:HD2	1:A:64:MET:SD	0.77	2.02	7	2
1:A:85:ARG:HA	1:A:106:ASN:ND2	0.77	1.95	7	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:PRO:O	0.77	2.01	12	1
1:A:89:ALA:HB1	1:A:124:VAL:HA	0.77	1.54	3	4
1:A:87:THR:HG22	1:A:127:LYS:CG	0.77	2.01	11	3
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:CE	0.77	2.63	8	2
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:HG3	0.77	1.78	12	2
1:A:90:MET:HB2	1:A:123:ALA:CB	0.77	2.09	1	3
1:A:144:HIS:CD2	1:A:145:ASP:O	0.77	2.37	5	6
1:A:48:ARG:HH21	1:A:51:PRO:CA	0.77	1.89	2	1
1:A:29:VAL:CA	1:A:32:PHE:HE2	0.77	1.72	11	3
1:A:115:HIS:NE2	1:A:120:PHE:CE2	0.77	2.53	7	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:46:PHE:CZ	0.77	2.12	7	2
1:A:17:GLU:HB3	1:A:129:VAL:CG1	0.77	2.09	6	2
1:A:151:ASN:OD1	1:A:151:ASN:O	0.77	2.02	5	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:CE	0.77	2.09	8	1
1:A:81:LEU:HA	1:A:82:ARG:NH1	0.77	1.93	3	1
1:A:92:ARG:CG	1:A:93:THR:N	0.77	2.33	11	6
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:CD	0.77	2.32	8	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:SD	0.77	2.19	8	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:CD2	1:A:17:GLU:OE2	0.77	2.33	10	2
1:A:37:ASN:O	1:A:38:SER:HB3	0.77	1.80	2	6
1:A:76:GLU:O	1:A:92:ARG:NH1	0.77	2.17	7	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:56:GLN:OE1	0.77	2.33	8	1
1:A:72:PRO:HG3	1:A:100:THR:CG2	0.76	2.10	10	3
1:A:162:ALA:O	1:A:163:LYS:HG3	0.76	1.80	10	2
1:A:78:ASP:OD1	1:A:79:ASN:N	0.76	2.18	8	5
1:A:60:PHE:CE2	1:A:66:GLN:HG2	0.76	2.14	6	1
1:A:145:ASP:HB3	1:A:150:GLN:OE1	0.76	1.79	12	2
1:A:36:VAL:HG11	1:A:164:VAL:HG13	0.76	1.56	9	3
1:A:58:GLY:O	1:A:59:GLY:O	0.76	2.04	7	3
1:A:78:ASP:O	1:A:80:GLY:N	0.76	2.18	11	2
1:A:8:LEU:CB	1:A:163:LYS:O	0.76	2.32	7	2
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:PHE:HD2	0.76	1.38	5	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:99:ALA:H	0.76	0.71	6	2
1:A:17:GLU:CG	1:A:129:VAL:CG1	0.76	2.62	4	1
1:A:19:GLU:OE2	1:A:20:LEU:O	0.76	2.03	4	1
1:A:9:LEU:O	1:A:16:ILE:CG1	0.76	2.32	9	3
1:A:96:LYS:CD	1:A:97:ASP:H	0.76	1.93	10	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:123:ALA:HB1	0.76	1.80	11	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:HD23	0.76	1.79	7	2
1:A:90:MET:HE2	1:A:102:GLN:O	0.76	1.80	7	2
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:O	0.76	1.81	12	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:153:PRO:CA	0.76	2.39	11	10
1:A:20:LEU:HD22	1:A:125:PHE:CE2	0.76	2.16	12	3
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:HD13	0.76	1.55	8	10
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:HG3	0.76	1.79	3	1
1:A:53:PHE:C	1:A:107:VAL:HB	0.76	2.01	6	1
1:A:48:ARG:C	1:A:48:ARG:HD3	0.75	2.01	11	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:CA	0.75	2.12	3	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:CD1	0.75	2.11	10	5
1:A:50:ILE:HD12	1:A:53:PHE:CB	0.75	2.11	10	2
1:A:53:PHE:CE2	1:A:54:MET:HE3	0.75	2.16	6	1
1:A:71:PRO:HB2	1:A:72:PRO:C	0.75	2.01	8	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:131:GLY:CA	0.75	2.11	5	1
1:A:47:HIS:CE1	1:A:48:ARG:HG2	0.75	2.15	10	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CD2	0.75	2.40	11	2
1:A:48:ARG:HG2	1:A:143:THR:HG21	0.75	1.56	4	1
1:A:6:HIS:HD2	1:A:19:GLU:HG2	0.75	1.27	4	2
1:A:74:LYS:NZ	1:A:75:ASN:O	0.75	2.17	1	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:122:TYR:CD1	0.75	2.16	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:HA	1:A:41:TYR:HE2	0.75	1.38	9	3
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:HB2	0.75	1.80	11	3
1:A:20:LEU:HD13	1:A:125:PHE:CE2	0.75	2.15	1	2
1:A:22:LYS:C	1:A:22:LYS:CD	0.75	2.54	11	2
1:A:78:ASP:CB	1:A:115:HIS:HD2	0.75	1.95	2	4
1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:HE21	0.75	1.95	2	1
1:A:134:VAL:HG12	1:A:138:ILE:CD1	0.75	2.12	11	1
1:A:48:ARG:HB2	1:A:153:PRO:CD	0.75	2.12	1	1
1:A:73:ILE:O	1:A:73:ILE:HD12	0.75	1.81	8	1
1:A:76:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	0.75	1.42	12	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:115:HIS:CG	0.75	2.13	9	2
1:A:62:GLU:CD	1:A:63:GLN:HG2	0.74	2.02	10	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:122:TYR:CE2	0.74	2.17	9	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	0.74	1.58	9	2
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ASN:ND2	0.74	2.19	7	1
1:A:9:LEU:HG	1:A:162:ALA:HA	0.74	1.59	11	1
1:A:64:MET:HE1	1:A:152:VAL:HG21	0.74	1.58	9	3
1:A:16:ILE:C	1:A:17:GLU:OE1	0.74	2.26	10	1
1:A:76:GLU:CG	1:A:77:ALA:H	0.74	1.95	3	1
1:A:95:ASP:O	1:A:96:LYS:HB3	0.74	1.82	9	2
1:A:8:LEU:HD21	1:A:17:GLU:OE1	0.74	1.82	6	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:55:ILE:HB	0.74	1.60	7	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:92:ARG:HH11	0.74	1.43	7	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:82:ARG:HH11	0.74	1.82	1	1
1:A:64:MET:CE	1:A:152:VAL:HG21	0.74	2.13	2	3
1:A:15:ASN:OD1	1:A:16:ILE:N	0.74	2.20	10	3
1:A:56:GLN:NE2	1:A:56:GLN:HA	0.74	1.95	10	1
1:A:134:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HD11	0.74	1.58	11	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:HB2	0.74	1.58	6	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:55:ILE:HG22	0.74	2.12	4	2
1:A:21:ASP:O	1:A:22:LYS:CB	0.74	2.34	6	4
1:A:92:ARG:HB2	1:A:99:ALA:CA	0.74	1.82	8	2
1:A:48:ARG:CD	1:A:153:PRO:HD3	0.74	2.12	1	1
1:A:83:ASN:HB3	1:A:87:THR:HG21	0.74	1.58	10	2
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:HA	0.74	1.82	8	6
1:A:63:GLN:OE1	1:A:63:GLN:N	0.74	2.18	1	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:125:PHE:CD2	0.74	2.18	8	1
1:A:43:ASN:CA	1:A:159:ILE:O	0.74	2.28	8	2
1:A:89:ALA:HB1	1:A:123:ALA:C	0.74	2.03	7	12
1:A:61:THR:C	1:A:62:GLU:OE2	0.74	2.26	2	2
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:CB	0.74	2.11	2	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:THR:O	1:A:46:PHE:HD1	0.73	1.66	10	8
1:A:56:GLN:HG2	1:A:104:PHE:HA	0.73	0.92	11	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:CD1	0.73	2.31	6	1
1:A:71:PRO:HD2	1:A:100:THR:HG22	0.73	1.60	7	2
1:A:164:VAL:C	1:A:165:LEU:HD12	0.73	2.03	5	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:CD	0.73	2.02	7	4
1:A:17:GLU:HB2	1:A:129:VAL:CG2	0.73	2.13	2	2
1:A:7:VAL:CA	1:A:164:VAL:HG12	0.73	2.10	7	2
1:A:17:GLU:OE2	1:A:129:VAL:CG2	0.73	2.36	5	2
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:OE1	0.73	1.82	7	3
1:A:108:ALA:O	1:A:110:ASN:N	0.73	2.21	8	5
1:A:87:THR:HG22	1:A:127:LYS:HZ2	0.73	1.43	5	1
1:A:107:VAL:CB	1:A:132:MET:CE	0.73	2.67	5	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:98:SER:C	0.73	1.96	8	1
1:A:49:VAL:O	1:A:50:ILE:HG13	0.73	1.83	2	1
1:A:154:SER:C	1:A:155:LYS:HG3	0.73	2.03	10	1
1:A:19:GLU:O	1:A:19:GLU:CD	0.73	2.27	10	3
1:A:162:ALA:O	1:A:163:LYS:CG	0.73	2.37	10	2
1:A:8:LEU:C	1:A:9:LEU:HD12	0.73	2.03	9	4
1:A:133:ASP:O	1:A:137:LYS:CB	0.73	2.37	7	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:53:PHE:HD2	0.73	1.44	1	3
1:A:85:ARG:HD2	1:A:109:ASP:OD1	0.73	1.81	1	1
1:A:47:HIS:O	1:A:48:ARG:CG	0.73	2.34	6	1
1:A:6:HIS:CB	1:A:165:LEU:HD23	0.73	2.13	7	1
1:A:103:PHE:HD2	1:A:125:PHE:HZ	0.73	1.26	4	5
1:A:76:GLU:CG	1:A:77:ALA:N	0.73	2.50	3	1
1:A:109:ASP:C	1:A:110:ASN:OD1	0.73	2.26	7	1
1:A:76:GLU:O	1:A:76:GLU:CD	0.73	2.27	7	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:17:GLU:OE2	0.73	1.84	2	2
1:A:146:VAL:CG2	1:A:152:VAL:HB	0.73	2.14	9	10
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:HB	0.73	1.83	2	3
1:A:115:HIS:CB	1:A:120:PHE:HB2	0.73	2.05	9	1
1:A:137:LYS:NZ	1:A:141:VAL:CG1	0.73	2.51	2	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:CD2	0.72	2.36	7	2
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:PHE:CZ	0.72	2.09	1	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:125:PHE:CE2	0.72	2.18	10	5
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:CB	0.72	2.36	2	4
1:A:89:ALA:HB1	1:A:124:VAL:CA	0.72	2.14	3	5
1:A:50:ILE:HD13	1:A:53:PHE:CD2	0.72	2.19	1	3
1:A:20:LEU:HD23	1:A:126:GLY:HA3	0.72	1.60	1	3
1:A:155:LYS:CB	1:A:156:PRO:CD	0.72	2.50	5	3

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CE2	1:A:54:MET:HE2	0.72	2.17	6	3
1:A:11:THR:HG21	1:A:46:PHE:CD2	0.72	2.20	4	8
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:HB2	0.72	2.13	6	1
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:HG3	0.72	1.61	7	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:54:MET:C	0.72	2.05	1	2
1:A:36:VAL:CA	1:A:40:PHE:HB2	0.72	2.15	8	1
1:A:19:GLU:CD	1:A:19:GLU:O	0.72	2.27	8	3
1:A:144:HIS:HD2	1:A:144:HIS:O	0.72	1.67	9	6
1:A:40:PHE:O	1:A:41:TYR:CG	0.72	2.42	3	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:49:VAL:HA	0.72	1.60	11	1
1:A:10:THR:HA	1:A:15:ASN:HA	0.72	1.60	8	6
1:A:48:ARG:HH21	1:A:51:PRO:HA	0.72	1.37	2	1
1:A:47:HIS:CG	1:A:56:GLN:OE1	0.72	2.42	1	1
1:A:31:ASN:O	1:A:34:ASP:CB	0.72	2.37	6	10
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:HD2	0.72	1.98	6	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CE2	0.72	2.43	2	2
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:CD	0.72	2.05	8	1
1:A:145:ASP:CB	1:A:150:GLN:OE1	0.72	2.38	12	1
1:A:148:PRO:O	1:A:149:TYR:CG	0.72	2.43	2	1
1:A:137:LYS:CD	1:A:137:LYS:C	0.72	2.58	2	2
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:PHE:HE2	0.72	0.91	1	3
1:A:24:LYS:HD3	1:A:79:ASN:CA	0.72	2.14	11	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:128:VAL:HG22	0.72	1.62	12	3
1:A:133:ASP:O	1:A:137:LYS:HB2	0.72	1.85	7	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:164:VAL:CG1	0.71	2.11	7	1
1:A:76:GLU:OE1	1:A:123:ALA:CA	0.71	2.38	10	1
1:A:24:LYS:CE	1:A:81:LEU:HD21	0.71	2.15	9	1
1:A:8:LEU:CG	1:A:17:GLU:OE2	0.71	2.37	9	2
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:HB3	0.71	2.15	4	1
1:A:148:PRO:HG2	1:A:149:TYR:CD2	0.71	2.20	9	5
1:A:130:LYS:CD	1:A:130:LYS:C	0.71	2.58	3	1
1:A:92:ARG:CD	1:A:98:SER:OG	0.71	2.38	8	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:17:GLU:CG	0.71	2.68	2	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:LEU:HB3	0.71	2.00	3	2
1:A:109:ASP:O	1:A:112:PHE:CZ	0.71	2.43	3	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:41:TYR:CE2	0.71	2.20	3	1
1:A:48:ARG:HB2	1:A:151:ASN:HB2	0.71	1.62	6	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:153:PRO:CG	0.71	2.15	4	1
1:A:73:ILE:O	1:A:97:ASP:CB	0.71	2.37	4	1
1:A:62:GLU:HB3	1:A:63:GLN:OE1	0.71	1.84	1	1
1:A:80:GLY:C	1:A:81:LEU:HD23	0.71	2.06	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:GLN:HG3	1:A:24:LYS:HD2	0.71	1.61	12	1
1:A:83:ASN:OD1	1:A:111:ALA:HB2	0.71	1.85	11	1
1:A:48:ARG:O	1:A:56:GLN:HG3	0.71	1.85	6	1
1:A:24:LYS:CE	1:A:81:LEU:HD11	0.71	2.15	9	1
1:A:76:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	0.71	1.61	1	1
1:A:120:PHE:O	1:A:120:PHE:CD1	0.71	2.44	9	1
1:A:24:LYS:HZ3	1:A:81:LEU:HD21	0.71	1.44	9	1
1:A:47:HIS:CG	1:A:48:ARG:H	0.71	2.04	9	8
1:A:49:VAL:HG11	1:A:54:MET:CB	0.71	2.15	11	1
1:A:75:ASN:C	1:A:76:GLU:OE2	0.71	2.29	1	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:16:ILE:O	0.71	2.39	1	1
1:A:130:LYS:O	1:A:132:MET:N	0.71	2.22	10	2
1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ASP:H	0.71	1.43	10	1
1:A:90:MET:CG	1:A:91:ALA:N	0.71	2.53	9	1
1:A:70:ASN:H	1:A:71:PRO:HD2	0.71	1.43	2	1
1:A:89:ALA:O	1:A:103:PHE:HB2	0.71	1.86	11	1
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:CG	0.71	2.37	8	2
1:A:77:ALA:HA	1:A:123:ALA:HA	0.70	1.62	8	9
1:A:94:ALA:O	1:A:95:ASP:CB	0.70	2.39	8	3
1:A:109:ASP:O	1:A:112:PHE:CE2	0.70	2.44	2	2
1:A:151:ASN:O	1:A:152:VAL:HG23	0.70	1.85	8	10
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ILE:HG13	0.70	1.86	2	7
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:CG	0.70	2.38	11	3
1:A:49:VAL:HG12	1:A:50:ILE:HG22	0.70	1.61	11	1
1:A:67:LYS:O	1:A:69:PRO:CD	0.70	2.38	6	1
1:A:37:ASN:O	1:A:38:SER:CB	0.70	2.39	2	6
1:A:113:LEU:HD23	1:A:122:TYR:CD2	0.70	2.21	2	2
1:A:59:GLY:C	1:A:67:LYS:HD2	0.70	2.07	3	1
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:CG	0.70	2.40	11	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:58:GLY:HA2	0.70	2.21	5	2
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:SER:HB2	0.70	1.62	7	1
1:A:136:ASP:C	1:A:140:GLN:HG2	0.70	2.04	8	2
1:A:78:ASP:N	1:A:115:HIS:HD2	0.70	1.84	2	2
1:A:113:LEU:HD21	1:A:122:TYR:HD2	0.70	1.46	3	1
1:A:24:LYS:HD3	1:A:81:LEU:HD21	0.70	1.64	6	1
1:A:56:GLN:HB2	1:A:57:GLY:CA	0.70	2.16	1	3
1:A:91:ALA:C	1:A:92:ARG:HG3	0.70	2.07	7	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:125:PHE:HE2	0.70	1.45	10	2
1:A:42:ASN:C	1:A:43:ASN:OD1	0.70	2.29	4	2
1:A:31:ASN:CG	1:A:73:ILE:HG21	0.70	2.06	8	2
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:HE1	0.70	2.04	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HB2	1:A:165:LEU:CD2	0.70	2.15	7	1
1:A:48:ARG:HH12	1:A:139:SER:HA	0.70	1.47	4	1
1:A:67:LYS:C	1:A:68:LYS:HG3	0.70	2.07	5	1
1:A:61:THR:HB	1:A:67:LYS:HE3	0.70	1.63	10	1
1:A:146:VAL:HG22	1:A:152:VAL:HB	0.70	1.63	1	12
1:A:110:ASN:O	1:A:112:PHE:CD1	0.70	2.44	3	1
1:A:74:LYS:HD2	1:A:75:ASN:OD1	0.70	1.87	1	1
1:A:69:PRO:C	1:A:70:ASN:OD1	0.69	2.30	11	4
1:A:75:ASN:HB2	1:A:78:ASP:OD2	0.69	1.87	1	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:HG3	0.69	2.17	10	2
1:A:144:HIS:CD2	1:A:144:HIS:O	0.69	2.45	1	5
1:A:149:TYR:HB3	1:A:151:ASN:OD1	0.69	1.86	6	1
1:A:24:LYS:HD2	1:A:81:LEU:HD11	0.69	1.61	9	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:89:ALA:H	0.69	1.48	3	12
1:A:44:THR:O	1:A:45:THR:CG2	0.69	2.39	4	12
1:A:92:ARG:CZ	1:A:93:THR:HB	0.69	2.17	3	1
1:A:67:LYS:HZ3	1:A:67:LYS:HA	0.69	1.42	1	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:23:GLN:HG2	0.69	1.88	2	1
1:A:89:ALA:HA	1:A:124:VAL:CA	0.69	2.13	11	7
1:A:111:ALA:O	1:A:113:LEU:N	0.69	2.25	12	3
1:A:47:HIS:HB2	1:A:56:GLN:CD	0.69	2.06	1	1
1:A:72:PRO:CB	1:A:98:SER:CB	0.69	2.71	2	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:54:MET:CG	0.69	2.16	10	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:HG3	0.69	1.63	10	3
1:A:19:GLU:HB3	1:A:129:VAL:HG13	0.69	1.62	2	3
1:A:48:ARG:CD	1:A:143:THR:HG21	0.69	2.18	1	1
1:A:163:LYS:O	1:A:165:LEU:HD12	0.69	1.88	5	1
1:A:137:LYS:NZ	1:A:141:VAL:HG11	0.69	2.03	2	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:23:GLN:HG3	0.69	1.87	10	1
1:A:127:LYS:CG	1:A:128:VAL:N	0.69	2.47	12	2
1:A:90:MET:C	1:A:123:ALA:HB3	0.69	2.08	5	6
1:A:61:THR:CB	1:A:67:LYS:NZ	0.69	2.55	10	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:HD1	0.69	2.06	5	3
1:A:129:VAL:C	1:A:130:LYS:HG3	0.69	2.08	12	2
1:A:66:GLN:O	1:A:66:GLN:OE1	0.69	2.11	12	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:63:GLN:CG	0.69	2.40	10	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:55:ILE:HA	0.69	2.18	6	1
1:A:32:PHE:CD2	1:A:36:VAL:HG21	0.69	2.23	2	4
1:A:59:GLY:C	1:A:67:LYS:HG2	0.69	2.09	5	2
1:A:36:VAL:CG1	1:A:164:VAL:HG13	0.69	2.17	8	2
1:A:67:LYS:NZ	1:A:102:GLN:CD	0.69	2.45	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:O	1:A:75:ASN:O	0.68	2.11	2	5
1:A:130:LYS:HD2	1:A:130:LYS:O	0.68	1.88	3	1
1:A:71:PRO:HD3	1:A:100:THR:HB	0.68	1.64	8	1
1:A:130:LYS:HD3	1:A:130:LYS:O	0.68	1.81	3	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:CG1	0.68	2.42	11	1
1:A:6:HIS:CE1	1:A:129:VAL:HG21	0.68	2.23	9	2
1:A:136:ASP:O	1:A:140:GLN:CD	0.68	2.31	11	5
1:A:82:ARG:HD2	1:A:82:ARG:N	0.68	2.02	11	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:162:ALA:HB2	0.68	1.65	2	2
1:A:113:LEU:O	1:A:114:ASP:O	0.68	2.12	8	2
1:A:17:GLU:C	1:A:129:VAL:HG12	0.68	2.08	3	2
1:A:56:GLN:HA	1:A:104:PHE:HA	0.68	1.66	8	3
1:A:85:ARG:HB3	1:A:108:ALA:O	0.68	1.86	11	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:HA	0.68	2.03	5	4
1:A:95:ASP:O	1:A:96:LYS:CB	0.68	2.41	9	4
1:A:31:ASN:CA	1:A:34:ASP:OD1	0.68	2.42	12	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:123:ALA:O	0.68	2.39	11	8
1:A:36:VAL:HG11	1:A:164:VAL:CG1	0.68	2.19	8	4
1:A:21:ASP:O	1:A:22:LYS:HB3	0.68	1.88	7	1
1:A:115:HIS:HB2	1:A:121:GLY:HA3	0.68	1.66	10	1
1:A:70:ASN:C	1:A:72:PRO:HD3	0.68	2.08	1	4
1:A:22:LYS:HG3	1:A:23:GLN:N	0.68	2.03	7	2
1:A:19:GLU:HB3	1:A:127:LYS:O	0.68	1.88	5	1
1:A:146:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG21	0.68	1.66	7	11
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:C	0.68	2.08	2	2
1:A:150:GLN:HG2	1:A:150:GLN:O	0.68	1.89	5	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:CB	0.68	2.41	8	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:138:ILE:HG12	0.68	1.65	3	12
1:A:80:GLY:C	1:A:81:LEU:HD22	0.68	2.08	6	1
1:A:76:GLU:C	1:A:92:ARG:NH1	0.68	2.47	7	1
1:A:90:MET:HE2	1:A:99:ALA:HA	0.68	1.64	4	1
1:A:19:GLU:CD	1:A:127:LYS:CD	0.68	2.61	8	1
1:A:5:PRO:CG	1:A:20:LEU:O	0.68	2.42	2	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:C	0.67	2.46	10	1
1:A:56:GLN:CG	1:A:104:PHE:CA	0.67	2.66	10	1
1:A:19:GLU:CG	1:A:127:LYS:HB3	0.67	2.19	12	3
1:A:33:VAL:HA	1:A:36:VAL:HB	0.67	1.63	7	6
1:A:107:VAL:HG11	1:A:132:MET:HE3	0.67	1.66	5	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:20:LEU:CD1	0.67	2.19	9	2
1:A:88:ILE:CA	1:A:126:GLY:HA3	0.67	2.19	5	2
1:A:27:VAL:O	1:A:31:ASN:ND2	0.67	2.26	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ASP:HB3	1:A:120:PHE:HE2	0.67	1.49	7	1
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ASP:CB	0.67	2.43	11	3
1:A:54:MET:CG	1:A:55:ILE:N	0.67	2.56	7	1
1:A:76:GLU:O	1:A:92:ARG:HD2	0.67	1.89	7	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:80:GLY:N	0.67	2.27	12	2
1:A:48:ARG:CB	1:A:151:ASN:HB2	0.67	2.19	6	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:HB3	0.67	1.90	12	3
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CB	0.67	2.42	5	2
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:CG1	0.67	2.43	8	1
1:A:57:GLY:O	1:A:103:PHE:CD1	0.67	2.48	12	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:HD1	0.67	2.08	11	1
1:A:24:LYS:HG3	1:A:79:ASN:HB2	0.67	1.65	1	1
1:A:74:LYS:C	1:A:74:LYS:HE3	0.67	2.10	1	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:134:VAL:HB	0.67	2.19	5	9
1:A:60:PHE:CD2	1:A:66:GLN:HG2	0.67	2.25	6	1
1:A:62:GLU:CB	1:A:63:GLN:OE1	0.67	2.43	1	1
1:A:41:TYR:OH	1:A:101:SER:HB3	0.67	1.89	8	1
1:A:64:MET:CE	1:A:152:VAL:CG2	0.67	2.73	9	2
1:A:20:LEU:C	1:A:21:ASP:OD1	0.67	2.33	11	1
1:A:24:LYS:HG2	1:A:24:LYS:O	0.67	1.88	11	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:139:SER:HA	0.67	1.66	7	1
1:A:53:PHE:HD1	1:A:54:MET:CG	0.67	2.01	12	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:32:PHE:CZ	0.67	2.24	2	1
1:A:21:ASP:O	1:A:22:LYS:HB2	0.67	1.89	2	3
1:A:76:GLU:HB2	1:A:79:ASN:ND2	0.67	2.03	12	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:CD1	0.67	2.83	10	2
1:A:48:ARG:CZ	1:A:49:VAL:O	0.67	2.43	11	1
1:A:80:GLY:C	1:A:81:LEU:HD12	0.67	2.11	4	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:166:PRO:HD2	0.67	2.12	8	2
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG23	0.67	1.90	2	1
1:A:90:MET:CB	1:A:123:ALA:HB3	0.66	2.18	1	9
1:A:59:GLY:HA2	1:A:102:GLN:OE1	0.66	1.90	11	1
1:A:48:ARG:HG3	1:A:151:ASN:O	0.66	1.87	11	1
1:A:50:ILE:HG13	1:A:51:PRO:HD2	0.66	1.65	11	1
1:A:135:ALA:O	1:A:139:SER:OG	0.66	2.09	7	1
1:A:70:ASN:OD1	1:A:70:ASN:O	0.66	2.11	8	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:115:HIS:NE2	0.66	2.05	9	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:58:GLY:O	0.66	2.48	10	2
1:A:73:ILE:HD13	1:A:98:SER:O	0.66	1.90	2	2
1:A:104:PHE:HZ	1:A:122:TYR:CD1	0.66	2.07	11	2
1:A:81:LEU:CD1	1:A:82:ARG:HH12	0.66	2.00	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:O	1:A:93:THR:HG23	0.66	1.89	2	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:120:PHE:CD1	0.66	2.84	11	3
1:A:113:LEU:HD23	1:A:122:TYR:HD1	0.66	1.50	5	1
1:A:155:LYS:HD2	1:A:155:LYS:N	0.66	2.05	5	1
1:A:46:PHE:CE2	1:A:159:ILE:HD11	0.66	2.26	5	2
1:A:33:VAL:O	1:A:37:ASN:CG	0.66	2.33	1	1
1:A:72:PRO:O	1:A:73:ILE:CG2	0.66	2.43	8	8
1:A:45:THR:CG2	1:A:158:VAL:HA	0.66	2.09	11	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:55:ILE:HG22	0.66	1.66	4	2
1:A:96:LYS:O	1:A:97:ASP:CG	0.66	2.34	5	2
1:A:83:ASN:OD1	1:A:87:THR:HG23	0.66	1.91	1	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:122:TYR:CD2	0.66	2.25	3	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:134:VAL:CG1	0.66	2.21	11	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:96:LYS:HZ2	0.66	1.85	2	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:C	0.66	2.32	10	6
1:A:40:PHE:O	1:A:41:TYR:CE1	0.66	2.49	3	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:ASN:ND2	0.66	2.29	4	1
1:A:92:ARG:CA	1:A:99:ALA:H	0.66	2.03	4	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CE1	0.66	2.49	11	1
1:A:85:ARG:CG	1:A:108:ALA:HA	0.66	2.21	11	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:HB3	0.66	1.67	12	1
1:A:67:LYS:NZ	1:A:102:GLN:OE1	0.66	2.27	9	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:99:ALA:HA	0.66	1.67	9	1
1:A:95:ASP:O	1:A:96:LYS:O	0.65	2.14	3	4
1:A:144:HIS:HD2	1:A:152:VAL:O	0.65	1.73	7	4
1:A:161:SER:OG	1:A:163:LYS:NZ	0.65	2.24	7	1
1:A:54:MET:HG2	1:A:55:ILE:H	0.65	1.50	7	1
1:A:48:ARG:NH2	1:A:141:VAL:HG23	0.65	2.06	4	1
1:A:129:VAL:C	1:A:130:LYS:HG2	0.65	2.11	5	2
1:A:144:HIS:O	1:A:144:HIS:CD2	0.65	2.48	9	5
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:CG	0.65	2.21	11	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:166:PRO:CD	0.65	2.15	4	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:114:ASP:N	0.65	2.06	5	2
1:A:41:TYR:CB	1:A:162:ALA:HB3	0.65	2.22	9	3
1:A:85:ARG:HB2	1:A:108:ALA:N	0.65	2.07	2	1
1:A:157:VAL:O	1:A:158:VAL:CG2	0.65	2.44	10	4
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:CA	0.65	2.44	11	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:LEU:HG	0.65	1.90	8	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ARG:O	0.65	2.14	8	1
1:A:150:GLN:C	1:A:151:ASN:OD1	0.65	2.35	2	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:CG2	0.65	2.43	2	5

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:PRO:O	1:A:53:PHE:N	0.65	2.29	4	12
1:A:85:ARG:CD	1:A:107:VAL:O	0.65	2.44	11	1
1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:CE	0.65	2.19	6	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:49:VAL:N	0.65	2.50	1	1
1:A:55:ILE:O	1:A:56:GLN:HG3	0.65	1.90	2	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:41:TYR:CE1	0.65	2.27	11	1
1:A:107:VAL:O	1:A:107:VAL:HG12	0.65	1.90	6	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:93:THR:N	0.65	2.06	6	3
1:A:75:ASN:O	1:A:76:GLU:CB	0.65	2.43	2	5
1:A:67:LYS:HZ3	1:A:102:GLN:CD	0.65	1.93	9	1
1:A:6:HIS:HE2	1:A:19:GLU:CD	0.65	1.94	5	2
1:A:50:ILE:HG21	1:A:54:MET:CE	0.65	2.21	10	3
1:A:48:ARG:HB2	1:A:56:GLN:HB2	0.65	1.69	3	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:54:MET:HG2	0.65	2.19	12	1
1:A:77:ALA:C	1:A:115:HIS:NE2	0.65	2.31	9	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:120:PHE:CD1	0.65	2.27	9	1
1:A:19:GLU:CD	1:A:127:LYS:CG	0.64	2.66	3	2
1:A:19:GLU:OE2	1:A:127:LYS:HG3	0.64	1.93	3	1
1:A:103:PHE:CD2	1:A:125:PHE:HZ	0.64	2.09	4	6
1:A:9:LEU:HD23	1:A:161:SER:C	0.64	2.12	7	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:115:HIS:NE2	0.64	2.60	9	1
1:A:90:MET:HE1	1:A:102:GLN:O	0.64	1.92	6	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:165:LEU:HD21	0.64	1.69	7	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:CD1	0.64	2.46	8	2
1:A:48:ARG:CZ	1:A:50:ILE:C	0.64	2.65	2	1
1:A:88:ILE:HD11	1:A:103:PHE:CD2	0.64	2.27	4	10
1:A:104:PHE:CD1	1:A:106:ASN:OD1	0.64	2.51	3	2
1:A:9:LEU:HG	1:A:162:ALA:CA	0.64	2.22	11	1
1:A:56:GLN:CA	1:A:104:PHE:CB	0.64	2.70	6	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:97:ASP:OD1	0.64	2.35	12	2
1:A:90:MET:HE3	1:A:99:ALA:CB	0.64	2.10	12	2
1:A:90:MET:CG	1:A:91:ALA:H	0.64	2.04	9	1
1:A:56:GLN:CB	1:A:103:PHE:O	0.64	2.46	11	3
1:A:89:ALA:HB3	1:A:104:PHE:CE1	0.64	2.27	3	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:134:VAL:HB	0.64	1.67	9	5
1:A:50:ILE:CG1	1:A:51:PRO:HD2	0.64	2.21	11	1
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:HG2	0.64	1.67	4	1
1:A:137:LYS:CA	1:A:140:GLN:HG2	0.64	2.22	1	2
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:HB2	0.64	1.91	9	2
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:HD2	0.64	1.92	8	1
1:A:48:ARG:HB3	1:A:56:GLN:CD	0.64	2.12	8	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HD13	1:A:163:LYS:O	0.64	1.93	9	1
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:LEU:HB3	0.64	2.12	10	1
1:A:71:PRO:O	1:A:72:PRO:O	0.64	2.16	9	7
1:A:32:PHE:CE2	1:A:36:VAL:HG21	0.64	2.27	4	4
1:A:17:GLU:CG	1:A:130:LYS:O	0.64	2.45	8	1
1:A:17:GLU:HB2	1:A:129:VAL:HG22	0.64	1.69	2	1
1:A:67:LYS:N	1:A:67:LYS:CD	0.64	2.44	7	2
1:A:16:ILE:C	1:A:17:GLU:HG3	0.64	2.12	11	6
1:A:47:HIS:N	1:A:47:HIS:ND1	0.64	2.46	7	5
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:H	0.64	1.53	5	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:54:MET:HG3	0.64	2.28	5	3
1:A:66:GLN:HA	1:A:66:GLN:NE2	0.64	2.08	1	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:GLU:OE2	0.64	2.10	5	1
1:A:133:ASP:O	1:A:136:ASP:HB2	0.64	1.93	12	6
1:A:67:LYS:HZ2	1:A:67:LYS:HA	0.64	1.53	1	1
1:A:70:ASN:CB	1:A:71:PRO:HD2	0.64	2.20	3	6
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:HB2	0.64	1.88	11	1
1:A:56:GLN:HG3	1:A:104:PHE:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:41:TYR:CE2	0.64	2.86	8	1
1:A:6:HIS:N	1:A:6:HIS:CD2	0.64	2.66	8	1
1:A:36:VAL:CA	1:A:41:TYR:HE2	0.63	2.06	9	2
1:A:136:ASP:HB3	1:A:140:GLN:OE1	0.63	1.93	7	1
1:A:19:GLU:OE2	1:A:20:LEU:N	0.63	2.32	1	2
1:A:137:LYS:HA	1:A:140:GLN:HG2	0.63	1.69	1	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:40:PHE:CB	0.63	2.22	8	1
1:A:146:VAL:HG12	1:A:147:GLY:H	0.63	1.51	9	3
1:A:88:ILE:HD13	1:A:103:PHE:CD1	0.63	2.28	7	2
1:A:48:ARG:NH2	1:A:141:VAL:CG2	0.63	2.62	4	1
1:A:56:GLN:HG3	1:A:104:PHE:CB	0.63	2.23	8	1
1:A:62:GLU:HG3	1:A:62:GLU:O	0.63	1.93	8	2
1:A:145:ASP:OD1	1:A:150:GLN:CG	0.63	2.44	10	2
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:N	0.63	2.45	7	1
1:A:54:MET:CG	1:A:55:ILE:H	0.63	2.06	7	1
1:A:128:VAL:CG1	1:A:130:LYS:O	0.63	2.47	6	1
1:A:24:LYS:HE3	1:A:24:LYS:CA	0.63	2.20	7	1
1:A:143:THR:HA	1:A:153:PRO:CA	0.63	2.23	9	2
1:A:17:GLU:CD	1:A:129:VAL:HG23	0.63	2.13	5	1
1:A:47:HIS:CG	1:A:48:ARG:N	0.63	2.66	12	9
1:A:89:ALA:HB2	1:A:124:VAL:HA	0.63	1.67	3	5
1:A:8:LEU:HG	1:A:17:GLU:HB2	0.63	1.71	4	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:122:TYR:CE1	0.63	2.28	5	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:HD22	1:A:96:LYS:HZ2	0.63	1.28	2	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:114:ASP:N	0.63	2.09	11	1
1:A:85:ARG:CG	1:A:108:ALA:CA	0.63	2.76	11	1
1:A:128:VAL:HG11	1:A:132:MET:HB2	0.63	1.70	4	2
1:A:68:LYS:H	1:A:69:PRO:HD2	0.63	1.54	2	1
1:A:37:ASN:OD1	1:A:38:SER:N	0.63	2.31	7	1
1:A:55:ILE:HD13	1:A:55:ILE:O	0.63	1.94	8	2
1:A:113:LEU:HG	1:A:122:TYR:CD1	0.63	2.29	8	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:88:ILE:CG2	0.63	2.18	2	1
1:A:49:VAL:O	1:A:50:ILE:CG1	0.63	2.46	2	1
1:A:78:ASP:CA	1:A:115:HIS:HD2	0.63	2.06	2	1
1:A:48:ARG:NE	1:A:151:ASN:HB2	0.63	2.08	11	1
1:A:82:ARG:CD	1:A:82:ARG:N	0.63	2.62	11	1
1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HE2	0.63	1.70	6	1
1:A:35:TYR:HB3	1:A:40:PHE:HD2	0.63	1.54	4	2
1:A:40:PHE:CZ	1:A:41:TYR:CD2	0.63	2.86	8	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:16:ILE:O	0.62	1.94	1	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:56:GLN:CD	0.62	2.67	8	1
1:A:90:MET:CG	1:A:99:ALA:HB1	0.62	2.23	8	2
1:A:145:ASP:O	1:A:146:VAL:HG22	0.62	1.93	12	6
1:A:6:HIS:CD2	1:A:19:GLU:CB	0.62	2.83	9	3
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:CG	0.62	2.65	6	1
1:A:8:LEU:O	1:A:163:LYS:N	0.62	2.32	7	5
1:A:92:ARG:CG	1:A:98:SER:OG	0.62	2.46	8	2
1:A:71:PRO:HD2	1:A:100:THR:CG2	0.62	2.22	1	2
1:A:17:GLU:OE2	1:A:129:VAL:HG21	0.62	1.94	4	1
1:A:44:THR:C	1:A:159:ILE:HB	0.62	2.14	8	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:7:VAL:O	0.62	1.93	9	1
1:A:85:ARG:HD3	1:A:107:VAL:O	0.62	1.95	11	1
1:A:96:LYS:HD2	1:A:97:ASP:N	0.62	2.08	10	1
1:A:115:HIS:NE2	1:A:120:PHE:CE1	0.62	2.68	11	2
1:A:24:LYS:O	1:A:24:LYS:HG3	0.62	1.95	10	3
1:A:9:LEU:HB2	1:A:16:ILE:HG13	0.62	1.71	7	2
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:LEU:HD13	0.62	2.09	1	1
1:A:41:TYR:O	1:A:44:THR:CG2	0.62	2.46	12	1
1:A:104:PHE:O	1:A:104:PHE:CD1	0.62	2.52	7	4
1:A:108:ALA:O	1:A:110:ASN:OD1	0.62	2.16	7	1
1:A:6:HIS:O	1:A:8:LEU:HD12	0.62	1.94	9	1
1:A:56:GLN:HE21	1:A:56:GLN:HA	0.62	1.55	10	1
1:A:53:PHE:C	1:A:107:VAL:HG22	0.62	2.15	9	6
1:A:66:GLN:O	1:A:67:LYS:O	0.62	2.17	7	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:CD1	1:A:46:PHE:HE2	0.62	2.08	7	1
1:A:48:ARG:O	1:A:56:GLN:HG2	0.62	1.94	4	1
1:A:90:MET:SD	1:A:99:ALA:CB	0.62	2.88	10	6
1:A:85:ARG:O	1:A:85:ARG:HG3	0.62	1.95	9	4
1:A:43:ASN:O	1:A:43:ASN:ND2	0.62	2.33	1	3
1:A:103:PHE:HD2	1:A:125:PHE:CZ	0.62	2.11	4	6
1:A:88:ILE:CD1	1:A:103:PHE:HB2	0.61	2.24	9	7
1:A:49:VAL:CG2	1:A:55:ILE:HG22	0.61	2.25	4	2
1:A:47:HIS:NE2	1:A:60:PHE:HD1	0.61	1.93	1	1
1:A:85:ARG:O	1:A:85:ARG:HG2	0.61	1.93	1	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:48:ARG:C	0.61	2.68	11	1
1:A:5:PRO:O	1:A:19:GLU:HG2	0.61	1.94	1	2
1:A:25:ALA:HB2	1:A:79:ASN:ND2	0.61	2.09	1	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:165:LEU:HD21	0.61	2.24	7	1
1:A:47:HIS:CE1	1:A:59:GLY:HA3	0.61	2.27	7	2
1:A:110:ASN:O	1:A:113:LEU:HD13	0.61	1.93	4	1
1:A:48:ARG:NH2	1:A:138:ILE:O	0.61	2.33	4	1
1:A:61:THR:O	1:A:61:THR:HG23	0.61	1.95	3	2
1:A:48:ARG:HA	1:A:48:ARG:NE	0.61	2.10	1	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:LEU:HD12	0.61	1.95	9	1
1:A:30:GLN:C	1:A:33:VAL:HG12	0.61	2.16	1	4
1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HG2	0.61	1.67	6	1
1:A:45:THR:O	1:A:46:PHE:CD2	0.61	2.54	9	2
1:A:56:GLN:CA	1:A:104:PHE:HA	0.61	2.25	6	2
1:A:7:VAL:O	1:A:17:GLU:CG	0.61	2.45	4	1
1:A:90:MET:CE	1:A:99:ALA:CB	0.61	2.68	12	2
1:A:107:VAL:HG13	1:A:132:MET:HE1	0.61	1.71	2	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:7:VAL:O	0.61	1.96	11	2
1:A:130:LYS:HA	1:A:130:LYS:CE	0.61	2.23	4	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:134:VAL:CG1	0.61	2.26	9	3
1:A:92:ARG:HG3	1:A:99:ALA:CA	0.61	2.25	9	1
1:A:41:TYR:HB2	1:A:162:ALA:HB3	0.61	1.71	5	5
1:A:16:ILE:HG23	1:A:134:VAL:HG11	0.61	1.72	1	7
1:A:35:TYR:CB	1:A:40:PHE:HD1	0.61	2.08	8	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:158:VAL:CA	0.61	2.11	11	2
1:A:24:LYS:NZ	1:A:80:GLY:O	0.61	2.30	6	1
1:A:67:LYS:CE	1:A:67:LYS:HA	0.61	2.18	10	2
1:A:151:ASN:O	1:A:152:VAL:CG2	0.61	2.49	8	10
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:CG	0.61	2.25	9	3
1:A:48:ARG:NH1	1:A:139:SER:HA	0.60	2.10	4	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:18:LEU:H	0.60	1.55	4	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:OE2	0.60	2.19	6	2
1:A:73:ILE:CG1	1:A:99:ALA:O	0.60	2.49	5	2
1:A:73:ILE:HG12	1:A:99:ALA:O	0.60	1.96	9	2
1:A:113:LEU:HD22	1:A:113:LEU:C	0.60	2.16	2	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:96:LYS:HZ1	0.60	1.78	2	1
1:A:76:GLU:CG	1:A:123:ALA:CB	0.60	2.77	3	1
1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:CD	0.60	2.09	11	1
1:A:71:PRO:CD	1:A:100:THR:HG22	0.60	2.25	7	2
1:A:53:PHE:C	1:A:54:MET:CG	0.60	2.69	2	3
1:A:24:LYS:O	1:A:24:LYS:HE2	0.60	1.94	7	1
1:A:71:PRO:CB	1:A:72:PRO:O	0.60	2.46	7	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:114:ASP:H	0.60	1.55	2	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:55:ILE:HA	0.60	2.25	2	1
1:A:19:GLU:O	1:A:126:GLY:CA	0.60	2.48	9	8
1:A:19:GLU:HG3	1:A:127:LYS:CB	0.60	2.15	3	2
1:A:76:GLU:CG	1:A:79:ASN:ND2	0.60	2.38	2	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:H	0.60	2.15	3	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:H	0.60	1.56	5	2
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:O	0.60	2.19	11	3
1:A:42:ASN:OD1	1:A:43:ASN:N	0.60	2.34	2	2
1:A:48:ARG:NH2	1:A:51:PRO:HG3	0.60	2.12	6	1
1:A:24:LYS:HD2	1:A:81:LEU:CD1	0.60	2.27	9	1
1:A:90:MET:HG3	1:A:91:ALA:H	0.60	1.55	9	1
1:A:8:LEU:CB	1:A:165:LEU:HD13	0.60	2.25	5	1
1:A:89:ALA:N	1:A:104:PHE:HB2	0.60	2.11	2	1
1:A:43:ASN:ND2	1:A:43:ASN:O	0.60	2.34	10	1
1:A:72:PRO:CG	1:A:100:THR:HG22	0.60	2.14	6	4
1:A:66:GLN:HA	1:A:66:GLN:HE21	0.60	1.55	1	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:159:ILE:HD12	0.60	1.97	3	8
1:A:55:ILE:O	1:A:105:ILE:N	0.60	2.34	6	8
1:A:61:THR:HG21	1:A:67:LYS:HE3	0.60	1.70	6	1
1:A:60:PHE:HB3	1:A:65:GLN:N	0.60	2.12	1	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:103:PHE:CZ	0.60	2.55	10	1
1:A:144:HIS:O	1:A:144:HIS:HD2	0.60	1.79	3	5
1:A:85:ARG:HG2	1:A:108:ALA:CA	0.60	2.26	11	1
1:A:132:MET:HB3	1:A:136:ASP:CG	0.60	2.16	7	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:126:GLY:HA2	0.60	1.73	12	5
1:A:48:ARG:HD3	1:A:143:THR:HG21	0.60	1.72	1	1
1:A:18:LEU:O	1:A:20:LEU:HD11	0.60	1.92	2	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:63:GLN:N	0.59	2.47	11	5
1:A:130:LYS:C	1:A:130:LYS:HE3	0.59	2.16	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:MET:HE3	1:A:152:VAL:HG21	0.59	1.72	2	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:166:PRO:N	0.59	2.12	11	2
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:N	0.59	2.35	2	2
1:A:65:GLN:OE1	1:A:65:GLN:HA	0.59	1.97	1	1
1:A:59:GLY:C	1:A:67:LYS:HE3	0.59	2.14	5	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:125:PHE:CE2	0.59	2.32	8	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:HG23	0.59	1.96	9	1
1:A:144:HIS:O	1:A:145:ASP:O	0.59	2.20	12	6
1:A:27:VAL:HG23	1:A:28:SER:H	0.59	1.58	11	2
1:A:87:THR:N	1:A:106:ASN:OD1	0.59	2.36	7	1
1:A:56:GLN:NE2	1:A:91:ALA:HB2	0.59	2.12	2	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:56:GLN:NE2	0.59	2.65	12	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:124:VAL:HG22	0.59	2.26	9	7
1:A:102:GLN:OE1	1:A:103:PHE:O	0.59	2.20	12	1
1:A:26:PRO:C	1:A:29:VAL:HG22	0.59	2.18	11	6
1:A:78:ASP:O	1:A:80:GLY:CA	0.59	2.46	6	1
1:A:132:MET:O	1:A:136:ASP:N	0.59	2.34	7	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:VAL:HG22	0.59	1.97	5	2
1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:NE2	0.59	2.59	2	1
1:A:86:GLY:O	1:A:128:VAL:N	0.59	2.35	1	8
1:A:18:LEU:CD1	1:A:127:LYS:O	0.59	2.50	1	3
1:A:53:PHE:O	1:A:54:MET:HG2	0.59	1.95	3	2
1:A:90:MET:SD	1:A:91:ALA:N	0.59	2.76	12	3
1:A:7:VAL:HG11	1:A:18:LEU:HB2	0.59	1.74	6	2
1:A:6:HIS:CE1	1:A:19:GLU:CB	0.59	2.86	8	1
1:A:144:HIS:CD2	1:A:153:PRO:O	0.59	2.56	12	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:120:PHE:CE1	0.59	2.55	9	1
1:A:85:ARG:HG3	1:A:85:ARG:O	0.59	1.98	3	2
1:A:73:ILE:O	1:A:98:SER:O	0.59	2.21	2	3
1:A:70:ASN:O	1:A:72:PRO:N	0.58	2.35	4	3
1:A:154:SER:C	1:A:156:PRO:HD3	0.58	2.13	1	2
1:A:7:VAL:HG22	1:A:9:LEU:CD1	0.58	2.28	11	5
1:A:42:ASN:O	1:A:42:ASN:OD1	0.58	2.21	12	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:125:PHE:CD2	0.58	2.33	11	2
1:A:48:ARG:NE	1:A:153:PRO:HB3	0.58	2.14	4	1
1:A:6:HIS:CE1	1:A:19:GLU:OE2	0.58	2.54	5	1
1:A:11:THR:HG21	1:A:46:PHE:CD1	0.58	2.33	2	1
1:A:9:LEU:N	1:A:16:ILE:O	0.58	2.36	5	1
1:A:57:GLY:O	1:A:103:PHE:CE1	0.58	2.56	12	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:THR:HG21	0.58	2.33	2	1
1:A:46:PHE:O	1:A:49:VAL:HG23	0.58	1.99	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:HIS:O	1:A:152:VAL:O	0.58	2.21	12	4
1:A:50:ILE:HG23	1:A:53:PHE:HB3	0.58	1.75	1	2
1:A:24:LYS:CE	1:A:24:LYS:HA	0.58	2.25	7	1
1:A:88:ILE:CG2	1:A:126:GLY:HA2	0.58	2.08	5	1
1:A:163:LYS:O	1:A:165:LEU:HD13	0.58	1.98	5	1
1:A:85:ARG:CB	1:A:109:ASP:OD1	0.58	2.51	12	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:93:THR:H	0.58	1.57	6	2
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:LEU:HD11	0.58	2.19	5	1
1:A:155:LYS:CD	1:A:155:LYS:N	0.58	2.67	5	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:115:HIS:HD2	0.58	1.91	9	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:122:TYR:HD2	0.58	2.10	3	1
1:A:34:ASP:O	1:A:38:SER:OG	0.58	2.16	3	1
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:O	0.58	2.22	7	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:61:THR:HA	0.58	1.74	9	2
1:A:60:PHE:HB3	1:A:64:MET:C	0.58	2.19	1	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:164:VAL:HG11	0.58	1.74	7	2
1:A:87:THR:O	1:A:106:ASN:CG	0.58	2.39	4	1
1:A:55:ILE:HD13	1:A:135:ALA:HB1	0.58	1.74	9	2
1:A:33:VAL:HG12	1:A:37:ASN:ND2	0.58	2.14	10	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:N	0.58	2.13	5	8
1:A:36:VAL:HG22	1:A:41:TYR:HE2	0.58	1.55	3	1
1:A:68:LYS:N	1:A:69:PRO:HD3	0.58	2.14	1	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:46:PHE:HE2	0.58	1.58	7	1
1:A:5:PRO:O	1:A:19:GLU:HA	0.58	1.98	7	3
1:A:90:MET:SD	1:A:90:MET:C	0.58	2.82	5	2
1:A:6:HIS:CE1	1:A:19:GLU:HG3	0.58	2.32	4	1
1:A:17:GLU:HG3	1:A:129:VAL:CG2	0.58	2.29	5	1
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ASP:N	0.57	2.34	11	5
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:CD1	0.57	2.92	2	5
1:A:106:ASN:O	1:A:107:VAL:HG13	0.57	1.98	2	7
1:A:93:THR:OG1	1:A:98:SER:HB3	0.57	1.99	1	1
1:A:54:MET:SD	1:A:54:MET:C	0.57	2.82	8	1
1:A:107:VAL:HA	1:A:132:MET:HE3	0.57	1.74	11	1
1:A:31:ASN:HD21	1:A:35:TYR:HE2	0.57	1.42	11	1
1:A:138:ILE:O	1:A:141:VAL:CG1	0.57	2.38	6	2
1:A:90:MET:CE	1:A:102:GLN:O	0.57	2.51	7	4
1:A:49:VAL:HG21	1:A:55:ILE:C	0.57	2.19	2	1
1:A:21:ASP:N	1:A:125:PHE:O	0.57	2.38	10	3
1:A:68:LYS:O	1:A:69:PRO:O	0.57	2.23	11	3
1:A:7:VAL:HG11	1:A:18:LEU:HD23	0.57	1.74	3	1
1:A:60:PHE:CB	1:A:64:MET:CA	0.57	2.68	1	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	0.57	1.57	2	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:105:ILE:HD11	0.57	2.27	10	8
1:A:50:ILE:C	1:A:50:ILE:HD13	0.57	2.20	5	2
1:A:35:TYR:HB3	1:A:40:PHE:CD2	0.57	2.34	4	3
1:A:78:ASP:CB	1:A:120:PHE:HE2	0.57	2.11	7	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:C	0.57	2.19	4	1
1:A:19:GLU:O	1:A:127:LYS:N	0.57	2.37	8	11
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD23	0.57	2.20	3	1
1:A:8:LEU:CG	1:A:17:GLU:CG	0.57	2.63	3	2
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:OG1	0.57	2.21	3	2
1:A:102:GLN:C	1:A:102:GLN:OE1	0.57	2.42	12	2
1:A:49:VAL:HG21	1:A:55:ILE:CG2	0.57	2.29	1	2
1:A:41:TYR:OH	1:A:101:SER:CB	0.57	2.53	8	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:55:ILE:CA	0.57	2.82	2	1
1:A:55:ILE:O	1:A:105:ILE:HB	0.57	2.00	11	4
1:A:13:ALA:CB	1:A:138:ILE:HG12	0.57	2.30	11	12
1:A:79:ASN:ND2	1:A:83:ASN:OD1	0.57	2.38	8	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:HB2	0.57	1.94	10	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:126:GLY:CA	0.57	2.29	12	3
1:A:93:THR:O	1:A:95:ASP:N	0.57	2.37	2	2
1:A:11:THR:HG22	1:A:159:ILE:CG1	0.57	2.14	3	1
1:A:155:LYS:O	1:A:157:VAL:N	0.57	2.38	10	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD23	0.57	2.19	11	2
1:A:63:GLN:O	1:A:64:MET:CB	0.57	2.52	1	6
1:A:23:GLN:OE1	1:A:23:GLN:HA	0.57	1.99	3	1
1:A:53:PHE:O	1:A:107:VAL:HG22	0.57	1.99	9	5
1:A:136:ASP:O	1:A:140:GLN:N	0.57	2.38	7	2
1:A:90:MET:O	1:A:123:ALA:N	0.57	2.37	1	2
1:A:113:LEU:CD2	1:A:113:LEU:O	0.57	2.52	8	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:55:ILE:CA	0.57	2.30	2	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:157:VAL:O	0.57	2.53	9	5
1:A:134:VAL:CG1	1:A:138:ILE:HD11	0.57	2.28	11	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:19:GLU:O	0.57	1.98	7	2
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:LEU:HD23	0.57	1.99	9	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:103:PHE:CD2	0.57	2.88	12	10
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD23	0.57	2.00	3	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:150:GLN:O	0.57	2.37	3	1
1:A:114:ASP:O	1:A:122:TYR:O	0.57	2.22	6	2
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:HB3	0.57	1.99	7	1
1:A:6:HIS:O	1:A:8:LEU:N	0.57	2.38	5	2
1:A:29:VAL:O	1:A:33:VAL:HG23	0.57	2.00	8	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:MET:O	1:A:104:PHE:HE2	0.57	1.82	9	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:55:ILE:HA	0.57	1.75	2	1
1:A:151:ASN:O	1:A:151:ASN:OD1	0.56	2.23	6	2
1:A:163:LYS:N	1:A:163:LYS:HD3	0.56	2.14	4	2
1:A:77:ALA:CB	1:A:92:ARG:HH11	0.56	2.12	7	1
1:A:112:PHE:O	1:A:113:LEU:HD13	0.56	1.96	12	1
1:A:67:LYS:C	1:A:68:LYS:HG2	0.56	2.20	9	1
1:A:17:GLU:CB	1:A:129:VAL:CG2	0.56	2.82	2	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD23	0.56	2.30	3	1
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ASN:OD1	0.56	2.23	7	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:77:ALA:N	0.56	2.38	4	1
1:A:90:MET:HE2	1:A:99:ALA:CA	0.56	2.31	4	1
1:A:76:GLU:HB3	1:A:123:ALA:CB	0.56	2.29	1	1
1:A:88:ILE:O	1:A:126:GLY:N	0.56	2.38	5	2
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:CZ	0.56	2.58	11	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:120:PHE:HA	0.56	2.34	11	2
1:A:100:THR:HG22	1:A:100:THR:O	0.56	2.01	11	1
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ASP:HB3	0.56	2.00	11	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:CD2	0.56	2.93	6	1
1:A:155:LYS:HG3	1:A:155:LYS:O	0.56	2.01	7	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:164:VAL:HG11	0.56	2.30	7	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:129:VAL:HG11	0.56	2.20	4	1
1:A:137:LYS:HZ2	1:A:141:VAL:CG1	0.56	2.12	2	1
1:A:137:LYS:HZ3	1:A:141:VAL:CG1	0.56	2.14	2	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:128:VAL:N	0.56	2.16	10	4
1:A:84:THR:CG2	1:A:109:ASP:OD1	0.56	2.53	4	2
1:A:92:ARG:NE	1:A:95:ASP:OD1	0.56	2.37	9	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:54:MET:HG2	0.56	1.70	10	1
1:A:129:VAL:O	1:A:130:LYS:HB2	0.56	2.00	3	4
1:A:71:PRO:CD	1:A:72:PRO:HA	0.56	2.30	8	1
1:A:48:ARG:HH22	1:A:50:ILE:C	0.56	1.96	2	1
1:A:54:MET:N	1:A:107:VAL:HB	0.56	2.16	6	1
1:A:35:TYR:CZ	1:A:69:PRO:HB3	0.56	2.35	7	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:41:TYR:CE2	0.56	2.93	8	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:129:VAL:HG11	0.56	2.00	4	1
1:A:88:ILE:HG23	1:A:126:GLY:C	0.56	2.20	2	3
1:A:90:MET:C	1:A:90:MET:SD	0.56	2.84	12	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:99:ALA:HA	0.56	1.77	9	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:N	0.56	2.16	5	1
1:A:54:MET:O	1:A:55:ILE:HG23	0.56	2.01	10	2
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:N	0.56	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:88:ILE:HD11	1:A:125:PHE:CZ	0.56	2.36	9	4
1:A:58:GLY:O	1:A:102:GLN:HG2	0.56	2.01	9	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:114:ASP:N	0.56	2.16	2	1
1:A:54:MET:O	1:A:55:ILE:CG2	0.56	2.54	10	2
1:A:126:GLY:O	1:A:127:LYS:HG2	0.56	1.98	3	3
1:A:6:HIS:NE2	1:A:19:GLU:CD	0.56	2.56	5	2
1:A:64:MET:HE1	1:A:152:VAL:CG2	0.56	2.29	9	2
1:A:90:MET:SD	1:A:125:PHE:CE1	0.56	2.99	2	1
1:A:19:GLU:N	1:A:127:LYS:O	0.55	2.38	5	3
1:A:83:ASN:OD1	1:A:111:ALA:CB	0.55	2.53	11	1
1:A:137:LYS:HA	1:A:140:GLN:CG	0.55	2.31	1	1
1:A:56:GLN:HG2	1:A:105:ILE:HG13	0.55	1.78	10	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:115:HIS:C	0.55	2.59	11	2
1:A:48:ARG:CD	1:A:49:VAL:CA	0.55	2.72	11	1
1:A:24:LYS:CE	1:A:24:LYS:O	0.55	2.54	7	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:104:PHE:HB3	0.55	2.01	5	1
1:A:15:ASN:ND2	1:A:17:GLU:OE1	0.55	2.39	9	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:41:TYR:CE1	0.55	2.95	2	1
1:A:78:ASP:N	1:A:115:HIS:CD2	0.55	2.73	2	1
1:A:19:GLU:CB	1:A:127:LYS:O	0.55	2.54	5	2
1:A:85:ARG:HA	1:A:106:ASN:HD21	0.55	1.55	7	1
1:A:34:ASP:OD2	1:A:35:TYR:CE2	0.55	2.60	7	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:92:ARG:NH1	0.55	2.69	7	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:105:ILE:HB	0.55	2.29	1	2
1:A:34:ASP:OD2	1:A:35:TYR:CZ	0.55	2.59	7	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:64:MET:SD	0.55	2.94	7	2
1:A:11:THR:HA	1:A:159:ILE:HA	0.55	1.77	3	9
1:A:49:VAL:HB	1:A:54:MET:O	0.55	2.01	2	2
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLN:CD	0.55	2.44	6	2
1:A:136:ASP:O	1:A:140:GLN:NE2	0.55	2.35	1	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:116:GLY:N	0.55	2.55	11	2
1:A:61:THR:CB	1:A:65:GLN:O	0.55	2.54	7	2
1:A:61:THR:CB	1:A:67:LYS:HZ2	0.55	2.15	10	1
1:A:55:ILE:O	1:A:56:GLN:CG	0.55	2.54	2	2
1:A:22:LYS:CG	1:A:23:GLN:N	0.55	2.68	7	1
1:A:35:TYR:CZ	1:A:69:PRO:CB	0.55	2.89	7	1
1:A:92:ARG:CD	1:A:93:THR:CA	0.55	2.84	5	1
1:A:106:ASN:O	1:A:107:VAL:CG1	0.55	2.54	2	8
1:A:135:ALA:O	1:A:139:SER:N	0.55	2.38	7	1
1:A:20:LEU:CA	1:A:125:PHE:O	0.55	2.49	9	1
1:A:8:LEU:CG	1:A:17:GLU:OE1	0.55	2.54	7	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:THR:H	0.55	1.61	4	2
1:A:56:GLN:CG	1:A:104:PHE:HB2	0.55	2.31	9	3
1:A:103:PHE:HB2	1:A:125:PHE:CE1	0.55	2.37	2	1
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:HG13	0.54	2.01	10	1
1:A:35:TYR:O	1:A:38:SER:OG	0.54	2.22	11	1
1:A:92:ARG:CA	1:A:102:GLN:OE1	0.54	2.55	5	1
1:A:35:TYR:HB2	1:A:40:PHE:HD1	0.54	1.62	8	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:55:ILE:HG12	0.54	1.77	8	1
1:A:64:MET:SD	1:A:149:TYR:CD2	0.54	3.00	2	1
1:A:40:PHE:O	1:A:40:PHE:CD2	0.54	2.60	3	1
1:A:29:VAL:CA	1:A:32:PHE:CD2	0.54	2.72	11	3
1:A:20:LEU:CD1	1:A:125:PHE:HE2	0.54	2.12	12	1
1:A:23:GLN:OE1	1:A:24:LYS:CB	0.54	2.52	10	1
1:A:83:ASN:CB	1:A:87:THR:HG21	0.54	2.31	10	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:160:LEU:HD12	0.54	2.18	3	4
1:A:55:ILE:HD13	1:A:55:ILE:C	0.54	2.22	8	2
1:A:113:LEU:CD1	1:A:113:LEU:H	0.54	2.11	8	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:41:TYR:CD2	0.54	2.95	8	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:ASN:CG	0.54	2.45	10	2
1:A:17:GLU:HG3	1:A:129:VAL:HG23	0.54	1.80	5	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:89:ALA:N	0.54	2.18	4	9
1:A:83:ASN:HB2	1:A:87:THR:HG21	0.54	1.79	12	2
1:A:17:GLU:HG3	1:A:17:GLU:O	0.54	2.02	5	1
1:A:24:LYS:HE2	1:A:81:LEU:HD11	0.54	1.76	9	1
1:A:53:PHE:HD1	1:A:108:ALA:HB3	0.54	1.63	2	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:55:ILE:O	0.54	2.00	11	1
1:A:27:VAL:O	1:A:30:GLN:HB3	0.54	2.02	8	2
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:HD22	0.54	2.02	5	1
1:A:6:HIS:ND1	1:A:19:GLU:HB3	0.54	2.18	8	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:97:ASP:OD1	0.54	2.56	12	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:HG22	0.54	2.03	2	1
1:A:162:ALA:C	1:A:163:LYS:HG3	0.54	2.23	9	2
1:A:90:MET:CA	1:A:123:ALA:HB3	0.54	2.33	9	4
1:A:143:THR:CA	1:A:154:SER:N	0.54	2.59	7	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:129:VAL:CG1	0.54	2.56	4	1
1:A:148:PRO:C	1:A:150:GLN:OE1	0.54	2.42	10	1
1:A:33:VAL:O	1:A:37:ASN:OD1	0.54	2.25	1	2
1:A:88:ILE:HD11	1:A:103:PHE:CG	0.54	2.37	8	7
1:A:76:GLU:OE2	1:A:79:ASN:ND2	0.54	2.40	6	1
1:A:8:LEU:CG	1:A:17:GLU:HB3	0.54	2.24	5	1
1:A:48:ARG:HB2	1:A:56:GLN:O	0.54	2.03	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD12	0.54	2.18	4	4
1:A:137:LYS:N	1:A:140:GLN:OE1	0.54	2.40	9	2
1:A:89:ALA:HB2	1:A:124:VAL:CG2	0.54	2.32	12	3
1:A:110:ASN:O	1:A:112:PHE:N	0.54	2.41	3	1
1:A:122:TYR:O	1:A:123:ALA:O	0.54	2.25	7	2
1:A:6:HIS:CD2	1:A:6:HIS:N	0.54	2.74	11	3
1:A:21:ASP:OD2	1:A:24:LYS:CG	0.54	2.56	2	1
1:A:18:LEU:HD21	1:A:105:ILE:HD13	0.54	1.79	2	1
1:A:144:HIS:C	1:A:144:HIS:CD2	0.53	2.81	3	5
1:A:98:SER:O	1:A:99:ALA:HB3	0.53	2.02	11	3
1:A:70:ASN:CA	1:A:100:THR:HG22	0.53	2.20	7	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:46:PHE:CE2	0.53	2.38	7	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:8:LEU:C	0.53	2.22	7	3
1:A:113:LEU:HD13	1:A:113:LEU:N	0.53	2.18	5	1
1:A:25:ALA:N	1:A:26:PRO:HD3	0.53	2.18	12	11
1:A:33:VAL:CG2	1:A:37:ASN:OD1	0.53	2.56	3	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:ASN:HB2	0.53	2.03	1	3
1:A:62:GLU:HG2	1:A:63:GLN:HG2	0.53	1.80	6	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:N	0.53	2.19	2	2
1:A:91:ALA:H	1:A:103:PHE:HA	0.53	1.62	7	1
1:A:45:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	0.53	1.81	9	1
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD22	0.53	2.18	3	1
1:A:150:GLN:O	1:A:151:ASN:HB2	0.53	2.03	11	4
1:A:88:ILE:CD1	1:A:103:PHE:CD1	0.53	2.91	11	2
1:A:88:ILE:CG1	1:A:125:PHE:CE1	0.53	2.92	7	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:137:LYS:NZ	0.53	2.41	4	1
1:A:75:ASN:H	1:A:97:ASP:HA	0.53	1.63	5	1
1:A:17:GLU:N	1:A:130:LYS:O	0.53	2.41	8	1
1:A:133:ASP:O	1:A:137:LYS:N	0.53	2.40	7	3
1:A:110:ASN:O	1:A:111:ALA:HB2	0.53	2.03	11	2
1:A:131:GLY:O	1:A:134:VAL:N	0.53	2.42	11	2
1:A:132:MET:O	1:A:135:ALA:HB3	0.53	2.03	5	5
1:A:125:PHE:O	1:A:125:PHE:CD2	0.53	2.61	1	2
1:A:41:TYR:C	1:A:44:THR:HG23	0.53	2.23	12	1
1:A:82:ARG:O	1:A:82:ARG:HG3	0.53	2.03	9	1
1:A:53:PHE:N	1:A:107:VAL:HG23	0.53	2.19	2	2
1:A:16:ILE:O	1:A:17:GLU:CG	0.53	2.57	11	5
1:A:19:GLU:C	1:A:20:LEU:HD12	0.53	2.24	9	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:50:ILE:O	0.53	2.50	4	1
1:A:93:THR:O	1:A:94:ALA:HB3	0.53	2.04	8	2
1:A:146:VAL:HG21	1:A:152:VAL:CB	0.53	2.33	6	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:HIS:C	1:A:48:ARG:HG2	0.53	2.19	6	1
1:A:80:GLY:C	1:A:81:LEU:HD13	0.53	2.20	6	1
1:A:48:ARG:HH12	1:A:139:SER:CA	0.53	2.15	4	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:15:ASN:N	0.53	2.18	4	1
1:A:47:HIS:HE1	1:A:56:GLN:O	0.53	1.87	2	1
1:A:78:ASP:HB3	1:A:115:HIS:NE2	0.53	2.13	2	1
1:A:141:VAL:O	1:A:142:PRO:O	0.53	2.27	5	8
1:A:70:ASN:CB	1:A:100:THR:HG21	0.53	2.33	7	1
1:A:17:GLU:CG	1:A:129:VAL:HG23	0.53	2.33	5	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:54:MET:HE2	0.53	1.79	10	2
1:A:11:THR:CG2	1:A:46:PHE:CE2	0.53	2.92	9	9
1:A:49:VAL:CG1	1:A:55:ILE:CA	0.53	2.87	6	1
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASN:HB2	0.53	2.03	6	1
1:A:28:SER:HA	1:A:73:ILE:HG13	0.53	1.79	7	1
1:A:76:GLU:O	1:A:92:ARG:CD	0.53	2.57	7	1
1:A:6:HIS:CE1	1:A:19:GLU:CG	0.53	2.84	4	1
1:A:42:ASN:OD1	1:A:42:ASN:O	0.52	2.27	10	3
1:A:20:LEU:CD2	1:A:32:PHE:CE2	0.52	2.93	9	3
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLN:CG	0.52	2.57	6	4
1:A:76:GLU:O	1:A:123:ALA:HB2	0.52	2.04	11	2
1:A:27:VAL:HG23	1:A:28:SER:N	0.52	2.20	11	2
1:A:55:ILE:O	1:A:105:ILE:O	0.52	2.27	1	1
1:A:83:ASN:HB2	1:A:87:THR:CG2	0.52	2.35	3	1
1:A:46:PHE:CE1	1:A:159:ILE:CD1	0.52	2.92	2	5
1:A:20:LEU:HD12	1:A:20:LEU:N	0.52	2.20	9	4
1:A:99:ALA:O	1:A:100:THR:HG23	0.52	2.05	4	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:54:MET:HE3	0.52	1.81	8	1
1:A:68:LYS:O	1:A:68:LYS:HG3	0.52	2.03	8	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:CB	0.52	2.56	12	1
1:A:90:MET:HG2	1:A:91:ALA:N	0.52	2.19	9	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:50:ILE:O	0.52	2.43	2	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:55:ILE:HG22	0.52	1.80	4	2
1:A:32:PHE:CE1	1:A:40:PHE:CZ	0.52	2.97	8	1
1:A:79:ASN:HD21	1:A:124:VAL:HB	0.52	1.65	3	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:17:GLU:CD	0.52	2.25	3	3
1:A:9:LEU:O	1:A:16:ILE:HG22	0.52	2.04	4	1
1:A:35:TYR:OH	1:A:71:PRO:HG3	0.52	2.05	1	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:134:VAL:N	0.52	2.41	8	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:GLN:HB2	0.52	2.04	10	2
1:A:54:MET:N	1:A:107:VAL:HG22	0.52	2.20	8	5
1:A:79:ASN:ND2	1:A:124:VAL:HB	0.52	2.19	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:HIS:NE2	1:A:120:PHE:CD1	0.52	2.78	11	1
1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:HD12	0.52	2.20	4	2
1:A:46:PHE:O	1:A:47:HIS:C	0.52	2.47	4	2
1:A:48:ARG:HB2	1:A:56:GLN:OE1	0.52	2.00	8	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:46:PHE:HZ	0.52	2.18	9	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:SER:OG	0.52	2.05	3	4
1:A:61:THR:OG1	1:A:65:GLN:O	0.52	2.26	7	1
1:A:63:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	0.52	2.05	4	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:20:LEU:N	0.52	2.20	8	1
1:A:56:GLN:HG3	1:A:105:ILE:HG13	0.52	1.77	10	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:CB	0.52	2.57	10	2
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD12	0.52	2.20	11	2
1:A:26:PRO:O	1:A:29:VAL:HG23	0.52	2.03	2	2
1:A:76:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	0.52	1.63	6	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:54:MET:CG	0.52	2.89	12	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:32:PHE:CE2	0.52	2.40	9	2
1:A:48:ARG:CD	1:A:49:VAL:HA	0.52	2.35	11	1
1:A:50:ILE:CD1	1:A:53:PHE:HD2	0.52	2.09	7	1
1:A:128:VAL:HG21	1:A:132:MET:SD	0.52	2.45	2	1
1:A:145:ASP:CG	1:A:150:GLN:HG3	0.52	2.23	10	1
1:A:88:ILE:HD11	1:A:125:PHE:HE1	0.52	1.65	7	1
1:A:22:LYS:HG3	1:A:23:GLN:H	0.52	1.62	7	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:46:PHE:HZ	0.52	2.08	7	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:120:PHE:CD2	0.52	2.40	4	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:125:PHE:HE2	0.52	2.17	5	4
1:A:6:HIS:CD2	1:A:19:GLU:HB2	0.52	2.40	9	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:HD22	0.51	2.21	2	4
1:A:85:ARG:O	1:A:85:ARG:CG	0.51	2.59	1	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:56:GLN:HG3	0.51	1.81	6	1
1:A:46:PHE:CE2	1:A:159:ILE:CD1	0.51	2.93	9	2
1:A:132:MET:O	1:A:136:ASP:OD1	0.51	2.27	8	5
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:CG	0.51	2.58	7	2
1:A:32:PHE:CE2	1:A:36:VAL:CG2	0.51	2.93	9	5
1:A:24:LYS:CE	1:A:24:LYS:CA	0.51	2.88	7	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:92:ARG:NH1	0.51	2.15	7	1
1:A:144:HIS:CD2	1:A:144:HIS:C	0.51	2.83	5	3
1:A:61:THR:HG21	1:A:67:LYS:HD2	0.51	1.74	2	1
1:A:150:GLN:OE1	1:A:150:GLN:HA	0.51	2.06	6	2
1:A:17:GLU:O	1:A:129:VAL:CG1	0.51	2.51	4	1
1:A:92:ARG:HA	1:A:99:ALA:N	0.51	2.15	4	1
1:A:66:GLN:HE21	1:A:66:GLN:CA	0.51	2.18	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:PRO:O	1:A:19:GLU:CG	0.51	2.51	5	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:HE1	0.51	1.82	8	1
1:A:29:VAL:O	1:A:32:PHE:CB	0.51	2.51	10	2
1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ASP:N	0.51	2.11	10	1
1:A:51:PRO:O	1:A:52:GLY:C	0.51	2.48	2	11
1:A:48:ARG:HB3	1:A:151:ASN:O	0.51	2.05	1	1
1:A:40:PHE:HE1	1:A:58:GLY:HA2	0.51	1.58	5	1
1:A:112:PHE:O	1:A:112:PHE:HD1	0.51	1.87	9	2
1:A:145:ASP:CG	1:A:150:GLN:HG2	0.51	2.23	9	1
1:A:150:GLN:O	1:A:151:ASN:CG	0.51	2.41	9	1
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD12	0.51	2.21	9	2
1:A:148:PRO:HG2	1:A:149:TYR:H	0.51	1.66	5	6
1:A:11:THR:CG2	1:A:46:PHE:CD1	0.51	2.93	2	2
1:A:75:ASN:HB3	1:A:92:ARG:NH2	0.51	2.21	7	1
1:A:72:PRO:HB3	1:A:98:SER:HB3	0.51	1.81	2	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:127:LYS:O	0.51	2.05	6	2
1:A:131:GLY:O	1:A:134:VAL:HB	0.51	2.05	5	3
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:CA	0.51	2.58	2	3
1:A:85:ARG:CG	1:A:108:ALA:C	0.51	2.79	11	1
1:A:96:LYS:C	1:A:97:ASP:OD1	0.51	2.44	6	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:HD22	0.51	2.21	7	1
1:A:71:PRO:HB2	1:A:72:PRO:CA	0.51	2.35	7	2
1:A:37:ASN:OD1	1:A:37:ASN:O	0.51	2.28	4	1
1:A:47:HIS:O	1:A:153:PRO:HD3	0.51	2.06	4	2
1:A:66:GLN:CA	1:A:66:GLN:NE2	0.51	2.74	1	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:99:ALA:H	0.51	1.66	9	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:18:LEU:O	0.51	2.06	2	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:128:VAL:HG22	0.50	1.83	11	2
1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:HD13	0.50	2.21	6	2
1:A:32:PHE:CD2	1:A:36:VAL:CG2	0.50	2.94	7	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:HB2	0.50	2.06	12	2
1:A:54:MET:HG3	1:A:54:MET:O	0.50	2.06	9	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:99:ALA:N	0.50	2.20	9	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.50	2.59	2	2
1:A:165:LEU:HB3	1:A:166:PRO:CD	0.50	2.34	6	1
1:A:70:ASN:CG	1:A:100:THR:HG21	0.50	2.27	7	1
1:A:136:ASP:CB	1:A:140:GLN:OE1	0.50	2.60	7	1
1:A:48:ARG:NH2	1:A:138:ILE:HG22	0.50	2.21	1	1
1:A:145:ASP:OD1	1:A:150:GLN:HA	0.50	2.06	10	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:N	0.50	2.21	3	5
1:A:55:ILE:C	1:A:56:GLN:HG3	0.50	2.26	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:PHE:CD2	1:A:125:PHE:CZ	0.50	2.99	6	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:122:TYR:CD2	0.50	2.95	1	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:131:GLY:O	0.50	2.07	1	2
1:A:70:ASN:N	1:A:71:PRO:CD	0.50	2.74	1	2
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.50	2.20	1	1
1:A:129:VAL:C	1:A:130:LYS:CG	0.50	2.77	5	2
1:A:102:GLN:OE1	1:A:103:PHE:CA	0.50	2.58	12	1
1:A:24:LYS:CG	1:A:24:LYS:O	0.50	2.59	10	1
1:A:56:GLN:HG3	1:A:104:PHE:CA	0.50	2.37	10	1
1:A:115:HIS:HB3	1:A:120:PHE:CB	0.50	2.08	9	1
1:A:90:MET:HG3	1:A:102:GLN:O	0.50	2.07	9	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:63:GLN:N	0.50	2.43	10	1
1:A:73:ILE:HD13	1:A:73:ILE:N	0.50	2.22	2	4
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:CG1	0.50	2.37	7	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:20:LEU:HD13	0.50	1.83	5	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:15:ASN:HD21	0.50	1.66	5	1
1:A:71:PRO:HD3	1:A:100:THR:CB	0.50	2.35	8	1
1:A:128:VAL:HG11	1:A:132:MET:N	0.50	2.22	9	1
1:A:59:GLY:O	1:A:67:LYS:HG2	0.50	2.07	9	1
1:A:48:ARG:HH22	1:A:51:PRO:N	0.50	1.81	2	1
1:A:47:HIS:NE2	1:A:48:ARG:CG	0.50	2.75	10	1
1:A:33:VAL:HG22	1:A:37:ASN:OD1	0.50	2.07	3	1
1:A:11:THR:OG1	1:A:138:ILE:HD11	0.50	2.06	6	2
1:A:76:GLU:CD	1:A:123:ALA:HB2	0.50	2.20	7	1
1:A:22:LYS:CG	1:A:23:GLN:H	0.50	2.20	7	1
1:A:84:THR:HG23	1:A:109:ASP:OD1	0.50	2.06	4	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:92:ARG:N	0.50	2.21	1	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:139:SER:HA	0.50	1.83	8	1
1:A:143:THR:C	1:A:154:SER:H	0.50	2.10	9	1
1:A:70:ASN:HB3	1:A:71:PRO:CD	0.50	2.34	3	6
1:A:10:THR:O	1:A:160:LEU:HG	0.50	2.06	3	3
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLN:HG2	0.50	2.07	6	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:55:ILE:CB	0.50	2.36	7	1
1:A:21:ASP:OD2	1:A:24:LYS:HB2	0.50	2.06	2	1
1:A:70:ASN:N	1:A:71:PRO:HD2	0.50	2.18	2	1
1:A:46:PHE:O	1:A:49:VAL:CG2	0.50	2.59	10	1
1:A:45:THR:HG21	1:A:157:VAL:O	0.50	2.07	11	1
1:A:76:GLU:CA	1:A:79:ASN:OD1	0.50	2.60	6	1
1:A:32:PHE:C	1:A:36:VAL:HG23	0.50	2.25	7	2
1:A:49:VAL:CG1	1:A:139:SER:HA	0.50	2.37	8	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:61:THR:O	0.50	2.60	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:CG2	1:A:41:TYR:HE2	0.50	2.20	3	1
1:A:41:TYR:HB2	1:A:162:ALA:CB	0.50	2.36	11	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:54:MET:SD	0.50	3.00	11	1
1:A:165:LEU:CB	1:A:166:PRO:HD3	0.50	2.34	6	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD22	0.50	2.27	8	2
1:A:106:ASN:HD22	1:A:110:ASN:HB2	0.50	1.65	2	1
1:A:61:THR:CB	1:A:62:GLU:OE2	0.50	2.59	2	1
1:A:146:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HB	0.49	1.83	9	3
1:A:57:GLY:N	1:A:103:PHE:O	0.49	2.45	4	3
1:A:9:LEU:CA	1:A:161:SER:O	0.49	2.57	7	1
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:O	0.49	2.65	5	2
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:SD	0.49	2.99	8	1
1:A:75:ASN:HB3	1:A:97:ASP:OD1	0.49	2.07	2	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:125:PHE:CE2	0.49	2.95	9	9
1:A:39:GLY:O	1:A:40:PHE:HB2	0.49	2.07	1	2
1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:ASP:N	0.49	2.22	2	1
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASN:CB	0.49	2.60	6	2
1:A:76:GLU:C	1:A:79:ASN:OD1	0.49	2.50	6	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:143:THR:CG2	0.49	2.37	1	1
1:A:56:GLN:HA	1:A:104:PHE:CA	0.49	2.37	6	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:18:LEU:H	0.49	2.19	4	2
1:A:19:GLU:HB3	1:A:129:VAL:HG22	0.49	1.84	7	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:50:ILE:C	0.49	2.28	4	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:153:PRO:HD3	0.49	2.36	1	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:HG2	0.49	2.02	12	2
1:A:103:PHE:C	1:A:103:PHE:CD1	0.49	2.85	12	9
1:A:16:ILE:C	1:A:17:GLU:CG	0.49	2.80	11	9
1:A:48:ARG:HD3	1:A:153:PRO:CD	0.49	2.38	4	1
1:A:15:ASN:C	1:A:16:ILE:HG23	0.49	2.28	5	5
1:A:56:GLN:CA	1:A:103:PHE:O	0.49	2.61	11	1
1:A:57:GLY:N	1:A:104:PHE:HA	0.49	2.18	4	2
1:A:61:THR:OG1	1:A:65:GLN:HB3	0.49	2.07	5	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:N	0.49	2.22	9	1
1:A:92:ARG:C	1:A:95:ASP:OD1	0.49	2.51	9	1
1:A:90:MET:HB2	1:A:123:ALA:HB1	0.49	1.81	2	1
1:A:111:ALA:H	1:A:113:LEU:CD1	0.49	2.19	2	1
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLN:HG3	0.49	2.07	2	1
1:A:132:MET:HA	1:A:135:ALA:HB3	0.49	1.83	11	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:127:LYS:N	0.49	2.23	1	4
1:A:93:THR:O	1:A:94:ALA:HB2	0.49	2.07	4	2
1:A:88:ILE:HD11	1:A:125:PHE:CE1	0.49	2.43	7	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:MET:CB	1:A:106:ASN:HA	0.49	2.37	4	1
1:A:106:ASN:ND2	1:A:110:ASN:OD1	0.49	2.45	2	1
1:A:104:PHE:HD1	1:A:106:ASN:OD1	0.49	1.91	5	2
1:A:18:LEU:CB	1:A:20:LEU:HD11	0.49	2.38	7	1
1:A:125:PHE:CD2	1:A:125:PHE:O	0.49	2.65	4	2
1:A:47:HIS:HB2	1:A:56:GLN:HG3	0.49	1.84	4	1
1:A:63:GLN:O	1:A:64:MET:HB3	0.49	2.08	1	1
1:A:70:ASN:O	1:A:70:ASN:ND2	0.49	2.46	1	1
1:A:155:LYS:H	1:A:155:LYS:CD	0.49	2.21	5	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:GLN:HB3	0.49	2.07	12	1
1:A:88:ILE:CG2	1:A:127:LYS:N	0.49	2.76	10	12
1:A:9:LEU:HD12	1:A:9:LEU:N	0.49	2.23	3	3
1:A:33:VAL:O	1:A:37:ASN:N	0.49	2.38	4	8
1:A:126:GLY:C	1:A:127:LYS:CG	0.49	2.67	11	2
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:LEU:CD1	0.49	2.14	1	2
1:A:56:GLN:CG	1:A:104:PHE:CB	0.49	2.91	5	4
1:A:87:THR:HG23	1:A:127:LYS:HZ1	0.49	1.61	5	1
1:A:11:THR:HG21	1:A:46:PHE:CZ	0.49	2.42	8	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:125:PHE:CE2	0.49	2.95	8	1
1:A:71:PRO:HD2	1:A:72:PRO:HA	0.49	1.85	8	1
1:A:31:ASN:C	1:A:34:ASP:OD2	0.49	2.50	9	1
1:A:41:TYR:HB3	1:A:162:ALA:CB	0.49	2.38	2	2
1:A:41:TYR:O	1:A:43:ASN:N	0.48	2.46	6	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:CA	0.48	2.76	7	1
1:A:44:THR:CA	1:A:62:GLU:OE2	0.48	2.59	7	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:143:THR:CG2	0.48	2.89	1	1
1:A:110:ASN:O	1:A:111:ALA:HB3	0.48	2.08	8	3
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:HE2	0.48	2.07	10	1
1:A:40:PHE:O	1:A:44:THR:CG2	0.48	2.57	7	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:32:PHE:CE2	0.48	2.95	2	1
1:A:72:PRO:C	1:A:73:ILE:HG23	0.48	2.28	8	9
1:A:50:ILE:HG23	1:A:51:PRO:HD2	0.48	1.85	2	2
1:A:101:SER:O	1:A:102:GLN:HB2	0.48	2.09	12	2
1:A:77:ALA:O	1:A:115:HIS:HD2	0.48	1.91	8	1
1:A:85:ARG:HB2	1:A:109:ASP:N	0.48	2.23	12	1
1:A:54:MET:CA	1:A:107:VAL:HG22	0.48	2.38	8	3
1:A:16:ILE:CG2	1:A:134:VAL:CG1	0.48	2.92	9	7
1:A:150:GLN:H	1:A:150:GLN:CD	0.48	2.12	5	1
1:A:70:ASN:N	1:A:100:THR:HG21	0.48	2.23	8	1
1:A:90:MET:HB3	1:A:123:ALA:HB1	0.48	1.86	10	1
1:A:146:VAL:CG2	1:A:152:VAL:CB	0.48	2.91	9	6

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:LYS:CD	1:A:163:LYS:N	0.48	2.77	4	1
1:A:47:HIS:ND1	1:A:56:GLN:OE1	0.48	2.46	1	1
1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CD	0.48	2.76	1	1
1:A:6:HIS:CB	1:A:165:LEU:O	0.48	2.52	5	1
1:A:24:LYS:HD2	1:A:24:LYS:N	0.48	2.24	12	1
1:A:123:ALA:C	1:A:124:VAL:HG23	0.48	2.28	11	10
1:A:68:LYS:N	1:A:69:PRO:HD2	0.48	2.22	7	2
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:N	0.48	2.23	5	1
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD23	0.48	2.22	10	1
1:A:127:LYS:O	1:A:128:VAL:CG2	0.48	2.62	11	3
1:A:120:PHE:HD1	1:A:121:GLY:N	0.48	2.07	1	1
1:A:59:GLY:CA	1:A:67:LYS:CD	0.48	2.59	9	2
1:A:54:MET:C	1:A:55:ILE:HG23	0.48	2.29	10	3
1:A:13:ALA:CB	1:A:138:ILE:CG1	0.48	2.91	8	12
1:A:93:THR:O	1:A:94:ALA:C	0.48	2.51	11	1
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:C	0.48	2.52	6	3
1:A:14:GLY:O	1:A:134:VAL:HG11	0.48	2.09	7	1
1:A:43:ASN:HD21	1:A:158:VAL:HG13	0.48	1.69	7	1
1:A:68:LYS:HB3	1:A:69:PRO:HD2	0.48	1.80	7	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:96:LYS:CA	0.48	2.62	7	1
1:A:11:THR:CG2	1:A:46:PHE:CD2	0.48	2.97	9	2
1:A:8:LEU:HA	1:A:17:GLU:CB	0.48	2.39	5	1
1:A:49:VAL:C	1:A:50:ILE:HG13	0.48	2.29	2	1
1:A:29:VAL:HG23	1:A:30:GLN:N	0.47	2.24	3	9
1:A:29:VAL:CB	1:A:32:PHE:CE2	0.47	2.95	11	1
1:A:89:ALA:H	1:A:104:PHE:HB2	0.47	1.68	2	2
1:A:88:ILE:HG13	1:A:125:PHE:CE1	0.47	2.44	7	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:THR:N	0.47	2.24	4	2
1:A:49:VAL:CG2	1:A:55:ILE:CG2	0.47	2.92	1	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:HA	0.47	1.86	1	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:PHE:HE2	0.47	1.92	2	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:32:PHE:CE2	0.47	2.43	2	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:32:PHE:HZ	0.47	1.68	2	1
1:A:45:THR:C	1:A:46:PHE:HD1	0.47	2.12	10	1
1:A:21:ASP:OD2	1:A:81:LEU:HG	0.47	2.09	3	1
1:A:104:PHE:CZ	1:A:122:TYR:CD1	0.47	2.97	11	1
1:A:24:LYS:O	1:A:24:LYS:CG	0.47	2.60	11	1
1:A:98:SER:CB	1:A:99:ALA:O	0.47	2.54	4	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:58:GLY:HA2	0.47	2.44	5	1
1:A:35:TYR:HB3	1:A:40:PHE:HA	0.47	1.85	8	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:GLU:HG3	0.47	2.09	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:C	1:A:76:GLU:HG3	0.47	2.30	7	1
1:A:64:MET:HG3	1:A:64:MET:O	0.47	2.09	1	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:131:GLY:HA3	0.47	1.85	5	1
1:A:22:LYS:CA	1:A:29:VAL:HG11	0.47	2.27	8	2
1:A:88:ILE:CG2	1:A:127:LYS:H	0.47	2.22	1	2
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:C	0.47	2.53	6	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:CG	0.47	2.14	1	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:73:ILE:HG22	0.47	2.05	1	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:17:GLU:CG	0.47	2.06	1	1
1:A:87:THR:HG23	1:A:127:LYS:NZ	0.47	2.20	5	1
1:A:72:PRO:CB	1:A:98:SER:O	0.47	2.60	12	1
1:A:44:THR:C	1:A:45:THR:HG23	0.47	2.30	5	12
1:A:138:ILE:HG23	1:A:157:VAL:HG21	0.47	1.86	3	2
1:A:80:GLY:C	1:A:81:LEU:HG	0.47	2.29	11	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:20:LEU:HD22	0.47	2.39	7	1
1:A:33:VAL:HA	1:A:36:VAL:CB	0.47	2.39	7	1
1:A:47:HIS:NE2	1:A:60:PHE:N	0.47	2.62	1	1
1:A:31:ASN:HA	1:A:34:ASP:CG	0.47	2.28	8	1
1:A:151:ASN:C	1:A:152:VAL:HG23	0.47	2.29	8	7
1:A:113:LEU:HB2	1:A:122:TYR:HD2	0.47	1.70	11	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:142:PRO:HD2	0.47	1.85	11	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:HE3	0.47	2.39	11	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:55:ILE:HG22	0.47	2.24	2	1
1:A:78:ASP:CA	1:A:115:HIS:CD2	0.47	2.92	2	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:HA	0.47	2.44	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:134:VAL:CB	0.47	2.93	2	9
1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:LYS:N	0.47	2.25	3	3
1:A:146:VAL:CG2	1:A:152:VAL:CG2	0.47	2.92	1	9
1:A:145:ASP:O	1:A:146:VAL:CG2	0.47	2.63	12	6
1:A:85:ARG:CG	1:A:109:ASP:N	0.47	2.77	11	1
1:A:153:PRO:HB2	1:A:155:LYS:O	0.47	2.08	6	1
1:A:50:ILE:O	1:A:54:MET:O	0.47	2.32	6	1
1:A:73:ILE:C	1:A:97:ASP:HB3	0.47	2.27	4	1
1:A:135:ALA:O	1:A:138:ILE:HB	0.47	2.10	9	3
1:A:113:LEU:CG	1:A:122:TYR:CD1	0.47	2.96	8	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:54:MET:HE1	0.47	2.36	8	1
1:A:65:GLN:O	1:A:66:GLN:C	0.47	2.53	2	7
1:A:102:GLN:CD	1:A:102:GLN:H	0.47	2.12	11	1
1:A:12:SER:OG	1:A:157:VAL:HA	0.47	2.10	8	1
1:A:13:ALA:HB3	1:A:138:ILE:HD11	0.47	1.87	8	1
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:NE2	0.47	2.25	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ARG:HA	1:A:92:ARG:NE	0.47	2.25	8	1
1:A:24:LYS:HD3	1:A:81:LEU:HD11	0.47	1.78	9	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:N	0.47	2.78	3	8
1:A:68:LYS:CB	1:A:69:PRO:HD3	0.47	2.27	7	1
1:A:145:ASP:CG	1:A:150:GLN:OE1	0.47	2.53	12	1
1:A:110:ASN:O	1:A:112:PHE:CE2	0.47	2.67	10	2
1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:CZ	0.47	2.25	1	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:61:THR:O	0.47	2.10	9	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:9:LEU:CD1	0.46	2.93	3	4
1:A:154:SER:OG	1:A:155:LYS:CD	0.46	2.63	5	1
1:A:88:ILE:HB	1:A:104:PHE:O	0.46	2.10	2	1
1:A:157:VAL:C	1:A:158:VAL:HG23	0.46	2.31	12	4
1:A:40:PHE:C	1:A:41:TYR:CG	0.46	2.89	3	1
1:A:76:GLU:CD	1:A:123:ALA:HB1	0.46	2.29	11	1
1:A:107:VAL:O	1:A:108:ALA:HB2	0.46	2.09	6	2
1:A:9:LEU:O	1:A:16:ILE:N	0.46	2.48	1	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:56:GLN:HE21	0.46	2.23	12	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:54:MET:SD	0.46	3.08	12	1
1:A:19:GLU:CG	1:A:127:LYS:CA	0.46	2.83	3	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:153:PRO:HB3	0.46	1.83	6	2
1:A:106:ASN:O	1:A:132:MET:HE3	0.46	2.08	7	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:ASN:CG	0.46	2.53	4	1
1:A:47:HIS:NE2	1:A:48:ARG:HG3	0.46	2.26	5	2
1:A:88:ILE:CD1	1:A:103:PHE:CG	0.46	2.99	8	2
1:A:23:GLN:HG3	1:A:24:LYS:CD	0.46	2.38	12	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:46:PHE:CZ	0.46	2.98	9	1
1:A:35:TYR:CE2	1:A:100:THR:O	0.46	2.68	2	1
1:A:48:ARG:NH2	1:A:50:ILE:O	0.46	2.48	2	1
1:A:73:ILE:O	1:A:74:LYS:C	0.46	2.53	2	1
1:A:88:ILE:CB	1:A:104:PHE:O	0.46	2.64	2	1
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:LEU:HB3	0.46	1.68	3	1
1:A:75:ASN:HB3	1:A:92:ARG:HH22	0.46	1.69	7	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:139:SER:HB3	0.46	1.86	5	1
1:A:23:GLN:NE2	1:A:24:LYS:HE2	0.46	2.25	5	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HD23	0.46	1.87	8	1
1:A:71:PRO:N	1:A:72:PRO:HA	0.46	2.25	8	1
1:A:84:THR:O	1:A:85:ARG:C	0.46	2.53	3	6
1:A:19:GLU:OE1	1:A:127:LYS:CB	0.46	2.59	11	2
1:A:113:LEU:HB2	1:A:122:TYR:CD2	0.46	2.45	11	1
1:A:104:PHE:CE1	1:A:122:TYR:HB3	0.46	2.46	11	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:35:TYR:CD2	0.46	2.68	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:VAL:HG13	1:A:131:GLY:HA2	0.46	1.86	9	1
1:A:106:ASN:C	1:A:107:VAL:HG13	0.46	2.30	2	8
1:A:49:VAL:CG1	1:A:54:MET:C	0.46	2.84	6	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:103:PHE:C	0.46	2.87	8	3
1:A:105:ILE:HG22	1:A:132:MET:HE1	0.46	1.87	8	2
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:CA	0.46	2.39	5	1
1:A:40:PHE:C	1:A:41:TYR:CD1	0.46	2.89	8	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:63:GLN:HG2	0.46	2.09	10	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:89:ALA:O	0.46	2.64	11	1
1:A:56:GLN:CA	1:A:104:PHE:CA	0.46	2.88	6	1
1:A:163:LYS:N	1:A:163:LYS:CD	0.46	2.79	11	1
1:A:50:ILE:HD12	1:A:54:MET:HE2	0.46	1.88	9	1
1:A:91:ALA:HA	1:A:104:PHE:HE1	0.46	1.71	2	1
1:A:107:VAL:HG23	1:A:108:ALA:N	0.46	2.26	5	5
1:A:16:ILE:C	1:A:17:GLU:HG2	0.46	2.31	7	3
1:A:48:ARG:C	1:A:49:VAL:HG23	0.46	2.30	8	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:55:ILE:HA	0.46	1.83	2	1
1:A:53:PHE:O	1:A:53:PHE:CD1	0.46	2.69	6	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:20:LEU:HD22	0.46	1.88	7	1
1:A:23:GLN:HG3	1:A:24:LYS:N	0.46	2.26	2	2
1:A:101:SER:H	1:A:102:GLN:NE2	0.46	2.08	4	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:54:MET:CE	0.46	2.81	5	1
1:A:35:TYR:HB2	1:A:40:PHE:CD1	0.46	2.45	8	1
1:A:89:ALA:HB1	1:A:124:VAL:N	0.45	2.27	3	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:20:LEU:CD2	0.45	2.94	7	1
1:A:157:VAL:HG12	1:A:158:VAL:N	0.45	2.26	1	4
1:A:88:ILE:N	1:A:126:GLY:HA3	0.45	2.26	5	1
1:A:75:ASN:H	1:A:97:ASP:CG	0.45	2.15	12	1
1:A:103:PHE:HB2	1:A:125:PHE:HE1	0.45	1.71	2	1
1:A:137:LYS:HZ2	1:A:141:VAL:HG11	0.45	1.65	2	1
1:A:115:HIS:CB	1:A:121:GLY:HA3	0.45	2.39	10	1
1:A:61:THR:HB	1:A:67:LYS:HZ2	0.45	1.61	10	1
1:A:127:LYS:C	1:A:128:VAL:HG23	0.45	2.31	11	4
1:A:163:LYS:O	1:A:163:LYS:HG3	0.45	2.11	2	2
1:A:56:GLN:CD	1:A:104:PHE:CG	0.45	2.90	2	1
1:A:83:ASN:HB3	1:A:87:THR:CG2	0.45	2.38	10	1
1:A:53:PHE:H	1:A:107:VAL:HG23	0.45	1.71	3	2
1:A:47:HIS:ND1	1:A:47:HIS:N	0.45	2.64	5	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:54:MET:C	0.45	2.32	11	1
1:A:43:ASN:ND2	1:A:158:VAL:HG13	0.45	2.26	7	1
1:A:48:ARG:HD2	1:A:153:PRO:N	0.45	2.26	1	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HG23	1:A:20:LEU:CD1	0.45	2.41	5	1
1:A:89:ALA:HB3	1:A:104:PHE:CD1	0.45	2.47	11	1
1:A:78:ASP:CG	1:A:120:PHE:HE2	0.45	2.15	7	1
1:A:60:PHE:O	1:A:62:GLU:N	0.45	2.50	7	1
1:A:73:ILE:C	1:A:73:ILE:HD12	0.45	2.32	8	1
1:A:48:ARG:O	1:A:49:VAL:CG1	0.45	2.65	9	1
1:A:48:ARG:C	1:A:49:VAL:HG13	0.45	2.32	9	1
1:A:37:ASN:O	1:A:38:SER:O	0.45	2.35	12	3
1:A:83:ASN:CB	1:A:87:THR:CG2	0.45	2.94	3	1
1:A:12:SER:OG	1:A:157:VAL:HG13	0.45	2.11	7	2
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:CA	0.45	2.42	5	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:CG2	0.45	2.41	2	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:29:VAL:HG21	0.45	1.89	10	1
1:A:73:ILE:O	1:A:74:LYS:O	0.45	2.35	2	2
1:A:50:ILE:HD13	1:A:51:PRO:O	0.45	2.12	5	2
1:A:36:VAL:HA	1:A:41:TYR:CE1	0.45	2.47	11	1
1:A:85:ARG:HB3	1:A:109:ASP:N	0.45	2.27	6	1
1:A:47:HIS:ND1	1:A:59:GLY:HA3	0.45	2.26	7	1
1:A:6:HIS:CE1	1:A:129:VAL:CG2	0.45	2.98	9	2
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:HD2	0.45	2.34	1	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:46:PHE:HZ	0.45	1.69	9	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HG3	0.45	1.84	6	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:120:PHE:CE1	0.45	3.05	7	1
1:A:113:LEU:H	1:A:113:LEU:HD12	0.45	1.69	4	1
1:A:45:THR:C	1:A:159:ILE:HG13	0.45	2.32	8	1
1:A:90:MET:CG	1:A:125:PHE:CD1	0.45	2.93	2	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:50:ILE:H	0.45	2.10	2	1
1:A:85:ARG:CB	1:A:108:ALA:H	0.45	2.20	2	1
1:A:9:LEU:HA	1:A:162:ALA:HA	0.45	1.89	6	2
1:A:127:LYS:O	1:A:128:VAL:HG23	0.45	2.12	11	2
1:A:24:LYS:CD	1:A:79:ASN:CA	0.45	2.94	11	1
1:A:107:VAL:O	1:A:107:VAL:CG1	0.45	2.62	6	1
1:A:68:LYS:CE	1:A:68:LYS:HA	0.45	2.41	6	1
1:A:90:MET:O	1:A:104:PHE:CE2	0.45	2.68	9	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:124:VAL:CG2	0.45	2.95	3	5
1:A:95:ASP:HA	1:A:98:SER:HB2	0.45	1.89	6	1
1:A:76:GLU:OE1	1:A:90:MET:HB3	0.45	2.12	7	1
1:A:120:PHE:C	1:A:120:PHE:CD1	0.45	2.90	1	1
1:A:67:LYS:CE	1:A:67:LYS:CA	0.44	2.92	10	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:74:LYS:N	0.44	2.28	3	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LEU:HG	0.44	2.12	11	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ALA:HB3	1:A:102:GLN:CG	0.44	2.39	7	1
1:A:88:ILE:HG23	1:A:127:LYS:N	0.44	2.27	8	2
1:A:74:LYS:O	1:A:74:LYS:HE3	0.44	2.11	1	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:127:LYS:H	0.44	1.71	1	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:122:TYR:HE1	0.44	1.66	5	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:GLN:CB	0.44	2.64	8	1
1:A:82:ARG:C	1:A:83:ASN:OD1	0.44	2.55	12	1
1:A:82:ARG:O	1:A:82:ARG:CZ	0.44	2.62	12	1
1:A:75:ASN:N	1:A:97:ASP:HA	0.44	2.27	2	1
1:A:8:LEU:HA	1:A:16:ILE:O	0.44	2.12	3	1
1:A:50:ILE:HG22	1:A:54:MET:HE3	0.44	1.87	11	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD11	0.44	1.87	11	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:50:ILE:N	0.44	2.27	6	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:139:SER:OG	0.44	2.11	7	1
1:A:23:GLN:CG	1:A:24:LYS:HD2	0.44	2.39	12	1
1:A:80:GLY:H	1:A:81:LEU:HD12	0.44	1.72	9	1
1:A:21:ASP:OD2	1:A:24:LYS:HG2	0.44	2.12	2	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:135:ALA:CB	0.44	2.30	10	1
1:A:91:ALA:C	1:A:102:GLN:HE22	0.44	2.15	3	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ALA:CB	0.44	2.65	11	1
1:A:146:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG23	0.44	1.87	6	1
1:A:6:HIS:HA	1:A:19:GLU:HA	0.44	1.89	9	2
1:A:53:PHE:HE1	1:A:110:ASN:ND2	0.44	2.11	8	1
1:A:146:VAL:H	1:A:150:GLN:HA	0.44	1.72	2	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:76:GLU:OE2	0.44	2.35	2	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:122:TYR:HD2	0.44	1.67	7	1
1:A:90:MET:O	1:A:91:ALA:O	0.44	2.35	4	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:ARG:CZ	0.44	2.93	1	1
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:ALA:N	0.44	2.27	5	2
1:A:35:TYR:CB	1:A:40:PHE:CD1	0.44	2.97	8	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:126:GLY:HA3	0.44	1.89	10	1
1:A:63:GLN:C	1:A:64:MET:CG	0.44	2.60	10	3
1:A:24:LYS:CE	1:A:79:ASN:O	0.44	2.65	11	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:120:PHE:HE1	0.44	1.67	6	1
1:A:12:SER:N	1:A:158:VAL:O	0.44	2.50	7	2
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD22	0.44	2.12	8	1
1:A:150:GLN:O	1:A:151:ASN:CB	0.44	2.65	11	2
1:A:71:PRO:CB	1:A:72:PRO:CA	0.44	2.95	8	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:104:PHE:N	0.44	2.27	2	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:32:PHE:CZ	0.44	2.98	2	1
1:A:72:PRO:CB	1:A:98:SER:HB3	0.44	2.41	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:GLN:O	1:A:151:ASN:HB3	0.44	2.13	10	2
1:A:104:PHE:HZ	1:A:122:TYR:CG	0.44	2.30	11	1
1:A:48:ARG:HA	1:A:48:ARG:HE	0.44	1.70	1	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:62:GLU:O	0.44	2.66	8	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:120:PHE:HD1	0.44	2.11	10	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:54:MET:HE1	0.44	2.48	3	3
1:A:99:ALA:HA	1:A:102:GLN:OE1	0.44	2.12	4	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:PRO:O	0.44	2.13	4	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:115:HIS:N	0.44	2.66	9	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:105:ILE:CD1	0.44	2.94	2	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:58:GLY:O	0.44	2.71	10	1
1:A:143:THR:HB	1:A:144:HIS:H	0.44	1.31	9	6
1:A:36:VAL:CG1	1:A:164:VAL:CG1	0.44	2.95	7	1
1:A:55:ILE:N	1:A:105:ILE:O	0.44	2.51	4	1
1:A:150:GLN:O	1:A:152:VAL:HG23	0.44	2.13	8	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:134:VAL:HG11	0.44	2.42	8	1
1:A:148:PRO:O	1:A:149:TYR:CE1	0.44	2.67	2	1
1:A:43:ASN:CG	1:A:43:ASN:O	0.43	2.56	10	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:O	0.43	2.66	8	2
1:A:54:MET:HA	1:A:107:VAL:HG23	0.43	1.89	6	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:165:LEU:HD21	0.43	1.87	7	1
1:A:98:SER:OG	1:A:100:THR:HG23	0.43	2.13	4	1
1:A:48:ARG:NE	1:A:48:ARG:CA	0.43	2.81	1	1
1:A:31:ASN:ND2	1:A:73:ILE:HG21	0.43	2.28	8	1
1:A:29:VAL:O	1:A:32:PHE:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:61:THR:O	1:A:62:GLU:HB2	0.43	2.12	10	1
1:A:7:VAL:C	1:A:8:LEU:HD12	0.43	2.33	3	2
1:A:21:ASP:C	1:A:22:LYS:HG2	0.43	2.34	7	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:107:VAL:HG11	0.43	2.43	7	1
1:A:130:LYS:HE3	1:A:130:LYS:CA	0.43	2.42	9	1
1:A:70:ASN:H	1:A:71:PRO:CD	0.43	2.20	2	1
1:A:92:ARG:C	1:A:93:THR:HG22	0.43	2.33	2	1
1:A:120:PHE:CD1	1:A:120:PHE:C	0.43	2.91	10	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:56:GLN:CG	0.43	2.44	6	1
1:A:137:LYS:O	1:A:140:GLN:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:122:TYR:HB2	0.43	2.43	8	1
1:A:32:PHE:HE1	1:A:40:PHE:CZ	0.43	2.30	8	1
1:A:8:LEU:N	1:A:8:LEU:HD12	0.43	2.28	8	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD2	0.43	2.87	11	2
1:A:110:ASN:O	1:A:111:ALA:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:51:PRO:HD2	0.43	2.43	4	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:O	0.43	2.36	1	1
1:A:128:VAL:C	1:A:129:VAL:HG13	0.43	2.33	5	1
1:A:6:HIS:O	1:A:8:LEU:CD1	0.43	2.66	9	1
1:A:112:PHE:CD1	1:A:112:PHE:C	0.43	2.90	3	1
1:A:9:LEU:CG	1:A:162:ALA:CB	0.43	2.95	11	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:139:SER:OG	0.43	2.13	7	1
1:A:98:SER:O	1:A:100:THR:N	0.43	2.50	7	1
1:A:41:TYR:CB	1:A:162:ALA:CB	0.43	2.96	9	3
1:A:21:ASP:OD2	1:A:24:LYS:CB	0.43	2.66	2	1
1:A:128:VAL:HG12	1:A:129:VAL:N	0.43	2.28	10	3
1:A:141:VAL:CG2	1:A:142:PRO:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:41:TYR:O	1:A:44:THR:N	0.43	2.48	6	1
1:A:136:ASP:O	1:A:139:SER:CA	0.43	2.67	7	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:17:GLU:CA	0.43	2.44	1	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:153:PRO:HG3	0.43	2.44	2	1
1:A:34:ASP:O	1:A:38:SER:N	0.43	2.42	3	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:18:LEU:CD2	0.43	2.97	3	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:17:GLU:OE1	0.43	2.66	8	1
1:A:64:MET:HE3	1:A:152:VAL:CG2	0.43	2.43	9	2
1:A:77:ALA:HB1	1:A:115:HIS:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:162:ALA:CB	0.43	2.96	11	1
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ASP:OD1	0.43	2.36	8	1
1:A:71:PRO:CD	1:A:100:THR:CG2	0.43	2.97	8	1
1:A:144:HIS:CE1	1:A:154:SER:HA	0.43	2.49	9	1
1:A:162:ALA:C	1:A:163:LYS:CG	0.43	2.88	10	1
1:A:29:VAL:C	1:A:32:PHE:CE2	0.43	2.91	3	2
1:A:70:ASN:CB	1:A:71:PRO:CD	0.43	2.97	9	4
1:A:77:ALA:CB	1:A:120:PHE:CE1	0.43	2.96	6	2
1:A:70:ASN:OD1	1:A:100:THR:CG2	0.43	2.61	7	1
1:A:24:LYS:HZ1	1:A:81:LEU:CD2	0.43	2.13	9	1
1:A:148:PRO:C	1:A:149:TYR:CG	0.43	2.92	2	1
1:A:88:ILE:CG1	1:A:89:ALA:N	0.43	2.81	6	6
1:A:62:GLU:HG2	1:A:63:GLN:HG3	0.43	1.91	5	1
1:A:70:ASN:H	1:A:100:THR:HG21	0.43	1.73	8	1
1:A:30:GLN:O	1:A:33:VAL:HG13	0.43	2.03	12	1
1:A:48:ARG:O	1:A:49:VAL:HG13	0.43	2.14	9	1
1:A:91:ALA:HA	1:A:104:PHE:CE1	0.43	2.48	2	1
1:A:56:GLN:CG	1:A:104:PHE:C	0.42	2.88	10	1
1:A:145:ASP:C	1:A:146:VAL:CG2	0.42	2.88	12	7
1:A:84:THR:HG23	1:A:109:ASP:HA	0.42	1.91	4	1
1:A:112:PHE:C	1:A:113:LEU:HD13	0.42	2.34	5	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG12	0.42	2.14	5	1
1:A:64:MET:C	1:A:65:GLN:HG3	0.42	2.34	2	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:122:TYR:HD2	0.42	1.67	11	1
1:A:73:ILE:HD13	1:A:99:ALA:O	0.42	2.14	11	2
1:A:9:LEU:O	1:A:16:ILE:O	0.42	2.37	5	1
1:A:62:GLU:O	1:A:62:GLU:CG	0.42	2.67	12	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:CD	0.42	2.66	9	1
1:A:41:TYR:HB3	1:A:162:ALA:HB3	0.42	1.91	2	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:67:LYS:NZ	0.42	2.87	3	1
1:A:144:HIS:C	1:A:145:ASP:O	0.42	2.57	11	5
1:A:90:MET:HG2	1:A:99:ALA:HB1	0.42	1.88	8	1
1:A:64:MET:C	1:A:65:GLN:HG2	0.42	2.35	6	1
1:A:99:ALA:O	1:A:100:THR:CG2	0.42	2.67	4	1
1:A:90:MET:HE2	1:A:99:ALA:CB	0.42	2.45	4	1
1:A:83:ASN:OD1	1:A:87:THR:HG22	0.42	2.12	1	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:131:GLY:HA2	0.42	1.91	5	1
1:A:48:ARG:HB3	1:A:56:GLN:OE1	0.42	2.10	8	1
1:A:88:ILE:H	1:A:126:GLY:C	0.42	2.17	3	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:55:ILE:HG22	0.42	1.91	3	1
1:A:81:LEU:CA	1:A:82:ARG:HH11	0.42	2.19	3	1
1:A:22:LYS:CD	1:A:23:GLN:CA	0.42	2.91	11	1
1:A:55:ILE:HG23	1:A:107:VAL:HG21	0.42	1.90	6	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:107:VAL:CG1	0.42	2.96	7	1
1:A:47:HIS:O	1:A:153:PRO:CG	0.42	2.67	4	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:53:PHE:CD2	0.42	2.36	1	1
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ARG:O	0.42	2.37	5	1
1:A:76:GLU:O	1:A:123:ALA:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:41:TYR:HA	1:A:44:THR:HG21	0.42	1.90	12	1
1:A:79:ASN:O	1:A:79:ASN:OD1	0.42	2.37	9	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD12	0.42	2.35	11	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:LEU:HD11	0.42	1.91	7	1
1:A:70:ASN:N	1:A:71:PRO:HD3	0.42	2.29	7	2
1:A:74:LYS:HA	1:A:97:ASP:OD2	0.42	2.12	4	1
1:A:84:THR:HG23	1:A:109:ASP:CG	0.42	2.34	4	1
1:A:9:LEU:C	1:A:16:ILE:HG22	0.42	2.35	4	1
1:A:68:LYS:HG2	1:A:68:LYS:O	0.42	2.14	1	1
1:A:83:ASN:ND2	1:A:110:ASN:HD22	0.42	2.13	9	1
1:A:96:LYS:CG	1:A:97:ASP:N	0.42	2.83	2	1
1:A:40:PHE:O	1:A:40:PHE:CG	0.42	2.72	3	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:14:GLY:C	0.42	2.34	4	1
1:A:54:MET:SD	1:A:56:GLN:NE2	0.42	2.92	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:CG1	1:A:20:LEU:CD2	0.42	2.98	9	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:94:ALA:N	0.42	2.29	3	1
1:A:128:VAL:O	1:A:129:VAL:CG1	0.42	2.68	5	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:CG2	0.42	2.68	9	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:HG23	0.42	1.92	2	1
1:A:145:ASP:HA	1:A:150:GLN:HA	0.42	1.91	2	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:51:PRO:N	0.42	2.30	10	2
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:N	0.42	2.30	3	3
1:A:104:PHE:CZ	1:A:122:TYR:CG	0.42	3.08	11	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:HIS:HB3	0.42	2.14	6	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:55:ILE:HA	0.42	1.92	4	1
1:A:154:SER:OG	1:A:155:LYS:HD2	0.42	2.14	5	1
1:A:41:TYR:CD2	1:A:58:GLY:HA3	0.42	2.49	8	1
1:A:153:PRO:O	1:A:156:PRO:N	0.42	2.52	9	1
1:A:129:VAL:HG23	1:A:130:LYS:N	0.42	2.30	2	1
1:A:24:LYS:HG3	1:A:81:LEU:CD2	0.42	2.44	2	1
1:A:50:ILE:HG23	1:A:50:ILE:O	0.42	2.15	10	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:56:GLN:N	0.42	2.30	11	1
1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CE	0.42	2.95	4	1
1:A:136:ASP:O	1:A:139:SER:OG	0.42	2.37	1	1
1:A:92:ARG:N	1:A:102:GLN:HE22	0.42	2.12	8	1
1:A:31:ASN:O	1:A:34:ASP:N	0.42	2.53	9	1
1:A:64:MET:SD	1:A:149:TYR:CB	0.42	3.08	2	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:67:LYS:CE	0.42	2.43	2	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:113:LEU:C	0.41	2.89	11	1
1:A:115:HIS:NE2	1:A:120:PHE:HE1	0.41	2.09	11	1
1:A:86:GLY:O	1:A:127:LYS:HB3	0.41	2.15	6	1
1:A:88:ILE:HG13	1:A:89:ALA:N	0.41	2.29	12	2
1:A:79:ASN:CG	1:A:80:GLY:H	0.41	2.18	5	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:122:TYR:HB2	0.41	1.91	8	1
1:A:17:GLU:CB	1:A:130:LYS:O	0.41	2.68	8	1
1:A:48:ARG:HH11	1:A:55:ILE:HG22	0.41	1.74	2	1
1:A:9:LEU:O	1:A:15:ASN:HA	0.41	2.14	2	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:54:MET:O	0.41	2.68	6	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:54:MET:SD	0.41	3.14	5	1
1:A:128:VAL:CG1	1:A:131:GLY:CA	0.41	2.99	9	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:61:THR:O	0.41	2.65	3	1
1:A:32:PHE:CD1	1:A:33:VAL:N	0.41	2.88	11	2
1:A:29:VAL:O	1:A:32:PHE:CD2	0.41	2.73	11	1
1:A:84:THR:O	1:A:86:GLY:N	0.41	2.53	11	2
1:A:76:GLU:O	1:A:77:ALA:HB2	0.41	2.15	4	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:CD1	1:A:89:ALA:N	0.41	2.84	3	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:134:VAL:CG1	0.41	2.97	11	1
1:A:63:GLN:HG3	1:A:64:MET:N	0.41	2.31	7	1
1:A:150:GLN:CD	1:A:150:GLN:H	0.41	2.18	4	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:104:PHE:CZ	0.41	2.95	8	1
1:A:41:TYR:CD2	1:A:58:GLY:CA	0.41	3.03	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:94:ALA:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:67:LYS:NZ	1:A:102:GLN:CG	0.41	2.83	9	1
1:A:53:PHE:HA	1:A:108:ALA:CB	0.41	2.46	2	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ALA:C	0.41	2.58	12	2
1:A:35:TYR:N	1:A:35:TYR:CD1	0.41	2.89	8	1
1:A:154:SER:O	1:A:155:LYS:HB2	0.41	2.16	12	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:20:LEU:CD2	0.41	2.45	9	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:165:LEU:HB2	0.41	1.92	2	1
1:A:17:GLU:CA	1:A:129:VAL:HG12	0.41	2.43	3	1
1:A:49:VAL:O	1:A:50:ILE:HB	0.41	2.16	11	1
1:A:19:GLU:CG	1:A:19:GLU:O	0.41	2.69	7	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:PRO:N	0.41	2.31	4	1
1:A:89:ALA:O	1:A:104:PHE:CE1	0.41	2.74	4	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:16:ILE:O	0.41	2.12	1	1
1:A:31:ASN:O	1:A:34:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:11:THR:CG2	1:A:46:PHE:CE1	0.41	3.03	2	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:50:ILE:C	0.41	2.74	2	1
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:C	0.41	2.94	10	1
1:A:50:ILE:C	1:A:50:ILE:CD1	0.41	2.89	10	2
1:A:104:PHE:CE1	1:A:106:ASN:OD1	0.41	2.73	3	2
1:A:48:ARG:HH21	1:A:51:PRO:HG3	0.41	1.76	6	1
1:A:150:GLN:HA	1:A:150:GLN:OE1	0.41	2.15	7	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:50:ILE:N	0.41	2.31	7	1
1:A:141:VAL:O	1:A:141:VAL:HG23	0.41	2.16	5	1
1:A:45:THR:O	1:A:159:ILE:HD12	0.41	2.15	8	1
1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CD1	0.41	2.88	10	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:122:TYR:HB2	0.41	1.92	3	1
1:A:108:ALA:O	1:A:109:ASP:C	0.41	2.58	3	1
1:A:165:LEU:CB	1:A:166:PRO:CD	0.41	2.97	6	1
1:A:92:ARG:HG3	1:A:98:SER:OG	0.41	2.16	6	1
1:A:61:THR:HB	1:A:65:GLN:CG	0.41	2.40	7	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:126:GLY:CA	0.41	2.38	1	1
1:A:20:LEU:O	1:A:21:ASP:O	0.41	2.39	1	1
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	0.41	2.94	1	1
1:A:104:PHE:HE1	1:A:106:ASN:HD21	0.41	1.57	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PHE:HZ	1:A:58:GLY:O	0.41	1.98	12	1
1:A:59:GLY:C	1:A:67:LYS:CG	0.41	2.89	9	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:157:VAL:O	0.41	2.16	9	1
1:A:104:PHE:CZ	1:A:122:TYR:CB	0.41	2.97	2	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:153:PRO:CG	0.41	2.99	2	1
1:A:70:ASN:O	1:A:100:THR:CG2	0.41	2.69	2	1
1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ASN:OD1	0.41	2.16	2	1
1:A:48:ARG:HH22	1:A:51:PRO:HA	0.41	1.40	2	1
1:A:143:THR:O	1:A:154:SER:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:H	0.41	2.26	5	1
1:A:35:TYR:O	1:A:38:SER:O	0.41	2.39	8	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:120:PHE:CD1	0.41	3.03	9	1
1:A:61:THR:HB	1:A:62:GLU:OE2	0.41	2.16	2	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:28:SER:OG	0.40	2.17	10	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:134:VAL:HB	0.40	1.94	11	1
1:A:36:VAL:CG2	1:A:41:TYR:CE1	0.40	3.03	11	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:GLY:O	0.40	2.39	6	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:53:PHE:C	0.40	2.93	9	2
1:A:145:ASP:HB3	1:A:150:GLN:HG2	0.40	1.93	2	1
1:A:15:ASN:C	1:A:16:ILE:HG13	0.40	2.34	11	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:105:ILE:HG12	0.40	1.93	7	1
1:A:48:ARG:HE	1:A:143:THR:HG23	0.40	1.76	4	1
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	0.40	2.89	5	1
1:A:92:ARG:HE	1:A:92:ARG:HA	0.40	1.75	8	1
1:A:56:GLN:CD	1:A:104:PHE:HB2	0.40	2.36	9	1
1:A:83:ASN:HD22	1:A:110:ASN:HB3	0.40	1.74	9	1
1:A:24:LYS:CD	1:A:81:LEU:CD1	0.40	2.75	9	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:103:PHE:CE1	0.40	2.74	10	1
1:A:46:PHE:CD1	1:A:159:ILE:CD1	0.40	3.03	6	1
1:A:35:TYR:CZ	1:A:101:SER:HB3	0.40	2.51	4	1
1:A:85:ARG:HD3	1:A:85:ARG:N	0.40	2.32	1	1
1:A:134:VAL:O	1:A:137:LYS:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:93:THR:O	1:A:93:THR:CG2	0.40	2.61	2	1
1:A:6:HIS:HB2	1:A:165:LEU:CD2	0.40	2.29	7	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD1	0.40	2.88	4	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:141:VAL:O	0.40	2.16	1	1
1:A:79:ASN:O	1:A:79:ASN:CG	0.40	2.57	1	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:CD2	0.40	2.90	5	1
1:A:35:TYR:O	1:A:38:SER:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:O	0.40	2.17	5	1
1:A:153:PRO:O	1:A:154:SER:C	0.40	2.59	9	1

*Continued on next page...*





*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:CD1	1:A:122:TYR:CD1	0.40	3.05	6	1
1:A:85:ARG:CD	1:A:109:ASP:OD1	0.40	2.70	6	1
1:A:67:LYS:HZ2	1:A:102:GLN:CG	0.40	2.30	9	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:103:PHE:O	0.40	2.74	2	1
1:A:73:ILE:CD1	1:A:98:SER:O	0.40	2.68	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	158/166 (95%)	63±3 (40±2%)	50±4 (32±2%)	45±4 (28±2%)		
All	All	1896/1992 (95%)	757 (40%)	605 (32%)	534 (28%)		

All 96 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	147	GLY	12
1	A	52	GLY	12
1	A	142	PRO	12
1	A	38	SER	11
1	A	146	VAL	11
1	A	124	VAL	11
1	A	67	LYS	11
1	A	96	LYS	10
1	A	85	ARG	10
1	A	44	THR	10
1	A	120	PHE	10
1	A	93	THR	10
1	A	123	ALA	10
1	A	125	PHE	9
1	A	151	ASN	9
1	A	51	PRO	9
1	A	76	GLU	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	127	LYS	9
1	A	94	ALA	9
1	A	66	GLN	9
1	A	72	PRO	9
1	A	92	ARG	9
1	A	75	ASN	8
1	A	102	GLN	8
1	A	99	ALA	8
1	A	64	MET	8
1	A	62	GLU	8
1	A	107	VAL	8
1	A	130	LYS	8
1	A	98	SER	8
1	A	131	GLY	8
1	A	91	ALA	7
1	A	145	ASP	7
1	A	69	PRO	7
1	A	77	ALA	7
1	A	111	ALA	7
1	A	58	GLY	7
1	A	101	SER	7
1	A	155	LYS	7
1	A	71	PRO	7
1	A	109	ASP	7
1	A	74	LYS	6
1	A	148	PRO	6
1	A	113	LEU	6
1	A	115	HIS	6
1	A	114	ASP	5
1	A	81	LEU	5
1	A	95	ASP	5
1	A	47	HIS	5
1	A	112	PHE	5
1	A	79	ASN	5
1	A	83	ASN	5
1	A	78	ASP	5
1	A	70	ASN	4
1	A	108	ALA	4
1	A	82	ARG	4
1	A	53	PHE	4
1	A	61	THR	4
1	A	80	GLY	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	ASP	4
1	A	22	LYS	4
1	A	121	GLY	4
1	A	40	PHE	4
1	A	110	ASN	4
1	A	49	VAL	4
1	A	5	PRO	3
1	A	157	VAL	3
1	A	59	GLY	3
1	A	68	LYS	3
1	A	153	PRO	3
1	A	97	ASP	3
1	A	56	GLN	3
1	A	48	ARG	3
1	A	73	ILE	3
1	A	45	THR	2
1	A	116	GLY	2
1	A	55	ILE	2
1	A	7	VAL	2
1	A	26	PRO	2
1	A	158	VAL	2
1	A	39	GLY	2
1	A	156	PRO	2
1	A	42	ASN	2
1	A	129	VAL	2
1	A	16	ILE	1
1	A	134	VAL	1
1	A	128	VAL	1
1	A	41	TYR	1
1	A	136	ASP	1
1	A	50	ILE	1
1	A	100	THR	1
1	A	154	SER	1
1	A	63	GLN	1
1	A	139	SER	1
1	A	150	GLN	1
1	A	162	ALA	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	134/139 (96%)	123±2 (92±1%)	11±2 (8±1%)	18	64
All	All	1608/1668 (96%)	1480 (92%)	128 (8%)	18	64

All 39 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	88	ILE	12
1	A	144	HIS	12
1	A	103	PHE	11
1	A	76	GLU	8
1	A	19	GLU	8
1	A	146	VAL	7
1	A	73	ILE	6
1	A	62	GLU	5
1	A	115	HIS	5
1	A	113	LEU	4
1	A	102	GLN	3
1	A	90	MET	3
1	A	130	LYS	3
1	A	82	ARG	3
1	A	92	ARG	3
1	A	67	LYS	3
1	A	125	PHE	2
1	A	66	GLN	2
1	A	163	LYS	2
1	A	96	LYS	2
1	A	120	PHE	2
1	A	24	LYS	2
1	A	50	ILE	2
1	A	55	ILE	2
1	A	74	LYS	2
1	A	22	LYS	1
1	A	85	ARG	1
1	A	127	LYS	1
1	A	54	MET	1
1	A	23	GLN	1
1	A	81	LEU	1
1	A	83	ASN	1
1	A	136	ASP	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	150	GLN	1
1	A	47	HIS	1
1	A	30	GLN	1
1	A	143	THR	1
1	A	112	PHE	1
1	A	68	LYS	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

### 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided