



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:58 pm GMT

PDB ID : 1EES
Title : SOLUTION STRUCTURE OF CDC42HS COMPLEXED WITH A PEPTIDE DERIVED FROM P-21 ACTIVATED KINASE, NMR, 20 STRUCTURES
Authors : Gizachew, D.; Guo, W.; Chohan, K.C.; Sutcliffe, M.J.; Oswald, R.E.
Deposited on : 2000-02-02

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : trunk28760
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

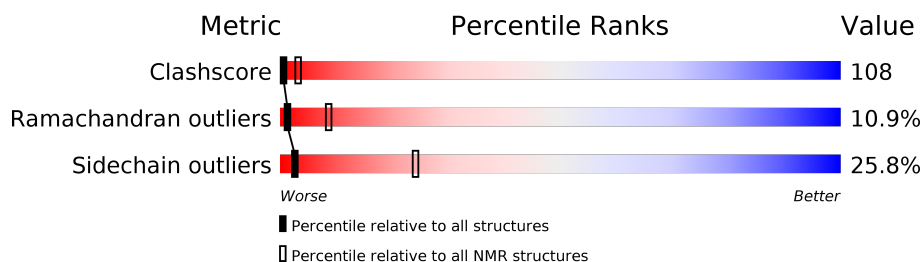
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

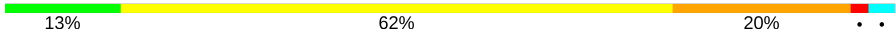
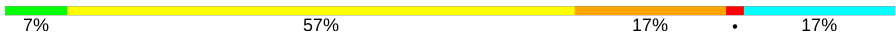
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	178	
2	B	46	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 19 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 9 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:1-A:28, A:35-A:178, B:1-B:38 (210)	1.45	19

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 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3501 atoms, of which 1750 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called GTP-BINDING PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	178	Total	C	H	N	O	S	0
			2794	893	1405	221	268	7	

- Molecule 2 is a protein called P21-ACTIVATED KINASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
2	B	46	Total	C	H	N	O	0
			707	228	345	61	73	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

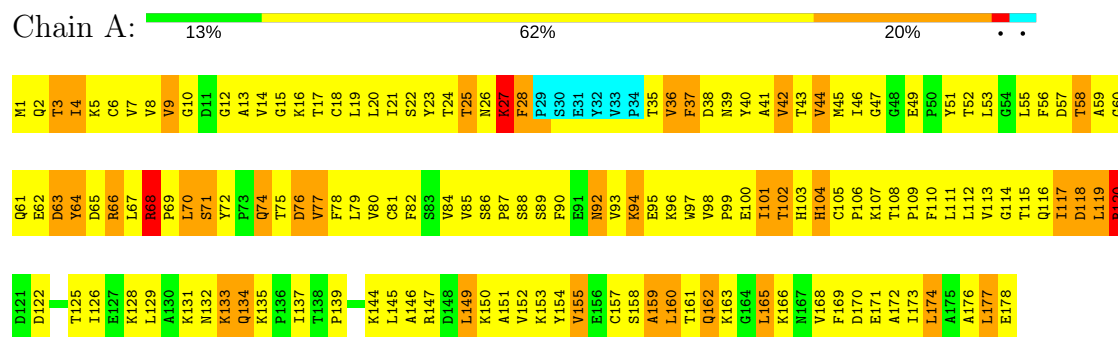
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	1	GLY	LYS	see remark 999	UNP Q61036
B	2	SER	GLU	see remark 999	UNP Q61036

4 Residue-property plots

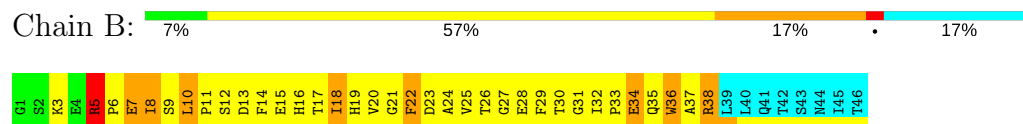
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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: GTP-BINDING PROTEIN



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

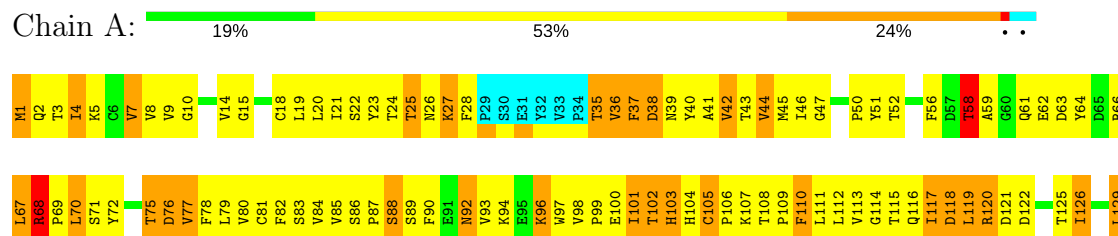


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN



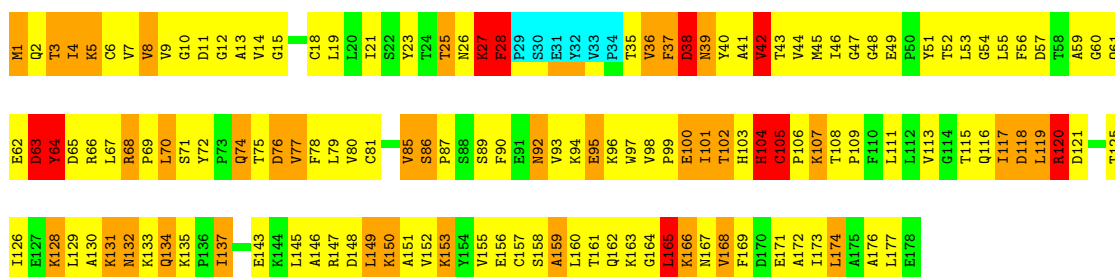
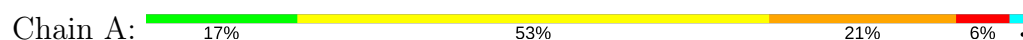


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

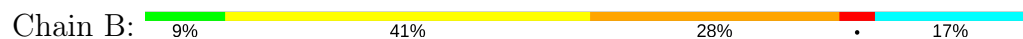


4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

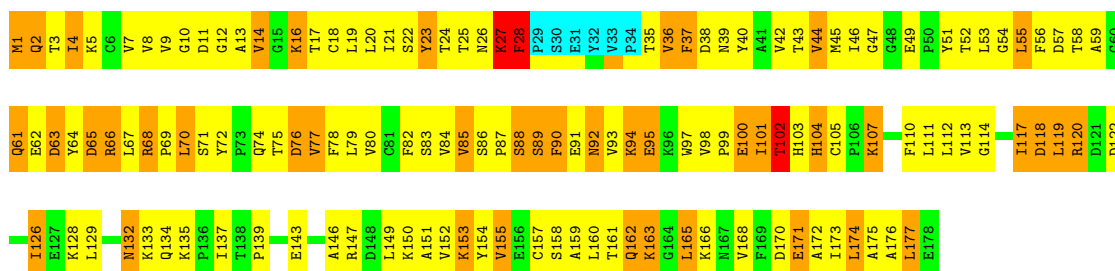
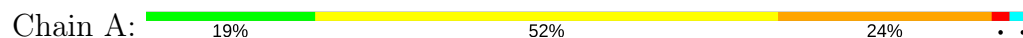


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

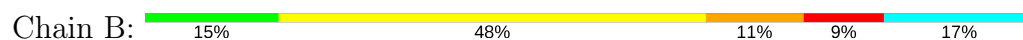


4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN



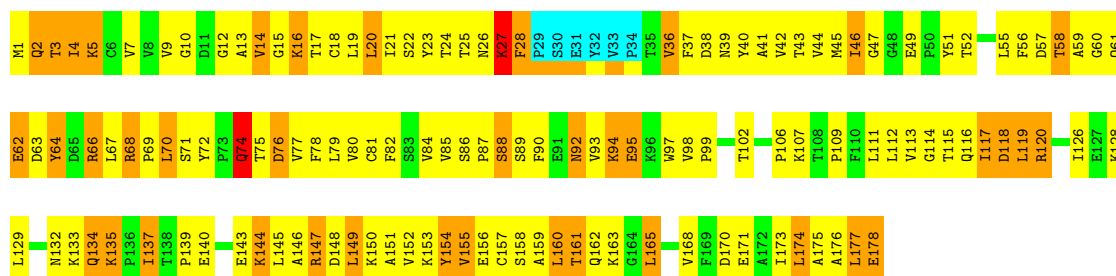
• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE



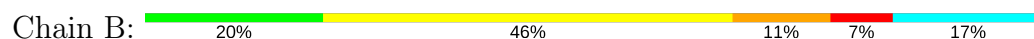


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

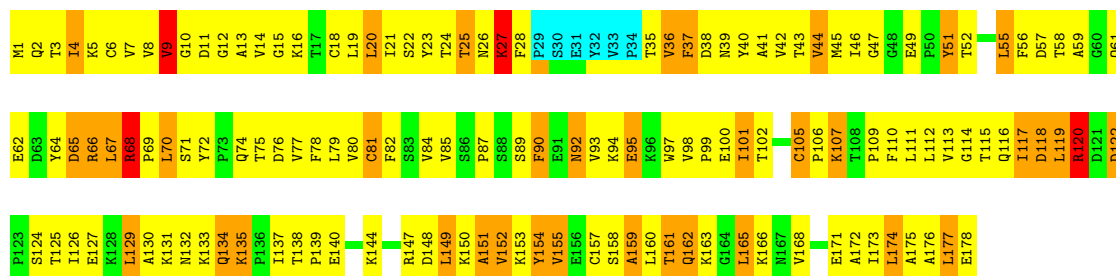
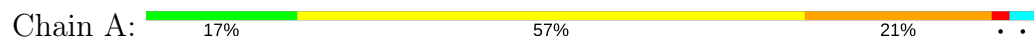


- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

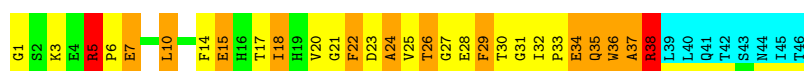


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

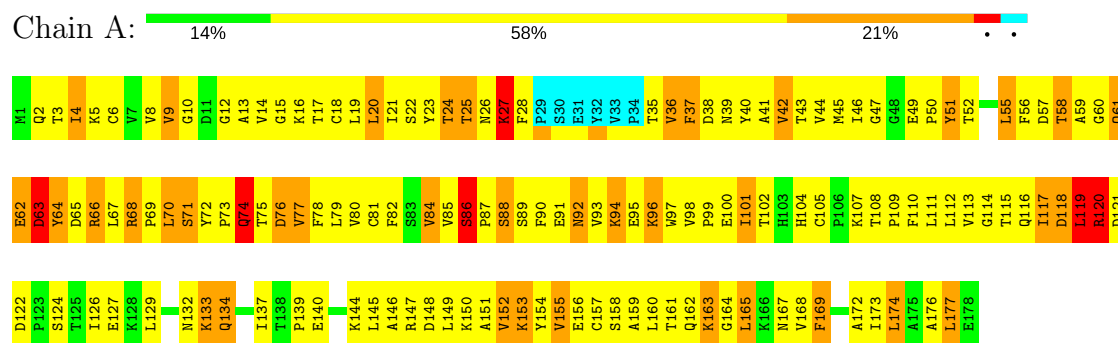


- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

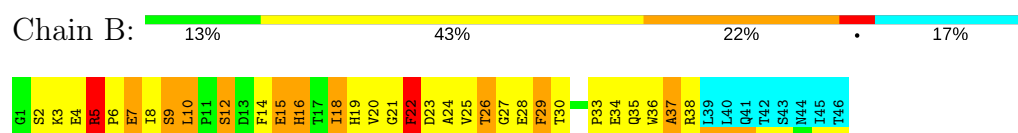


4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

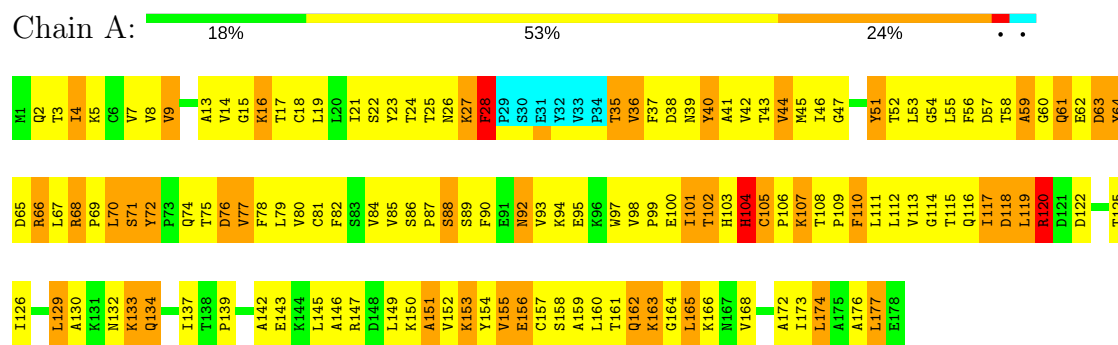


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

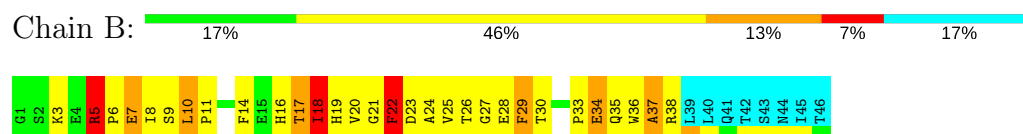


4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

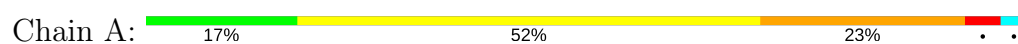


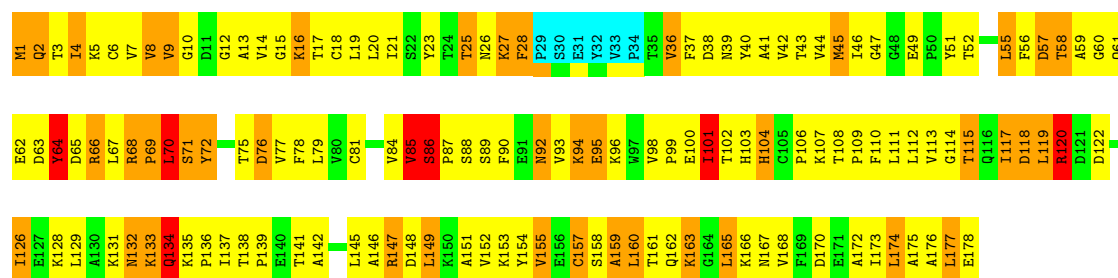
• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE



4.2.8 Score per residue for model 8

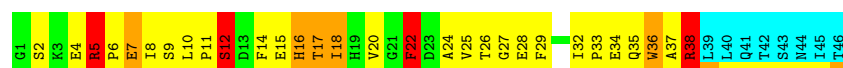
• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN





• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

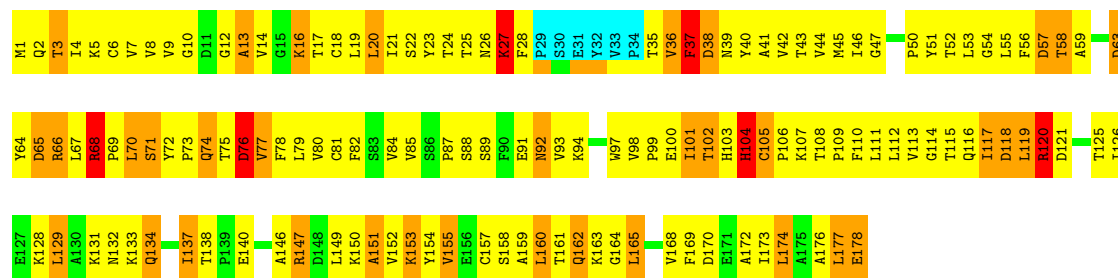
Chain B: 17% 46% 11% 9% 17%



4.2.9 Score per residue for model 9

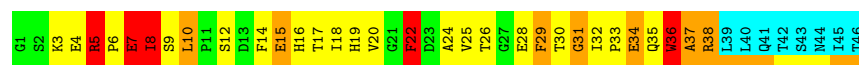
• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 17% 56% 20%



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

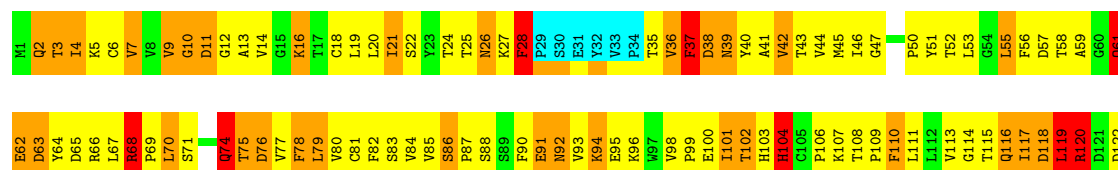
Chain B: 15% 41% 15% 11% 17%



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 19% 47% 26% 5%



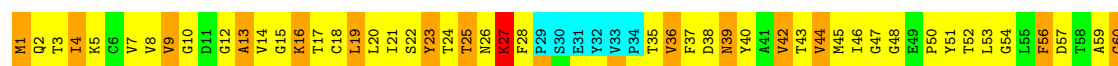


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE



4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

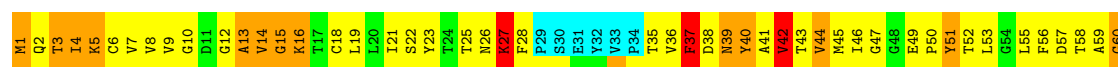
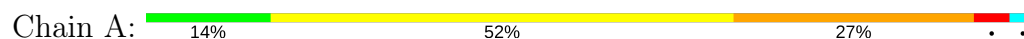


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

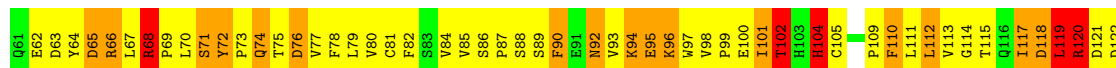
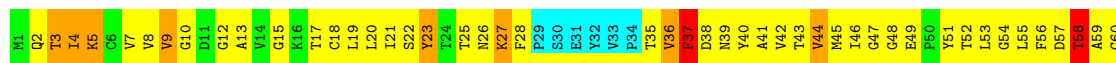





4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 16% 57% 20% . .



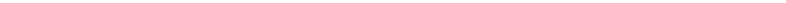
- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

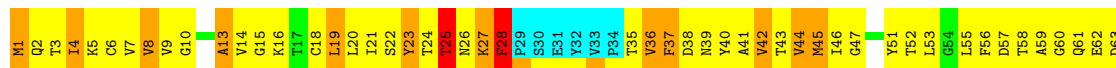
Chain B:  24% 37% 15% 7% 17%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A:  15% 58% 20% . .



- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

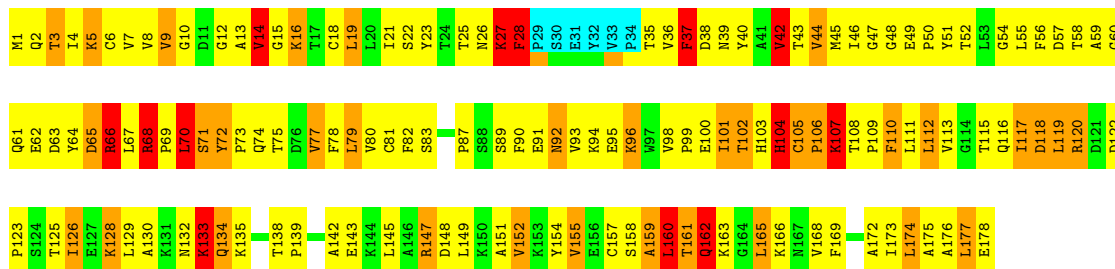
Chain B: 



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 17% 53% 19% 7% •



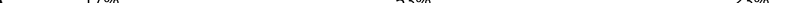
- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

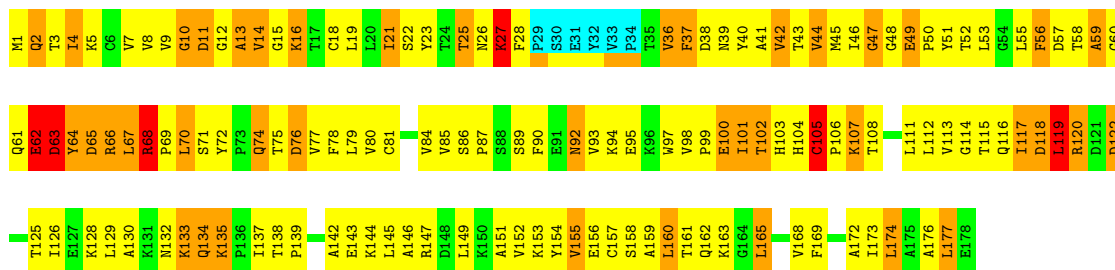
Chain B:  9% 50% 20% . 17%




4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A:  17% 53% 23% . .



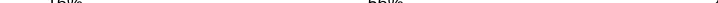
- Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

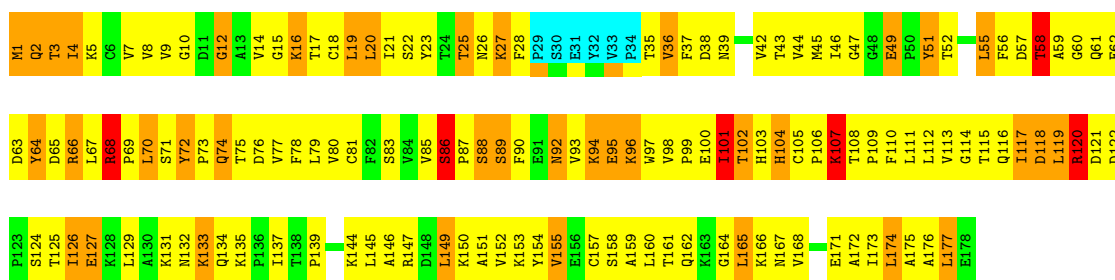
Chain B: 



4.2.17 Score per residue for model 17

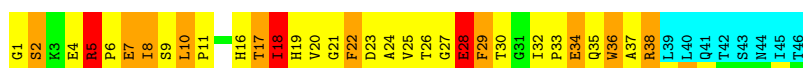
- Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A:  16% 56% 21% . .



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

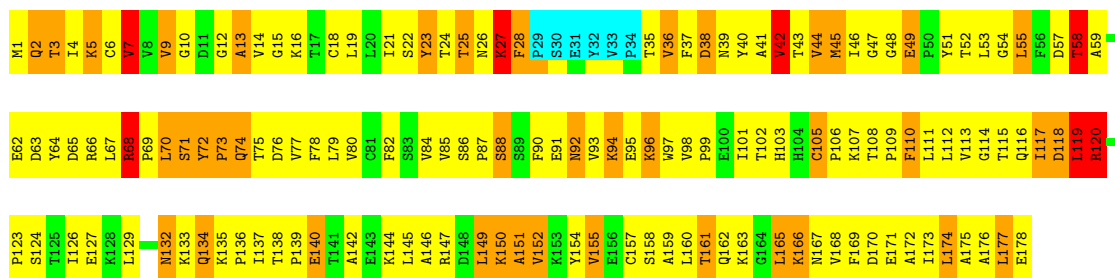
Chain B: 13% 41% 22% 7% 17%



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 14% 56% 22%



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

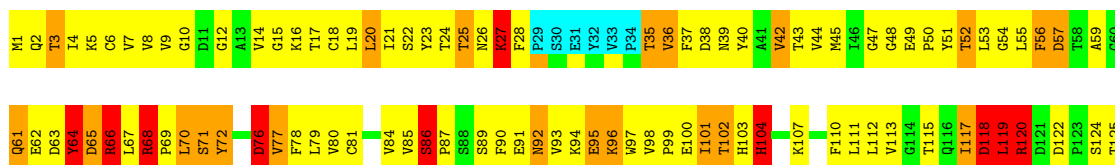
Chain B: 22% 39% 15% 7% 17%

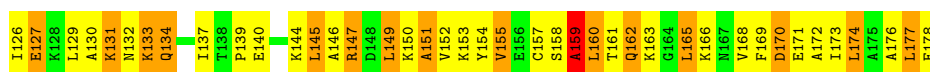


4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN

Chain A: 18% 52% 20% 6%



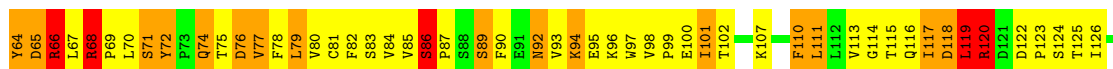
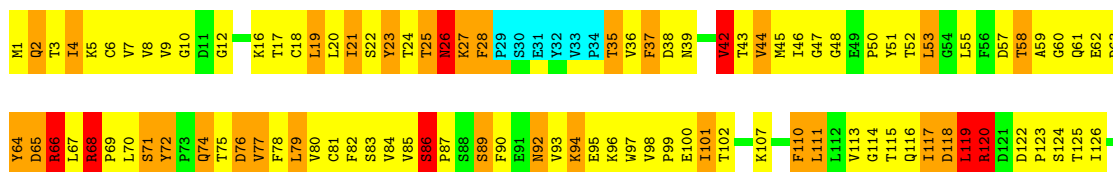
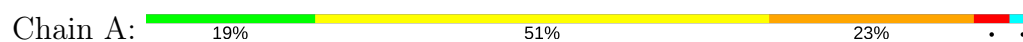


• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE

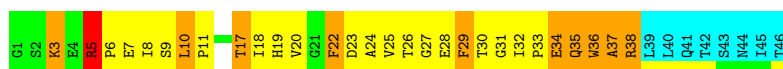
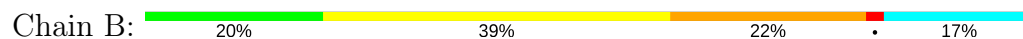


4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: GTP-BINDING PROTEIN



• Molecule 2: P21-ACTIVATED KINASE



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry simulated annealing Ramachandran refinement*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry, structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	3.851
X-PLOR	refinement	3.851

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.02±0.01	0±0/1368 (0.0±0.0%)	1.25±0.01	0±0/1859 (0.0±0.0%)
2	B	1.12±0.01	0±0/310 (0.0±0.0%)	1.22±0.02	0±0/422 (0.0±0.0%)
All	All	1.04	0/33560 (0.0%)	1.24	4/45620 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.0±0.2
2	B	0.0±0.0	1.9±0.2
All	All	0	118

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	27	LYS	N-CA-CB	-5.34	100.99	110.60	5	1
1	A	28	PHE	N-CA-CB	-5.22	101.20	110.60	14	1
1	A	159	ALA	N-CA-CB	-5.21	102.81	110.10	19	1
1	A	107	LYS	N-CA-CB	-5.04	101.52	110.60	12	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	66	ARG	Sidechain	20
2	B	38	ARG	Sidechain	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	120	ARG	Sidechain	20
1	A	147	ARG	Sidechain	20
1	A	68	ARG	Sidechain	19
2	B	5	ARG	Sidechain	19

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1341	1362	1362	319±29
2	B	300	279	279	94±13
All	All	32820	32820	32820	7056

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 107.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:HD11	1.13	1.78	6	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:HD12	1.06	1.84	7	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG11	1.05	1.15	16	14
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:THR:HG22	1.05	1.28	14	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:159:ALA:HB2	1.03	1.07	20	6
1:A:160:LEU:HD13	1:A:161:THR:N	1.02	1.69	16	2
1:A:37:PHE:CD1	2:B:18:ILE:HG22	1.01	1.90	15	1
1:A:117:ILE:C	1:A:117:ILE:HD12	0.99	1.78	20	15
1:A:90:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HD11	0.99	1.92	11	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:56:PHE:N	0.98	1.74	6	7
1:A:4:ILE:HD13	1:A:176:ALA:HB1	0.97	1.32	19	3
1:A:5:LYS:O	1:A:75:THR:HG23	0.97	1.58	17	6
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:N	0.97	1.74	6	3
1:A:21:ILE:HG23	1:A:25:THR:HG21	0.97	1.36	4	2
1:A:4:ILE:HD12	1:A:176:ALA:CB	0.97	1.90	2	8
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:C	0.96	1.79	6	5
1:A:21:ILE:HG22	1:A:27:LYS:O	0.96	1.57	10	1
1:A:38:ASP:CB	2:B:18:ILE:HD12	0.96	1.90	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:CD2	1:A:165:LEU:HD11	0.96	1.96	5	7
2:B:22:PHE:CD1	2:B:25:VAL:HG21	0.96	1.96	6	6
1:A:43:THR:HG23	1:A:51:TYR:O	0.95	1.60	13	14
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:HD22	0.95	1.62	4	5
2:B:22:PHE:CG	2:B:25:VAL:HG21	0.95	1.97	17	7
1:A:98:VAL:HG22	1:A:149:LEU:HD21	0.94	1.39	13	4
1:A:77:VAL:CG1	1:A:176:ALA:HB2	0.94	1.92	18	2
1:A:68:ARG:O	1:A:70:LEU:HD23	0.94	1.62	15	12
1:A:42:VAL:HG22	2:B:14:PHE:O	0.94	1.61	9	1
1:A:23:TYR:CB	1:A:165:LEU:HD22	0.93	1.92	20	1
1:A:35:THR:CB	2:B:26:THR:HG21	0.93	1.93	7	1
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:HD13	0.93	1.63	3	5
1:A:111:LEU:CD1	1:A:152:VAL:HG11	0.92	1.93	8	15
1:A:5:LYS:CB	1:A:75:THR:HG23	0.92	1.94	3	6
1:A:36:VAL:HG13	1:A:58:THR:HG23	0.92	1.38	4	2
1:A:145:LEU:O	1:A:149:LEU:HD12	0.92	1.65	4	4
1:A:160:LEU:HD12	1:A:160:LEU:O	0.92	1.64	9	4
1:A:84:VAL:HG12	1:A:137:ILE:HG23	0.92	1.39	19	2
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:O	0.91	1.65	12	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG1	0.91	1.94	16	13
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:HG22	0.91	1.80	13	1
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:HD22	0.91	1.81	8	4
1:A:90:PHE:O	1:A:93:VAL:HG22	0.91	1.65	13	9
1:A:159:ALA:HB1	2:B:28:GLU:HG2	0.91	1.43	5	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:176:ALA:HB1	0.90	1.96	19	7
1:A:149:LEU:HD22	1:A:149:LEU:O	0.90	1.66	17	3
1:A:85:VAL:HG23	1:A:129:LEU:HD23	0.90	1.40	10	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:52:THR:O	0.89	1.66	18	13
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:HD11	0.89	2.01	6	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:176:ALA:CB	0.89	1.96	17	3
1:A:122:ASP:O	1:A:126:ILE:HD13	0.89	1.68	5	12
1:A:155:VAL:HB	1:A:168:VAL:HG22	0.89	1.43	3	19
1:A:41:ALA:O	1:A:42:VAL:HG23	0.88	1.68	16	4
1:A:36:VAL:CG2	2:B:25:VAL:HG11	0.88	1.97	1	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:107:LYS:CB	0.88	1.97	12	1
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:HD13	0.88	1.67	10	4
1:A:35:THR:CA	2:B:20:VAL:HG21	0.88	1.98	7	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:168:VAL:HG12	0.88	1.46	12	1
1:A:67:LEU:C	1:A:70:LEU:HD21	0.88	1.89	17	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:159:ALA:HB2	0.88	1.45	5	4
1:A:21:ILE:HG22	1:A:26:ASN:HB2	0.88	1.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:O	0.87	1.67	20	9
1:A:36:VAL:HG12	1:A:59:ALA:HB2	0.87	1.45	16	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:129:LEU:HD23	0.87	2.00	10	3
1:A:19:LEU:HD13	1:A:159:ALA:CB	0.87	1.99	20	3
1:A:146:ALA:HA	1:A:151:ALA:HB3	0.87	1.44	6	9
1:A:117:ILE:O	1:A:117:ILE:HD12	0.87	1.69	14	11
1:A:19:LEU:HD21	2:B:29:PHE:HB2	0.87	1.45	19	6
1:A:118:ASP:CB	1:A:161:THR:HG21	0.86	1.99	20	5
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:HD22	0.86	1.70	12	3
2:B:10:LEU:HD22	2:B:10:LEU:O	0.86	1.71	17	3
1:A:164:GLY:O	1:A:168:VAL:HG23	0.86	1.69	6	4
1:A:93:VAL:HG23	1:A:94:LYS:HD3	0.86	1.44	2	8
1:A:59:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB2	0.86	1.47	13	2
1:A:10:GLY:HA2	1:A:80:VAL:HG23	0.86	1.46	11	4
1:A:62:GLU:HG2	2:B:20:VAL:HG22	0.86	1.46	10	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:176:ALA:HB1	0.86	1.46	3	6
1:A:5:LYS:O	1:A:75:THR:HG22	0.86	1.70	20	2
2:B:22:PHE:HB3	2:B:25:VAL:HG21	0.86	1.45	18	9
1:A:79:LEU:HD22	1:A:111:LEU:HD23	0.85	1.48	6	11
1:A:9:VAL:HG13	2:B:35:GLN:NE2	0.85	1.86	5	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:HD23	0.85	1.71	9	1
1:A:149:LEU:HD13	1:A:149:LEU:N	0.85	1.87	2	5
1:A:41:ALA:O	1:A:42:VAL:HG13	0.85	1.70	12	3
1:A:160:LEU:O	1:A:160:LEU:HD12	0.85	1.72	8	3
1:A:98:VAL:CG2	1:A:149:LEU:HD21	0.84	2.02	9	3
1:A:155:VAL:HG21	1:A:168:VAL:HG13	0.84	1.47	5	7
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:HD12	0.84	2.07	15	3
1:A:38:ASP:HB3	1:A:55:LEU:HD11	0.84	1.49	3	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:80:VAL:HB	0.84	1.48	18	1
1:A:5:LYS:O	1:A:77:VAL:HG22	0.84	1.71	2	9
1:A:79:LEU:CD2	1:A:111:LEU:HD23	0.84	2.01	6	7
1:A:160:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CD2	0.84	2.07	20	1
1:A:84:VAL:HG12	1:A:154:TYR:OH	0.84	1.72	16	2
1:A:113:VAL:CG2	1:A:168:VAL:HG11	0.84	2.03	7	6
2:B:17:THR:O	2:B:18:ILE:HG23	0.83	1.73	18	3
1:A:79:LEU:HD13	1:A:168:VAL:CG1	0.83	2.02	12	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:HD11	0.83	1.71	17	2
1:A:46:ILE:HG22	2:B:7:GLU:HB3	0.83	1.50	9	3
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:HD23	0.83	2.12	7	1
1:A:6:CYS:HB3	1:A:55:LEU:HD22	0.83	1.51	5	1
1:A:155:VAL:CG2	1:A:168:VAL:HG13	0.83	2.04	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:THR:HG23	1:A:51:TYR:C	0.83	1.94	15	2
1:A:9:VAL:C	2:B:37:ALA:HB3	0.83	1.94	16	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:O	0.82	1.74	7	3
1:A:36:VAL:CG2	2:B:25:VAL:HG12	0.82	2.04	16	3
1:A:149:LEU:HD13	1:A:149:LEU:C	0.82	1.95	1	1
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD13	0.82	1.88	2	8
1:A:160:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CE2	0.82	2.08	20	1
1:A:142:ALA:HB3	1:A:154:TYR:CD2	0.82	2.10	10	1
1:A:158:SER:O	1:A:165:LEU:HD21	0.82	1.74	4	2
1:A:119:LEU:HG	1:A:125:THR:HG21	0.82	1.51	10	2
1:A:51:TYR:OH	1:A:173:ILE:HG23	0.82	1.75	17	2
1:A:85:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD23	0.82	1.52	5	2
1:A:111:LEU:HG	1:A:172:ALA:HB2	0.82	1.50	7	12
1:A:16:LYS:HA	1:A:19:LEU:HD23	0.82	1.52	15	2
2:B:22:PHE:O	2:B:25:VAL:HG22	0.81	1.75	11	1
1:A:6:CYS:CB	1:A:55:LEU:HD22	0.81	2.05	5	1
1:A:35:THR:HB	2:B:26:THR:HG21	0.81	1.50	7	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:107:LYS:HB3	0.81	1.47	12	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:N	0.81	1.90	12	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:105:CYS:O	0.81	1.74	14	4
1:A:19:LEU:CD1	1:A:159:ALA:HB2	0.81	2.05	13	5
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:C	0.81	1.96	15	6
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:HD11	0.81	2.04	8	3
1:A:5:LYS:HB2	1:A:75:THR:HG23	0.81	1.51	3	3
1:A:157:CYS:SG	1:A:168:VAL:HG21	0.81	2.14	9	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:137:ILE:HD11	0.81	2.09	11	1
1:A:159:ALA:HB1	2:B:29:PHE:CZ	0.81	2.11	2	1
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:HG11	0.81	1.48	9	2
1:A:36:VAL:HG12	1:A:37:PHE:N	0.81	1.91	1	6
1:A:38:ASP:HB2	2:B:18:ILE:HA	0.81	1.53	20	1
1:A:158:SER:HB3	1:A:161:THR:HG23	0.81	1.52	15	2
1:A:97:TRP:CH2	1:A:149:LEU:HD23	0.81	2.10	7	2
1:A:44:VAL:HG12	1:A:51:TYR:HB2	0.81	1.52	1	6
1:A:19:LEU:HD11	2:B:29:PHE:CB	0.80	2.05	16	2
1:A:79:LEU:HD12	1:A:169:PHE:CE1	0.80	2.10	16	1
1:A:146:ALA:CA	1:A:151:ALA:HB3	0.80	2.07	14	10
1:A:77:VAL:HG11	1:A:176:ALA:HB2	0.80	1.53	14	2
1:A:25:THR:O	1:A:27:LYS:N	0.80	2.13	20	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:159:ALA:CA	0.80	2.05	18	3
1:A:62:GLU:CG	2:B:20:VAL:HG22	0.80	2.06	10	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:HD21	0.80	1.51	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:HG23	2:B:25:VAL:HG11	0.80	1.53	1	1
1:A:149:LEU:HD12	1:A:149:LEU:N	0.80	1.92	9	5
1:A:14:VAL:HB	1:A:115:THR:HG23	0.80	1.50	9	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HA	0.80	1.53	12	3
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:HD23	0.80	1.92	4	6
1:A:117:ILE:O	1:A:119:LEU:N	0.80	2.15	9	20
1:A:9:VAL:HG12	1:A:78:PHE:HB3	0.80	1.53	18	1
1:A:155:VAL:CB	1:A:168:VAL:HG22	0.79	2.07	10	12
2:B:8:ILE:HG23	2:B:9:SER:N	0.79	1.92	15	5
1:A:70:LEU:HD11	2:B:37:ALA:CB	0.79	2.06	11	3
1:A:111:LEU:CD1	1:A:152:VAL:HG21	0.79	2.07	6	6
1:A:2:GLN:O	1:A:52:THR:HG21	0.79	1.77	17	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:HG21	0.79	1.51	16	1
1:A:94:LYS:HG3	1:A:145:LEU:HD11	0.79	1.54	17	3
1:A:9:VAL:O	1:A:14:VAL:HG21	0.79	1.76	4	1
1:A:19:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CB	0.79	2.07	19	3
1:A:16:LYS:HD3	1:A:79:LEU:HD12	0.79	1.54	11	3
1:A:36:VAL:CG1	1:A:59:ALA:HB3	0.78	2.07	7	2
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:C	0.78	1.98	19	4
1:A:122:ASP:OD1	1:A:125:THR:HG22	0.78	1.78	14	3
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD22	0.78	1.98	12	2
1:A:20:LEU:N	1:A:165:LEU:HD12	0.78	1.92	4	1
1:A:158:SER:CB	1:A:161:THR:HG23	0.78	2.08	5	3
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:LYS:N	0.78	1.94	7	6
1:A:98:VAL:HG11	1:A:149:LEU:HD22	0.78	1.56	20	1
1:A:77:VAL:HG12	1:A:109:PRO:CG	0.78	2.08	8	2
1:A:111:LEU:HD22	1:A:111:LEU:N	0.78	1.94	2	7
1:A:3:THR:HG22	1:A:3:THR:O	0.77	1.77	4	7
1:A:28:PHE:CZ	2:B:30:THR:HG22	0.77	2.14	7	2
2:B:18:ILE:N	2:B:18:ILE:HD13	0.77	1.95	8	3
1:A:174:LEU:HD13	1:A:174:LEU:N	0.77	1.93	10	10
1:A:42:VAL:HG23	2:B:14:PHE:O	0.77	1.79	3	2
1:A:23:TYR:OH	1:A:165:LEU:HD21	0.77	1.78	6	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:176:ALA:HB2	0.77	1.55	14	4
1:A:44:VAL:HG12	1:A:46:ILE:CD1	0.77	2.10	4	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:ALA:HB2	0.77	1.78	17	14
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:LYS:N	0.77	1.95	2	7
1:A:8:VAL:HG21	1:A:17:THR:OG1	0.77	1.78	20	1
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:HD23	0.77	1.79	16	3
1:A:85:VAL:HG12	1:A:134:GLN:O	0.77	1.80	3	1
1:A:70:LEU:HD12	2:B:36:TRP:C	0.77	2.00	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:8:ILE:HD13	2:B:8:ILE:N	0.77	1.93	17	2
1:A:160:LEU:HD22	1:A:160:LEU:O	0.77	1.79	16	1
1:A:86:SER:CA	1:A:129:LEU:HD23	0.77	2.09	6	1
1:A:83:SER:OG	1:A:85:VAL:HG22	0.77	1.79	1	1
1:A:117:ILE:C	1:A:117:ILE:CD1	0.76	2.53	20	11
1:A:37:PHE:CG	1:A:37:PHE:O	0.76	2.37	10	3
1:A:76:ASP:OD2	1:A:77:VAL:HG22	0.76	1.81	18	1
1:A:35:THR:O	1:A:36:VAL:HG23	0.76	1.80	7	3
1:A:36:VAL:CG1	2:B:20:VAL:HG11	0.76	2.11	10	2
1:A:85:VAL:HG12	1:A:136:PRO:HB3	0.76	1.54	8	2
1:A:153:LYS:HD3	1:A:155:VAL:HG13	0.76	1.57	1	1
1:A:111:LEU:N	1:A:111:LEU:HD22	0.76	1.96	14	12
1:A:98:VAL:HG11	1:A:149:LEU:CD2	0.76	2.11	20	1
1:A:35:THR:O	2:B:20:VAL:HG23	0.76	1.81	18	4
1:A:82:PHE:C	1:A:115:THR:HG23	0.76	2.01	10	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:26:ASN:OD1	0.76	1.81	10	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD22	0.76	2.01	16	2
1:A:35:THR:CB	2:B:20:VAL:HG11	0.76	2.11	9	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:54:GLY:N	0.76	1.96	2	7
1:A:149:LEU:HD11	1:A:151:ALA:HB2	0.76	1.55	4	4
1:A:53:LEU:HD12	1:A:53:LEU:C	0.75	2.02	16	8
2:B:22:PHE:CD2	2:B:25:VAL:HG21	0.75	2.15	7	1
1:A:66:ARG:C	1:A:70:LEU:HD23	0.75	2.01	9	1
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD13	0.75	2.02	6	2
1:A:36:VAL:CG1	1:A:58:THR:HG23	0.75	2.11	4	2
2:B:22:PHE:O	2:B:25:VAL:HG23	0.75	1.80	1	3
1:A:79:LEU:CD1	1:A:168:VAL:HG12	0.75	2.11	14	9
1:A:19:LEU:HD12	1:A:159:ALA:HA	0.75	1.58	16	4
1:A:152:VAL:HG22	1:A:175:ALA:CB	0.75	2.10	11	4
1:A:28:PHE:CE1	2:B:30:THR:HG22	0.75	2.17	7	4
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:CZ3	0.75	2.16	17	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:CD1	0.75	2.69	12	4
1:A:35:THR:OG1	2:B:26:THR:HG21	0.75	1.81	7	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:176:ALA:HA	0.75	1.58	8	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:160:LEU:C	0.75	2.02	9	5
1:A:23:TYR:CD2	1:A:165:LEU:HD12	0.75	2.15	7	1
1:A:4:ILE:HD11	1:A:176:ALA:HB1	0.75	1.57	18	1
1:A:102:THR:HG21	1:A:108:THR:OG1	0.75	1.81	1	1
1:A:35:THR:HA	2:B:20:VAL:HG21	0.75	1.56	7	1
1:A:92:ASN:ND2	1:A:93:VAL:HG13	0.75	1.95	4	10
1:A:93:VAL:HG13	1:A:97:TRP:CZ2	0.74	2.16	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ILE:HG23	2:B:10:LEU:HB3	0.74	1.59	18	1
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:HD12	0.74	2.02	19	1
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	0.74	1.59	16	4
1:A:19:LEU:HB3	1:A:159:ALA:CB	0.74	2.11	10	1
1:A:35:THR:HG23	1:A:37:PHE:HB2	0.74	1.57	15	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:59:ALA:CB	0.74	2.12	16	1
1:A:84:VAL:HG23	1:A:115:THR:O	0.74	1.82	20	1
1:A:5:LYS:HB3	1:A:75:THR:HG22	0.74	1.59	1	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:159:ALA:O	0.74	2.41	3	3
1:A:149:LEU:C	1:A:149:LEU:HD13	0.74	2.04	4	3
1:A:92:ASN:ND2	1:A:93:VAL:HG23	0.73	1.98	18	6
1:A:10:GLY:CA	1:A:80:VAL:HG23	0.73	2.12	11	1
1:A:165:LEU:H	1:A:165:LEU:HD13	0.73	1.43	14	4
2:B:29:PHE:O	2:B:30:THR:HG23	0.73	1.83	4	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:55:LEU:HD11	0.73	1.83	4	1
2:B:26:THR:HG23	2:B:29:PHE:N	0.73	1.98	2	1
1:A:98:VAL:HG22	1:A:149:LEU:CD2	0.73	2.12	9	4
1:A:36:VAL:HG21	2:B:25:VAL:HG12	0.73	1.59	16	1
1:A:85:VAL:C	1:A:129:LEU:HD23	0.73	2.03	16	1
1:A:42:VAL:HG21	2:B:15:GLU:O	0.73	1.83	10	3
1:A:55:LEU:HD13	1:A:55:LEU:C	0.73	2.03	8	5
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:HD23	0.73	1.98	18	1
1:A:173:ILE:O	1:A:177:LEU:HD12	0.73	1.83	17	14
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD1	0.73	2.52	11	8
1:A:14:VAL:HG12	1:A:14:VAL:O	0.73	1.83	12	1
1:A:37:PHE:O	1:A:37:PHE:CD1	0.73	2.41	12	2
1:A:46:ILE:HG22	2:B:7:GLU:CB	0.73	2.14	18	2
1:A:75:THR:O	1:A:75:THR:HG22	0.73	1.82	18	1
1:A:44:VAL:CG1	2:B:10:LEU:HD23	0.73	2.14	11	1
1:A:77:VAL:HG12	1:A:109:PRO:HG3	0.73	1.59	8	2
1:A:84:VAL:O	1:A:137:ILE:HG22	0.73	1.83	16	2
1:A:44:VAL:HG23	1:A:51:TYR:HB2	0.73	1.59	13	2
1:A:4:ILE:HG13	1:A:176:ALA:HB1	0.73	1.58	20	3
1:A:19:LEU:HD13	1:A:159:ALA:HA	0.73	1.60	6	2
1:A:118:ASP:OD2	1:A:161:THR:HG21	0.73	1.83	1	1
1:A:44:VAL:HG12	2:B:10:LEU:HD23	0.73	1.58	11	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:166:LYS:N	0.73	1.99	3	7
1:A:36:VAL:N	2:B:20:VAL:HG11	0.72	1.99	13	4
1:A:149:LEU:HD13	1:A:150:LYS:N	0.72	1.99	4	1
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:HG21	0.72	1.60	4	2
1:A:40:TYR:CE1	1:A:55:LEU:HD11	0.72	2.19	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:PHE:C	1:A:79:LEU:HD23	0.72	2.04	12	1
2:B:18:ILE:N	2:B:18:ILE:HD12	0.72	2.00	1	3
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:HD23	0.72	1.60	11	4
1:A:22:SER:OG	1:A:160:LEU:HD23	0.72	1.83	10	1
1:A:77:VAL:HB	1:A:172:ALA:HB1	0.72	1.60	18	1
1:A:41:ALA:HB2	1:A:56:PHE:CE1	0.72	2.19	5	1
2:B:8:ILE:HD13	2:B:8:ILE:H	0.72	1.42	17	2
1:A:36:VAL:HG22	2:B:26:THR:HG21	0.72	1.59	5	1
1:A:39:ASN:CB	1:A:55:LEU:HD11	0.72	2.13	18	1
1:A:68:ARG:N	1:A:69:PRO:CD	0.72	2.52	13	17
1:A:85:VAL:HB	1:A:129:LEU:HD21	0.72	1.60	4	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:152:VAL:HG21	0.72	1.61	14	5
2:B:5:ARG:N	2:B:6:PRO:CD	0.72	2.53	19	5
2:B:10:LEU:HD22	2:B:10:LEU:C	0.72	2.04	13	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:70:LEU:N	0.71	2.00	11	4
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:HD13	0.71	1.63	7	2
1:A:70:LEU:HD11	2:B:37:ALA:HA	0.71	1.63	16	3
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:SER:N	0.71	1.99	18	2
1:A:2:GLN:O	1:A:4:ILE:N	0.71	2.24	18	5
2:B:10:LEU:N	2:B:10:LEU:CD1	0.71	2.54	20	2
1:A:160:LEU:HD13	1:A:160:LEU:C	0.71	2.06	17	1
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD22	0.71	2.04	3	1
1:A:101:ILE:HG23	1:A:104:HIS:C	0.71	2.05	14	4
1:A:7:VAL:CG2	1:A:75:THR:HG21	0.71	2.16	1	2
1:A:51:TYR:CE1	1:A:177:LEU:HD21	0.71	2.20	17	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:HD11	0.71	2.16	14	1
1:A:36:VAL:HG21	2:B:25:VAL:CG1	0.71	2.15	16	2
1:A:44:VAL:HG12	1:A:51:TYR:CG	0.71	2.20	9	2
1:A:42:VAL:CG1	1:A:53:LEU:HD21	0.71	2.16	3	1
1:A:19:LEU:HD11	2:B:29:PHE:CG	0.71	2.21	8	3
1:A:37:PHE:O	1:A:37:PHE:CG	0.71	2.44	6	2
1:A:38:ASP:CB	2:B:18:ILE:HB	0.71	2.15	18	1
1:A:37:PHE:CG	2:B:18:ILE:HG22	0.70	2.21	15	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:CD1	0.70	2.69	6	4
1:A:102:THR:HG22	1:A:103:HIS:N	0.70	2.02	7	9
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:LYS:H	0.70	1.45	16	7
1:A:98:VAL:O	1:A:102:THR:HG23	0.70	1.87	20	2
1:A:36:VAL:HG13	1:A:58:THR:CG2	0.70	2.16	4	3
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:HG22	0.70	1.87	5	1
1:A:85:VAL:HG23	1:A:129:LEU:HD22	0.70	1.60	6	2
1:A:41:ALA:HB2	1:A:56:PHE:CZ	0.70	2.22	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:18:ILE:HD13	2:B:18:ILE:N	0.70	2.01	14	3
2:B:20:VAL:CG2	2:B:22:PHE:CE2	0.70	2.74	4	1
1:A:153:LYS:CD	1:A:155:VAL:HG13	0.70	2.17	1	2
1:A:42:VAL:HG13	2:B:14:PHE:HB2	0.70	1.62	1	1
1:A:102:THR:HG21	1:A:108:THR:HB	0.70	1.63	17	1
1:A:118:ASP:HB2	1:A:161:THR:HG21	0.70	1.63	15	4
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:HD13	0.70	2.17	4	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:GLY:N	0.69	2.01	8	3
1:A:58:THR:HG23	1:A:58:THR:O	0.69	1.85	7	2
1:A:36:VAL:CB	2:B:20:VAL:HG21	0.69	2.16	16	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:163:LYS:CB	0.69	2.75	14	1
1:A:58:THR:O	1:A:59:ALA:HB2	0.69	1.87	7	2
2:B:10:LEU:C	2:B:10:LEU:HD22	0.69	2.07	11	2
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:HD13	0.69	2.16	15	1
1:A:117:ILE:CD1	1:A:117:ILE:C	0.69	2.56	14	9
1:A:4:ILE:HB	1:A:176:ALA:HB1	0.69	1.64	11	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:165:LEU:HD12	0.69	2.23	12	1
2:B:18:ILE:HD13	2:B:18:ILE:H	0.69	1.47	13	1
1:A:7:VAL:HG11	2:B:36:TRP:CE3	0.69	2.21	19	1
1:A:149:LEU:CD1	1:A:149:LEU:N	0.69	2.54	7	9
1:A:20:LEU:CA	1:A:165:LEU:HD12	0.69	2.17	4	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:172:ALA:HB2	0.69	2.18	19	5
1:A:25:THR:HG22	1:A:26:ASN:CG	0.69	2.08	10	1
1:A:41:ALA:CB	1:A:56:PHE:CZ	0.69	2.76	5	1
1:A:84:VAL:HG22	1:A:120:ARG:HG2	0.69	1.64	13	3
1:A:23:TYR:CG	1:A:165:LEU:HD11	0.69	2.21	1	3
2:B:5:ARG:CB	2:B:6:PRO:CD	0.69	2.70	10	13
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD12	0.69	2.00	7	3
1:A:42:VAL:HB	2:B:14:PHE:O	0.69	1.87	16	3
1:A:37:PHE:CE1	1:A:64:TYR:CE1	0.69	2.81	4	1
1:A:8:VAL:HG12	2:B:35:GLN:HG2	0.69	1.63	6	1
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:H	0.69	1.47	6	1
1:A:68:ARG:O	1:A:70:LEU:CD2	0.69	2.40	4	10
1:A:163:LYS:HA	1:A:165:LEU:CD1	0.69	2.17	14	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:26:THR:O	0.69	1.88	4	1
1:A:38:ASP:HB3	2:B:18:ILE:HD12	0.69	1.63	5	1
1:A:57:ASP:H	2:B:18:ILE:HD11	0.69	1.46	5	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:165:LEU:HD22	0.69	1.64	20	1
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:HG21	0.69	2.23	20	2
1:A:158:SER:HB2	1:A:161:THR:HG23	0.69	1.62	5	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD21	0.68	1.63	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:O	1:A:24:THR:HG23	0.68	1.88	4	1
1:A:37:PHE:CA	2:B:20:VAL:HG22	0.68	2.19	13	1
1:A:70:LEU:HD12	2:B:36:TRP:O	0.68	1.88	6	3
1:A:28:PHE:O	1:A:28:PHE:CG	0.68	2.45	18	7
1:A:36:VAL:HG13	1:A:58:THR:O	0.68	1.88	3	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:26:ASN:ND2	0.68	2.03	6	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:HD13	0.68	1.64	15	2
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:HD23	0.68	1.89	10	2
1:A:155:VAL:HB	1:A:168:VAL:HG23	0.68	1.65	2	1
1:A:36:VAL:HG22	2:B:26:THR:CG2	0.68	2.19	5	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:80:VAL:HG12	0.68	2.19	12	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD12	0.68	2.08	8	4
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:HB2	0.68	1.88	13	16
1:A:155:VAL:HG22	1:A:171:GLU:OE1	0.68	1.87	17	1
1:A:39:ASN:HB3	1:A:55:LEU:HD13	0.68	1.64	2	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:78:PHE:HB3	0.68	1.64	19	3
1:A:19:LEU:C	1:A:23:TYR:CE2	0.68	2.67	6	3
1:A:2:GLN:CA	1:A:177:LEU:HD23	0.68	2.18	11	2
1:A:4:ILE:HG23	1:A:52:THR:O	0.68	1.89	17	4
1:A:39:ASN:N	2:B:18:ILE:HG22	0.68	2.04	6	1
1:A:5:LYS:O	1:A:76:ASP:HB3	0.68	1.89	18	1
2:B:18:ILE:H	2:B:18:ILE:HD13	0.68	1.47	8	3
1:A:21:ILE:HG21	2:B:26:THR:HG23	0.68	1.64	7	4
1:A:13:ALA:O	1:A:14:VAL:HG23	0.68	1.88	12	1
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LYS:CB	0.68	2.42	2	8
1:A:93:VAL:HG23	1:A:94:LYS:CD	0.68	2.19	12	5
1:A:158:SER:O	1:A:162:GLN:N	0.68	2.27	12	4
2:B:26:THR:OG1	2:B:30:THR:HG22	0.68	1.87	2	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:42:VAL:CG2	0.68	2.77	19	1
2:B:22:PHE:CB	2:B:25:VAL:HG21	0.68	2.18	17	7
1:A:120:ARG:HA	1:A:126:ILE:HD11	0.68	1.65	5	3
1:A:7:VAL:HG22	1:A:75:THR:HG21	0.67	1.64	1	2
1:A:84:VAL:HG11	1:A:120:ARG:HG3	0.67	1.65	9	1
2:B:10:LEU:CD1	2:B:10:LEU:N	0.67	2.57	7	4
1:A:38:ASP:HB2	2:B:18:ILE:HD12	0.67	1.64	5	1
1:A:35:THR:O	1:A:37:PHE:CD1	0.67	2.48	12	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:107:LYS:CB	0.67	2.72	12	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:HD11	0.67	1.66	8	1
1:A:105:CYS:CB	1:A:106:PRO:CD	0.67	2.73	18	4
1:A:90:PHE:CZ	1:A:94:LYS:CE	0.67	2.78	2	2
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CE2	0.67	2.78	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CD1	0.67	2.62	12	3
1:A:105:CYS:N	1:A:106:PRO:CD	0.67	2.58	7	3
1:A:4:ILE:HG23	1:A:53:LEU:CB	0.67	2.20	9	6
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HD23	0.67	1.89	10	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:C	0.67	2.10	14	3
1:A:40:TYR:CE1	2:B:18:ILE:HG23	0.67	2.25	6	1
1:A:97:TRP:CD1	1:A:97:TRP:N	0.67	2.60	14	3
1:A:159:ALA:HB1	2:B:29:PHE:CE2	0.67	2.25	8	2
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:HA	0.67	1.66	19	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:19:LEU:HG	0.67	1.67	2	1
1:A:6:CYS:HA	1:A:77:VAL:HG13	0.67	1.66	19	2
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:HD21	0.67	1.67	15	1
2:B:23:ASP:O	2:B:25:VAL:HG23	0.67	1.89	7	5
1:A:13:ALA:HB1	1:A:116:GLN:NE2	0.67	2.04	2	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:HB3	0.66	1.89	4	6
1:A:152:VAL:HG22	1:A:175:ALA:HB2	0.66	1.67	4	4
1:A:47:GLY:CA	2:B:8:ILE:HG22	0.66	2.21	9	4
1:A:111:LEU:HD12	1:A:152:VAL:HG11	0.66	1.66	4	5
1:A:99:PRO:O	1:A:101:ILE:HD12	0.66	1.90	9	1
1:A:18:CYS:HA	1:A:28:PHE:HB2	0.66	1.67	10	1
1:A:28:PHE:CZ	1:A:35:THR:CG2	0.66	2.78	10	1
1:A:47:GLY:HA3	2:B:8:ILE:HG22	0.66	1.66	2	3
1:A:35:THR:HG21	2:B:25:VAL:H	0.66	1.49	5	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TYR:CD2	0.66	2.49	6	6
1:A:44:VAL:HG12	1:A:46:ILE:HD13	0.66	1.68	4	1
1:A:72:TYR:CD1	1:A:78:PHE:CZ	0.66	2.84	8	1
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:HG21	0.66	2.05	16	1
2:B:5:ARG:CB	2:B:6:PRO:HD2	0.66	2.20	3	12
1:A:38:ASP:CG	1:A:55:LEU:HD11	0.66	2.11	4	1
1:A:113:VAL:HG11	1:A:157:CYS:HB3	0.66	1.67	8	1
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:CB	0.66	2.43	19	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:94:LYS:CE	0.66	2.78	17	3
1:A:90:PHE:CE2	1:A:145:LEU:HD13	0.66	2.26	17	1
1:A:21:ILE:HG22	2:B:27:GLY:CA	0.66	2.21	18	4
1:A:38:ASP:CB	1:A:55:LEU:HD11	0.66	2.21	3	1
1:A:145:LEU:HG	1:A:149:LEU:HD22	0.66	1.66	6	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:HG21	0.66	1.67	19	2
1:A:162:GLN:O	1:A:163:LYS:CB	0.66	2.44	14	7
1:A:5:LYS:HB3	1:A:75:THR:HG23	0.66	1.68	4	5
1:A:28:PHE:CD1	1:A:28:PHE:O	0.66	2.49	4	3
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:THR:H	0.66	1.50	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD11	1:A:159:ALA:CB	0.66	2.20	5	2
1:A:44:VAL:CA	2:B:13:ASP:HB3	0.66	2.21	16	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:149:LEU:HB2	0.65	1.67	1	2
1:A:2:GLN:NE2	1:A:177:LEU:HD22	0.65	2.05	12	2
1:A:19:LEU:HD11	2:B:29:PHE:HB3	0.65	1.67	16	2
1:A:37:PHE:C	2:B:20:VAL:HG12	0.65	2.12	17	1
1:A:39:ASN:H	2:B:18:ILE:HG22	0.65	1.49	6	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:O	0.65	1.90	16	3
1:A:93:VAL:O	1:A:97:TRP:CD1	0.65	2.50	6	6
1:A:101:ILE:HD13	1:A:101:ILE:O	0.65	1.88	20	2
1:A:47:GLY:CA	2:B:8:ILE:CG2	0.65	2.74	4	3
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:HD13	0.65	2.26	4	1
1:A:8:VAL:HG11	2:B:35:GLN:HB3	0.65	1.68	16	1
1:A:84:VAL:HG21	1:A:120:ARG:CG	0.65	2.22	9	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:19:HIS:N	0.65	2.06	2	2
1:A:21:ILE:HG13	2:B:26:THR:HG23	0.65	1.69	17	2
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD13	0.65	2.11	14	2
1:A:157:CYS:HB2	1:A:165:LEU:HD22	0.65	1.67	4	1
2:B:29:PHE:CE1	2:B:33:PRO:CG	0.65	2.80	6	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:75:THR:HG21	0.65	1.67	11	5
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:HD12	0.65	1.52	3	2
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:HG21	0.65	2.30	5	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:VAL:HG11	0.65	2.27	5	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:171:GLU:OE2	0.65	1.92	3	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:HG22	0.65	2.32	12	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:159:ALA:N	0.65	2.06	18	1
1:A:37:PHE:CG	2:B:18:ILE:HG21	0.65	2.25	20	2
1:A:40:TYR:CD2	2:B:15:GLU:CB	0.65	2.79	6	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:ALA:HB3	0.65	1.91	8	2
1:A:170:ASP:HA	1:A:173:ILE:HD12	0.65	1.67	1	3
1:A:39:ASN:CG	1:A:55:LEU:HD11	0.65	2.12	20	2
1:A:169:PHE:CZ	1:A:173:ILE:HD11	0.65	2.26	15	2
1:A:58:THR:O	1:A:59:ALA:HB3	0.65	1.91	14	1
1:A:6:CYS:HB3	1:A:55:LEU:HD23	0.65	1.68	2	2
1:A:40:TYR:CG	2:B:15:GLU:CB	0.65	2.79	6	1
1:A:134:GLN:N	1:A:134:GLN:NE2	0.65	2.45	6	5
1:A:174:LEU:H	1:A:174:LEU:HD22	0.65	1.52	9	11
1:A:23:TYR:CZ	1:A:159:ALA:O	0.65	2.49	2	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:46:ILE:HD11	0.65	2.22	2	4
1:A:36:VAL:HG11	1:A:62:GLU:CG	0.65	2.22	2	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:165:LEU:CD1	0.65	2.79	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:THR:N	2:B:20:VAL:HG21	0.65	2.07	7	1
1:A:90:PHE:HE1	1:A:112:LEU:HD22	0.65	1.50	8	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:165:LEU:CD1	0.65	2.78	5	4
1:A:163:LYS:CE	1:A:165:LEU:HD11	0.65	2.22	14	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:165:LEU:HD21	0.65	1.69	3	1
1:A:70:LEU:HD12	2:B:37:ALA:HA	0.65	1.68	9	1
1:A:18:CYS:HA	2:B:26:THR:O	0.65	1.92	13	12
2:B:18:ILE:C	2:B:18:ILE:HD12	0.65	2.12	12	5
1:A:28:PHE:CG	1:A:28:PHE:O	0.64	2.50	1	3
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HB3	0.64	1.91	2	9
1:A:174:LEU:HD22	1:A:174:LEU:H	0.64	1.52	13	7
1:A:3:THR:HG23	1:A:53:LEU:HD13	0.64	1.68	20	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:175:ALA:CB	0.64	2.22	18	5
2:B:7:GLU:OE2	2:B:10:LEU:HD23	0.64	1.92	14	1
1:A:9:VAL:HG21	1:A:80:VAL:HG23	0.64	1.69	5	1
1:A:45:MET:C	1:A:46:ILE:HD12	0.64	2.12	3	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:120:ARG:N	0.64	2.07	8	1
1:A:5:LYS:O	1:A:77:VAL:HG13	0.64	1.93	20	3
1:A:21:ILE:HG22	2:B:27:GLY:HA3	0.64	1.68	17	3
2:B:32:ILE:HG22	2:B:32:ILE:O	0.64	1.92	2	1
1:A:97:TRP:CZ3	1:A:98:VAL:HG22	0.64	2.27	6	1
1:A:102:THR:HG21	1:A:108:THR:CB	0.64	2.23	1	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:HG	0.64	2.27	1	5
1:A:75:THR:HG22	1:A:77:VAL:O	0.64	1.92	6	6
1:A:18:CYS:O	1:A:28:PHE:CG	0.64	2.51	10	1
1:A:51:TYR:HE1	1:A:177:LEU:HD21	0.64	1.52	17	1
1:A:170:ASP:O	1:A:174:LEU:HD22	0.64	1.93	18	6
1:A:12:GLY:O	1:A:13:ALA:HB2	0.64	1.92	9	2
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:CG2	0.64	2.60	16	2
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD22	0.64	1.69	7	3
1:A:37:PHE:CG	2:B:18:ILE:CG2	0.64	2.81	20	2
1:A:37:PHE:O	1:A:38:ASP:O	0.64	2.15	2	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:4:ILE:C	0.64	2.13	16	3
1:A:21:ILE:HG23	1:A:26:ASN:OD1	0.64	1.93	1	2
2:B:22:PHE:CD1	2:B:25:VAL:CG2	0.64	2.80	16	5
1:A:63:ASP:OD2	2:B:20:VAL:HG11	0.64	1.91	15	1
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LYS:CG	0.64	2.46	2	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:HD21	0.64	2.27	6	1
1:A:174:LEU:CD1	1:A:174:LEU:N	0.64	2.61	2	3
1:A:23:TYR:CD1	1:A:160:LEU:O	0.64	2.50	9	2
1:A:28:PHE:CE1	2:B:30:THR:CG2	0.64	2.80	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD1	0.64	2.60	10	6
1:A:111:LEU:HD11	1:A:172:ALA:HB2	0.64	1.70	19	3
1:A:8:VAL:HG23	1:A:8:VAL:O	0.64	1.93	11	1
1:A:46:ILE:HA	2:B:10:LEU:HB3	0.64	1.69	15	5
1:A:70:LEU:HD13	1:A:70:LEU:H	0.64	1.53	17	2
1:A:163:LYS:NZ	1:A:165:LEU:HD11	0.64	2.07	14	1
1:A:72:TYR:O	1:A:72:TYR:CG	0.64	2.49	3	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:64:TYR:CD1	0.64	2.27	1	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:112:LEU:HD22	0.64	2.28	8	1
1:A:70:LEU:H	1:A:70:LEU:HD22	0.64	1.50	9	3
1:A:55:LEU:HD22	1:A:56:PHE:H	0.64	1.53	6	3
2:B:29:PHE:C	2:B:30:THR:HG22	0.64	2.12	14	2
1:A:113:VAL:HG21	1:A:168:VAL:HG11	0.64	1.70	5	3
1:A:41:ALA:HB3	2:B:15:GLU:OE1	0.64	1.93	13	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:27:LYS:C	0.64	2.14	9	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:15:GLU:N	0.64	2.60	15	2
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:N	0.64	2.07	15	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:TYR:CE1	0.64	2.51	13	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:161:THR:H	0.64	1.49	16	1
1:A:19:LEU:HB3	1:A:23:TYR:CE2	0.63	2.28	1	2
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:HG22	0.63	1.68	15	2
1:A:15:GLY:O	1:A:19:LEU:HD23	0.63	1.94	8	3
1:A:14:VAL:HG22	2:B:32:ILE:CG2	0.63	2.23	11	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD12	0.63	1.69	13	4
1:A:105:CYS:N	1:A:106:PRO:HD3	0.63	2.08	7	4
1:A:90:PHE:CE1	1:A:94:LYS:NZ	0.63	2.66	16	1
1:A:4:ILE:C	1:A:4:ILE:HD13	0.63	2.14	10	3
1:A:149:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	0.63	1.53	8	2
1:A:7:VAL:HG11	2:B:36:TRP:CZ3	0.63	2.28	7	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:115:THR:HG23	0.63	2.23	6	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:CG2	0.63	2.22	16	3
1:A:79:LEU:HD11	1:A:168:VAL:HG12	0.63	1.69	8	5
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:CG	0.63	2.46	15	3
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:C	0.63	2.14	7	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:137:ILE:CD1	0.63	2.81	11	1
1:A:85:VAL:HB	1:A:129:LEU:HD22	0.63	1.69	20	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:HD13	0.63	2.08	2	4
1:A:21:ILE:HG23	1:A:25:THR:CG2	0.63	2.20	4	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:159:ALA:O	0.63	2.52	8	2
1:A:72:TYR:CE1	1:A:78:PHE:CZ	0.63	2.86	8	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:151:ALA:HB3	0.63	1.70	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:CD1	1:A:23:TYR:C	0.63	2.72	11	2
2:B:36:TRP:O	2:B:37:ALA:HB2	0.63	1.94	11	5
1:A:129:LEU:HD23	1:A:136:PRO:HB3	0.63	1.69	18	1
1:A:85:VAL:HA	1:A:129:LEU:HD21	0.63	1.70	18	2
1:A:94:LYS:CD	1:A:94:LYS:N	0.63	2.59	19	9
1:A:44:VAL:CG1	1:A:46:ILE:HD12	0.63	2.24	7	2
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:HA	0.63	2.08	15	1
1:A:42:VAL:HG13	2:B:14:PHE:HA	0.63	1.69	7	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:136:PRO:CB	0.63	2.23	13	1
1:A:44:VAL:HG22	1:A:51:TYR:HB2	0.63	1.70	16	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:70:LEU:N	0.63	2.52	8	6
1:A:44:VAL:HG12	1:A:51:TYR:CB	0.63	2.23	9	3
1:A:44:VAL:HG13	1:A:46:ILE:CD1	0.63	2.24	3	5
1:A:19:LEU:HD22	1:A:159:ALA:CB	0.63	2.24	18	4
1:A:36:VAL:HG11	1:A:60:GLY:CA	0.63	2.24	14	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:162:GLN:HG2	0.63	2.29	12	1
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:CD2	0.63	2.51	8	1
1:A:37:PHE:H	2:B:20:VAL:CG2	0.63	2.06	16	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:HD22	0.63	1.69	1	1
2:B:23:ASP:O	2:B:24:ALA:HB3	0.63	1.94	20	5
1:A:86:SER:CB	1:A:87:PRO:HD2	0.63	2.24	6	7
1:A:19:LEU:HB3	1:A:159:ALA:HB3	0.63	1.70	10	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:CB	0.63	2.47	15	3
2:B:32:ILE:N	2:B:33:PRO:CD	0.63	2.62	14	6
2:B:22:PHE:CD1	2:B:22:PHE:N	0.63	2.65	4	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:10:GLY:N	0.62	2.62	8	4
1:A:37:PHE:CB	2:B:20:VAL:N	0.62	2.62	3	1
2:B:36:TRP:CD2	2:B:36:TRP:O	0.62	2.52	18	2
1:A:139:PRO:CB	1:A:154:TYR:CD1	0.62	2.81	6	1
1:A:37:PHE:CG	2:B:18:ILE:HD13	0.62	2.29	16	1
1:A:40:TYR:CD2	2:B:16:HIS:HA	0.62	2.29	1	1
1:A:36:VAL:CG2	2:B:25:VAL:CG1	0.62	2.77	13	3
1:A:5:LYS:O	1:A:75:THR:CG2	0.62	2.47	4	13
1:A:21:ILE:O	1:A:25:THR:N	0.62	2.27	20	2
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:HD11	0.62	1.69	20	2
1:A:46:ILE:HG23	2:B:7:GLU:CG	0.62	2.23	6	1
1:A:110:PHE:O	1:A:152:VAL:HG12	0.62	1.95	1	2
2:B:5:ARG:HB2	2:B:6:PRO:CD	0.62	2.25	10	2
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:CD2	0.62	2.62	6	5
1:A:39:ASN:OD1	1:A:56:PHE:CE1	0.62	2.52	3	1
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:CB	0.62	2.47	3	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:PHE:HA	0.62	1.70	10	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:107:LYS:HB3	0.62	2.24	12	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:136:PRO:HB3	0.62	1.71	13	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:129:LEU:N	0.62	2.09	10	2
1:A:173:ILE:O	1:A:177:LEU:HD11	0.62	1.94	14	6
1:A:18:CYS:SG	1:A:19:LEU:HD22	0.62	2.35	11	4
1:A:70:LEU:HD11	2:B:37:ALA:HB1	0.62	1.70	11	1
1:A:84:VAL:HG21	1:A:117:ILE:CB	0.62	2.24	20	1
1:A:159:ALA:O	1:A:161:THR:N	0.62	2.32	10	3
1:A:28:PHE:CB	2:B:28:GLU:CB	0.62	2.78	5	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:CG1	0.62	2.77	12	2
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG23	0.62	1.94	17	3
1:A:23:TYR:CE1	1:A:162:GLN:O	0.62	2.53	14	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:70:LEU:HB3	0.62	1.70	5	1
1:A:41:ALA:O	1:A:42:VAL:CG2	0.62	2.47	1	5
2:B:8:ILE:CG2	2:B:9:SER:N	0.62	2.63	19	2
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:CG	0.62	2.52	3	4
1:A:35:THR:O	2:B:20:VAL:CG2	0.62	2.48	5	4
1:A:22:SER:HA	1:A:27:LYS:N	0.62	2.10	16	4
1:A:14:VAL:HG13	1:A:19:LEU:HD11	0.62	1.70	9	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:16:HIS:O	0.62	2.52	2	4
1:A:55:LEU:HD22	1:A:55:LEU:C	0.62	2.13	17	2
1:A:3:THR:N	1:A:52:THR:HG21	0.62	2.09	15	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:160:LEU:O	0.62	2.53	4	3
1:A:40:TYR:CD2	2:B:16:HIS:O	0.62	2.53	3	2
1:A:158:SER:C	1:A:162:GLN:HB3	0.62	2.15	12	1
1:A:40:TYR:CG	2:B:15:GLU:HB3	0.62	2.30	6	2
1:A:4:ILE:HD13	1:A:176:ALA:CA	0.62	2.23	19	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:O	0.62	2.18	6	7
1:A:59:ALA:HB3	1:A:65:ASP:CB	0.62	2.24	17	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:VAL:HG23	0.62	1.94	3	5
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:CB	0.62	2.48	7	6
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:CB	0.62	2.47	14	1
1:A:129:LEU:O	1:A:134:GLN:NE2	0.62	2.33	3	1
1:A:3:THR:H	1:A:52:THR:HG21	0.62	1.54	3	1
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLN:NE2	0.62	2.33	6	2
1:A:100:GLU:HG2	1:A:101:ILE:HG22	0.62	1.71	8	1
1:A:22:SER:CB	1:A:159:ALA:HB1	0.61	2.24	20	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:15:GLU:O	0.61	2.48	10	2
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:HD11	0.61	1.71	14	1
1:A:67:LEU:O	1:A:70:LEU:HD11	0.61	1.95	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:THR:O	1:A:78:PHE:CE1	0.61	2.53	13	2
2:B:5:ARG:HB3	2:B:6:PRO:CD	0.61	2.25	18	10
1:A:19:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CD1	0.61	2.29	4	3
1:A:18:CYS:HA	1:A:28:PHE:CB	0.61	2.25	10	1
1:A:15:GLY:O	1:A:19:LEU:CD2	0.61	2.48	15	1
1:A:3:THR:CA	1:A:52:THR:HG21	0.61	2.24	4	2
1:A:4:ILE:CD1	1:A:176:ALA:CB	0.61	2.77	5	7
1:A:102:THR:CG2	1:A:105:CYS:O	0.61	2.49	3	3
1:A:36:VAL:CG1	1:A:37:PHE:N	0.61	2.62	1	4
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:CB	0.61	2.48	4	8
1:A:4:ILE:HD12	1:A:77:VAL:HG11	0.61	1.70	17	1
1:A:75:THR:HG22	1:A:75:THR:O	0.61	1.95	15	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:TYR:CZ	0.61	2.54	14	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TYR:CE1	0.61	2.53	3	1
1:A:2:GLN:NE2	1:A:2:GLN:N	0.61	2.48	3	1
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CD2	0.61	2.84	18	3
1:A:28:PHE:CD1	2:B:30:THR:HG21	0.61	2.30	5	1
1:A:40:TYR:CE2	2:B:16:HIS:O	0.61	2.54	3	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:154:TYR:CE2	0.61	2.84	1	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:19:HIS:C	0.61	2.16	15	2
1:A:37:PHE:HB3	2:B:20:VAL:N	0.61	2.10	3	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:154:TYR:CD2	0.61	2.84	7	5
2:B:36:TRP:O	2:B:36:TRP:CG	0.61	2.54	4	2
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:HG13	0.61	1.72	13	1
2:B:18:ILE:CD1	2:B:18:ILE:N	0.61	2.64	8	5
1:A:125:THR:O	1:A:129:LEU:HD12	0.61	1.94	14	1
1:A:115:THR:HG22	1:A:157:CYS:SG	0.61	2.34	2	1
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:HG23	0.61	1.96	18	3
1:A:154:TYR:O	1:A:154:TYR:CG	0.61	2.54	13	5
1:A:62:GLU:HB3	1:A:64:TYR:CD1	0.61	2.30	19	2
1:A:42:VAL:HG22	1:A:43:THR:H	0.61	1.54	3	4
1:A:115:THR:HG22	1:A:116:GLN:HG3	0.61	1.71	14	2
1:A:8:VAL:HG22	1:A:16:LYS:HB2	0.61	1.72	14	1
1:A:38:ASP:CB	2:B:18:ILE:CD1	0.61	2.77	5	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:CD1	0.61	2.54	6	2
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:CB	0.61	2.49	14	8
1:A:77:VAL:HG11	1:A:176:ALA:CB	0.61	2.25	16	4
1:A:103:HIS:O	1:A:104:HIS:CD2	0.61	2.54	3	3
1:A:46:ILE:N	1:A:46:ILE:HD12	0.61	2.11	11	1
1:A:22:SER:N	1:A:27:LYS:O	0.61	2.33	10	1
1:A:75:THR:O	1:A:78:PHE:CD2	0.61	2.54	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:VAL:CG2	1:A:79:LEU:N	0.61	2.64	2	2
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:HD12	0.61	1.96	8	1
1:A:145:LEU:O	1:A:145:LEU:HD23	0.61	1.96	18	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:129:LEU:N	0.60	2.10	7	3
1:A:44:VAL:HG13	1:A:46:ILE:HD12	0.60	1.73	7	3
1:A:85:VAL:HG11	1:A:126:ILE:HD11	0.60	1.71	16	2
1:A:2:GLN:C	1:A:52:THR:HG21	0.60	2.16	17	3
1:A:4:ILE:HG12	1:A:77:VAL:HG21	0.60	1.73	12	1
1:A:53:LEU:CD2	1:A:53:LEU:N	0.60	2.63	12	1
1:A:154:TYR:CD1	1:A:154:TYR:O	0.60	2.53	6	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:176:ALA:HB1	0.60	2.27	13	6
1:A:90:PHE:CD1	1:A:137:ILE:CG1	0.60	2.83	11	1
1:A:94:LYS:HB3	1:A:145:LEU:HD11	0.60	1.71	11	1
1:A:19:LEU:O	1:A:159:ALA:CB	0.60	2.49	10	1
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:CE3	0.60	2.54	9	3
1:A:13:ALA:O	1:A:14:VAL:CB	0.60	2.49	12	3
1:A:23:TYR:CD1	1:A:165:LEU:HD11	0.60	2.31	3	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:37:PHE:O	0.60	2.54	9	2
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:HG	0.60	2.31	1	2
1:A:46:ILE:HG22	2:B:7:GLU:HB2	0.60	1.71	1	4
1:A:173:ILE:O	1:A:177:LEU:CD1	0.60	2.49	11	20
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:HB3	0.60	1.72	9	3
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:CB	0.60	2.50	1	3
1:A:4:ILE:CB	1:A:176:ALA:HB1	0.60	2.25	11	2
1:A:37:PHE:CD2	1:A:62:GLU:HG3	0.60	2.32	17	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:162:GLN:HA	0.60	2.32	15	2
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:N	0.60	2.69	5	2
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:H	0.60	1.55	12	2
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:HB3	0.60	2.26	13	10
1:A:75:THR:O	1:A:78:PHE:CE2	0.60	2.54	10	3
1:A:86:SER:CB	1:A:87:PRO:CD	0.60	2.79	6	7
1:A:28:PHE:CD1	2:B:29:PHE:O	0.60	2.54	3	3
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:HD13	0.60	1.96	10	1
1:A:35:THR:O	1:A:37:PHE:N	0.60	2.34	9	2
1:A:112:LEU:HD21	1:A:153:LYS:C	0.60	2.17	13	1
1:A:97:TRP:N	1:A:97:TRP:CD1	0.60	2.63	13	6
1:A:85:VAL:HG11	1:A:120:ARG:HA	0.60	1.73	19	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:51:TYR:CD1	0.60	2.32	7	4
1:A:35:THR:O	1:A:36:VAL:HB	0.60	1.96	10	5
1:A:36:VAL:O	1:A:38:ASP:N	0.60	2.34	10	8
1:A:17:THR:HG21	1:A:57:ASP:OD2	0.60	1.96	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:OH	1:A:158:SER:O	0.60	2.15	3	4
1:A:36:VAL:HG12	1:A:58:THR:O	0.60	1.96	13	1
1:A:111:LEU:N	1:A:111:LEU:CD2	0.60	2.65	2	9
1:A:129:LEU:CD1	1:A:129:LEU:N	0.60	2.65	19	2
1:A:133:LYS:C	1:A:134:GLN:NE2	0.60	2.55	4	6
1:A:6:CYS:C	1:A:7:VAL:HG22	0.60	2.16	18	2
1:A:8:VAL:CG2	2:B:36:TRP:CE3	0.60	2.85	15	1
1:A:39:ASN:CB	1:A:55:LEU:CD1	0.60	2.80	2	2
1:A:40:TYR:HB3	2:B:16:HIS:C	0.60	2.17	12	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:THR:HG22	0.60	1.96	8	2
1:A:76:ASP:OD1	1:A:76:ASP:N	0.60	2.34	8	2
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:LYS:N	0.60	2.65	2	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:159:ALA:HB2	0.60	1.71	17	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:N	0.60	2.12	17	1
1:A:154:TYR:O	1:A:154:TYR:CD2	0.60	2.55	4	4
1:A:21:ILE:CG2	2:B:26:THR:O	0.60	2.50	4	1
1:A:84:VAL:HA	1:A:137:ILE:HG23	0.60	1.74	13	3
1:A:43:THR:O	2:B:13:ASP:CB	0.60	2.50	14	6
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:HG12	0.60	1.96	17	3
2:B:18:ILE:HD12	2:B:18:ILE:C	0.60	2.17	9	2
1:A:132:ASN:CB	1:A:134:GLN:NE2	0.60	2.65	3	1
1:A:13:ALA:O	1:A:14:VAL:CG2	0.60	2.50	12	1
1:A:111:LEU:CG	1:A:172:ALA:HB2	0.60	2.26	1	8
1:A:36:VAL:HG23	2:B:25:VAL:CG1	0.60	2.25	1	1
1:A:42:VAL:HG13	2:B:15:GLU:CB	0.60	2.26	19	2
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:HD22	0.60	2.12	18	3
1:A:21:ILE:CB	1:A:28:PHE:HA	0.60	2.26	10	1
2:B:29:PHE:N	2:B:29:PHE:CD1	0.60	2.70	10	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:15:GLU:HA	0.60	2.27	14	2
1:A:79:LEU:CD1	1:A:168:VAL:HG13	0.60	2.26	2	1
2:B:26:THR:O	2:B:26:THR:CG2	0.60	2.50	5	1
1:A:41:ALA:C	1:A:42:VAL:HG23	0.59	2.16	1	5
1:A:27:LYS:O	2:B:27:GLY:O	0.59	2.20	13	7
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:HB3	0.59	1.96	19	1
1:A:134:GLN:NE2	1:A:134:GLN:N	0.59	2.49	18	8
1:A:130:ALA:O	1:A:134:GLN:N	0.59	2.34	11	1
1:A:22:SER:CA	1:A:27:LYS:O	0.59	2.50	10	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:162:GLN:CB	0.59	2.85	17	1
1:A:158:SER:N	1:A:165:LEU:HD21	0.59	2.12	4	2
1:A:159:ALA:HB1	2:B:29:PHE:CD2	0.59	2.32	3	2
1:A:28:PHE:CD1	1:A:28:PHE:C	0.59	2.75	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:HG13	0.59	2.31	13	1
1:A:68:ARG:N	1:A:69:PRO:HD2	0.59	2.12	3	12
1:A:65:ASP:O	1:A:68:ARG:CG	0.59	2.50	20	2
1:A:165:LEU:O	1:A:165:LEU:HD22	0.59	1.97	5	2
2:B:22:PHE:CD2	2:B:26:THR:HB	0.59	2.32	4	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:43:THR:N	0.59	2.64	2	1
1:A:39:ASN:CB	1:A:55:LEU:HD13	0.59	2.27	2	1
2:B:8:ILE:HG12	2:B:9:SER:N	0.59	2.12	3	7
1:A:98:VAL:N	1:A:99:PRO:CD	0.59	2.65	7	19
1:A:152:VAL:CG2	1:A:175:ALA:CB	0.59	2.80	15	8
1:A:111:LEU:CD1	1:A:152:VAL:CG1	0.59	2.79	4	4
1:A:142:ALA:HB1	1:A:154:TYR:CD1	0.59	2.31	12	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:46:ILE:CD1	0.59	2.79	4	6
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:O	0.59	1.98	10	2
2:B:20:VAL:HG21	2:B:26:THR:HB	0.59	1.73	17	1
1:A:149:LEU:HD22	1:A:150:LYS:N	0.59	2.12	2	1
1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:HD23	0.59	2.13	12	1
1:A:67:LEU:HD12	2:B:36:TRP:CZ2	0.59	2.31	12	1
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:HG22	0.59	1.97	13	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:159:ALA:CB	0.59	2.27	11	1
1:A:27:LYS:O	2:B:27:GLY:HA3	0.59	1.98	11	2
1:A:18:CYS:O	1:A:28:PHE:HB3	0.59	1.98	10	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:HD23	0.59	2.12	4	2
1:A:42:VAL:HG13	1:A:53:LEU:HD21	0.59	1.73	3	1
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:CG2	0.59	2.28	6	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:71:SER:N	0.59	2.65	18	1
1:A:8:VAL:O	2:B:37:ALA:HB2	0.59	1.96	16	1
2:B:24:ALA:HB1	2:B:28:GLU:OE2	0.59	1.98	15	2
1:A:18:CYS:CB	1:A:28:PHE:CD2	0.59	2.86	10	1
1:A:139:PRO:O	1:A:154:TYR:CD2	0.59	2.56	13	1
1:A:8:VAL:HG11	2:B:35:GLN:CB	0.59	2.26	16	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:13:ASP:OD1	0.59	1.98	1	1
1:A:35:THR:O	1:A:36:VAL:CG2	0.59	2.50	7	3
1:A:4:ILE:CG2	1:A:52:THR:O	0.59	2.51	8	16
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD12	0.59	2.17	18	4
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:HD21	0.59	2.27	15	2
1:A:36:VAL:CG1	1:A:60:GLY:CA	0.59	2.80	14	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:90:PHE:CD1	0.59	2.91	4	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:158:SER:O	0.59	2.56	3	1
1:A:108:THR:HG22	1:A:109:PRO:HD2	0.59	1.75	1	2
1:A:47:GLY:N	2:B:9:SER:O	0.59	2.34	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:22:PHE:N	2:B:22:PHE:CD1	0.59	2.64	19	1
1:A:23:TYR:HB3	1:A:165:LEU:HD22	0.59	1.70	20	1
1:A:27:LYS:CG	2:B:25:VAL:O	0.59	2.51	10	1
1:A:155:VAL:HG11	1:A:168:VAL:HA	0.59	1.74	17	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:62:GLU:CG	0.59	2.85	17	1
1:A:100:GLU:C	1:A:101:ILE:HG22	0.59	2.17	8	2
1:A:44:VAL:CG2	1:A:53:LEU:CD1	0.59	2.80	14	1
1:A:28:PHE:CD1	2:B:30:THR:CG2	0.59	2.85	5	1
1:A:98:VAL:CG1	1:A:149:LEU:CD2	0.59	2.81	3	1
1:A:94:LYS:HD3	1:A:94:LYS:N	0.59	2.13	19	11
1:A:162:GLN:N	1:A:162:GLN:OE1	0.59	2.35	19	1
2:B:20:VAL:HG23	2:B:22:PHE:CE2	0.59	2.33	4	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:111:LEU:N	0.59	2.66	5	4
1:A:21:ILE:HG21	2:B:27:GLY:HA2	0.59	1.75	5	1
1:A:28:PHE:CE1	2:B:29:PHE:O	0.59	2.56	3	1
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:HB2	0.59	1.98	17	9
1:A:103:HIS:O	1:A:104:HIS:CG	0.59	2.56	2	5
2:B:8:ILE:CD1	2:B:9:SER:N	0.59	2.66	11	2
1:A:94:LYS:HG3	1:A:145:LEU:HD21	0.59	1.73	17	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:15:GLY:N	0.59	2.12	15	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:HG3	0.59	2.33	14	2
1:A:27:LYS:O	2:B:26:THR:HG23	0.59	1.98	14	1
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LYS:HB3	0.59	1.98	2	1
2:B:29:PHE:CD1	2:B:29:PHE:O	0.59	2.56	7	2
1:A:21:ILE:HG21	2:B:27:GLY:CA	0.59	2.28	1	2
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:THR:N	0.59	2.13	14	8
2:B:5:ARG:CD	2:B:6:PRO:N	0.59	2.66	16	2
1:A:18:CYS:CB	2:B:26:THR:O	0.59	2.50	5	4
1:A:19:LEU:CD1	1:A:159:ALA:CB	0.59	2.81	5	4
1:A:8:VAL:CG2	2:B:36:TRP:CB	0.59	2.81	20	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:149:LEU:HD23	0.59	1.74	4	2
1:A:163:LYS:CG	1:A:163:LYS:O	0.59	2.51	18	1
1:A:84:VAL:HG12	1:A:137:ILE:CG2	0.58	2.22	19	2
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.58	2.66	10	4
1:A:70:LEU:HD11	2:B:37:ALA:HB2	0.58	1.75	11	1
1:A:4:ILE:N	1:A:52:THR:OG1	0.58	2.35	17	3
1:A:35:THR:HG21	2:B:36:TRP:CH2	0.58	2.32	17	1
2:B:22:PHE:CD1	2:B:22:PHE:O	0.58	2.55	4	1
1:A:59:ALA:HA	2:B:20:VAL:CG1	0.58	2.27	12	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:GLY:N	0.58	2.13	12	7
1:A:82:PHE:O	1:A:115:THR:HG22	0.58	1.96	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:VAL:O	2:B:36:TRP:CH2	0.58	2.56	17	1
2:B:18:ILE:CG2	2:B:19:HIS:N	0.58	2.66	2	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:134:GLN:O	0.58	2.51	3	1
1:A:113:VAL:HG22	1:A:168:VAL:HG11	0.58	1.74	7	3
1:A:23:TYR:CE2	1:A:163:LYS:N	0.58	2.71	18	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LYS:N	0.58	2.36	9	5
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ASN:N	0.58	2.14	13	6
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:CB	0.58	2.50	8	5
1:A:110:PHE:O	1:A:152:VAL:CG1	0.58	2.50	20	6
1:A:70:LEU:HD22	2:B:36:TRP:O	0.58	1.98	20	1
1:A:75:THR:O	1:A:77:VAL:N	0.58	2.36	12	13
1:A:22:SER:OG	1:A:159:ALA:HB1	0.58	1.98	4	1
2:B:26:THR:HG23	2:B:29:PHE:H	0.58	1.57	2	1
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:CG2	0.58	2.51	5	1
2:B:5:ARG:N	2:B:5:ARG:CD	0.58	2.65	7	1
1:A:67:LEU:C	1:A:69:PRO:HD2	0.58	2.19	20	14
1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASP:N	0.58	2.14	8	15
1:A:46:ILE:HG22	2:B:7:GLU:HG3	0.58	1.75	5	3
1:A:18:CYS:HA	1:A:28:PHE:CD2	0.58	2.34	10	1
2:B:5:ARG:HB2	2:B:6:PRO:HD3	0.58	1.75	15	4
1:A:163:LYS:CD	1:A:165:LEU:HD11	0.58	2.27	14	1
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:CB	0.58	2.51	7	3
1:A:14:VAL:HG13	1:A:115:THR:HG23	0.58	1.76	6	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:159:ALA:CA	0.58	2.28	16	2
1:A:37:PHE:O	2:B:18:ILE:O	0.58	2.21	1	1
1:A:118:ASP:HB3	1:A:161:THR:HG21	0.58	1.75	20	2
1:A:162:GLN:O	1:A:163:LYS:HB2	0.58	1.97	14	5
1:A:117:ILE:HG23	1:A:158:SER:OG	0.58	1.99	10	1
2:B:5:ARG:HB2	2:B:6:PRO:HD2	0.58	1.74	2	7
1:A:46:ILE:O	1:A:49:GLU:N	0.58	2.34	16	5
1:A:40:TYR:CD1	2:B:16:HIS:O	0.58	2.56	14	3
1:A:37:PHE:CD1	1:A:64:TYR:CE1	0.58	2.91	4	1
1:A:21:ILE:O	1:A:24:THR:N	0.58	2.37	1	4
1:A:19:LEU:HD22	1:A:159:ALA:HB1	0.58	1.75	6	5
1:A:169:PHE:CZ	1:A:170:ASP:OD1	0.58	2.57	19	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ASN:H	0.58	1.58	19	4
1:A:18:CYS:CB	2:B:26:THR:HA	0.58	2.28	20	1
1:A:22:SER:HA	1:A:27:LYS:O	0.58	1.98	10	1
1:A:18:CYS:HB2	1:A:28:PHE:CD2	0.58	2.33	10	1
1:A:80:VAL:CG1	1:A:82:PHE:CE2	0.58	2.86	10	3
2:B:22:PHE:CE1	2:B:31:GLY:O	0.58	2.57	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:HZ3	0.58	1.58	17	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:38:ASP:OD1	0.58	2.57	5	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:160:LEU:C	0.58	2.77	18	1
1:A:5:LYS:CB	1:A:75:THR:HG22	0.58	2.28	10	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:56:PHE:CD2	0.58	2.56	19	1
2:B:18:ILE:O	2:B:18:ILE:HD12	0.58	1.98	3	2
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:HD11	0.58	1.76	8	2
1:A:36:VAL:HG11	2:B:20:VAL:HG11	0.58	1.74	10	2
1:A:27:LYS:HG3	2:B:25:VAL:O	0.58	1.99	10	1
2:B:16:HIS:NE2	2:B:19:HIS:NE2	0.58	2.52	17	1
1:A:20:LEU:N	1:A:165:LEU:CD1	0.58	2.66	4	1
1:A:90:PHE:O	1:A:90:PHE:CD1	0.58	2.56	3	1
1:A:2:GLN:N	1:A:2:GLN:NE2	0.58	2.51	8	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:62:GLU:CB	0.58	2.25	13	1
1:A:90:PHE:CD2	1:A:94:LYS:HE3	0.58	2.33	1	1
2:B:10:LEU:HD12	2:B:10:LEU:O	0.58	1.97	1	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:HD21	0.58	2.34	11	2
1:A:46:ILE:CG2	2:B:7:GLU:HB2	0.58	2.29	7	4
1:A:77:VAL:HG23	1:A:77:VAL:O	0.58	1.99	14	3
1:A:90:PHE:CE1	1:A:94:LYS:HE2	0.58	2.34	17	4
1:A:9:VAL:CG2	1:A:10:GLY:N	0.58	2.66	6	5
1:A:23:TYR:CE1	1:A:161:THR:O	0.58	2.57	17	1
1:A:72:TYR:O	1:A:72:TYR:CD1	0.58	2.57	17	1
1:A:75:THR:O	1:A:78:PHE:CZ	0.58	2.57	17	3
1:A:149:LEU:C	1:A:149:LEU:HD22	0.58	2.19	8	3
1:A:102:THR:CG2	1:A:106:PRO:CG	0.58	2.82	2	2
1:A:104:HIS:O	1:A:105:CYS:CB	0.58	2.51	7	1
1:A:72:TYR:HB2	1:A:73:PRO:HD2	0.58	1.75	18	1
1:A:44:VAL:HG12	2:B:13:ASP:CB	0.58	2.29	16	1
2:B:10:LEU:CG	2:B:10:LEU:O	0.58	2.52	1	2
2:B:6:PRO:O	2:B:7:GLU:O	0.58	2.22	4	13
1:A:28:PHE:CD2	2:B:30:THR:HG22	0.58	2.34	15	2
1:A:18:CYS:C	1:A:19:LEU:HD23	0.58	2.18	10	1
1:A:26:ASN:O	2:B:27:GLY:CA	0.58	2.52	10	1
1:A:14:VAL:HG21	2:B:30:THR:H	0.58	1.59	17	1
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:CE3	0.58	2.34	17	2
1:A:28:PHE:CD1	1:A:160:LEU:HD22	0.58	2.34	4	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:18:ILE:HD13	0.58	2.34	2	1
1:A:72:TYR:CD1	1:A:72:TYR:O	0.58	2.57	3	1
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:CG	0.58	2.57	13	2
1:A:45:MET:CB	2:B:10:LEU:HD22	0.58	2.29	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:CD2	0.58	2.52	19	3
2:B:10:LEU:HD12	2:B:10:LEU:N	0.58	2.13	20	3
1:A:23:TYR:CG	1:A:162:GLN:HB2	0.58	2.34	17	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:90:PHE:CE1	0.58	2.92	14	1
1:A:98:VAL:N	1:A:99:PRO:HD2	0.57	2.14	19	20
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CD2	0.57	2.66	19	2
2:B:5:ARG:HD2	2:B:6:PRO:CD	0.57	2.29	19	2
1:A:113:VAL:CG1	1:A:114:GLY:N	0.57	2.67	20	2
1:A:57:ASP:O	1:A:58:THR:O	0.57	2.22	18	5
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:HD22	0.57	2.39	17	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:165:LEU:HD12	0.57	1.76	17	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:173:ILE:HD11	0.57	2.34	15	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:58:THR:O	0.57	1.99	15	1
1:A:160:LEU:O	1:A:160:LEU:HD22	0.57	1.99	14	1
1:A:14:VAL:O	2:B:36:TRP:CZ2	0.57	2.57	14	1
1:A:25:THR:OG1	2:B:27:GLY:CA	0.57	2.52	4	1
1:A:46:ILE:N	1:A:49:GLU:O	0.57	2.35	5	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:106:PRO:HG2	0.57	1.75	18	1
1:A:42:VAL:HG22	2:B:14:PHE:HB2	0.57	1.76	1	1
1:A:44:VAL:O	1:A:50:PRO:HA	0.57	1.99	16	7
2:B:36:TRP:CG	2:B:36:TRP:O	0.57	2.57	18	4
1:A:117:ILE:N	1:A:158:SER:OG	0.57	2.37	10	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:HB2	0.57	2.33	14	3
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:CB	0.57	2.52	14	3
1:A:37:PHE:CZ	1:A:63:ASP:OD2	0.57	2.57	4	1
2:B:29:PHE:CZ	2:B:33:PRO:HD2	0.57	2.34	6	1
1:A:105:CYS:CB	1:A:106:PRO:HD3	0.57	2.30	18	2
1:A:36:VAL:CG2	2:B:21:GLY:HA3	0.57	2.28	1	1
2:B:22:PHE:O	2:B:25:VAL:CG2	0.57	2.51	9	4
1:A:44:VAL:HA	2:B:12:SER:O	0.57	1.99	16	5
2:B:5:ARG:CD	2:B:5:ARG:N	0.57	2.67	15	2
1:A:117:ILE:HG21	1:A:156:GLU:HG3	0.57	1.76	4	1
2:B:26:THR:HG23	2:B:26:THR:O	0.57	1.98	4	2
1:A:39:ASN:N	2:B:17:THR:OG1	0.57	2.37	13	2
1:A:3:THR:O	1:A:3:THR:HG22	0.57	1.97	18	5
1:A:41:ALA:O	2:B:15:GLU:CB	0.57	2.53	13	2
1:A:36:VAL:CG1	1:A:59:ALA:CB	0.57	2.81	7	2
1:A:4:ILE:O	1:A:52:THR:O	0.57	2.22	8	1
1:A:84:VAL:HG12	1:A:137:ILE:HG22	0.57	1.75	9	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:111:LEU:H	0.57	1.56	1	7
1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:GLY:H	0.57	1.59	14	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:32:ILE:HD13	2:B:32:ILE:N	0.57	2.15	19	1
2:B:33:PRO:O	2:B:34:GLU:C	0.57	2.43	13	7
1:A:158:SER:O	1:A:160:LEU:N	0.57	2.37	12	4
1:A:59:ALA:O	1:A:62:GLU:N	0.57	2.38	20	4
1:A:154:TYR:O	1:A:154:TYR:CD1	0.57	2.58	15	1
1:A:158:SER:OG	1:A:161:THR:CG2	0.57	2.53	15	1
1:A:21:ILE:HB	2:B:27:GLY:HA2	0.57	1.75	15	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:CB	0.57	2.87	14	2
1:A:62:GLU:O	1:A:64:TYR:CE2	0.57	2.57	14	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:SER:N	0.57	2.14	14	1
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:CD2	0.57	2.57	3	2
1:A:64:TYR:CE2	1:A:67:LEU:HD21	0.57	2.33	12	1
1:A:86:SER:HA	1:A:129:LEU:HD23	0.57	1.75	6	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:160:LEU:C	0.57	2.78	16	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:120:ARG:HG3	0.57	1.76	16	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:94:LYS:CE	0.57	2.88	1	3
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:HB2	0.57	2.27	6	4
1:A:40:TYR:CE2	1:A:42:VAL:HG21	0.57	2.35	19	1
1:A:130:ALA:HA	1:A:134:GLN:NE2	0.57	2.14	20	2
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:CG1	0.57	2.28	12	4
2:B:22:PHE:CD2	2:B:26:THR:CB	0.57	2.87	4	1
1:A:25:THR:CB	2:B:26:THR:O	0.57	2.52	4	1
1:A:158:SER:CB	1:A:161:THR:OG1	0.57	2.52	19	3
1:A:87:PRO:N	1:A:132:ASN:ND2	0.57	2.53	19	1
2:B:22:PHE:CZ	2:B:31:GLY:O	0.57	2.58	10	1
1:A:155:VAL:HG11	1:A:168:VAL:CA	0.57	2.30	17	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:159:ALA:O	0.57	1.98	3	2
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:CB	0.57	2.30	11	1
1:A:37:PHE:CE2	2:B:18:ILE:HB	0.57	2.33	8	2
1:A:53:LEU:HD12	1:A:53:LEU:O	0.57	2.00	10	1
1:A:36:VAL:HG23	2:B:25:VAL:HB	0.57	1.75	9	2
1:A:159:ALA:HA	1:A:163:LYS:CE	0.57	2.30	14	1
2:B:22:PHE:CE2	2:B:26:THR:OG1	0.57	2.54	4	1
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:CG2	0.57	2.29	20	14
1:A:4:ILE:HD11	1:A:76:ASP:O	0.57	1.99	19	1
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:CD1	0.57	2.58	11	1
1:A:84:VAL:HG21	1:A:117:ILE:HB	0.57	1.76	20	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:HB	0.57	1.75	10	2
1:A:67:LEU:O	1:A:70:LEU:CD2	0.57	2.53	10	4
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:CD1	0.57	2.30	17	1
1:A:3:THR:O	1:A:3:THR:CG2	0.57	2.52	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ALA:HB3	1:A:65:ASP:HB3	0.57	1.76	17	1
1:A:28:PHE:HA	2:B:28:GLU:HA	0.57	1.75	4	1
1:A:94:LYS:N	1:A:94:LYS:CD	0.57	2.66	18	5
1:A:98:VAL:HG22	1:A:149:LEU:HD22	0.57	1.75	3	1
1:A:35:THR:HG22	2:B:24:ALA:N	0.57	2.15	9	1
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:CD2	0.57	2.48	1	3
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:N	0.57	2.72	19	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:78:PHE:HB2	0.57	1.77	10	1
1:A:39:ASN:O	1:A:40:TYR:CG	0.57	2.58	15	2
1:A:111:LEU:CD1	1:A:152:VAL:CG2	0.57	2.81	6	3
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:HB	0.57	1.74	6	1
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:CB	0.57	2.30	6	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:159:ALA:HA	0.57	2.34	1	1
1:A:161:THR:O	1:A:162:GLN:CB	0.57	2.52	15	6
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:CB	0.57	2.82	10	1
1:A:95:GLU:O	1:A:99:PRO:CD	0.57	2.53	3	3
2:B:29:PHE:O	2:B:29:PHE:CG	0.57	2.58	7	1
1:A:110:PHE:CD1	1:A:110:PHE:N	0.57	2.71	12	1
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CD1	0.57	2.87	16	2
1:A:37:PHE:H	2:B:20:VAL:HG21	0.57	1.58	16	1
1:A:42:VAL:HG22	2:B:14:PHE:CB	0.56	2.29	1	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:O	0.56	2.23	15	8
1:A:5:LYS:O	1:A:77:VAL:CG2	0.56	2.53	4	3
1:A:28:PHE:N	1:A:28:PHE:CD1	0.56	2.73	10	2
2:B:8:ILE:N	2:B:8:ILE:CD1	0.56	2.64	17	2
1:A:12:GLY:CA	2:B:34:GLU:HA	0.56	2.30	12	2
1:A:8:VAL:HG11	2:B:36:TRP:CD2	0.56	2.35	2	1
1:A:58:THR:OG1	2:B:36:TRP:CD1	0.56	2.57	5	1
1:A:102:THR:HA	1:A:105:CYS:O	0.56	2.00	6	1
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:CB	0.56	2.83	1	5
1:A:21:ILE:CG2	2:B:27:GLY:HA2	0.56	2.30	5	5
2:B:10:LEU:CD2	2:B:10:LEU:O	0.56	2.51	17	3
1:A:162:GLN:O	1:A:163:LYS:CG	0.56	2.53	14	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:163:LYS:HB2	0.56	2.35	18	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:15:GLY:HA3	0.56	1.76	13	1
1:A:21:ILE:HG21	2:B:27:GLY:HA3	0.56	1.77	12	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:162:GLN:OE1	0.56	2.59	19	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:HG21	0.56	2.30	11	2
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:H	0.56	1.60	11	2
1:A:39:ASN:O	1:A:40:TYR:CD1	0.56	2.58	11	1
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:CD2	0.56	2.50	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ALA:C	1:A:42:VAL:HG13	0.56	2.19	6	2
1:A:14:VAL:C	2:B:36:TRP:CH2	0.56	2.79	17	1
1:A:14:VAL:O	2:B:35:GLN:NE2	0.56	2.39	17	2
1:A:35:THR:CG2	2:B:22:PHE:O	0.56	2.54	2	2
1:A:129:LEU:HA	1:A:134:GLN:NE2	0.56	2.14	3	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:NZ	0.56	2.37	6	1
2:B:5:ARG:HB3	2:B:6:PRO:HD2	0.56	1.76	11	8
1:A:18:CYS:CA	2:B:26:THR:O	0.56	2.53	20	5
1:A:4:ILE:HG23	1:A:4:ILE:O	0.56	2.01	20	1
1:A:19:LEU:O	1:A:159:ALA:HB1	0.56	2.01	10	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:165:LEU:C	0.56	2.74	13	8
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:C	0.56	2.20	18	3
1:A:14:VAL:O	2:B:36:TRP:CZ3	0.56	2.59	17	1
1:A:37:PHE:CE2	2:B:18:ILE:HG13	0.56	2.35	6	2
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:CG	0.56	2.53	3	4
1:A:5:LYS:C	1:A:75:THR:HG23	0.56	2.21	9	5
1:A:74:GLN:NE2	1:A:74:GLN:O	0.56	2.38	4	2
1:A:20:LEU:HD12	1:A:165:LEU:CD2	0.56	2.29	3	1
1:A:17:THR:HG21	1:A:57:ASP:CG	0.56	2.21	3	1
1:A:157:CYS:N	1:A:163:LYS:O	0.56	2.39	6	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:25:THR:HG21	0.56	2.31	8	1
1:A:101:ILE:HG23	1:A:104:HIS:HA	0.56	1.78	16	1
1:A:21:ILE:CG2	2:B:27:GLY:CA	0.56	2.83	15	6
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:THR:N	0.56	2.69	16	6
1:A:42:VAL:HG13	2:B:15:GLU:HB3	0.56	1.76	19	2
1:A:62:GLU:HB3	1:A:64:TYR:CE2	0.56	2.35	16	2
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:HD22	0.56	2.30	4	1
1:A:39:ASN:O	1:A:40:TYR:CD2	0.56	2.58	9	2
1:A:71:SER:O	1:A:72:TYR:O	0.56	2.24	8	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:163:LYS:HB2	0.56	2.36	18	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:129:LEU:C	0.56	2.21	16	1
1:A:158:SER:CB	1:A:162:GLN:CB	0.56	2.84	11	2
1:A:59:ALA:O	1:A:61:GLN:N	0.56	2.38	6	4
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:OG	0.56	1.99	20	1
1:A:96:LYS:O	1:A:100:GLU:HG2	0.56	2.01	6	3
1:A:74:GLN:O	1:A:74:GLN:NE2	0.56	2.39	10	2
1:A:68:ARG:C	1:A:70:LEU:HD23	0.56	2.21	2	4
1:A:37:PHE:CD1	2:B:18:ILE:CG2	0.56	2.79	15	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:162:GLN:HB2	0.56	2.35	4	1
1:A:37:PHE:O	1:A:57:ASP:CB	0.56	2.54	5	1
1:A:41:ALA:HB1	1:A:54:GLY:CA	0.56	2.31	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD22	0.56	2.16	16	1
1:A:44:VAL:HG12	2:B:13:ASP:HB3	0.56	1.78	16	1
1:A:76:ASP:CA	1:A:108:THR:HG21	0.56	2.30	1	1
1:A:35:THR:C	1:A:36:VAL:HG23	0.56	2.21	19	4
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:CG	0.56	2.54	10	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:162:GLN:CB	0.56	2.89	4	2
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:CD2	0.56	2.54	10	2
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:CD2	0.56	2.59	14	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:51:TYR:CD2	0.56	2.36	3	1
1:A:174:LEU:HD12	2:B:3:LYS:HE2	0.56	1.78	7	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:14:VAL:O	0.56	2.54	12	1
1:A:47:GLY:CA	2:B:9:SER:HB3	0.56	2.30	6	1
1:A:71:SER:HA	2:B:37:ALA:O	0.56	2.00	6	1
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:CD2	0.56	2.68	18	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:CG	0.56	2.89	1	3
2:B:29:PHE:C	2:B:29:PHE:CD1	0.56	2.79	1	3
1:A:103:HIS:O	1:A:104:HIS:CB	0.56	2.53	2	10
1:A:160:LEU:CD2	2:B:29:PHE:CD2	0.56	2.88	20	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:63:ASP:OD1	0.56	2.59	4	1
1:A:98:VAL:CG2	1:A:149:LEU:HD22	0.56	2.30	3	1
1:A:46:ILE:CG2	2:B:6:PRO:O	0.56	2.54	9	2
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:HB3	0.56	2.31	13	1
1:A:28:PHE:CD2	1:A:28:PHE:O	0.56	2.59	12	4
1:A:56:PHE:CD1	1:A:56:PHE:N	0.56	2.74	15	2
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:O	0.56	2.59	10	1
1:A:159:ALA:CB	1:A:163:LYS:HE3	0.56	2.30	14	1
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:CD1	0.56	2.35	14	1
1:A:158:SER:OG	1:A:163:LYS:CG	0.56	2.54	7	1
1:A:84:VAL:HG22	1:A:120:ARG:CG	0.56	2.31	13	2
1:A:139:PRO:HB2	1:A:154:TYR:CE1	0.56	2.35	6	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:25:THR:CG2	0.56	2.84	8	1
1:A:41:ALA:CB	1:A:54:GLY:CA	0.56	2.83	18	1
1:A:36:VAL:CA	2:B:20:VAL:HG21	0.56	2.31	16	1
1:A:120:ARG:O	1:A:126:ILE:CD1	0.56	2.53	1	4
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:CD1	0.56	2.69	19	7
1:A:68:ARG:CG	1:A:69:PRO:HD3	0.56	2.30	7	3
1:A:7:VAL:N	1:A:75:THR:HG21	0.56	2.15	20	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:125:THR:HG21	0.56	1.76	13	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:N	0.56	2.16	10	2
1:A:36:VAL:O	1:A:58:THR:O	0.56	2.23	17	1
1:A:79:LEU:CD1	1:A:168:VAL:CG1	0.56	2.84	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:HG13	1:A:14:VAL:C	0.56	2.21	15	1
1:A:4:ILE:HG12	1:A:76:ASP:OD1	0.56	2.01	18	1
1:A:70:LEU:O	1:A:71:SER:CB	0.55	2.53	19	1
1:A:90:PHE:CG	1:A:91:GLU:N	0.55	2.75	19	3
2:B:17:THR:C	2:B:18:ILE:HD12	0.55	2.21	20	1
1:A:82:PHE:O	1:A:115:THR:N	0.55	2.39	13	7
1:A:5:LYS:C	1:A:75:THR:CG2	0.55	2.75	3	2
1:A:39:ASN:N	2:B:18:ILE:HG12	0.55	2.16	3	1
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:CG	0.55	2.53	12	2
1:A:129:LEU:HD12	1:A:129:LEU:H	0.55	1.61	6	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:67:LEU:HD11	0.55	2.36	1	1
1:A:70:LEU:O	1:A:72:TYR:N	0.55	2.39	20	8
1:A:169:PHE:CD1	1:A:169:PHE:O	0.55	2.59	11	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:162:GLN:HB2	0.55	2.37	20	1
1:A:76:ASP:O	1:A:108:THR:HG23	0.55	2.01	12	1
1:A:77:VAL:HG12	1:A:176:ALA:HB2	0.55	1.72	18	1
1:A:39:ASN:O	2:B:18:ILE:CG1	0.55	2.54	18	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:75:THR:OG1	0.55	2.55	1	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:154:TYR:CD2	0.55	2.36	16	3
1:A:70:LEU:HD21	2:B:37:ALA:HA	0.55	1.78	7	4
1:A:116:GLN:O	1:A:120:ARG:CB	0.55	2.55	14	1
1:A:161:THR:HG22	1:A:162:GLN:N	0.55	2.16	14	2
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:HB	0.55	2.37	8	2
2:B:20:VAL:HG23	2:B:22:PHE:CD2	0.55	2.36	4	1
1:A:110:PHE:O	1:A:152:VAL:HG13	0.55	2.01	6	2
2:B:29:PHE:CZ	2:B:33:PRO:CG	0.55	2.89	6	1
1:A:84:VAL:HG13	1:A:85:VAL:HG22	0.55	1.77	8	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	0.55	1.76	18	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:CG	0.55	2.54	16	1
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:SER:N	0.55	2.16	13	5
1:A:37:PHE:CD2	2:B:19:HIS:O	0.55	2.60	19	1
2:B:5:ARG:HD3	2:B:5:ARG:C	0.55	2.21	19	1
2:B:10:LEU:HD13	2:B:10:LEU:O	0.55	2.01	20	3
1:A:37:PHE:CE1	2:B:20:VAL:HG11	0.55	2.36	20	1
1:A:56:PHE:N	1:A:56:PHE:CD1	0.55	2.75	9	3
1:A:23:TYR:OH	1:A:159:ALA:CA	0.55	2.55	2	3
1:A:85:VAL:CG1	1:A:129:LEU:HD23	0.55	2.29	5	2
1:A:40:TYR:CD1	2:B:15:GLU:HB3	0.55	2.36	12	1
1:A:107:LYS:CG	1:A:107:LYS:O	0.55	2.55	8	2
1:A:27:LYS:HD2	1:A:27:LYS:N	0.55	2.16	9	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:CD1	0.55	2.69	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:LYS:N	0.55	2.16	16	5
1:A:70:LEU:HD12	1:A:72:TYR:N	0.55	2.17	19	1
1:A:8:VAL:O	2:B:35:GLN:NE2	0.55	2.39	19	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:HB	0.55	2.01	8	13
1:A:36:VAL:O	1:A:57:ASP:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:26:ASN:O	2:B:27:GLY:HA2	0.55	2.01	10	1
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:HG12	0.55	2.16	14	1
1:A:82:PHE:CA	1:A:115:THR:OG1	0.55	2.54	6	2
1:A:80:VAL:CG2	1:A:82:PHE:CE2	0.55	2.89	12	1
1:A:9:VAL:HB	2:B:36:TRP:CZ2	0.55	2.36	13	1
1:A:37:PHE:HB2	1:A:59:ALA:HB1	0.55	1.78	16	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:19:HIS:CB	0.55	2.55	1	1
1:A:75:THR:O	1:A:76:ASP:C	0.55	2.45	3	14
1:A:87:PRO:O	1:A:89:SER:N	0.55	2.38	6	5
1:A:82:PHE:CE2	1:A:90:PHE:CE1	0.55	2.95	20	2
1:A:70:LEU:HB3	2:B:37:ALA:HA	0.55	1.78	8	3
1:A:94:LYS:HG3	1:A:145:LEU:CD1	0.55	2.31	17	1
1:A:58:THR:OG1	2:B:36:TRP:CG	0.55	2.60	8	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:163:LYS:HA	0.55	2.37	2	1
1:A:28:PHE:C	1:A:28:PHE:CD1	0.55	2.80	2	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:94:LYS:HE3	0.55	2.35	2	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:107:LYS:HB2	0.55	1.77	12	1
1:A:5:LYS:C	1:A:76:ASP:CB	0.55	2.75	18	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:176:ALA:CB	0.55	2.54	18	1
2:B:13:ASP:O	2:B:14:PHE:O	0.55	2.24	10	2
1:A:133:LYS:O	1:A:133:LYS:CG	0.55	2.55	17	3
1:A:80:VAL:HG13	1:A:80:VAL:O	0.55	1.99	11	1
1:A:8:VAL:HG23	2:B:36:TRP:HB3	0.55	1.76	20	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:CD1	0.55	2.75	17	3
1:A:4:ILE:CG1	1:A:76:ASP:CB	0.55	2.85	18	1
1:A:28:PHE:CZ	2:B:30:THR:CG2	0.55	2.89	16	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:OD1	0.55	2.55	1	1
1:A:89:SER:O	1:A:92:ASN:ND2	0.55	2.40	15	15
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TYR:CE2	0.55	2.60	8	4
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:CA	0.55	2.84	10	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:CD2	0.55	2.55	10	1
2:B:20:VAL:HG22	2:B:22:PHE:H	0.55	1.61	3	1
1:A:18:CYS:SG	1:A:19:LEU:CD2	0.55	2.95	8	3
1:A:75:THR:O	1:A:76:ASP:CB	0.55	2.53	8	1
1:A:19:LEU:HB3	1:A:23:TYR:CZ	0.55	2.37	6	2
1:A:86:SER:N	1:A:129:LEU:HD22	0.55	2.17	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:VAL:CB	1:A:129:LEU:HD13	0.55	2.32	20	1
1:A:21:ILE:HG13	2:B:26:THR:HG22	0.55	1.79	3	2
1:A:96:LYS:O	1:A:100:GLU:CG	0.55	2.55	13	4
1:A:22:SER:CA	2:B:27:GLY:O	0.55	2.55	15	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:60:GLY:N	0.55	2.16	4	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:162:GLN:CB	0.55	2.55	12	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASP:CB	0.55	2.54	2	9
1:A:63:ASP:C	1:A:64:TYR:CD1	0.55	2.80	16	3
1:A:22:SER:HB2	1:A:159:ALA:HB1	0.55	1.77	20	1
1:A:155:VAL:HG21	1:A:168:VAL:HA	0.55	1.79	20	5
1:A:5:LYS:HB2	1:A:75:THR:HA	0.55	1.78	10	1
1:A:75:THR:CG2	1:A:75:THR:O	0.55	2.55	18	2
1:A:76:ASP:O	1:A:109:PRO:CG	0.55	2.55	18	2
1:A:8:VAL:HG22	1:A:17:THR:OG1	0.55	2.02	7	2
1:A:60:GLY:HA3	2:B:22:PHE:CD2	0.55	2.37	12	1
2:B:18:ILE:CD1	2:B:18:ILE:C	0.55	2.76	9	2
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLN:HB2	0.55	2.01	6	2
1:A:26:ASN:OD1	1:A:35:THR:CG2	0.55	2.55	6	1
1:A:41:ALA:HB1	1:A:54:GLY:HA3	0.55	1.78	18	1
1:A:17:THR:HG23	1:A:18:CYS:N	0.55	2.17	13	1
1:A:22:SER:OG	1:A:160:LEU:CD2	0.54	2.55	10	1
1:A:71:SER:CB	2:B:37:ALA:O	0.54	2.55	10	1
1:A:12:GLY:HA2	2:B:35:GLN:N	0.54	2.17	12	4
1:A:43:THR:HG22	1:A:44:VAL:N	0.54	2.17	4	5
1:A:23:TYR:CD1	1:A:162:GLN:HB3	0.54	2.37	17	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:GLY:N	0.54	2.17	4	4
1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:LYS:N	0.54	2.17	8	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:70:LEU:N	0.54	2.17	18	1
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:HD1	0.54	1.63	1	2
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD23	0.54	1.80	11	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:36:VAL:O	0.54	2.02	20	1
1:A:61:GLN:CG	2:B:21:GLY:HA3	0.54	2.32	17	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:135:LYS:O	0.54	2.55	5	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:LYS:H	0.54	1.63	2	2
1:A:39:ASN:HB3	1:A:55:LEU:CD1	0.54	2.33	2	2
1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD12	0.54	1.63	2	1
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:CD1	0.54	2.67	5	2
2:B:34:GLU:HG3	2:B:37:ALA:O	0.54	2.02	7	3
1:A:94:LYS:HD2	1:A:94:LYS:N	0.54	2.16	12	1
1:A:8:VAL:O	2:B:36:TRP:CD2	0.54	2.60	13	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:162:GLN:CD	0.54	2.81	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:CYS:HB2	1:A:165:LEU:HB3	0.54	1.77	14	7
1:A:1:MET:O	1:A:177:LEU:CA	0.54	2.56	11	1
2:B:28:GLU:OE1	2:B:28:GLU:N	0.54	2.41	10	2
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:O	0.54	2.55	14	2
1:A:25:THR:CG2	2:B:26:THR:O	0.54	2.55	4	1
1:A:38:ASP:H	2:B:19:HIS:H	0.54	1.43	2	1
1:A:59:ALA:O	1:A:62:GLU:CG	0.54	2.55	8	1
1:A:69:PRO:HG2	1:A:70:LEU:HD13	0.54	1.79	8	1
1:A:27:LYS:CD	1:A:27:LYS:N	0.54	2.70	9	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:O	0.54	2.26	11	6
1:A:51:TYR:CD2	1:A:53:LEU:HD23	0.54	2.37	19	1
1:A:40:TYR:O	1:A:54:GLY:CA	0.54	2.55	19	1
1:A:85:VAL:HB	1:A:129:LEU:HD23	0.54	1.79	19	1
1:A:117:ILE:O	1:A:120:ARG:N	0.54	2.39	17	14
1:A:111:LEU:H	1:A:111:LEU:HD22	0.54	1.62	13	8
1:A:95:GLU:O	1:A:99:PRO:CG	0.54	2.55	18	9
1:A:18:CYS:HB2	2:B:28:GLU:O	0.54	2.02	5	4
1:A:170:ASP:O	1:A:174:LEU:CD2	0.54	2.56	18	5
1:A:55:LEU:O	1:A:56:PHE:CD2	0.54	2.61	4	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:129:LEU:H	0.54	1.61	5	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:18:CYS:SG	0.54	2.43	18	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:94:LYS:HD3	0.54	2.32	1	3
1:A:19:LEU:CD2	2:B:29:PHE:HB2	0.54	2.33	17	8
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:N	0.54	2.41	19	1
1:A:158:SER:OG	1:A:161:THR:OG1	0.54	2.25	9	2
1:A:26:ASN:O	2:B:27:GLY:HA3	0.54	2.02	5	2
1:A:75:THR:HB	1:A:78:PHE:CZ	0.54	2.38	16	4
1:A:12:GLY:CA	2:B:34:GLU:OE1	0.54	2.56	20	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.54	1.78	17	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:145:LEU:HD13	0.54	2.36	17	1
1:A:3:THR:CA	1:A:52:THR:OG1	0.54	2.55	17	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:ALA:CB	0.54	2.56	9	6
2:B:29:PHE:CE1	2:B:30:THR:O	0.54	2.61	2	1
2:B:35:GLN:C	2:B:36:TRP:CE3	0.54	2.80	2	1
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLN:CB	0.54	2.54	12	2
1:A:84:VAL:CG2	1:A:120:ARG:CG	0.54	2.86	13	2
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:CG1	0.54	2.90	13	1
1:A:161:THR:HG23	1:A:162:GLN:N	0.54	2.16	16	1
1:A:38:ASP:CB	2:B:18:ILE:HA	0.54	2.29	20	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:CG1	0.54	2.32	12	2
1:A:75:THR:CG2	1:A:77:VAL:O	0.54	2.55	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:CB	0.54	2.55	5	4
1:A:39:ASN:CG	2:B:18:ILE:HD13	0.54	2.23	15	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:38:ASP:N	0.54	2.75	5	1
1:A:159:ALA:HB3	2:B:29:PHE:CD1	0.54	2.37	12	1
1:A:26:ASN:HB2	2:B:27:GLY:HA3	0.54	1.79	1	1
1:A:24:THR:O	1:A:25:THR:HB	0.54	2.01	5	3
2:B:22:PHE:O	2:B:22:PHE:CD1	0.54	2.61	19	1
1:A:118:ASP:CG	1:A:161:THR:HG21	0.54	2.21	11	3
1:A:35:THR:HG21	2:B:36:TRP:CZ3	0.54	2.37	17	1
1:A:113:VAL:HG11	1:A:157:CYS:SG	0.54	2.43	18	7
1:A:159:ALA:CA	1:A:163:LYS:CE	0.54	2.85	14	1
1:A:149:LEU:CD1	1:A:149:LEU:C	0.54	2.76	4	1
1:A:39:ASN:CB	1:A:55:LEU:O	0.54	2.56	5	1
1:A:41:ALA:CB	1:A:56:PHE:CE1	0.54	2.91	5	1
1:A:49:GLU:CG	1:A:49:GLU:O	0.54	2.56	3	1
1:A:13:ALA:CB	1:A:81:CYS:O	0.54	2.56	7	1
1:A:62:GLU:HG3	2:B:20:VAL:HA	0.54	1.78	6	1
1:A:133:LYS:CE	1:A:135:LYS:O	0.54	2.55	13	1
1:A:64:TYR:O	2:B:36:TRP:CE2	0.54	2.61	16	1
1:A:65:ASP:O	1:A:70:LEU:HD21	0.54	2.03	9	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:132:ASN:ND2	0.54	2.18	6	2
1:A:64:TYR:O	1:A:66:ARG:N	0.54	2.41	13	6
1:A:21:ILE:HA	1:A:24:THR:OG1	0.54	2.03	6	3
1:A:38:ASP:CG	1:A:40:TYR:CE2	0.54	2.81	14	1
1:A:63:ASP:C	1:A:64:TYR:CG	0.54	2.80	8	4
1:A:18:CYS:HB3	2:B:26:THR:HA	0.54	1.80	19	2
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:CA	0.54	2.32	19	1
1:A:159:ALA:O	1:A:160:LEU:C	0.54	2.47	15	4
2:B:30:THR:OG1	2:B:31:GLY:N	0.54	2.41	5	5
1:A:137:ILE:HG23	1:A:137:ILE:O	0.54	2.02	18	3
1:A:84:VAL:HG11	1:A:154:TYR:OH	0.54	2.03	14	2
2:B:17:THR:C	2:B:18:ILE:HD13	0.54	2.23	14	1
1:A:97:TRP:O	1:A:100:GLU:CG	0.54	2.56	2	1
1:A:36:VAL:HG23	2:B:26:THR:HB	0.54	1.79	6	1
1:A:98:VAL:HG11	1:A:149:LEU:HG	0.54	1.80	8	1
1:A:11:ASP:OD2	1:A:80:VAL:HG23	0.54	2.03	16	1
1:A:72:TYR:O	1:A:74:GLN:NE2	0.54	2.41	5	3
1:A:160:LEU:CD2	2:B:28:GLU:O	0.54	2.56	10	1
1:A:115:THR:CG2	1:A:116:GLN:N	0.54	2.70	17	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:LYS:HD2	0.54	2.03	4	2
1:A:92:ASN:HD21	1:A:93:VAL:HG13	0.54	1.61	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:VAL:HG22	1:A:78:PHE:HB3	0.54	1.78	2	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:165:LEU:N	0.54	2.71	3	2
1:A:156:GLU:CG	1:A:163:LYS:O	0.54	2.56	7	1
1:A:37:PHE:HB2	1:A:59:ALA:CB	0.54	2.33	16	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:65:ASP:HB3	0.53	1.79	19	2
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:CD	0.53	2.70	11	1
1:A:14:VAL:HG12	2:B:29:PHE:CE2	0.53	2.38	10	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:ASN:ND2	0.53	2.41	8	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:N	0.53	2.70	16	2
1:A:11:ASP:OD2	1:A:80:VAL:HG22	0.53	2.04	2	1
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD12	0.53	2.17	18	2
1:A:28:PHE:CB	2:B:28:GLU:HB2	0.53	2.32	5	1
1:A:93:VAL:O	1:A:97:TRP:NE1	0.53	2.40	7	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:162:GLN:CG	0.53	2.91	12	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:26:ASN:CB	0.53	2.28	6	1
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:HD12	0.53	1.80	13	1
1:A:86:SER:O	1:A:129:LEU:CD2	0.53	2.55	16	1
1:A:64:TYR:O	2:B:36:TRP:CZ2	0.53	2.61	16	1
1:A:117:ILE:HA	1:A:120:ARG:HB2	0.53	1.80	1	2
2:B:14:PHE:CD1	2:B:14:PHE:N	0.53	2.76	5	3
1:A:1:MET:O	1:A:1:MET:CG	0.53	2.56	20	1
1:A:70:LEU:HD13	2:B:37:ALA:HA	0.53	1.79	20	1
1:A:160:LEU:HD22	2:B:28:GLU:O	0.53	2.03	10	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.53	2.33	17	1
2:B:1:GLY:O	2:B:2:SER:CB	0.53	2.55	17	1
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:CD2	0.53	2.38	15	2
1:A:146:ALA:HA	1:A:151:ALA:CB	0.53	2.33	12	3
1:A:2:GLN:HB3	1:A:177:LEU:HD23	0.53	1.78	2	1
2:B:29:PHE:CD1	2:B:30:THR:N	0.53	2.76	2	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:106:PRO:HG2	0.53	2.34	9	2
1:A:128:LYS:O	1:A:131:LYS:CG	0.53	2.56	12	2
1:A:19:LEU:CB	1:A:23:TYR:OH	0.53	2.56	6	1
2:B:2:SER:O	2:B:4:GLU:N	0.53	2.41	6	2
1:A:76:ASP:OD1	1:A:176:ALA:HB1	0.53	2.03	18	1
1:A:72:TYR:CG	1:A:74:GLN:NE2	0.53	2.76	18	1
1:A:40:TYR:CE1	1:A:42:VAL:HB	0.53	2.38	1	1
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:C	0.53	2.47	19	9
1:A:173:ILE:C	1:A:174:LEU:HD13	0.53	2.23	10	4
1:A:81:CYS:SG	1:A:81:CYS:O	0.53	2.66	5	3
1:A:155:VAL:CG1	1:A:168:VAL:HG22	0.53	2.32	15	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:15:GLU:CA	0.53	2.86	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:29:PHE:O	2:B:30:THR:CB	0.53	2.54	14	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:163:LYS:HB2	0.53	2.38	18	3
1:A:118:ASP:N	1:A:118:ASP:OD1	0.53	2.41	4	3
1:A:105:CYS:O	1:A:107:LYS:CE	0.53	2.56	2	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TYR:CD1	0.53	2.62	3	3
1:A:97:TRP:CZ2	1:A:149:LEU:HD23	0.53	2.39	7	2
1:A:14:VAL:CG1	1:A:19:LEU:HD11	0.53	2.33	7	2
1:A:126:ILE:O	1:A:130:ALA:HB2	0.53	2.03	12	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:76:ASP:HB2	0.53	2.34	18	1
1:A:41:ALA:C	1:A:42:VAL:CG2	0.53	2.77	4	4
1:A:53:LEU:CD1	1:A:53:LEU:C	0.53	2.75	19	4
1:A:61:GLN:CG	2:B:23:ASP:HB2	0.53	2.33	19	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:152:VAL:HG11	0.53	1.81	11	1
1:A:74:GLN:NE2	1:A:74:GLN:N	0.53	2.55	11	2
1:A:8:VAL:CG2	1:A:17:THR:OG1	0.53	2.56	20	2
1:A:77:VAL:HG12	1:A:109:PRO:HG2	0.53	1.78	10	1
1:A:18:CYS:O	1:A:28:PHE:CB	0.53	2.57	10	1
1:A:18:CYS:O	1:A:28:PHE:CD1	0.53	2.61	10	1
1:A:65:ASP:O	1:A:69:PRO:CD	0.53	2.57	17	3
1:A:8:VAL:HG22	1:A:16:LYS:CB	0.53	2.33	14	1
1:A:37:PHE:CD1	2:B:18:ILE:HG21	0.53	2.38	2	1
1:A:27:LYS:HG2	1:A:28:PHE:N	0.53	2.18	12	2
1:A:112:LEU:CD2	1:A:153:LYS:O	0.53	2.57	13	1
1:A:16:LYS:HB2	1:A:169:PHE:CE1	0.53	2.39	16	1
2:B:32:ILE:HG23	2:B:33:PRO:HD2	0.53	1.81	16	2
1:A:158:SER:HB3	1:A:162:GLN:CB	0.53	2.33	16	2
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD2	0.53	2.76	2	4
2:B:29:PHE:O	2:B:30:THR:CG2	0.53	2.57	4	5
1:A:21:ILE:HD12	1:A:35:THR:OG1	0.53	2.03	20	1
1:A:27:LYS:CG	2:B:27:GLY:O	0.53	2.56	20	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:17:THR:HG22	0.53	2.37	10	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:4:ILE:O	0.53	2.03	10	2
1:A:85:VAL:HG21	1:A:129:LEU:HD13	0.53	1.79	17	1
1:A:16:LYS:HG3	1:A:165:LEU:HD23	0.53	1.79	15	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:133:LYS:O	0.53	2.56	4	1
1:A:168:VAL:HG12	1:A:169:PHE:N	0.53	2.18	2	1
1:A:146:ALA:O	1:A:151:ALA:N	0.53	2.42	3	3
1:A:36:VAL:HG13	1:A:59:ALA:HB3	0.53	1.79	7	1
1:A:36:VAL:H	2:B:20:VAL:HG11	0.53	1.62	13	2
1:A:139:PRO:HB2	1:A:154:TYR:CD1	0.53	2.37	6	1
1:A:18:CYS:SG	2:B:29:PHE:CE1	0.53	3.00	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:GLY:N	2:B:9:SER:CB	0.53	2.71	6	1
1:A:46:ILE:HG23	2:B:7:GLU:CB	0.53	2.33	6	1
1:A:22:SER:O	1:A:27:LYS:CA	0.53	2.56	18	3
1:A:103:HIS:O	1:A:104:HIS:HB2	0.53	2.04	1	5
1:A:43:THR:O	2:B:12:SER:O	0.53	2.25	19	3
2:B:21:GLY:O	2:B:22:PHE:CB	0.53	2.56	12	6
1:A:158:SER:O	1:A:165:LEU:HD12	0.53	2.04	11	1
1:A:27:LYS:O	2:B:27:GLY:CA	0.53	2.56	11	2
1:A:70:LEU:HD22	2:B:37:ALA:HA	0.53	1.79	20	1
1:A:62:GLU:HB2	2:B:20:VAL:HG13	0.53	1.79	10	1
2:B:5:ARG:CB	2:B:6:PRO:HD3	0.53	2.33	10	1
1:A:41:ALA:O	1:A:42:VAL:CG1	0.53	2.57	6	4
1:A:69:PRO:CG	2:B:36:TRP:O	0.53	2.57	17	1
1:A:140:GLU:O	1:A:144:LYS:CE	0.53	2.57	5	2
1:A:42:VAL:HG22	1:A:43:THR:N	0.53	2.18	3	2
2:B:34:GLU:OE2	2:B:37:ALA:N	0.53	2.42	7	2
1:A:132:ASN:ND2	1:A:133:LYS:HG2	0.53	2.19	8	1
1:A:37:PHE:CD1	2:B:20:VAL:HG11	0.53	2.38	20	1
1:A:84:VAL:CG1	1:A:137:ILE:O	0.53	2.56	10	1
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:CG2	0.53	2.57	17	3
1:A:103:HIS:O	1:A:104:HIS:HB3	0.53	2.02	16	3
1:A:18:CYS:CB	2:B:28:GLU:O	0.53	2.56	14	2
1:A:94:LYS:CD	1:A:145:LEU:HD13	0.53	2.33	4	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:26:THR:CG2	0.53	2.56	7	1
1:A:120:ARG:O	1:A:126:ILE:HD11	0.53	2.02	1	3
1:A:87:PRO:CB	1:A:132:ASN:ND2	0.53	2.72	1	1
2:B:33:PRO:O	2:B:34:GLU:O	0.53	2.26	11	9
1:A:155:VAL:HG11	1:A:167:ASN:C	0.53	2.24	17	2
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:PRO:HD2	0.53	1.79	17	2
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:CB	0.53	2.34	5	1
1:A:6:CYS:SG	1:A:55:LEU:HD22	0.53	2.43	5	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:58:THR:O	0.53	2.57	13	4
1:A:63:ASP:N	1:A:63:ASP:OD1	0.53	2.42	7	1
1:A:102:THR:N	1:A:107:LYS:HB3	0.53	2.19	6	1
1:A:132:ASN:ND2	1:A:133:LYS:CG	0.53	2.71	8	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:THR:CG2	0.53	2.56	8	1
1:A:77:VAL:HG13	1:A:176:ALA:HB2	0.53	1.76	18	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:59:ALA:CB	0.53	2.34	1	2
1:A:36:VAL:O	1:A:37:PHE:O	0.53	2.27	20	3
1:A:62:GLU:CB	1:A:64:TYR:CD1	0.53	2.92	19	2
1:A:46:ILE:N	1:A:46:ILE:CD1	0.53	2.72	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:LEU:CB	1:A:134:GLN:OE1	0.53	2.56	20	1
1:A:19:LEU:HB3	1:A:159:ALA:HB2	0.53	1.81	10	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:HG23	0.53	1.80	10	1
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:CG	0.53	2.39	16	4
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:HB2	0.53	2.04	14	2
1:A:90:PHE:CE2	1:A:94:LYS:HE2	0.53	2.39	14	1
1:A:161:THR:O	1:A:162:GLN:C	0.53	2.47	5	3
1:A:80:VAL:O	1:A:80:VAL:HG13	0.53	2.03	3	1
1:A:102:THR:HB	1:A:107:LYS:CG	0.53	2.34	12	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:ND2	0.53	2.71	6	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:154:TYR:CG	0.53	2.39	18	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:ALA:C	0.53	2.47	19	8
1:A:10:GLY:N	1:A:80:VAL:HG12	0.53	2.18	19	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:15:GLU:CB	0.53	2.87	19	1
2:B:5:ARG:N	2:B:6:PRO:HD3	0.53	2.18	19	1
1:A:14:VAL:CG1	2:B:29:PHE:CD2	0.53	2.92	10	1
1:A:104:HIS:CE1	1:A:105:CYS:HG	0.53	2.22	17	1
1:A:35:THR:CG2	2:B:36:TRP:CZ2	0.53	2.91	17	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:68:ARG:NE	0.53	2.41	15	1
1:A:59:ALA:HA	2:B:21:GLY:CA	0.53	2.34	15	1
2:B:5:ARG:HD3	2:B:6:PRO:N	0.53	2.19	16	2
2:B:23:ASP:O	2:B:24:ALA:C	0.53	2.46	12	7
1:A:46:ILE:HD13	1:A:51:TYR:CD1	0.53	2.39	5	1
1:A:18:CYS:HA	2:B:26:THR:HG23	0.53	1.80	6	2
1:A:19:LEU:CD2	2:B:29:PHE:CB	0.53	2.85	6	1
2:B:7:GLU:CA	2:B:7:GLU:OE1	0.53	2.56	18	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:HG11	0.53	1.81	16	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:165:LEU:CD2	0.52	2.91	1	1
2:B:35:GLN:OE1	2:B:38:ARG:CG	0.52	2.56	1	1
1:A:162:GLN:CA	1:A:162:GLN:OE1	0.52	2.57	19	1
1:A:90:PHE:O	1:A:93:VAL:CG2	0.52	2.57	16	7
1:A:60:GLY:N	2:B:21:GLY:HA2	0.52	2.19	15	1
1:A:157:CYS:CA	1:A:163:LYS:O	0.52	2.57	6	1
1:A:56:PHE:O	1:A:56:PHE:CD1	0.52	2.61	6	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:HG3	0.52	2.03	9	1
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:CB	0.52	2.33	9	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:LEU:CD2	0.52	2.34	1	2
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:HB2	0.52	2.35	1	2
1:A:43:THR:HA	1:A:51:TYR:O	0.52	2.05	3	5
1:A:70:LEU:HD11	2:B:37:ALA:CA	0.52	2.35	19	1
1:A:133:LYS:CD	1:A:135:LYS:O	0.52	2.57	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:TYR:CE2	2:B:15:GLU:HG3	0.52	2.38	11	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:8:VAL:H	0.52	1.64	15	1
1:A:79:LEU:CD2	1:A:79:LEU:N	0.52	2.72	14	3
1:A:168:VAL:CG1	1:A:169:PHE:N	0.52	2.72	2	1
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CZ	0.52	2.90	2	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:94:LYS:NZ	0.52	2.77	7	1
2:B:28:GLU:HG3	2:B:28:GLU:O	0.52	2.03	7	1
1:A:75:THR:HA	1:A:78:PHE:CZ	0.52	2.39	18	1
2:B:7:GLU:OE1	2:B:8:ILE:N	0.52	2.42	18	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:154:TYR:CE2	0.52	2.38	1	1
2:B:10:LEU:CD1	2:B:10:LEU:O	0.52	2.57	1	2
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASP:HB2	0.52	2.03	10	3
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:N	0.52	2.17	12	2
1:A:74:GLN:O	1:A:74:GLN:CG	0.52	2.56	16	2
1:A:22:SER:CB	2:B:27:GLY:O	0.52	2.57	15	1
1:A:58:THR:O	2:B:36:TRP:CE2	0.52	2.62	14	1
1:A:2:GLN:CA	1:A:52:THR:OG1	0.52	2.57	4	1
1:A:3:THR:CG2	1:A:3:THR:O	0.52	2.51	4	1
1:A:45:MET:SD	2:B:12:SER:CB	0.52	2.97	4	1
1:A:42:VAL:CB	2:B:15:GLU:HB3	0.52	2.33	5	1
1:A:39:ASN:ND2	1:A:39:ASN:O	0.52	2.42	7	1
1:A:15:GLY:C	1:A:19:LEU:HD23	0.52	2.25	8	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:18:ILE:HD13	0.52	1.80	18	1
1:A:16:LYS:HB2	1:A:169:PHE:CZ	0.52	2.40	16	1
1:A:5:LYS:CB	1:A:75:THR:HA	0.52	2.34	11	4
1:A:23:TYR:CA	1:A:159:ALA:O	0.52	2.57	11	1
1:A:37:PHE:CB	1:A:62:GLU:OE1	0.52	2.58	11	1
1:A:1:MET:O	1:A:177:LEU:HA	0.52	2.04	2	3
1:A:23:TYR:C	1:A:23:TYR:CD1	0.52	2.82	20	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:165:LEU:CD2	0.52	2.35	20	1
1:A:118:ASP:O	1:A:119:LEU:HB3	0.52	2.05	4	3
2:B:29:PHE:C	2:B:30:THR:CG2	0.52	2.77	10	7
1:A:35:THR:O	1:A:36:VAL:CB	0.52	2.56	5	4
1:A:5:LYS:HD2	1:A:73:PRO:CB	0.52	2.34	15	1
1:A:81:CYS:HB3	1:A:115:THR:HG21	0.52	1.81	2	1
1:A:120:ARG:HA	1:A:126:ILE:CD1	0.52	2.33	2	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:163:LYS:HA	0.52	2.39	5	1
1:A:28:PHE:HB2	2:B:28:GLU:CB	0.52	2.34	5	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:51:TYR:CB	0.52	2.31	13	2
1:A:39:ASN:HB2	2:B:18:ILE:HD11	0.52	1.82	12	1
1:A:40:TYR:CD2	2:B:15:GLU:HB2	0.52	2.39	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:N	0.52	2.19	6	1
1:A:133:LYS:O	1:A:135:LYS:N	0.52	2.42	8	2
1:A:57:ASP:OD1	1:A:57:ASP:N	0.52	2.41	8	1
1:A:37:PHE:CD2	1:A:38:ASP:O	0.52	2.63	18	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:CD2	0.52	2.73	16	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:163:LYS:N	0.52	2.77	16	1
1:A:40:TYR:C	1:A:40:TYR:CD1	0.52	2.83	1	2
2:B:18:ILE:C	2:B:18:ILE:CD1	0.52	2.77	3	3
1:A:169:PHE:C	1:A:169:PHE:CD1	0.52	2.82	11	3
1:A:81:CYS:C	1:A:115:THR:CG2	0.52	2.78	10	1
1:A:28:PHE:CD1	2:B:28:GLU:OE2	0.52	2.63	17	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:VAL:CG2	0.52	2.57	5	5
1:A:119:LEU:HD21	1:A:125:THR:HG21	0.52	1.81	7	2
1:A:98:VAL:HG12	1:A:106:PRO:HB2	0.52	1.82	8	1
1:A:40:TYR:CB	2:B:16:HIS:CB	0.52	2.87	18	1
1:A:129:LEU:O	1:A:129:LEU:HD13	0.52	2.04	16	1
1:A:159:ALA:HB2	2:B:29:PHE:CD1	0.52	2.40	16	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:115:THR:HG23	0.52	2.32	9	1
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:CD1	0.52	2.39	1	2
2:B:8:ILE:HG23	2:B:9:SER:H	0.52	1.64	4	5
1:A:118:ASP:OD2	1:A:160:LEU:CB	0.52	2.58	17	1
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:CG1	0.52	2.58	17	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:135:LYS:O	0.52	2.05	5	3
1:A:97:TRP:HB3	1:A:110:PHE:CZ	0.52	2.39	14	1
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:CG	0.52	2.57	14	1
1:A:60:GLY:O	1:A:61:GLN:CB	0.52	2.57	2	2
1:A:28:PHE:HB3	2:B:28:GLU:CB	0.52	2.34	5	1
1:A:81:CYS:CB	1:A:115:THR:OG1	0.52	2.57	8	1
1:A:69:PRO:C	1:A:70:LEU:HD13	0.52	2.25	9	1
1:A:149:LEU:CD2	1:A:149:LEU:O	0.52	2.50	19	4
1:A:94:LYS:N	1:A:94:LYS:HD3	0.52	2.20	18	2
1:A:23:TYR:CB	1:A:165:LEU:CD2	0.52	2.81	20	1
1:A:4:ILE:CG2	1:A:53:LEU:C	0.52	2.78	20	1
1:A:84:VAL:CG2	1:A:121:ASP:OD2	0.52	2.58	14	1
1:A:46:ILE:CG2	2:B:7:GLU:HG3	0.52	2.34	5	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:68:ARG:CG	0.52	2.57	12	1
2:B:35:GLN:N	2:B:35:GLN:CD	0.52	2.63	8	1
1:A:98:VAL:CG1	1:A:149:LEU:HB2	0.52	2.35	1	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:CG2	0.52	2.97	5	3
1:A:70:LEU:CB	2:B:37:ALA:HA	0.52	2.35	20	3
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:CD1	0.52	2.52	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:35:GLN:HG2	2:B:36:TRP:CD1	0.52	2.40	10	1
1:A:5:LYS:CA	1:A:54:GLY:O	0.52	2.57	15	1
1:A:39:ASN:HB2	2:B:16:HIS:HB2	0.52	1.81	15	1
1:A:1:MET:O	1:A:2:GLN:NE2	0.52	2.40	18	2
1:A:59:ALA:CB	2:B:36:TRP:CH2	0.52	2.92	14	1
1:A:37:PHE:CE1	2:B:18:ILE:HG21	0.52	2.40	2	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:159:ALA:CA	0.52	2.87	5	2
1:A:90:PHE:CD1	1:A:90:PHE:C	0.52	2.81	3	1
1:A:28:PHE:O	2:B:28:GLU:HA	0.52	2.05	8	2
1:A:18:CYS:O	2:B:26:THR:O	0.52	2.28	19	5
1:A:27:LYS:CG	1:A:28:PHE:N	0.52	2.73	12	4
1:A:100:GLU:C	1:A:101:ILE:CG1	0.52	2.78	11	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:HB3	0.52	2.40	11	1
1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:GLY:N	0.52	2.19	7	7
1:A:79:LEU:HD12	1:A:168:VAL:HG12	0.52	1.82	10	1
2:B:6:PRO:O	2:B:7:GLU:CG	0.52	2.57	10	1
1:A:159:ALA:HB2	1:A:163:LYS:HE3	0.52	1.80	14	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:26:ASN:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:8:VAL:CG1	2:B:35:GLN:HB3	0.52	2.35	12	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:53:LEU:HD23	0.52	2.39	13	2
1:A:85:VAL:O	1:A:86:SER:O	0.52	2.28	8	3
1:A:46:ILE:O	1:A:48:GLY:N	0.52	2.43	16	6
1:A:118:ASP:CG	1:A:161:THR:CG2	0.52	2.79	10	1
1:A:81:CYS:O	1:A:115:THR:CG2	0.52	2.57	10	1
2:B:35:GLN:C	2:B:36:TRP:CG	0.52	2.78	8	3
1:A:23:TYR:CG	1:A:163:LYS:HB2	0.52	2.40	14	2
1:A:42:VAL:CB	2:B:14:PHE:O	0.52	2.56	16	2
1:A:89:SER:HA	1:A:92:ASN:OD1	0.52	2.04	2	3
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:CG	0.52	2.35	5	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:HA	0.52	2.39	8	2
1:A:10:GLY:O	2:B:35:GLN:NE2	0.52	2.43	3	1
2:B:8:ILE:H	2:B:8:ILE:HD13	0.52	1.64	3	1
1:A:67:LEU:C	1:A:70:LEU:HD22	0.52	2.25	6	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:163:LYS:HB2	0.52	2.40	18	1
1:A:40:TYR:CB	2:B:16:HIS:HB2	0.52	2.35	18	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:18:CYS:N	0.52	2.73	13	1
1:A:79:LEU:HG	1:A:169:PHE:CE2	0.52	2.40	16	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:THR:H	0.52	2.18	16	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:165:LEU:N	0.52	2.20	9	1
1:A:158:SER:HB3	1:A:161:THR:OG1	0.51	2.05	1	4
2:B:21:GLY:O	2:B:22:PHE:HB2	0.51	2.04	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:CYS:C	1:A:28:PHE:CB	0.51	2.78	10	1
1:A:35:THR:O	2:B:20:VAL:O	0.51	2.27	10	1
1:A:162:GLN:O	1:A:163:LYS:HB3	0.51	2.05	18	4
1:A:162:GLN:O	1:A:162:GLN:CG	0.51	2.58	17	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:171:GLU:HG3	0.51	1.83	17	1
2:B:36:TRP:CD1	2:B:36:TRP:N	0.51	2.75	15	1
1:A:21:ILE:HA	1:A:24:THR:HB	0.51	1.81	14	1
1:A:76:ASP:O	1:A:109:PRO:HG2	0.51	2.05	14	4
1:A:28:PHE:CE1	1:A:160:LEU:HD22	0.51	2.39	4	1
1:A:110:PHE:N	1:A:152:VAL:HG12	0.51	2.20	18	2
1:A:4:ILE:CG2	1:A:53:LEU:HB3	0.51	2.35	12	4
1:A:98:VAL:HG11	1:A:149:LEU:CG	0.51	2.35	8	1
1:A:55:LEU:C	1:A:56:PHE:CD2	0.51	2.84	16	1
1:A:28:PHE:CE1	2:B:30:THR:HG21	0.51	2.40	19	3
1:A:62:GLU:OE2	2:B:21:GLY:N	0.51	2.43	11	1
1:A:161:THR:O	1:A:162:GLN:HB3	0.51	2.05	7	6
1:A:75:THR:HB	1:A:78:PHE:CE1	0.51	2.40	14	8
1:A:18:CYS:C	1:A:28:PHE:HB3	0.51	2.26	10	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:N	0.51	2.75	12	2
1:A:60:GLY:N	2:B:21:GLY:CA	0.51	2.73	15	1
1:A:59:ALA:HB3	2:B:36:TRP:CZ2	0.51	2.40	14	1
1:A:87:PRO:CA	1:A:135:LYS:O	0.51	2.58	4	1
1:A:98:VAL:CG1	1:A:149:LEU:HD23	0.51	2.35	3	2
1:A:87:PRO:HA	1:A:134:GLN:HG3	0.51	1.82	3	1
1:A:39:ASN:N	2:B:18:ILE:CG1	0.51	2.73	3	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:HG12	0.51	2.35	3	2
1:A:42:VAL:HG21	2:B:15:GLU:N	0.51	2.20	12	2
1:A:19:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CG	0.51	2.39	6	2
2:B:29:PHE:CZ	2:B:33:PRO:HG2	0.51	2.40	6	1
1:A:37:PHE:CE1	1:A:65:ASP:OD2	0.51	2.64	16	1
1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:O	0.51	2.03	9	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:75:THR:CG2	0.51	2.88	1	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:70:LEU:H	0.51	2.18	13	6
1:A:144:LYS:O	1:A:148:ASP:N	0.51	2.41	12	5
1:A:65:ASP:OD2	2:B:38:ARG:NH1	0.51	2.44	19	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:87:PRO:HD2	0.51	1.81	6	3
1:A:59:ALA:O	1:A:60:GLY:C	0.51	2.48	15	9
1:A:18:CYS:CA	1:A:28:PHE:CD2	0.51	2.93	10	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:CB	0.51	2.34	10	2
1:A:8:VAL:CG1	1:A:17:THR:OG1	0.51	2.58	17	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:51:TYR:CB	0.51	2.34	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:THR:OG1	1:A:26:ASN:N	0.51	2.43	4	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:165:LEU:HG	0.51	2.40	3	3
1:A:40:TYR:HE1	1:A:55:LEU:HD21	0.51	1.65	12	1
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:HG3	0.51	2.06	12	1
1:A:139:PRO:HB3	1:A:154:TYR:CD1	0.51	2.40	6	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:SER:H	0.51	1.65	18	2
1:A:23:TYR:CE1	1:A:160:LEU:C	0.51	2.83	16	1
1:A:41:ALA:O	2:B:15:GLU:N	0.51	2.44	9	1
1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:GLY:H	0.51	1.64	1	5
1:A:67:LEU:O	1:A:70:LEU:HD22	0.51	2.06	5	4
2:B:24:ALA:HB1	2:B:28:GLU:HG3	0.51	1.82	19	1
1:A:35:THR:C	1:A:36:VAL:CG2	0.51	2.78	17	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:35:THR:HG22	0.51	1.82	11	1
1:A:21:ILE:HG13	2:B:26:THR:CG2	0.51	2.35	3	2
1:A:16:LYS:HD3	1:A:113:VAL:HG11	0.51	1.83	10	1
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:CA	0.51	2.59	17	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:162:GLN:HA	0.51	2.41	15	1
1:A:38:ASP:C	2:B:18:ILE:HA	0.51	2.26	15	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:112:LEU:HD11	0.51	2.41	5	1
1:A:132:ASN:HB3	1:A:134:GLN:NE2	0.51	2.18	3	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:116:GLN:HG3	0.51	1.81	9	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:75:THR:OG1	0.51	2.06	14	4
1:A:161:THR:C	1:A:162:GLN:CG	0.51	2.75	15	5
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:HG	0.51	2.06	19	3
1:A:92:ASN:HD22	1:A:93:VAL:HG23	0.51	1.65	15	2
1:A:102:THR:HG23	1:A:103:HIS:H	0.51	1.66	11	3
2:B:17:THR:C	2:B:18:ILE:HG23	0.51	2.26	11	3
2:B:34:GLU:CG	2:B:37:ALA:C	0.51	2.79	11	1
1:A:8:VAL:CG2	2:B:36:TRP:HB3	0.51	2.35	20	1
1:A:82:PHE:O	1:A:115:THR:HG23	0.51	2.05	10	1
2:B:29:PHE:O	2:B:30:THR:C	0.51	2.48	10	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:165:LEU:N	0.51	2.74	4	3
1:A:46:ILE:CG2	2:B:7:GLU:CB	0.51	2.88	7	2
1:A:39:ASN:HB2	2:B:17:THR:N	0.51	2.20	15	1
1:A:122:ASP:O	1:A:126:ILE:HB	0.51	2.06	14	1
1:A:37:PHE:CE2	2:B:18:ILE:HG12	0.51	2.40	4	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:HB2	0.51	2.06	2	4
1:A:38:ASP:HB3	2:B:18:ILE:O	0.51	2.05	5	1
1:A:84:VAL:CG1	1:A:154:TYR:OH	0.51	2.58	7	1
1:A:40:TYR:CG	2:B:16:HIS:O	0.51	2.64	16	1
1:A:35:THR:CG2	2:B:24:ALA:N	0.51	2.74	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:GLU:O	1:A:174:LEU:CD2	0.51	2.58	1	1
1:A:77:VAL:CG2	1:A:77:VAL:O	0.51	2.58	1	4
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:THR:N	0.51	2.20	20	3
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:HA	0.51	2.35	10	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:64:TYR:CZ	0.51	2.64	10	1
1:A:70:LEU:HA	2:B:37:ALA:CA	0.51	2.34	17	1
1:A:157:CYS:HB2	1:A:165:LEU:CB	0.51	2.36	12	5
1:A:134:GLN:HA	1:A:134:GLN:NE2	0.51	2.20	14	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:VAL:N	0.51	2.73	3	4
1:A:37:PHE:CZ	1:A:63:ASP:OD1	0.51	2.63	4	1
1:A:44:VAL:HG22	2:B:13:ASP:CB	0.51	2.36	2	1
1:A:40:TYR:CE2	2:B:17:THR:HG21	0.51	2.40	5	1
1:A:63:ASP:OD2	2:B:22:PHE:CE2	0.51	2.64	7	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:80:VAL:HG12	0.51	1.82	12	1
2:B:22:PHE:HB3	2:B:25:VAL:CB	0.51	2.36	12	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:CD1	0.51	2.35	8	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:140:GLU:HG3	0.51	2.05	18	1
1:A:40:TYR:CD2	2:B:15:GLU:HB3	0.51	2.41	16	1
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:HG2	0.51	2.05	1	2
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:CG2	0.51	2.79	17	11
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:HG23	0.51	2.26	12	4
1:A:80:VAL:CG1	1:A:80:VAL:O	0.51	2.59	11	3
2:B:17:THR:C	2:B:18:ILE:CG2	0.51	2.79	7	3
1:A:27:LYS:CG	2:B:27:GLY:C	0.51	2.79	20	1
1:A:68:ARG:O	1:A:70:LEU:N	0.51	2.43	3	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:160:LEU:HD21	0.51	2.34	10	1
1:A:1:MET:O	1:A:2:GLN:CB	0.51	2.57	4	2
1:A:115:THR:HG22	1:A:116:GLN:HG2	0.51	1.83	15	2
1:A:139:PRO:O	1:A:143:GLU:CB	0.51	2.59	15	1
2:B:5:ARG:HD2	2:B:5:ARG:N	0.51	2.20	15	1
1:A:92:ASN:HA	1:A:95:GLU:HG2	0.51	1.81	3	7
1:A:80:VAL:O	1:A:113:VAL:HG23	0.51	2.05	6	3
1:A:37:PHE:CZ	2:B:18:ILE:HG12	0.51	2.39	4	1
1:A:66:ARG:O	1:A:69:PRO:CD	0.51	2.58	4	2
1:A:90:PHE:CD2	1:A:137:ILE:HG13	0.51	2.41	2	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG12	0.51	2.04	2	2
1:A:76:ASP:O	1:A:78:PHE:CZ	0.51	2.64	8	1
1:A:5:LYS:C	1:A:76:ASP:HB3	0.51	2.26	18	1
2:B:36:TRP:CD1	2:B:37:ALA:N	0.51	2.78	13	1
1:A:114:GLY:O	1:A:117:ILE:CG2	0.51	2.58	1	3
1:A:86:SER:OG	1:A:87:PRO:CD	0.51	2.59	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LYS:HD2	1:A:95:GLU:N	0.51	2.20	10	2
1:A:21:ILE:CG2	1:A:28:PHE:HA	0.51	2.35	10	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:CB	0.51	2.36	10	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:166:LYS:N	0.51	2.74	18	2
1:A:16:LYS:CG	1:A:165:LEU:HD23	0.51	2.36	15	1
1:A:39:ASN:HB2	2:B:16:HIS:C	0.51	2.26	15	1
1:A:39:ASN:CG	2:B:18:ILE:CD1	0.51	2.79	15	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:135:LYS:O	0.51	2.58	5	2
1:A:22:SER:HA	1:A:27:LYS:HB3	0.51	1.82	14	1
1:A:58:THR:O	1:A:59:ALA:CB	0.51	2.56	7	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:159:ALA:HA	0.51	2.36	2	4
1:A:159:ALA:HB1	2:B:29:PHE:CE1	0.51	2.40	2	1
1:A:2:GLN:O	1:A:3:THR:HB	0.51	2.06	3	1
1:A:107:LYS:HE3	1:A:110:PHE:CE1	0.51	2.41	12	1
1:A:107:LYS:HE3	1:A:110:PHE:CZ	0.51	2.41	12	1
1:A:46:ILE:HG22	2:B:7:GLU:CD	0.51	2.26	13	1
1:A:44:VAL:O	1:A:50:PRO:CA	0.51	2.59	16	1
1:A:108:THR:CG2	1:A:109:PRO:HD2	0.51	2.36	6	5
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:HG2	0.51	2.06	11	4
1:A:158:SER:HB3	1:A:161:THR:CG2	0.51	2.36	5	2
1:A:85:VAL:HG23	1:A:129:LEU:CD2	0.51	2.27	10	1
1:A:94:LYS:CG	1:A:145:LEU:HD21	0.51	2.35	17	1
1:A:19:LEU:CD2	2:B:29:PHE:CD1	0.51	2.94	4	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:CB	0.51	2.99	5	1
1:A:2:GLN:C	1:A:52:THR:HB	0.51	2.26	18	1
1:A:42:VAL:HG23	2:B:14:PHE:C	0.51	2.27	11	2
1:A:90:PHE:O	1:A:94:LYS:HG2	0.51	2.06	18	9
1:A:37:PHE:CD1	2:B:20:VAL:HB	0.51	2.41	15	1
1:A:163:LYS:CA	1:A:165:LEU:CD1	0.51	2.89	14	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:CB	0.51	2.36	5	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:SER:OG	0.51	2.29	6	1
1:A:40:TYR:CE2	2:B:15:GLU:CD	0.51	2.85	6	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:79:LEU:N	0.51	2.74	6	2
1:A:72:TYR:CZ	1:A:74:GLN:HG2	0.51	2.41	18	1
1:A:130:ALA:O	1:A:134:GLN:NE2	0.50	2.43	1	4
1:A:61:GLN:CG	2:B:23:ASP:CB	0.50	2.89	19	1
1:A:106:PRO:O	1:A:149:LEU:O	0.50	2.29	10	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:133:LYS:CB	0.50	2.35	5	3
1:A:23:TYR:HH	1:A:158:SER:C	0.50	2.09	5	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:CG	0.50	2.95	7	2
1:A:62:GLU:HB3	1:A:64:TYR:CD2	0.50	2.41	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG13	0.50	2.06	16	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:103:HIS:N	0.50	2.74	19	2
1:A:27:LYS:HA	2:B:27:GLY:HA3	0.50	1.83	19	1
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:CD1	0.50	2.59	19	1
1:A:95:GLU:O	1:A:99:PRO:HG3	0.50	2.07	14	13
1:A:40:TYR:CD2	2:B:15:GLU:HG3	0.50	2.41	11	2
1:A:1:MET:O	1:A:2:GLN:HB2	0.50	2.06	4	2
1:A:27:LYS:HD2	1:A:28:PHE:N	0.50	2.21	15	2
1:A:14:VAL:HG23	2:B:36:TRP:CZ2	0.50	2.41	15	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG13	0.50	1.80	12	3
1:A:43:THR:O	2:B:13:ASP:HB3	0.50	2.06	14	2
2:B:14:PHE:C	2:B:15:GLU:CG	0.50	2.79	14	1
1:A:28:PHE:CG	1:A:160:LEU:CD2	0.50	2.94	4	1
1:A:37:PHE:CZ	2:B:18:ILE:HG21	0.50	2.42	2	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:19:HIS:HB2	0.50	1.83	2	1
2:B:29:PHE:CE1	2:B:33:PRO:HG2	0.50	2.41	6	1
1:A:145:LEU:O	1:A:149:LEU:CD1	0.50	2.59	8	1
1:A:89:SER:OG	1:A:90:PHE:N	0.50	2.44	16	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:CD2	0.50	2.55	9	1
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LYS:HB2	0.50	2.06	4	10
1:A:113:VAL:HG22	1:A:155:VAL:HG23	0.50	1.83	10	2
1:A:40:TYR:O	1:A:54:GLY:HA2	0.50	2.06	19	1
1:A:85:VAL:CB	1:A:129:LEU:HD23	0.50	2.36	19	2
1:A:124:SER:O	1:A:127:GLU:CB	0.50	2.59	13	6
1:A:19:LEU:CB	1:A:159:ALA:CB	0.50	2.89	10	1
1:A:12:GLY:HA2	2:B:34:GLU:HA	0.50	1.83	17	1
1:A:35:THR:HG22	2:B:36:TRP:CZ2	0.50	2.41	17	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:HB3	0.50	2.06	15	2
1:A:164:GLY:N	1:A:165:LEU:HD13	0.50	2.21	14	1
1:A:20:LEU:O	1:A:24:THR:CG2	0.50	2.58	4	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:78:PHE:CB	0.50	2.36	2	1
2:B:32:ILE:HG22	2:B:33:PRO:CD	0.50	2.36	12	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:153:LYS:N	0.50	2.21	6	1
1:A:113:VAL:HG22	1:A:168:VAL:CG1	0.50	2.37	18	2
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:HB	0.50	1.84	13	1
1:A:130:ALA:HA	1:A:134:GLN:HA	0.50	1.83	16	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:C	0.50	2.50	16	8
1:A:157:CYS:HB3	1:A:165:LEU:CB	0.50	2.37	13	3
1:A:86:SER:OG	1:A:87:PRO:HD2	0.50	2.07	19	2
1:A:25:THR:HG22	1:A:26:ASN:N	0.50	2.21	12	2
1:A:40:TYR:HB3	2:B:16:HIS:O	0.50	2.07	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HD22	1:A:70:LEU:H	0.50	1.63	17	1
1:A:169:PHE:CD1	1:A:169:PHE:N	0.50	2.79	14	1
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:CG2	0.50	2.35	14	1
1:A:67:LEU:C	1:A:69:PRO:CD	0.50	2.80	14	3
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:CG2	0.50	2.37	4	3
1:A:45:MET:CB	2:B:10:LEU:HB3	0.50	2.36	9	2
1:A:37:PHE:CE2	2:B:18:ILE:HG21	0.50	2.42	2	1
1:A:39:ASN:CG	1:A:55:LEU:CD1	0.50	2.80	2	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:14:PHE:O	0.50	2.57	3	2
2:B:33:PRO:O	2:B:34:GLU:HB2	0.50	2.06	3	1
2:B:35:GLN:CG	2:B:36:TRP:N	0.50	2.74	3	1
1:A:118:ASP:CB	1:A:161:THR:HB	0.50	2.37	12	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:15:GLU:HA	0.50	2.36	6	1
1:A:38:ASP:O	1:A:55:LEU:CD1	0.50	2.59	8	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:80:VAL:CB	0.50	2.29	18	1
1:A:2:GLN:HE21	1:A:177:LEU:HD23	0.50	1.66	16	1
1:A:94:LYS:O	1:A:99:PRO:HD3	0.50	2.07	12	4
1:A:133:LYS:O	1:A:133:LYS:CD	0.50	2.60	17	2
1:A:128:LYS:HD2	1:A:128:LYS:N	0.50	2.21	11	1
1:A:37:PHE:HB2	1:A:62:GLU:OE1	0.50	2.06	11	1
1:A:74:GLN:HG2	1:A:74:GLN:O	0.50	2.06	11	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:HG23	0.50	1.84	20	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD23	0.50	2.22	7	3
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:HB3	0.50	2.05	2	2
2:B:22:PHE:HB3	2:B:25:VAL:CG2	0.50	2.35	17	2
1:A:93:VAL:CG1	1:A:97:TRP:CZ2	0.50	2.92	14	1
1:A:19:LEU:C	1:A:23:TYR:CE1	0.50	2.85	3	1
1:A:28:PHE:CE2	2:B:29:PHE:O	0.50	2.65	7	1
2:B:29:PHE:CZ	2:B:33:PRO:CD	0.50	2.94	6	1
1:A:15:GLY:O	1:A:18:CYS:SG	0.50	2.69	6	7
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:CG2	0.50	2.60	11	2
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:CG1	0.50	2.37	11	2
1:A:21:ILE:HG22	2:B:26:THR:O	0.50	2.06	11	1
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:CD1	0.50	2.36	8	3
1:A:62:GLU:HG2	2:B:20:VAL:CG2	0.50	2.31	10	1
1:A:101:ILE:CG2	1:A:104:HIS:CA	0.50	2.90	15	1
1:A:49:GLU:HG3	2:B:4:GLU:CG	0.50	2.36	15	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:CG	0.50	2.94	14	2
1:A:36:VAL:HG11	1:A:60:GLY:HA2	0.50	1.83	14	1
1:A:16:LYS:CB	1:A:157:CYS:SG	0.50	3.00	4	1
1:A:26:ASN:OD1	2:B:27:GLY:O	0.50	2.29	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LEU:HD11	1:A:168:VAL:HG13	0.50	1.82	2	1
1:A:28:PHE:CB	2:B:28:GLU:HB3	0.50	2.35	5	1
1:A:85:VAL:O	1:A:86:SER:CB	0.50	2.59	3	1
2:B:10:LEU:N	2:B:10:LEU:HD12	0.50	2.21	12	1
2:B:32:ILE:HD11	2:B:35:GLN:HG2	0.50	1.84	13	1
1:A:27:LYS:CD	1:A:27:LYS:C	0.50	2.79	9	1
1:A:43:THR:O	2:B:13:ASP:HB2	0.50	2.07	10	4
1:A:22:SER:HA	1:A:27:LYS:CA	0.50	2.37	19	3
1:A:28:PHE:CZ	2:B:30:THR:HG21	0.50	2.42	19	1
1:A:63:ASP:HB3	1:A:64:TYR:CE1	0.50	2.41	6	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:162:GLN:CA	0.50	2.94	15	1
1:A:61:GLN:N	2:B:21:GLY:O	0.50	2.43	15	1
1:A:157:CYS:CA	1:A:165:LEU:HD22	0.50	2.37	4	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:90:PHE:CG	0.50	3.00	4	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:57:ASP:N	0.50	2.44	2	1
1:A:40:TYR:HB2	2:B:16:HIS:N	0.50	2.22	12	1
1:A:5:LYS:CD	1:A:74:GLN:HG3	0.50	2.36	18	1
2:B:13:ASP:OD1	2:B:13:ASP:N	0.50	2.44	16	1
2:B:30:THR:O	2:B:32:ILE:N	0.50	2.44	16	1
1:A:38:ASP:HB3	1:A:56:PHE:CG	0.50	2.41	19	1
1:A:38:ASP:CB	1:A:57:ASP:OD2	0.50	2.60	11	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:45:MET:N	0.50	2.22	20	4
1:A:36:VAL:HB	2:B:21:GLY:N	0.50	2.22	15	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:HB	0.50	1.84	18	2
1:A:85:VAL:HG12	1:A:134:GLN:C	0.50	2.26	3	1
2:B:21:GLY:O	2:B:22:PHE:CD1	0.50	2.65	7	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:CG	0.50	2.60	13	3
1:A:83:SER:OG	1:A:116:GLN:OE1	0.50	2.30	20	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:108:THR:HB	0.50	2.37	17	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:SER:CB	0.50	2.36	15	1
2:B:24:ALA:CB	2:B:28:GLU:OE2	0.50	2.59	15	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:163:LYS:HB3	0.50	2.42	14	1
1:A:68:ARG:N	1:A:69:PRO:HD3	0.50	2.22	13	4
1:A:21:ILE:HD11	1:A:37:PHE:CD1	0.50	2.41	6	1
1:A:14:VAL:C	2:B:35:GLN:HG3	0.50	2.27	8	1
1:A:101:ILE:HG23	1:A:104:HIS:O	0.50	2.07	13	1
1:A:112:LEU:O	1:A:112:LEU:HG	0.50	2.07	13	1
1:A:70:LEU:HD12	2:B:37:ALA:CA	0.50	2.36	9	1
1:A:105:CYS:HB3	1:A:106:PRO:CD	0.49	2.37	1	1
2:B:14:PHE:O	2:B:15:GLU:O	0.49	2.30	1	1
1:A:36:VAL:O	1:A:37:PHE:C	0.49	2.50	15	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LYS:O	2:B:27:GLY:C	0.49	2.51	19	1
2:B:17:THR:O	2:B:18:ILE:CG2	0.49	2.60	11	2
2:B:29:PHE:C	2:B:30:THR:HG23	0.49	2.27	17	4
1:A:21:ILE:HG22	2:B:27:GLY:HA2	0.49	1.83	8	4
1:A:155:VAL:HG22	1:A:171:GLU:CD	0.49	2.28	17	1
1:A:59:ALA:CB	2:B:20:VAL:O	0.49	2.60	15	1
1:A:21:ILE:CB	2:B:27:GLY:HA2	0.49	2.37	15	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:CG	0.49	2.65	14	1
1:A:87:PRO:O	1:A:90:PHE:N	0.49	2.45	14	1
1:A:157:CYS:HB3	1:A:168:VAL:HG21	0.49	1.85	4	1
1:A:82:PHE:HE1	1:A:93:VAL:HG11	0.49	1.64	5	1
1:A:9:VAL:HG13	2:B:35:GLN:HE22	0.49	1.64	5	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:16:LYS:HE2	0.49	1.84	3	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD21	0.49	1.84	12	1
1:A:94:LYS:N	1:A:94:LYS:HD2	0.49	2.21	13	1
2:B:10:LEU:N	2:B:10:LEU:HD13	0.49	2.21	13	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:SER:OG	0.49	2.08	1	1
1:A:45:MET:CB	2:B:11:PRO:HG2	0.49	2.37	12	5
1:A:10:GLY:CA	1:A:80:VAL:HA	0.49	2.37	19	2
1:A:85:VAL:HG23	1:A:85:VAL:O	0.49	2.07	11	2
1:A:155:VAL:HB	1:A:168:VAL:CG2	0.49	2.38	14	2
1:A:22:SER:CB	1:A:163:LYS:HE3	0.49	2.37	14	1
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:OG1	0.49	2.07	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:VAL:O	0.49	2.30	5	1
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:CD2	0.49	2.77	3	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:CG	0.49	2.81	6	1
1:A:41:ALA:CB	1:A:54:GLY:HA2	0.49	2.37	18	1
2:B:5:ARG:C	2:B:5:ARG:CD	0.49	2.80	16	1
1:A:84:VAL:HA	1:A:137:ILE:CG2	0.49	2.37	7	6
1:A:25:THR:CG2	1:A:26:ASN:N	0.49	2.75	13	4
2:B:6:PRO:O	2:B:7:GLU:C	0.49	2.51	9	7
1:A:155:VAL:HG11	1:A:168:VAL:N	0.49	2.22	17	1
1:A:112:LEU:HD22	1:A:154:TYR:CB	0.49	2.37	15	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:TYR:CD2	0.49	2.43	6	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:76:ASP:HA	0.49	2.37	18	1
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD1	0.49	2.81	13	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:TYR:CD1	0.49	2.65	13	1
1:A:162:GLN:CG	1:A:165:LEU:HG	0.49	2.37	9	1
1:A:157:CYS:HB3	1:A:165:LEU:HB2	0.49	1.84	1	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:165:LEU:HD21	0.49	2.42	13	2
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HA	0.49	2.07	17	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:O	1:A:71:SER:C	0.49	2.50	13	10
1:A:12:GLY:O	2:B:32:ILE:O	0.49	2.30	11	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:ALA:O	0.49	2.30	11	1
1:A:26:ASN:O	2:B:26:THR:OG1	0.49	2.25	11	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:154:TYR:CD1	0.49	2.95	20	2
1:A:6:CYS:SG	1:A:77:VAL:CG1	0.49	3.00	20	1
2:B:35:GLN:HG2	2:B:36:TRP:CG	0.49	2.42	10	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASP:HB3	0.49	2.07	17	3
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:O	0.49	2.30	17	1
1:A:55:LEU:CD1	1:A:55:LEU:C	0.49	2.74	6	4
1:A:59:ALA:CB	1:A:62:GLU:HA	0.49	2.37	5	2
1:A:40:TYR:HA	2:B:16:HIS:O	0.49	2.08	14	3
1:A:45:MET:CG	2:B:12:SER:HB2	0.49	2.36	4	1
1:A:150:LYS:O	1:A:150:LYS:CG	0.49	2.60	2	1
1:A:47:GLY:HA3	2:B:8:ILE:CG2	0.49	2.35	2	1
1:A:60:GLY:O	1:A:61:GLN:HB3	0.49	2.07	2	1
1:A:13:ALA:O	2:B:33:PRO:HG2	0.49	2.07	2	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG22	0.49	2.06	12	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:51:TYR:CE1	0.49	2.65	18	1
1:A:2:GLN:NE2	1:A:2:GLN:O	0.49	2.46	16	1
1:A:4:ILE:O	1:A:4:ILE:HD13	0.49	2.07	1	2
1:A:7:VAL:O	1:A:9:VAL:HG23	0.49	2.08	17	3
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:C	0.49	2.50	17	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:16:HIS:HB2	0.49	2.38	15	1
1:A:65:ASP:O	1:A:68:ARG:N	0.49	2.42	2	2
1:A:40:TYR:CD2	2:B:17:THR:CG2	0.49	2.95	5	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:64:TYR:CD2	0.49	2.65	3	1
2:B:15:GLU:O	2:B:16:HIS:O	0.49	2.29	3	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:113:VAL:CG1	0.49	3.01	12	1
2:B:34:GLU:CD	2:B:34:GLU:N	0.49	2.66	12	1
1:A:133:LYS:O	1:A:135:LYS:CD	0.49	2.60	8	1
1:A:135:LYS:CG	1:A:135:LYS:O	0.49	2.60	8	1
1:A:75:THR:O	1:A:76:ASP:HB3	0.49	2.08	8	1
1:A:97:TRP:CZ2	1:A:110:PHE:CE1	0.49	3.01	13	1
1:A:23:TYR:CB	1:A:165:LEU:HD11	0.49	2.38	13	1
1:A:144:LYS:O	1:A:148:ASP:CB	0.49	2.60	1	2
1:A:21:ILE:O	1:A:24:THR:OG1	0.49	2.29	19	2
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:HB3	0.49	1.82	16	3
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:GLU:H	0.49	1.68	20	2
1:A:18:CYS:HB3	1:A:35:THR:CB	0.49	2.37	17	1
1:A:26:ASN:C	1:A:27:LYS:HG3	0.49	2.26	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:GLN:O	1:A:4:ILE:HG22	0.49	2.08	18	3
1:A:70:LEU:O	1:A:72:TYR:CD2	0.49	2.65	14	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CB	0.49	2.37	4	2
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LYS:CD	0.49	2.61	2	1
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:N	0.49	2.75	2	2
1:A:42:VAL:HG22	2:B:13:ASP:HB2	0.49	1.85	2	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:79:LEU:C	0.49	2.81	16	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:94:LYS:HE2	0.49	2.43	7	2
1:A:113:VAL:CG1	1:A:157:CYS:HB3	0.49	2.37	7	2
1:A:58:THR:O	1:A:58:THR:CG2	0.49	2.57	7	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:79:LEU:C	0.49	2.80	7	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:HB3	0.49	2.47	12	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:108:THR:HG21	0.49	2.42	12	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:132:ASN:CG	0.49	2.81	16	1
1:A:63:ASP:C	1:A:64:TYR:CD2	0.49	2.86	9	1
1:A:96:LYS:HB3	1:A:97:TRP:CD1	0.49	2.43	19	3
1:A:138:THR:HB	1:A:139:PRO:HD2	0.49	1.85	16	8
1:A:63:ASP:HB3	1:A:64:TYR:CZ	0.49	2.42	20	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:160:LEU:O	0.49	2.08	17	1
1:A:61:GLN:HG2	2:B:21:GLY:CA	0.49	2.37	4	2
1:A:93:VAL:HG13	1:A:97:TRP:CE2	0.49	2.42	14	1
1:A:102:THR:HG21	1:A:106:PRO:HG2	0.49	1.83	2	2
1:A:89:SER:O	1:A:92:ASN:OD1	0.49	2.31	5	2
1:A:14:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD11	0.49	1.84	7	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:65:ASP:N	0.49	2.80	7	1
1:A:10:GLY:O	2:B:34:GLU:OE2	0.49	2.31	18	1
1:A:4:ILE:HG13	1:A:76:ASP:HA	0.49	1.85	18	1
1:A:97:TRP:CH2	1:A:110:PHE:CD1	0.49	3.00	13	1
1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:OD1	0.49	2.45	16	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:161:THR:N	0.49	2.45	16	1
1:A:28:PHE:O	1:A:28:PHE:CD1	0.49	2.66	19	1
1:A:62:GLU:CB	1:A:64:TYR:CE1	0.49	2.96	19	2
2:B:5:ARG:CD	2:B:5:ARG:C	0.49	2.81	19	1
1:A:6:CYS:C	1:A:7:VAL:CG2	0.49	2.80	18	3
1:A:84:VAL:HG21	1:A:117:ILE:CA	0.49	2.37	20	1
1:A:122:ASP:O	1:A:126:ILE:CD1	0.49	2.54	5	3
1:A:21:ILE:CG2	2:B:27:GLY:HA3	0.49	2.37	18	4
1:A:101:ILE:HD12	1:A:104:HIS:O	0.49	2.08	15	1
1:A:8:VAL:HG21	2:B:36:TRP:CD2	0.49	2.42	15	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:23:TYR:N	0.49	2.79	7	2
1:A:42:VAL:HB	2:B:15:GLU:HA	0.49	1.84	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:29:PHE:O	2:B:30:THR:HB	0.49	2.08	14	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:135:LYS:O	0.49	2.07	4	1
1:A:12:GLY:HA3	2:B:34:GLU:HA	0.49	1.83	12	1
1:A:65:ASP:CG	1:A:68:ARG:CG	0.49	2.81	12	1
1:A:39:ASN:HB2	2:B:18:ILE:CG1	0.49	2.37	12	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:23:TYR:CZ	0.49	2.96	6	1
1:A:78:PHE:O	1:A:111:LEU:HD23	0.49	2.06	8	1
1:A:36:VAL:N	2:B:26:THR:HB	0.49	2.21	18	1
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:CA	0.49	2.38	16	1
1:A:115:THR:O	1:A:116:GLN:C	0.49	2.51	1	7
2:B:9:SER:O	2:B:11:PRO:HD3	0.49	2.08	19	1
1:A:70:LEU:HD13	2:B:37:ALA:CA	0.49	2.38	20	1
1:A:142:ALA:HB3	1:A:154:TYR:HD2	0.49	1.59	10	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:55:LEU:O	0.49	2.08	10	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:129:LEU:CD2	0.49	2.85	10	1
2:B:32:ILE:N	2:B:33:PRO:HD3	0.49	2.22	14	4
1:A:44:VAL:CB	1:A:51:TYR:HB2	0.49	2.38	3	4
1:A:90:PHE:CE1	1:A:94:LYS:HB3	0.49	2.43	3	2
1:A:148:ASP:HB3	1:A:149:LEU:HD13	0.49	1.84	2	1
1:A:18:CYS:O	2:B:28:GLU:O	0.49	2.30	2	1
1:A:12:GLY:N	2:B:35:GLN:OE1	0.49	2.45	5	1
1:A:16:LYS:CA	1:A:19:LEU:HD23	0.49	2.31	5	1
1:A:42:VAL:HB	2:B:15:GLU:HB3	0.49	1.83	3	2
1:A:101:ILE:C	1:A:101:ILE:HD13	0.49	2.28	8	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:9:VAL:N	0.49	2.22	16	1
1:A:58:THR:OG1	2:B:36:TRP:CE2	0.49	2.57	9	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:64:TYR:CE1	0.49	2.42	1	2
1:A:165:LEU:H	1:A:165:LEU:CD1	0.49	2.21	2	5
1:A:111:LEU:HD11	1:A:172:ALA:CB	0.49	2.37	19	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:SER:N	0.49	2.45	19	2
2:B:10:LEU:C	2:B:10:LEU:CD2	0.49	2.81	11	2
2:B:10:LEU:HD13	2:B:10:LEU:N	0.49	2.23	11	1
1:A:2:GLN:HA	1:A:52:THR:OG1	0.49	2.08	4	2
1:A:155:VAL:CG2	1:A:171:GLU:OE2	0.49	2.61	5	1
1:A:160:LEU:CD1	1:A:160:LEU:C	0.49	2.77	8	2
1:A:86:SER:CB	1:A:89:SER:OG	0.48	2.61	1	1
2:B:24:ALA:CB	2:B:28:GLU:HG3	0.48	2.38	19	1
1:A:158:SER:HB2	1:A:162:GLN:HB2	0.48	1.85	11	2
1:A:98:VAL:HB	1:A:99:PRO:HD3	0.48	1.85	4	12
1:A:83:SER:HB3	1:A:116:GLN:NE2	0.48	2.22	20	1
1:A:83:SER:HB2	1:A:86:SER:CB	0.48	2.37	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:CD1	2:B:37:ALA:HA	0.48	2.38	5	4
1:A:159:ALA:C	1:A:161:THR:N	0.48	2.66	10	2
1:A:10:GLY:O	2:B:35:GLN:OE1	0.48	2.31	6	3
1:A:35:THR:HG22	2:B:22:PHE:O	0.48	2.08	2	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:15:GLU:HG3	0.48	2.38	12	1
1:A:12:GLY:CA	2:B:35:GLN:OE1	0.48	2.61	8	1
1:A:26:ASN:C	1:A:27:LYS:CG	0.48	2.81	1	1
2:B:18:ILE:N	2:B:18:ILE:CD1	0.48	2.67	1	2
1:A:45:MET:HB3	2:B:10:LEU:HD23	0.48	1.83	19	1
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CG	0.48	2.96	11	1
1:A:35:THR:O	2:B:26:THR:CG2	0.48	2.61	20	1
1:A:150:LYS:O	1:A:151:ALA:O	0.48	2.31	9	6
1:A:80:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CE2	0.48	2.43	10	2
2:B:5:ARG:O	2:B:7:GLU:N	0.48	2.43	4	3
1:A:92:ASN:O	1:A:95:GLU:HG2	0.48	2.08	14	2
1:A:39:ASN:O	2:B:16:HIS:O	0.48	2.31	14	1
1:A:2:GLN:NE2	1:A:177:LEU:HB3	0.48	2.23	5	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:TYR:CE2	0.48	2.43	5	1
1:A:2:GLN:N	1:A:2:GLN:OE1	0.48	2.46	5	1
1:A:1:MET:CG	1:A:177:LEU:HD22	0.48	2.38	3	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:GLY:H	0.48	1.65	8	1
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:41:ALA:O	2:B:15:GLU:HB3	0.48	2.09	13	1
1:A:42:VAL:HB	2:B:15:GLU:HG3	0.48	1.85	16	1
1:A:101:ILE:CG2	1:A:104:HIS:HA	0.48	2.38	16	4
2:B:36:TRP:O	2:B:36:TRP:CD2	0.48	2.67	11	1
1:A:96:LYS:O	1:A:100:GLU:HG3	0.48	2.07	10	2
1:A:18:CYS:HA	1:A:28:PHE:CG	0.48	2.43	10	1
2:B:10:LEU:HD13	2:B:10:LEU:C	0.48	2.27	10	1
1:A:37:PHE:HB2	2:B:19:HIS:HA	0.48	1.85	9	3
1:A:59:ALA:HB2	1:A:64:TYR:CZ	0.48	2.43	3	2
1:A:59:ALA:CB	1:A:65:ASP:CB	0.48	2.91	17	1
1:A:102:THR:HB	1:A:106:PRO:CG	0.48	2.38	15	2
1:A:126:ILE:CA	1:A:129:LEU:HD12	0.48	2.37	15	1
1:A:28:PHE:CD2	1:A:160:LEU:CD2	0.48	2.96	4	1
2:B:27:GLY:C	2:B:28:GLU:CG	0.48	2.82	4	1
1:A:49:GLU:HG3	1:A:49:GLU:O	0.48	2.06	3	1
1:A:4:ILE:HG23	1:A:53:LEU:HB3	0.48	1.85	9	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:75:THR:CB	0.48	2.91	1	2
1:A:105:CYS:HB3	1:A:106:PRO:HD3	0.48	1.85	18	2
1:A:158:SER:HB2	1:A:163:LYS:CG	0.48	2.39	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:ASN:O	1:A:171:GLU:OE1	0.48	2.30	20	2
1:A:18:CYS:SG	2:B:28:GLU:O	0.48	2.71	5	2
1:A:101:ILE:CG2	1:A:104:HIS:C	0.48	2.81	14	2
1:A:2:GLN:HA	1:A:52:THR:CB	0.48	2.38	3	1
1:A:27:LYS:C	2:B:27:GLY:O	0.48	2.51	12	1
1:A:40:TYR:CG	2:B:15:GLU:HB2	0.48	2.43	6	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:ALA:CB	0.48	2.60	9	2
1:A:49:GLU:OE1	1:A:51:TYR:CD1	0.48	2.66	18	1
1:A:45:MET:O	2:B:11:PRO:HD2	0.48	2.08	10	4
1:A:62:GLU:HB3	1:A:64:TYR:CZ	0.48	2.43	11	1
1:A:13:ALA:N	2:B:35:GLN:HG2	0.48	2.24	11	2
1:A:163:LYS:HD3	1:A:165:LEU:HD11	0.48	1.84	14	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:62:GLU:CG	0.48	2.91	2	1
1:A:39:ASN:HB3	1:A:55:LEU:O	0.48	2.08	5	3
1:A:5:LYS:O	1:A:77:VAL:CG1	0.48	2.61	5	1
2:B:7:GLU:CD	2:B:7:GLU:N	0.48	2.67	7	1
1:A:59:ALA:O	1:A:62:GLU:HB3	0.48	2.09	12	1
1:A:39:ASN:CG	1:A:64:TYR:CE2	0.48	2.86	12	1
1:A:85:VAL:O	1:A:86:SER:C	0.48	2.51	12	1
1:A:39:ASN:O	2:B:18:ILE:HG12	0.48	2.08	18	1
1:A:93:VAL:HB	1:A:97:TRP:CE2	0.48	2.44	13	1
1:A:68:ARG:CB	1:A:69:PRO:HD3	0.48	2.38	9	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:108:THR:OG1	0.48	2.58	1	1
2:B:10:LEU:HG	2:B:10:LEU:O	0.48	2.09	18	2
1:A:18:CYS:HB2	2:B:28:GLU:CB	0.48	2.39	11	1
2:B:23:ASP:O	2:B:24:ALA:CB	0.48	2.62	20	1
1:A:161:THR:OG1	1:A:162:GLN:N	0.48	2.45	15	3
1:A:38:ASP:N	2:B:19:HIS:H	0.48	2.06	2	2
1:A:27:LYS:CE	2:B:25:VAL:HG12	0.48	2.38	10	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:36:TRP:N	0.48	2.46	10	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:15:GLU:N	0.48	2.23	15	2
1:A:14:VAL:HG13	1:A:18:CYS:SG	0.48	2.48	15	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:90:PHE:CB	0.48	2.97	15	1
1:A:159:ALA:HA	1:A:163:LYS:CG	0.48	2.39	14	1
1:A:159:ALA:CA	1:A:163:LYS:HE3	0.48	2.38	14	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:149:LEU:CD2	0.48	2.37	3	1
1:A:44:VAL:O	1:A:51:TYR:N	0.48	2.47	13	2
1:A:21:ILE:HB	2:B:26:THR:O	0.48	2.08	7	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLY:O	0.48	2.32	12	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:115:THR:OG1	0.48	2.07	6	1
1:A:36:VAL:CG2	2:B:26:THR:HB	0.48	2.39	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ASP:CG	1:A:77:VAL:HG13	0.48	2.29	18	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:169:PHE:CD1	0.48	2.42	16	1
1:A:118:ASP:OD2	1:A:161:THR:CG2	0.48	2.59	1	1
1:A:38:ASP:O	1:A:56:PHE:HA	0.48	2.09	1	1
1:A:18:CYS:SG	1:A:19:LEU:HD23	0.48	2.48	20	2
1:A:37:PHE:CB	2:B:19:HIS:HA	0.48	2.38	12	2
1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:OE1	0.48	2.61	17	1
1:A:61:GLN:HA	1:A:61:GLN:OE1	0.48	2.08	17	1
1:A:70:LEU:CD1	1:A:70:LEU:H	0.48	2.18	17	1
1:A:36:VAL:HG13	1:A:57:ASP:HB2	0.48	1.86	15	1
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD22	0.48	2.24	9	3
1:A:6:CYS:CB	1:A:55:LEU:HB2	0.48	2.38	2	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:159:ALA:HA	0.48	2.09	5	1
1:A:42:VAL:HG21	2:B:13:ASP:O	0.48	2.08	3	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:137:ILE:HG12	0.48	2.43	3	1
1:A:114:GLY:O	1:A:157:CYS:O	0.48	2.32	12	1
1:A:78:PHE:O	1:A:79:LEU:HD23	0.48	2.08	12	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:136:PRO:HB3	0.48	2.33	8	1
1:A:4:ILE:CG2	1:A:53:LEU:CB	0.48	2.90	13	1
1:A:9:VAL:O	2:B:37:ALA:HB3	0.48	2.09	16	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:N	0.48	2.76	1	1
1:A:133:LYS:O	1:A:133:LYS:HD3	0.48	2.09	17	3
1:A:158:SER:HB3	1:A:162:GLN:N	0.48	2.23	11	1
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:VAL:N	0.48	2.76	4	3
1:A:120:ARG:HD2	1:A:126:ILE:HD11	0.48	1.85	17	1
1:A:64:TYR:C	1:A:64:TYR:CD1	0.48	2.87	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:62:GLU:HG3	0.48	2.08	5	2
1:A:42:VAL:HG21	2:B:15:GLU:CA	0.48	2.39	14	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:165:LEU:HB2	0.48	1.85	4	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:15:GLU:HB3	0.48	1.84	2	1
2:B:26:THR:O	2:B:29:PHE:O	0.48	2.31	2	1
1:A:166:LYS:O	1:A:170:ASP:OD2	0.48	2.31	12	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:67:LEU:HD21	0.48	1.69	12	1
1:A:13:ALA:N	2:B:33:PRO:O	0.48	2.46	12	1
1:A:6:CYS:SG	1:A:76:ASP:OD2	0.48	2.71	18	1
1:A:66:ARG:O	1:A:69:PRO:HD3	0.48	2.08	16	1
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:HD13	0.48	2.23	9	1
1:A:16:LYS:O	1:A:19:LEU:HB2	0.48	2.09	12	4
2:B:36:TRP:HA	2:B:36:TRP:CE3	0.48	2.44	16	3
1:A:81:CYS:HB3	1:A:115:THR:HG22	0.48	1.84	10	1
1:A:18:CYS:O	1:A:19:LEU:HD23	0.48	2.09	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLY:O	1:A:12:GLY:N	0.48	2.47	16	2
1:A:67:LEU:O	1:A:70:LEU:HD21	0.48	2.07	17	1
1:A:157:CYS:CB	1:A:165:LEU:HB2	0.48	2.39	15	2
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:HB3	0.48	1.84	14	1
1:A:85:VAL:CB	1:A:129:LEU:HD21	0.48	2.37	4	1
1:A:19:LEU:HD22	2:B:29:PHE:CG	0.48	2.44	4	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:16:LYS:CG	0.48	2.39	3	1
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:CD1	0.48	2.43	7	1
1:A:40:TYR:CG	2:B:16:HIS:HA	0.48	2.44	7	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:O	0.48	2.09	12	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:158:SER:O	0.48	2.66	6	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:23:TYR:OH	0.48	2.08	6	1
1:A:39:ASN:O	2:B:16:HIS:CB	0.48	2.61	8	1
1:A:5:LYS:O	1:A:76:ASP:CB	0.48	2.60	18	1
1:A:43:THR:CG2	1:A:50:PRO:HB2	0.48	2.39	16	1
1:A:169:PHE:CD1	1:A:169:PHE:C	0.48	2.87	19	1
1:A:100:GLU:O	1:A:100:GLU:OE2	0.48	2.32	11	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:15:GLY:HA2	0.48	1.86	11	1
1:A:38:ASP:HB3	1:A:57:ASP:OD2	0.48	2.09	11	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:CA	0.48	2.38	11	2
1:A:78:PHE:HB2	1:A:110:PHE:CE1	0.48	2.44	20	1
1:A:157:CYS:HB3	1:A:165:LEU:HB3	0.48	1.86	13	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:45:MET:N	0.48	2.76	17	1
1:A:98:VAL:HG11	1:A:149:LEU:HB2	0.48	1.86	17	1
1:A:39:ASN:CG	1:A:39:ASN:O	0.48	2.52	15	1
1:A:59:ALA:HA	2:B:20:VAL:O	0.48	2.08	15	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:C	0.48	2.82	14	2
1:A:60:GLY:O	2:B:21:GLY:O	0.48	2.31	14	1
1:A:92:ASN:O	1:A:95:GLU:CG	0.48	2.62	6	2
1:A:45:MET:HB3	2:B:10:LEU:HD13	0.48	1.85	4	1
1:A:8:VAL:HG11	2:B:36:TRP:CE2	0.48	2.44	2	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HD12	0.48	2.09	2	1
1:A:110:PHE:H	1:A:152:VAL:HG12	0.48	1.68	5	1
1:A:40:TYR:HA	2:B:16:HIS:HB2	0.48	1.85	3	1
1:A:101:ILE:O	1:A:105:CYS:N	0.48	2.40	6	1
1:A:60:GLY:N	1:A:62:GLU:OE2	0.48	2.47	6	1
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:CD1	0.48	2.87	8	1
1:A:85:VAL:HA	1:A:129:LEU:CD2	0.48	2.39	13	1
1:A:59:ALA:O	1:A:63:ASP:N	0.48	2.47	16	1
1:A:37:PHE:CD2	1:A:62:GLU:OE1	0.47	2.67	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:ASP:O	1:A:69:PRO:HD3	0.47	2.08	18	3
1:A:6:CYS:SG	1:A:77:VAL:HG11	0.47	2.49	20	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:159:ALA:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:26:ASN:O	2:B:26:THR:C	0.47	2.53	10	1
1:A:6:CYS:O	1:A:7:VAL:HG13	0.47	2.08	10	1
1:A:122:ASP:OD1	1:A:125:THR:CG2	0.47	2.58	14	1
1:A:27:LYS:O	2:B:27:GLY:N	0.47	2.47	14	1
1:A:21:ILE:HG23	2:B:26:THR:O	0.47	2.07	4	1
1:A:98:VAL:O	1:A:102:THR:CG2	0.47	2.62	4	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:13:ASP:HB2	0.47	2.39	2	1
1:A:2:GLN:O	1:A:177:LEU:HD23	0.47	2.09	5	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:CG1	0.47	2.39	5	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:51:TYR:CD1	0.47	2.97	7	1
2:B:25:VAL:HG22	2:B:28:GLU:OE1	0.47	2.09	12	1
1:A:40:TYR:CE2	2:B:15:GLU:OE1	0.47	2.67	6	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:N	0.47	2.47	18	1
1:A:36:VAL:N	2:B:20:VAL:HG21	0.47	2.24	16	1
2:B:22:PHE:O	2:B:23:ASP:C	0.47	2.51	11	5
1:A:84:VAL:HA	1:A:137:ILE:HG22	0.47	1.84	19	2
2:B:13:ASP:OD1	2:B:13:ASP:O	0.47	2.32	2	2
1:A:81:CYS:O	1:A:115:THR:OG1	0.47	2.32	9	4
1:A:14:VAL:HG22	2:B:32:ILE:HG21	0.47	1.84	11	1
1:A:149:LEU:C	1:A:150:LYS:CG	0.47	2.82	20	2
1:A:38:ASP:HB2	2:B:18:ILE:CA	0.47	2.34	20	1
1:A:65:ASP:O	1:A:68:ARG:HG2	0.47	2.10	15	3
1:A:80:VAL:HG13	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.44	10	1
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:HG3	0.47	2.08	15	2
1:A:92:ASN:ND2	1:A:92:ASN:C	0.47	2.67	15	1
1:A:116:GLN:O	1:A:120:ARG:HB2	0.47	2.09	14	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:O	0.47	2.09	14	1
1:A:14:VAL:O	2:B:36:TRP:CE2	0.47	2.66	14	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:THR:CG2	0.47	2.20	14	1
1:A:160:LEU:HB2	2:B:29:PHE:CE2	0.47	2.44	14	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:157:CYS:O	0.47	2.72	4	1
1:A:158:SER:N	1:A:162:GLN:HB2	0.47	2.24	2	2
1:A:37:PHE:O	1:A:57:ASP:HB2	0.47	2.09	5	1
1:A:28:PHE:HA	2:B:27:GLY:O	0.47	2.10	8	2
1:A:35:THR:CB	2:B:20:VAL:O	0.47	2.61	12	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:64:TYR:CE2	0.47	2.66	12	1
1:A:97:TRP:CZ3	1:A:98:VAL:CG2	0.47	2.97	6	1
1:A:163:LYS:HG2	1:A:163:LYS:O	0.47	2.09	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:THR:OG1	2:B:20:VAL:CG2	0.47	2.62	13	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:168:VAL:CG2	0.47	2.97	9	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:HB2	0.47	2.09	9	3
1:A:166:LYS:O	1:A:170:ASP:OD1	0.47	2.32	19	1
2:B:24:ALA:C	2:B:28:GLU:OE1	0.47	2.51	13	2
1:A:87:PRO:HA	1:A:132:ASN:ND2	0.47	2.24	2	3
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASP:OD1	0.47	2.32	2	1
1:A:19:LEU:HD21	2:B:29:PHE:CD2	0.47	2.44	12	3
1:A:86:SER:HB3	1:A:87:PRO:CD	0.47	2.38	6	1
1:A:94:LYS:HB2	1:A:145:LEU:HD21	0.47	1.86	8	1
1:A:4:ILE:HG12	1:A:76:ASP:CB	0.47	2.40	18	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:CG	0.47	2.39	13	1
1:A:44:VAL:O	1:A:50:PRO:CB	0.47	2.63	16	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:145:LEU:HD23	0.47	1.85	19	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:16:LYS:HB3	0.47	2.39	19	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:SER:HB2	0.47	2.09	11	2
1:A:23:TYR:CG	1:A:165:LEU:HD22	0.47	2.44	20	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:PHE:CA	0.47	2.39	10	1
2:B:6:PRO:O	2:B:7:GLU:HG3	0.47	2.10	14	2
1:A:58:THR:HG22	1:A:59:ALA:H	0.47	1.68	13	2
1:A:91:GLU:HA	1:A:94:LYS:HG2	0.47	1.86	14	2
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:156:GLU:C	1:A:163:LYS:O	0.47	2.53	7	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:51:TYR:HB2	0.47	2.40	12	2
1:A:5:LYS:O	1:A:77:VAL:O	0.47	2.31	12	1
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:HB2	0.47	1.84	12	1
1:A:56:PHE:C	1:A:56:PHE:CD1	0.47	2.87	6	1
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG22	0.47	2.09	16	1
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:CG	0.47	2.63	1	1
1:A:87:PRO:CA	1:A:132:ASN:ND2	0.47	2.77	19	1
1:A:156:GLU:O	1:A:157:CYS:SG	0.47	2.73	10	1
1:A:18:CYS:HB2	2:B:26:THR:O	0.47	2.09	5	3
1:A:110:PHE:C	1:A:152:VAL:CG1	0.47	2.82	6	7
1:A:114:GLY:O	1:A:117:ILE:HG22	0.47	2.09	14	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:154:TYR:HA	0.47	1.85	7	4
1:A:21:ILE:HB	2:B:28:GLU:HB3	0.47	1.87	2	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:C	0.47	2.82	12	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:68:ARG:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:41:ALA:C	1:A:42:VAL:CG1	0.47	2.82	6	1
2:B:26:THR:OG1	2:B:36:TRP:CH2	0.47	2.66	6	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:59:ALA:N	0.47	2.46	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LEU:CD1	1:A:154:TYR:HA	0.47	2.38	13	1
1:A:126:ILE:O	1:A:130:ALA:CB	0.47	2.62	19	2
2:B:29:PHE:O	2:B:29:PHE:CD2	0.47	2.67	20	1
1:A:18:CYS:HB2	1:A:28:PHE:CE2	0.47	2.45	10	1
2:B:5:ARG:HD3	2:B:5:ARG:N	0.47	2.25	10	1
1:A:97:TRP:HD1	1:A:97:TRP:N	0.47	2.07	17	1
1:A:22:SER:HB2	2:B:27:GLY:O	0.47	2.09	15	1
1:A:107:LYS:CG	1:A:150:LYS:HD2	0.47	2.39	2	1
1:A:55:LEU:O	1:A:56:PHE:CD1	0.47	2.68	5	1
1:A:99:PRO:O	1:A:101:ILE:HG13	0.47	2.10	6	2
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:CG2	0.47	2.63	12	1
2:B:32:ILE:CB	2:B:33:PRO:HD3	0.47	2.39	12	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:18:ILE:HD12	0.47	2.44	6	1
1:A:161:THR:O	1:A:162:GLN:HB2	0.47	2.08	1	3
1:A:87:PRO:O	1:A:88:SER:C	0.47	2.53	14	8
1:A:161:THR:C	1:A:162:GLN:HG2	0.47	2.30	19	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:N	0.47	2.45	19	1
2:B:4:GLU:C	2:B:6:PRO:HD2	0.47	2.30	19	1
1:A:12:GLY:C	2:B:33:PRO:O	0.47	2.53	15	2
1:A:40:TYR:HA	2:B:16:HIS:H	0.47	1.69	16	2
1:A:46:ILE:O	1:A:47:GLY:C	0.47	2.53	20	9
1:A:158:SER:CB	1:A:162:GLN:HB2	0.47	2.40	3	4
1:A:113:VAL:CG1	1:A:157:CYS:SG	0.47	3.03	20	3
1:A:44:VAL:CG1	1:A:51:TYR:CG	0.47	2.97	20	2
1:A:9:VAL:O	1:A:79:LEU:O	0.47	2.33	14	3
1:A:157:CYS:HB3	1:A:165:LEU:N	0.47	2.25	3	3
1:A:84:VAL:HG21	1:A:120:ARG:HG3	0.47	1.85	9	3
1:A:104:HIS:CE1	1:A:105:CYS:SG	0.47	3.08	17	1
1:A:125:THR:O	1:A:128:LYS:CD	0.47	2.63	15	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:132:ASN:O	0.47	2.09	15	1
2:B:27:GLY:C	2:B:28:GLU:OE1	0.47	2.53	15	3
1:A:134:GLN:CA	1:A:134:GLN:NE2	0.47	2.77	14	1
1:A:59:ALA:HB3	2:B:36:TRP:CH2	0.47	2.45	14	1
1:A:80:VAL:HG21	1:A:97:TRP:CZ3	0.47	2.45	14	1
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:HG2	0.47	2.10	8	2
1:A:67:LEU:HB3	2:B:36:TRP:CH2	0.47	2.44	4	1
1:A:41:ALA:HA	1:A:54:GLY:HA2	0.47	1.85	2	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:18:ILE:CD1	0.47	2.97	2	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:38:ASP:OD1	0.47	2.68	5	1
1:A:13:ALA:O	1:A:14:VAL:HB	0.47	2.09	3	3
1:A:107:LYS:CG	1:A:108:THR:H	0.47	2.22	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:GLN:C	1:A:62:GLU:CG	0.47	2.83	12	1
1:A:128:LYS:O	1:A:131:LYS:HG3	0.47	2.10	12	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ASN:ND2	0.47	2.25	6	1
1:A:2:GLN:HB3	1:A:52:THR:OG1	0.47	2.10	6	1
1:A:47:GLY:N	2:B:9:SER:HB3	0.47	2.24	6	1
1:A:112:LEU:HG	1:A:153:LYS:O	0.47	2.10	13	1
1:A:19:LEU:CD1	2:B:29:PHE:CB	0.47	2.88	16	1
1:A:76:ASP:O	1:A:108:THR:OG1	0.47	2.32	16	2
1:A:84:VAL:O	1:A:129:LEU:HD21	0.47	2.09	9	1
1:A:155:VAL:CG2	1:A:168:VAL:HG22	0.47	2.39	1	2
1:A:26:ASN:HB2	2:B:26:THR:O	0.47	2.10	11	1
1:A:177:LEU:O	1:A:178:GLU:OXT	0.47	2.33	4	1
1:A:70:LEU:H	1:A:70:LEU:HD23	0.47	1.67	4	1
1:A:43:THR:CG2	1:A:51:TYR:O	0.47	2.56	2	1
1:A:51:TYR:CD1	2:B:1:GLY:N	0.47	2.83	5	1
1:A:49:GLU:OE1	2:B:2:SER:O	0.47	2.32	3	2
1:A:120:ARG:C	1:A:120:ARG:CD	0.47	2.83	7	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:80:VAL:N	0.47	2.24	7	1
1:A:86:SER:N	1:A:129:LEU:HD23	0.47	2.25	16	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:CG	0.47	2.63	8	1
2:B:26:THR:CG2	2:B:26:THR:O	0.47	2.62	18	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:64:TYR:HA	0.47	2.10	16	1
1:A:13:ALA:HB1	1:A:115:THR:HG21	0.47	1.87	9	1
1:A:132:ASN:N	1:A:132:ASN:OD1	0.47	2.47	9	1
1:A:35:THR:O	1:A:36:VAL:C	0.47	2.54	9	1
2:B:4:GLU:CB	2:B:7:GLU:OE1	0.47	2.63	19	3
1:A:60:GLY:O	1:A:61:GLN:HG2	0.47	2.10	11	1
2:B:4:GLU:HB3	2:B:7:GLU:OE2	0.47	2.10	11	1
1:A:18:CYS:O	2:B:27:GLY:HA2	0.47	2.10	17	1
1:A:12:GLY:O	2:B:33:PRO:O	0.47	2.33	15	1
1:A:23:TYR:N	1:A:163:LYS:HD2	0.47	2.25	14	1
1:A:12:GLY:HA2	2:B:34:GLU:C	0.47	2.30	12	3
2:B:28:GLU:O	2:B:28:GLU:CG	0.47	2.62	7	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:HG	0.47	1.87	12	1
1:A:40:TYR:CB	2:B:16:HIS:C	0.47	2.84	12	1
1:A:116:GLN:NE2	2:B:30:THR:O	0.47	2.47	12	1
1:A:156:GLU:O	1:A:164:GLY:C	0.47	2.54	6	1
1:A:81:CYS:HB3	1:A:115:THR:OG1	0.47	2.10	8	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:18:ILE:HB	0.47	1.86	18	1
1:A:45:MET:C	2:B:10:LEU:HB3	0.47	2.31	9	1
2:B:11:PRO:O	2:B:12:SER:O	0.47	2.33	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:HG2	1:A:69:PRO:HD3	0.47	1.87	19	2
1:A:8:VAL:HB	2:B:35:GLN:OE1	0.47	2.10	11	1
1:A:128:LYS:C	1:A:129:LEU:HD12	0.47	2.30	10	1
1:A:71:SER:OG	2:B:37:ALA:O	0.47	2.29	10	1
1:A:158:SER:O	1:A:162:GLN:C	0.47	2.54	14	2
1:A:109:PRO:HB3	1:A:175:ALA:HB1	0.47	1.87	4	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:86:SER:N	0.47	2.78	4	1
1:A:52:THR:OG1	1:A:52:THR:O	0.47	2.32	8	2
1:A:118:ASP:OD1	1:A:118:ASP:C	0.47	2.53	3	1
1:A:129:LEU:O	1:A:134:GLN:HB2	0.47	2.10	3	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:114:GLY:O	0.47	2.73	6	2
1:A:156:GLU:O	1:A:168:VAL:CG2	0.47	2.63	6	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:125:THR:CG2	0.47	2.40	13	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:163:LYS:C	0.47	2.89	13	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:HB3	0.47	2.40	16	1
1:A:159:ALA:HB3	2:B:29:PHE:CD2	0.46	2.45	13	3
1:A:86:SER:O	1:A:132:ASN:ND2	0.46	2.48	10	1
1:A:42:VAL:CB	2:B:15:GLU:HA	0.46	2.40	14	1
1:A:67:LEU:HB3	2:B:36:TRP:CZ2	0.46	2.44	4	1
2:B:29:PHE:CD1	2:B:29:PHE:C	0.46	2.89	2	1
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:HD23	0.46	2.30	12	1
1:A:58:THR:CG2	2:B:36:TRP:CE3	0.46	2.98	6	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:140:GLU:CG	0.46	2.62	18	1
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:OE2	0.46	2.33	16	1
1:A:154:TYR:CG	1:A:154:TYR:O	0.46	2.67	11	2
1:A:8:VAL:HG23	2:B:36:TRP:CB	0.46	2.39	20	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:HB2	0.46	2.10	17	1
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:HB2	0.46	2.09	15	2
1:A:62:GLU:CG	1:A:65:ASP:HB3	0.46	2.40	15	1
1:A:82:PHE:N	1:A:115:THR:OG1	0.46	2.48	15	1
1:A:36:VAL:O	2:B:19:HIS:O	0.46	2.34	2	2
1:A:21:ILE:CG2	1:A:22:SER:N	0.46	2.78	14	1
1:A:170:ASP:O	1:A:173:ILE:HB	0.46	2.10	4	1
1:A:39:ASN:HA	1:A:56:PHE:CE1	0.46	2.45	4	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:62:GLU:HG2	0.46	1.85	2	1
1:A:87:PRO:O	1:A:88:SER:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:159:ALA:HB2	2:B:29:PHE:CE2	0.46	2.46	3	2
1:A:23:TYR:N	1:A:23:TYR:CD2	0.46	2.81	12	1
1:A:18:CYS:SG	2:B:29:PHE:CZ	0.46	3.08	6	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:154:TYR:CG	0.46	2.98	18	2
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:HB2	0.46	2.10	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1:MET:O	1:A:177:LEU:O	0.46	2.33	12	4
1:A:8:VAL:CG2	2:B:36:TRP:HB2	0.46	2.41	20	2
1:A:97:TRP:O	1:A:100:GLU:HB3	0.46	2.10	3	3
1:A:18:CYS:HB2	2:B:27:GLY:O	0.46	2.11	11	1
1:A:40:TYR:CZ	2:B:16:HIS:O	0.46	2.68	11	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:94:LYS:HE2	0.46	2.46	17	3
1:A:23:TYR:CD2	1:A:165:LEU:HB2	0.46	2.45	20	1
1:A:116:GLN:O	1:A:118:ASP:N	0.46	2.48	10	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:HG3	0.46	2.09	10	1
2:B:5:ARG:HD3	2:B:6:PRO:HD3	0.46	1.86	15	2
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LYS:O	0.46	2.33	9	2
1:A:155:VAL:HG11	1:A:167:ASN:HB3	0.46	1.86	14	1
1:A:105:CYS:H	1:A:106:PRO:HD3	0.46	1.69	2	2
1:A:13:ALA:O	2:B:32:ILE:HD11	0.46	2.11	5	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:HA	0.46	2.40	7	1
2:B:29:PHE:CE1	2:B:33:PRO:HG3	0.46	2.45	6	1
1:A:148:ASP:OD1	1:A:148:ASP:O	0.46	2.33	8	1
1:A:1:MET:HA	1:A:177:LEU:HA	0.46	1.87	18	1
1:A:86:SER:O	1:A:133:LYS:NZ	0.46	2.47	13	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:68:ARG:NH2	0.46	2.82	13	1
1:A:111:LEU:HG	1:A:172:ALA:CB	0.46	2.39	1	1
1:A:26:ASN:CB	2:B:27:GLY:HA3	0.46	2.40	6	2
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:C	0.46	2.54	16	3
1:A:27:LYS:O	2:B:28:GLU:HA	0.46	2.11	13	3
1:A:4:ILE:O	1:A:53:LEU:HA	0.46	2.11	2	4
1:A:85:VAL:HB	1:A:129:LEU:HD13	0.46	1.87	20	1
1:A:36:VAL:HG22	2:B:26:THR:OG1	0.46	2.11	20	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:14:PHE:HB3	0.46	2.40	10	1
1:A:69:PRO:HB2	2:B:36:TRP:O	0.46	2.10	17	1
1:A:27:LYS:HB2	2:B:28:GLU:HB3	0.46	1.86	15	1
1:A:22:SER:HA	1:A:27:LYS:CB	0.46	2.40	14	1
1:A:93:VAL:CG1	1:A:97:TRP:CH2	0.46	2.98	14	1
1:A:26:ASN:CB	1:A:27:LYS:HD2	0.46	2.41	2	1
1:A:81:CYS:HB3	1:A:115:THR:CG2	0.46	2.40	12	2
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD1	0.46	2.80	13	3
1:A:23:TYR:OH	1:A:162:GLN:HA	0.46	2.10	7	1
1:A:1:MET:HA	1:A:177:LEU:CA	0.46	2.40	18	1
1:A:39:ASN:O	2:B:18:ILE:HD11	0.46	2.08	18	1
1:A:70:LEU:HD11	2:B:36:TRP:O	0.46	2.09	16	1
1:A:162:GLN:CG	1:A:165:LEU:HB2	0.46	2.40	9	1
1:A:139:PRO:O	1:A:143:GLU:HB2	0.46	2.11	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:ASP:O	1:A:126:ILE:CG1	0.46	2.64	10	1
1:A:18:CYS:CA	1:A:28:PHE:CG	0.46	2.99	10	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:35:THR:OG1	0.46	2.10	10	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:15:GLY:N	0.46	2.25	17	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:CG2	0.46	2.63	12	2
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:SER:HB3	0.46	1.87	15	1
1:A:37:PHE:CA	2:B:20:VAL:HA	0.46	2.40	15	1
1:A:1:MET:HA	1:A:177:LEU:O	0.46	2.11	18	2
1:A:13:ALA:O	2:B:33:PRO:O	0.46	2.34	14	1
1:A:148:ASP:HB3	1:A:149:LEU:CD1	0.46	2.41	2	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:163:LYS:HA	0.46	2.45	2	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:38:ARG:NE	0.46	2.43	12	1
1:A:120:ARG:CD	1:A:120:ARG:C	0.46	2.84	6	1
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:HG22	0.46	1.87	6	1
1:A:101:ILE:O	1:A:102:THR:C	0.46	2.53	1	7
1:A:112:LEU:O	1:A:155:VAL:HG23	0.46	2.10	9	3
1:A:18:CYS:CA	1:A:28:PHE:CB	0.46	2.94	10	1
1:A:158:SER:O	1:A:162:GLN:HA	0.46	2.10	17	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:39:ASN:O	0.46	2.34	15	1
1:A:40:TYR:O	1:A:55:LEU:O	0.46	2.34	15	1
2:B:16:HIS:O	2:B:16:HIS:ND1	0.46	2.46	15	1
2:B:10:LEU:O	2:B:10:LEU:CG	0.46	2.62	18	2
1:A:90:PHE:HZ	1:A:112:LEU:HD11	0.46	1.69	5	1
1:A:20:LEU:O	1:A:24:THR:CB	0.46	2.63	9	2
1:A:4:ILE:CD1	1:A:76:ASP:HA	0.46	2.41	18	1
1:A:14:VAL:O	2:B:35:GLN:OE1	0.46	2.34	9	1
1:A:177:LEU:O	1:A:178:GLU:C	0.46	2.54	1	3
1:A:58:THR:HA	1:A:67:LEU:CB	0.46	2.41	1	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:21:GLY:CA	0.46	2.41	1	1
2:B:8:ILE:CG1	2:B:9:SER:N	0.46	2.77	18	4
1:A:126:ILE:O	1:A:130:ALA:N	0.46	2.41	19	1
2:B:36:TRP:O	2:B:37:ALA:CB	0.46	2.62	14	2
1:A:113:VAL:CG2	1:A:168:VAL:CG1	0.46	2.94	20	1
1:A:21:ILE:C	1:A:27:LYS:O	0.46	2.54	10	1
2:B:35:GLN:HG2	2:B:36:TRP:N	0.46	2.26	10	2
1:A:81:CYS:C	1:A:115:THR:OG1	0.46	2.54	16	3
1:A:163:LYS:NZ	1:A:165:LEU:CD1	0.46	2.77	14	1
1:A:35:THR:HB	2:B:20:VAL:CG1	0.46	2.40	14	2
1:A:80:VAL:CG2	1:A:80:VAL:O	0.46	2.63	12	2
1:A:44:VAL:HG12	1:A:46:ILE:HD11	0.46	1.84	4	1
2:B:23:ASP:OD1	2:B:23:ASP:N	0.46	2.47	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ASN:CB	1:A:55:LEU:HD12	0.46	2.40	5	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:26:ASN:CB	0.46	2.91	6	1
1:A:9:VAL:O	2:B:35:GLN:NE2	0.46	2.49	6	1
1:A:25:THR:O	1:A:26:ASN:OD1	0.46	2.34	8	1
1:A:46:ILE:HD13	1:A:51:TYR:CE1	0.46	2.45	8	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:159:ALA:O	0.46	2.68	18	1
1:A:100:GLU:C	1:A:101:ILE:HG12	0.46	2.31	11	2
1:A:18:CYS:O	1:A:21:ILE:HB	0.46	2.11	19	1
1:A:20:LEU:O	1:A:24:THR:OG1	0.46	2.26	11	5
1:A:38:ASP:HA	2:B:18:ILE:HG13	0.46	1.88	11	2
2:B:38:ARG:O	2:B:38:ARG:HG3	0.46	2.11	11	1
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:CG	0.46	2.54	5	3
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:HB	0.46	2.51	5	2
1:A:69:PRO:HG2	2:B:36:TRP:O	0.46	2.11	17	1
1:A:15:GLY:O	1:A:19:LEU:HG	0.46	2.11	4	2
1:A:19:LEU:CB	1:A:165:LEU:HD11	0.46	2.40	9	2
1:A:22:SER:OG	1:A:27:LYS:HB3	0.46	2.10	15	1
1:A:38:ASP:CG	1:A:55:LEU:CD1	0.46	2.84	4	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HB2	0.46	1.87	5	1
1:A:39:ASN:C	1:A:40:TYR:CD1	0.46	2.89	3	1
1:A:40:TYR:CB	2:B:15:GLU:HB3	0.46	2.40	6	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:HD21	0.46	2.11	8	1
1:A:67:LEU:CA	1:A:70:LEU:HD21	0.46	2.41	8	1
1:A:95:GLU:HA	1:A:99:PRO:HG3	0.46	1.87	8	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:172:ALA:O	0.46	2.10	18	1
1:A:125:THR:HG23	1:A:126:ILE:HD12	0.46	1.88	16	1
1:A:159:ALA:HB2	2:B:29:PHE:CE1	0.46	2.45	16	1
1:A:37:PHE:CB	2:B:18:ILE:HD13	0.46	2.41	16	1
1:A:128:LYS:O	1:A:132:ASN:OD1	0.46	2.33	9	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:ASN:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:14:VAL:HB	2:B:29:PHE:CD2	0.46	2.45	1	1
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD23	0.46	2.26	1	1
1:A:92:ASN:HA	1:A:95:GLU:CG	0.46	2.41	19	2
1:A:6:CYS:HB2	1:A:55:LEU:CB	0.46	2.41	14	3
1:A:27:LYS:HE2	2:B:25:VAL:O	0.46	2.10	10	1
1:A:71:SER:O	1:A:73:PRO:HD3	0.46	2.11	9	2
1:A:46:ILE:HA	2:B:10:LEU:CB	0.46	2.41	14	1
1:A:19:LEU:HB3	1:A:23:TYR:OH	0.46	2.11	3	1
2:B:19:HIS:ND1	2:B:19:HIS:N	0.46	2.64	7	1
1:A:97:TRP:CZ3	1:A:149:LEU:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:85:VAL:CA	1:A:129:LEU:HD21	0.46	2.41	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:PHE:HB3	2:B:18:ILE:HD13	0.46	1.88	16	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:159:ALA:HA	0.46	2.46	1	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:59:ALA:HB3	0.46	1.87	1	1
1:A:2:GLN:O	1:A:3:THR:C	0.46	2.54	20	5
1:A:124:SER:O	1:A:127:GLU:HB2	0.46	2.11	18	3
1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:O	0.46	2.64	11	1
1:A:111:LEU:O	1:A:113:VAL:HG23	0.46	2.11	3	2
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ASP:N	0.46	2.43	10	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:160:LEU:CD2	0.46	2.38	10	1
1:A:25:THR:CG2	1:A:26:ASN:OD1	0.46	2.59	10	1
1:A:47:GLY:N	2:B:7:GLU:OE1	0.46	2.49	14	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:135:LYS:C	0.46	2.85	4	1
1:A:69:PRO:O	1:A:70:LEU:C	0.46	2.54	4	1
1:A:51:TYR:CE2	1:A:177:LEU:HD21	0.46	2.46	12	1
1:A:120:ARG:HD2	1:A:121:ASP:N	0.46	2.25	6	1
1:A:84:VAL:HB	1:A:137:ILE:CG2	0.46	2.41	18	1
1:A:59:ALA:HA	1:A:63:ASP:HA	0.46	1.88	16	1
1:A:149:LEU:CD1	1:A:151:ALA:HB2	0.45	2.40	1	1
1:A:59:ALA:HB1	2:B:20:VAL:O	0.45	2.11	1	1
2:B:36:TRP:CE3	2:B:36:TRP:N	0.45	2.84	1	1
1:A:38:ASP:OD1	2:B:18:ILE:HG12	0.45	2.11	19	1
2:B:21:GLY:O	2:B:22:PHE:HB3	0.45	2.10	19	2
1:A:26:ASN:HB3	2:B:26:THR:OG1	0.45	2.11	14	2
1:A:130:ALA:O	1:A:133:LYS:O	0.45	2.33	5	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:57:ASP:OD2	0.45	2.34	5	1
1:A:104:HIS:O	1:A:105:CYS:HB3	0.45	2.10	7	1
1:A:86:SER:CB	1:A:129:LEU:HD23	0.45	2.41	6	1
1:A:157:CYS:O	1:A:157:CYS:SG	0.45	2.74	6	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:OE1	0.45	2.34	6	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:108:THR:N	0.45	2.49	8	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:N	0.45	2.26	8	1
1:A:2:GLN:HG2	1:A:3:THR:N	0.45	2.26	8	1
2:B:32:ILE:HB	2:B:33:PRO:HD3	0.45	1.88	8	1
1:A:37:PHE:CG	2:B:18:ILE:CD1	0.45	2.99	16	1
1:A:85:VAL:CA	1:A:129:LEU:HD11	0.45	2.40	1	2
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:H	0.45	2.09	1	1
1:A:120:ARG:HA	1:A:125:THR:HG21	0.45	1.86	16	2
1:A:37:PHE:CG	2:B:19:HIS:O	0.45	2.69	19	1
1:A:26:ASN:OD1	2:B:26:THR:HG22	0.45	2.12	19	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:37:ALA:C	0.45	2.32	4	3
1:A:40:TYR:CE1	2:B:17:THR:CG2	0.45	2.99	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:HD21	1:A:125:THR:HB	0.45	1.87	2	2
1:A:113:VAL:HG13	1:A:168:VAL:HG21	0.45	1.87	14	1
1:A:158:SER:N	1:A:165:LEU:CD2	0.45	2.80	4	1
2:B:23:ASP:O	2:B:25:VAL:N	0.45	2.49	12	3
1:A:38:ASP:HB3	2:B:18:ILE:HA	0.45	1.87	2	1
1:A:28:PHE:CD2	2:B:29:PHE:CE2	0.45	3.04	2	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:62:GLU:CA	0.45	2.42	5	1
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:HD21	0.45	2.12	7	1
1:A:126:ILE:HD12	1:A:129:LEU:HD21	0.45	1.88	12	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:68:ARG:HG3	0.45	2.11	12	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:HG13	0.45	2.40	9	2
1:A:37:PHE:O	1:A:38:ASP:CG	0.45	2.55	6	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:62:GLU:N	0.45	2.49	6	1
1:A:69:PRO:CD	1:A:70:LEU:HD22	0.45	2.41	9	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:56:PHE:CE2	0.45	2.69	19	1
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:HG22	0.45	1.88	9	3
1:A:139:PRO:HA	1:A:142:ALA:HB3	0.45	1.89	20	1
1:A:70:LEU:CG	2:B:37:ALA:HA	0.45	2.41	18	2
1:A:19:LEU:C	1:A:159:ALA:CB	0.45	2.85	10	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:CD	0.45	2.54	10	3
1:A:23:TYR:CE2	1:A:162:GLN:CB	0.45	3.00	15	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:18:CYS:SG	0.45	3.04	15	1
2:B:10:LEU:C	2:B:10:LEU:CD1	0.45	2.84	15	1
1:A:8:VAL:HG23	2:B:36:TRP:CE3	0.45	2.46	15	1
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:CD1	0.45	2.23	12	2
1:A:37:PHE:HB3	2:B:19:HIS:O	0.45	2.11	13	3
1:A:82:PHE:CE2	1:A:90:PHE:CG	0.45	3.04	4	1
1:A:95:GLU:O	1:A:99:PRO:HD3	0.45	2.10	3	1
1:A:44:VAL:HA	2:B:12:SER:CB	0.45	2.41	6	1
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:CD2	0.45	2.84	18	1
1:A:112:LEU:O	1:A:154:TYR:HA	0.45	2.12	18	1
1:A:22:SER:OG	2:B:27:GLY:C	0.45	2.55	13	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:129:LEU:C	0.45	2.84	16	1
1:A:135:LYS:N	1:A:135:LYS:CD	0.45	2.79	16	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:162:GLN:N	0.45	2.50	16	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:37:PHE:H	0.45	1.69	16	2
1:A:70:LEU:HD12	1:A:72:TYR:H	0.45	1.71	19	1
1:A:169:PHE:O	1:A:173:ILE:HG12	0.45	2.12	6	4
1:A:83:SER:CA	1:A:115:THR:OG1	0.45	2.65	10	1
1:A:2:GLN:OE1	1:A:50:PRO:O	0.45	2.34	10	1
1:A:1:MET:C	1:A:2:GLN:HG2	0.45	2.31	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LYS:O	1:A:98:VAL:HB	0.45	2.12	7	2
1:A:38:ASP:HA	1:A:57:ASP:CB	0.45	2.42	2	1
1:A:15:GLY:N	2:B:36:TRP:CZ2	0.45	2.85	2	1
2:B:32:ILE:N	2:B:33:PRO:HD2	0.45	2.27	8	1
1:A:41:ALA:O	2:B:15:GLU:HB2	0.45	2.12	13	1
1:A:58:THR:HA	1:A:68:ARG:CZ	0.45	2.42	13	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:114:GLY:C	0.45	2.95	16	1
1:A:113:VAL:HA	1:A:155:VAL:O	0.45	2.11	6	6
1:A:154:TYR:CD2	1:A:154:TYR:O	0.45	2.70	20	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:4:ILE:C	0.45	2.83	16	2
1:A:18:CYS:O	1:A:22:SER:HB2	0.45	2.12	9	3
1:A:139:PRO:HB2	1:A:154:TYR:CE2	0.45	2.46	17	1
1:A:155:VAL:CG2	1:A:171:GLU:CD	0.45	2.84	17	1
1:A:35:THR:CG2	2:B:36:TRP:CH2	0.45	2.99	17	1
1:A:158:SER:CB	1:A:161:THR:CG2	0.45	2.91	15	1
1:A:139:PRO:HB3	1:A:154:TYR:OH	0.45	2.11	5	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:158:SER:O	0.45	2.69	3	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:165:LEU:HD11	0.45	2.46	3	1
1:A:92:ASN:HD21	1:A:93:VAL:HG23	0.45	1.70	3	1
1:A:108:THR:O	1:A:110:PHE:CE2	0.45	2.70	12	1
1:A:121:ASP:OD1	1:A:121:ASP:O	0.45	2.34	12	1
1:A:59:ALA:HA	2:B:20:VAL:HG11	0.45	1.87	12	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:HG22	0.45	2.12	8	1
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:HG13	0.45	1.88	8	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:MET:N	0.45	2.25	16	1
1:A:92:ASN:ND2	1:A:93:VAL:CG1	0.45	2.78	1	1
2:B:28:GLU:O	2:B:30:THR:HG23	0.45	2.11	19	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:15:GLY:HA2	0.45	2.40	11	1
1:A:13:ALA:O	2:B:32:ILE:HG22	0.45	2.11	11	1
1:A:83:SER:CB	1:A:116:GLN:NE2	0.45	2.80	20	1
1:A:46:ILE:HG13	2:B:10:LEU:HB2	0.45	1.89	20	1
2:B:3:LYS:O	2:B:3:LYS:CG	0.45	2.64	20	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:17:THR:HB	0.45	1.88	17	1
1:A:125:THR:C	1:A:129:LEU:HD12	0.45	2.31	14	1
1:A:3:THR:HG23	1:A:5:LYS:HE3	0.45	1.88	4	1
1:A:35:THR:CB	2:B:26:THR:HB	0.45	2.42	3	1
1:A:20:LEU:O	1:A:24:THR:HB	0.45	2.10	9	2
1:A:21:ILE:HG21	2:B:26:THR:CG2	0.45	2.40	7	1
1:A:80:VAL:HG21	1:A:82:PHE:CE2	0.45	2.46	12	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:82:PHE:CE2	0.45	2.46	12	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:CD2	0.45	2.34	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:THR:N	1:A:52:THR:OG1	0.45	2.49	8	1
1:A:35:THR:CB	2:B:20:VAL:HB	0.45	2.42	13	1
1:A:106:PRO:C	1:A:107:LYS:HG2	0.45	2.32	16	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:SER:CB	0.45	2.42	16	1
1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:CG	0.45	2.87	1	1
1:A:26:ASN:C	1:A:27:LYS:HG2	0.45	2.31	1	3
1:A:133:LYS:O	1:A:133:LYS:HG2	0.45	2.12	19	3
1:A:20:LEU:H	1:A:20:LEU:HD23	0.45	1.72	19	1
1:A:36:VAL:O	1:A:57:ASP:HB3	0.45	2.11	4	4
1:A:70:LEU:O	1:A:71:SER:HB2	0.45	2.10	16	3
1:A:104:HIS:NE2	1:A:105:CYS:SG	0.45	2.82	17	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:176:ALA:HB2	0.45	1.82	17	1
1:A:49:GLU:CB	2:B:4:GLU:OE2	0.45	2.65	17	1
1:A:39:ASN:N	1:A:39:ASN:OD1	0.45	2.47	15	1
1:A:16:LYS:HB2	1:A:157:CYS:SG	0.45	2.52	4	1
1:A:150:LYS:O	1:A:150:LYS:HG3	0.45	2.11	2	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:13:ASP:CB	0.45	2.94	2	1
1:A:62:GLU:O	2:B:21:GLY:HA3	0.45	2.11	2	1
1:A:56:PHE:HB2	2:B:36:TRP:CH2	0.45	2.47	5	1
1:A:37:PHE:HB3	2:B:20:VAL:HB	0.45	1.87	3	2
1:A:157:CYS:HB2	1:A:165:LEU:HA	0.45	1.86	7	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:65:ASP:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:94:LYS:HA	1:A:97:TRP:CE2	0.45	2.47	6	1
1:A:134:GLN:O	1:A:136:PRO:HD3	0.45	2.11	1	2
1:A:158:SER:CB	1:A:162:GLN:HB3	0.45	2.42	11	1
1:A:101:ILE:O	1:A:102:THR:O	0.45	2.35	3	3
1:A:14:VAL:HG12	2:B:29:PHE:CD2	0.45	2.46	10	1
1:A:9:VAL:CB	2:B:35:GLN:HG3	0.45	2.42	10	1
2:B:8:ILE:HD12	2:B:8:ILE:N	0.45	2.27	10	1
1:A:70:LEU:CA	2:B:37:ALA:HA	0.45	2.41	17	1
1:A:68:ARG:CZ	1:A:68:ARG:HB2	0.45	2.42	15	1
1:A:84:VAL:CA	1:A:137:ILE:CG2	0.45	2.94	14	1
1:A:94:LYS:NZ	1:A:145:LEU:HD13	0.45	2.27	4	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:158:SER:C	0.45	2.55	2	2
1:A:38:ASP:HA	1:A:57:ASP:HB3	0.45	1.89	2	1
2:B:32:ILE:O	2:B:32:ILE:HG23	0.45	2.12	5	1
1:A:171:GLU:HG3	1:A:172:ALA:N	0.45	2.26	3	1
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:CG	0.45	2.94	12	1
1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CD2	0.45	2.78	12	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:145:LEU:CD1	0.45	2.99	12	1
1:A:117:ILE:CG1	1:A:163:LYS:CD	0.45	2.95	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLU:C	1:A:99:PRO:CG	0.45	2.85	18	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:163:LYS:CB	0.45	3.00	18	1
2:B:16:HIS:O	2:B:17:THR:HG23	0.45	2.11	18	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:163:LYS:N	0.45	2.85	16	1
1:A:79:LEU:CD1	1:A:169:PHE:CD1	0.45	3.00	16	1
1:A:82:PHE:O	1:A:114:GLY:HA2	0.45	2.12	1	6
2:B:30:THR:O	2:B:31:GLY:C	0.45	2.54	1	1
1:A:37:PHE:C	1:A:37:PHE:CD1	0.45	2.88	19	1
1:A:47:GLY:HA3	2:B:7:GLU:HB3	0.45	1.89	11	1
1:A:118:ASP:C	1:A:119:LEU:CG	0.45	2.85	20	1
1:A:45:MET:HA	1:A:49:GLU:O	0.45	2.12	6	7
2:B:5:ARG:H	2:B:6:PRO:CD	0.45	2.24	7	2
1:A:159:ALA:HA	1:A:163:LYS:HG2	0.45	1.89	14	1
1:A:22:SER:O	1:A:27:LYS:HB3	0.45	2.12	14	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:53:LEU:HD12	0.45	2.41	14	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:152:VAL:CB	0.45	2.95	4	1
1:A:105:CYS:SG	1:A:106:PRO:HD2	0.45	2.52	5	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:109:PRO:HD2	0.45	2.12	7	2
2:B:5:ARG:O	2:B:7:GLU:OE1	0.45	2.35	7	1
1:A:88:SER:OG	1:A:133:LYS:HD3	0.45	2.12	12	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:56:PHE:O	0.45	2.70	12	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:159:ALA:CA	0.45	2.42	6	1
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:40:TYR:HB2	2:B:16:HIS:HB3	0.45	1.88	18	1
2:B:4:GLU:HB2	2:B:7:GLU:OE1	0.45	2.11	19	2
1:A:1:MET:O	1:A:177:LEU:HB3	0.45	2.12	11	5
1:A:86:SER:C	1:A:132:ASN:ND2	0.45	2.70	10	1
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:HB3	0.45	2.12	2	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HB	0.45	1.89	4	1
1:A:89:SER:O	1:A:92:ASN:CG	0.45	2.56	5	2
1:A:138:THR:OG1	1:A:140:GLU:HG2	0.45	2.12	9	2
1:A:129:LEU:CA	1:A:134:GLN:HB2	0.45	2.42	3	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:134:GLN:CG	0.45	2.42	3	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:60:GLY:HA2	0.45	2.47	7	1
1:A:105:CYS:HB2	1:A:106:PRO:CD	0.45	2.42	18	1
1:A:134:GLN:CB	1:A:135:LYS:HD2	0.45	2.41	16	1
2:B:14:PHE:O	2:B:15:GLU:CG	0.45	2.65	16	1
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:HB	0.45	2.12	9	1
2:B:13:ASP:CG	2:B:13:ASP:O	0.44	2.56	19	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:LYS:CB	0.44	2.65	20	2
1:A:65:ASP:OD2	1:A:68:ARG:NH2	0.44	2.50	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LYS:HA	1:A:19:LEU:HG	0.44	1.87	17	1
1:A:49:GLU:HB3	2:B:4:GLU:OE2	0.44	2.12	17	1
1:A:85:VAL:HG23	1:A:86:SER:H	0.44	1.72	17	1
1:A:22:SER:O	1:A:27:LYS:HA	0.44	2.12	18	3
1:A:115:THR:O	1:A:116:GLN:HG3	0.44	2.12	15	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:CD1	0.44	2.43	15	1
1:A:152:VAL:HG21	1:A:175:ALA:CB	0.44	2.41	15	1
1:A:59:ALA:CB	2:B:36:TRP:CZ3	0.44	3.00	14	1
1:A:88:SER:O	1:A:89:SER:HB2	0.44	2.12	14	1
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD13	0.44	2.25	5	5
2:B:5:ARG:HD2	2:B:7:GLU:N	0.44	2.28	4	1
1:A:145:LEU:O	1:A:148:ASP:HB3	0.44	2.12	2	2
1:A:21:ILE:HG21	2:B:28:GLU:HB2	0.44	1.87	2	1
1:A:27:LYS:CG	1:A:28:PHE:H	0.44	2.25	5	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:113:VAL:HG12	0.44	2.52	12	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:CB	0.44	3.05	8	2
1:A:100:GLU:HB3	1:A:105:CYS:HB3	0.44	1.88	6	1
1:A:118:ASP:OD2	1:A:158:SER:OG	0.44	2.33	6	1
1:A:26:ASN:OD1	1:A:35:THR:HG23	0.44	2.12	6	1
1:A:90:PHE:CD2	1:A:94:LYS:HE2	0.44	2.47	6	1
1:A:12:GLY:C	2:B:35:GLN:OE1	0.44	2.56	8	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:HG13	0.44	1.89	9	1
1:A:21:ILE:O	1:A:22:SER:C	0.44	2.55	20	4
1:A:122:ASP:OD1	1:A:123:PRO:HD2	0.44	2.12	20	1
1:A:57:ASP:O	1:A:58:THR:C	0.44	2.55	10	4
1:A:2:GLN:O	1:A:52:THR:HB	0.44	2.12	15	1
1:A:27:LYS:CB	2:B:28:GLU:HB3	0.44	2.42	15	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:19:HIS:O	0.44	2.12	6	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:135:LYS:O	0.44	2.11	14	2
1:A:102:THR:OG1	1:A:103:HIS:CD2	0.44	2.70	14	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:126:ILE:HG13	0.44	2.42	14	1
1:A:160:LEU:HB2	2:B:29:PHE:CZ	0.44	2.47	14	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:56:PHE:N	0.44	2.27	14	2
1:A:8:VAL:CG1	2:B:36:TRP:CE3	0.44	3.00	2	1
1:A:44:VAL:HA	2:B:13:ASP:HB3	0.44	1.87	16	2
1:A:38:ASP:C	1:A:55:LEU:HD11	0.44	2.33	3	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:103:HIS:H	0.44	1.72	7	1
1:A:15:GLY:N	2:B:35:GLN:HG3	0.44	2.28	7	2
1:A:102:THR:HB	1:A:107:LYS:HG2	0.44	1.88	12	1
1:A:57:ASP:C	1:A:57:ASP:OD1	0.44	2.55	12	1
2:B:2:SER:O	2:B:4:GLU:HG3	0.44	2.13	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:PHE:CB	2:B:20:VAL:HG22	0.44	2.41	13	1
1:A:23:TYR:N	1:A:159:ALA:O	0.44	2.50	11	1
1:A:8:VAL:C	2:B:35:GLN:OE1	0.44	2.56	11	1
1:A:70:LEU:C	1:A:72:TYR:N	0.44	2.70	20	3
1:A:37:PHE:CD1	2:B:20:VAL:CG1	0.44	3.00	20	1
1:A:62:GLU:C	1:A:62:GLU:OE1	0.44	2.56	10	1
2:B:36:TRP:CD1	2:B:36:TRP:C	0.44	2.89	10	1
1:A:27:LYS:C	2:B:28:GLU:OE2	0.44	2.56	15	1
1:A:111:LEU:H	1:A:111:LEU:CD2	0.44	2.26	16	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:8:VAL:N	0.44	2.27	12	5
2:B:23:ASP:C	2:B:25:VAL:N	0.44	2.70	4	1
1:A:59:ALA:HA	1:A:62:GLU:HG2	0.44	1.90	13	2
1:A:1:MET:O	1:A:2:GLN:HB3	0.44	2.10	3	2
1:A:9:VAL:HG21	1:A:80:VAL:HA	0.44	1.89	7	2
1:A:1:MET:CA	1:A:177:LEU:HB3	0.44	2.42	8	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:59:ALA:HB2	0.44	2.29	16	1
1:A:6:CYS:HB3	1:A:55:LEU:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:139:PRO:HB3	1:A:154:TYR:CE2	0.44	2.48	4	3
1:A:18:CYS:HB2	2:B:26:THR:C	0.44	2.33	20	1
1:A:16:LYS:CD	1:A:113:VAL:HG11	0.44	2.43	10	1
1:A:122:ASP:CG	1:A:125:THR:HG22	0.44	2.32	10	1
1:A:133:LYS:CE	1:A:136:PRO:HB3	0.44	2.43	10	1
1:A:91:GLU:O	1:A:94:LYS:HG3	0.44	2.12	10	2
1:A:120:ARG:O	1:A:120:ARG:NE	0.44	2.50	17	1
2:B:22:PHE:O	2:B:25:VAL:HB	0.44	2.11	17	2
1:A:117:ILE:CG1	1:A:118:ASP:N	0.44	2.80	14	2
1:A:174:LEU:O	1:A:178:GLU:CG	0.44	2.66	4	1
1:A:25:THR:OG1	2:B:27:GLY:HA3	0.44	2.13	4	1
1:A:2:GLN:HG3	1:A:52:THR:OG1	0.44	2.12	4	1
1:A:100:GLU:HG3	1:A:101:ILE:N	0.44	2.28	2	1
1:A:165:LEU:O	1:A:168:VAL:HB	0.44	2.11	2	1
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:CB	0.44	2.43	2	3
1:A:158:SER:OG	1:A:162:GLN:N	0.44	2.36	3	1
1:A:28:PHE:O	2:B:28:GLU:HG2	0.44	2.11	3	1
1:A:45:MET:CB	2:B:11:PRO:HD2	0.44	2.43	3	1
1:A:39:ASN:O	1:A:39:ASN:CG	0.44	2.55	7	1
1:A:162:GLN:N	1:A:162:GLN:NE2	0.44	2.65	12	1
2:B:32:ILE:HG22	2:B:33:PRO:N	0.44	2.28	12	1
1:A:40:TYR:CE1	2:B:18:ILE:CG2	0.44	2.98	6	1
1:A:41:ALA:O	2:B:14:PHE:O	0.44	2.36	8	1
1:A:146:ALA:O	1:A:149:LEU:HD13	0.44	2.12	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:O	0.44	2.12	13	1
1:A:85:VAL:HG21	1:A:125:THR:CG2	0.44	2.41	16	1
1:A:64:TYR:O	2:B:36:TRP:NE1	0.44	2.50	16	1
1:A:5:LYS:HB3	1:A:75:THR:CG2	0.44	2.40	1	1
2:B:5:ARG:CD	2:B:6:PRO:CD	0.44	2.96	19	1
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:HA	0.44	1.90	20	2
1:A:116:GLN:O	1:A:117:ILE:C	0.44	2.54	10	1
1:A:36:VAL:C	2:B:20:VAL:HB	0.44	2.32	12	2
1:A:157:CYS:HB2	1:A:168:VAL:HG21	0.44	1.89	17	1
1:A:40:TYR:CB	1:A:55:LEU:HD11	0.44	2.43	15	1
1:A:123:PRO:HA	1:A:126:ILE:HB	0.44	1.90	18	2
1:A:84:VAL:O	1:A:137:ILE:CG2	0.44	2.66	14	1
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:HD13	0.44	1.73	12	3
1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:HD22	0.44	2.28	4	1
1:A:61:GLN:CB	2:B:21:GLY:HA3	0.44	2.43	5	1
1:A:40:TYR:CB	2:B:16:HIS:O	0.44	2.65	12	1
1:A:98:VAL:HG12	1:A:106:PRO:CB	0.44	2.41	8	1
1:A:39:ASN:O	2:B:16:HIS:C	0.44	2.55	16	1
1:A:68:ARG:CB	1:A:69:PRO:CD	0.44	2.94	9	1
1:A:45:MET:CB	2:B:10:LEU:HD23	0.44	2.42	19	1
1:A:143:GLU:O	1:A:143:GLU:CD	0.44	2.56	11	1
1:A:74:GLN:CD	1:A:74:GLN:N	0.44	2.68	4	2
1:A:45:MET:HB2	2:B:11:PRO:HD2	0.44	1.87	10	3
1:A:21:ILE:HG22	1:A:27:LYS:C	0.44	2.26	10	1
1:A:2:GLN:CG	2:B:1:GLY:CA	0.44	2.96	10	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:162:GLN:HB3	0.44	2.47	17	1
1:A:26:ASN:CG	2:B:24:ALA:O	0.44	2.55	17	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:171:GLU:HB3	0.44	2.42	4	1
1:A:42:VAL:HG13	2:B:14:PHE:C	0.44	2.32	4	1
1:A:42:VAL:HG13	2:B:14:PHE:N	0.44	2.27	4	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:LYS:HD3	0.44	2.12	5	1
2:B:34:GLU:HG2	2:B:35:GLN:N	0.44	2.28	5	1
1:A:133:LYS:CD	1:A:133:LYS:O	0.44	2.66	7	1
1:A:22:SER:OG	1:A:27:LYS:HA	0.44	2.12	18	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:149:LEU:HD22	0.44	2.43	16	1
1:A:76:ASP:HB3	1:A:108:THR:CG2	0.44	2.43	1	1
1:A:68:ARG:C	1:A:70:LEU:CD2	0.44	2.85	10	2
2:B:4:GLU:C	2:B:6:PRO:CD	0.44	2.86	19	1
1:A:161:THR:O	1:A:163:LYS:HG3	0.44	2.13	11	3
1:A:132:ASN:O	1:A:133:LYS:HB2	0.44	2.12	20	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:19:HIS:H	0.44	1.73	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:PHE:CD1	2:B:30:THR:HG22	0.44	2.47	20	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:HB2	0.44	1.88	10	1
1:A:59:ALA:CA	2:B:20:VAL:O	0.44	2.66	15	1
1:A:67:LEU:CD2	1:A:67:LEU:N	0.44	2.80	4	1
2:B:32:ILE:CG2	2:B:32:ILE:O	0.44	2.63	2	1
1:A:140:GLU:O	1:A:144:LYS:HE3	0.44	2.13	5	1
1:A:112:LEU:HD22	1:A:154:TYR:HB2	0.44	1.90	5	1
2:B:19:HIS:CE1	2:B:20:VAL:HG12	0.44	2.48	3	1
1:A:84:VAL:O	1:A:137:ILE:N	0.44	2.50	12	1
1:A:21:ILE:HG13	2:B:26:THR:OG1	0.44	2.12	12	1
1:A:39:ASN:O	2:B:18:ILE:CD1	0.44	2.66	18	1
1:A:72:TYR:CD2	1:A:74:GLN:NE2	0.44	2.86	18	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:76:ASP:OD1	0.44	2.65	18	1
1:A:36:VAL:HB	2:B:20:VAL:C	0.44	2.32	1	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:CA	0.44	2.65	19	4
1:A:61:GLN:CG	1:A:63:ASP:HB2	0.44	2.43	20	1
1:A:115:THR:O	1:A:116:GLN:HB2	0.44	2.13	5	3
2:B:22:PHE:CZ	2:B:31:GLY:HA2	0.44	2.47	10	1
1:A:18:CYS:HB3	1:A:35:THR:HB	0.44	1.90	17	1
1:A:72:TYR:CD1	1:A:72:TYR:N	0.44	2.84	17	1
2:B:5:ARG:CG	2:B:6:PRO:HD2	0.44	2.42	2	2
1:A:45:MET:C	2:B:10:LEU:O	0.44	2.56	15	1
2:B:10:LEU:CD1	2:B:12:SER:OG	0.44	2.65	15	1
1:A:160:LEU:CD1	1:A:161:THR:N	0.44	2.73	14	1
1:A:18:CYS:O	1:A:22:SER:OG	0.44	2.26	14	1
1:A:85:VAL:O	1:A:129:LEU:HD11	0.44	2.13	7	1
1:A:64:TYR:O	1:A:68:ARG:HB3	0.44	2.13	7	1
1:A:91:GLU:O	1:A:95:GLU:HG3	0.44	2.12	12	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:17:THR:HG21	0.44	2.43	6	1
1:A:149:LEU:HD21	1:A:151:ALA:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:37:PHE:H	2:B:20:VAL:HG13	0.44	1.72	13	1
2:B:27:GLY:O	2:B:28:GLU:CD	0.44	2.56	13	1
1:A:3:THR:OG1	1:A:52:THR:HG21	0.44	2.13	16	1
1:A:65:ASP:HB3	1:A:68:ARG:CB	0.44	2.42	16	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:120:ARG:HG3	0.44	2.43	16	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:120:ARG:CG	0.44	2.42	16	1
1:A:2:GLN:HB3	2:B:1:GLY:CA	0.44	2.42	16	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:44:VAL:O	0.44	2.66	9	1
1:A:78:PHE:C	1:A:79:LEU:HD22	0.44	2.32	9	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:165:LEU:CD1	0.44	2.98	1	1
1:A:19:LEU:O	1:A:20:LEU:C	0.44	2.56	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:O	1:A:162:GLN:HG2	0.44	2.13	19	1
1:A:118:ASP:CG	1:A:161:THR:CB	0.44	2.87	19	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:141:THR:CG2	0.44	3.01	11	1
1:A:158:SER:HB3	1:A:162:GLN:HB3	0.44	1.90	11	2
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:CG2	0.44	2.43	11	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:PHE:C	0.44	2.33	10	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:35:GLN:C	0.44	2.57	10	1
1:A:1:MET:HG2	1:A:177:LEU:O	0.44	2.12	15	1
1:A:6:CYS:HA	1:A:77:VAL:CG1	0.44	2.42	15	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:163:LYS:CD	0.44	2.43	14	1
1:A:9:VAL:HG21	1:A:79:LEU:C	0.44	2.33	16	2
1:A:129:LEU:HD22	1:A:129:LEU:N	0.44	2.27	5	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLY:C	0.44	2.55	12	1
1:A:4:ILE:HG13	1:A:176:ALA:CB	0.44	2.43	12	2
1:A:91:GLU:O	1:A:95:GLU:CG	0.44	2.66	12	1
1:A:124:SER:O	1:A:127:GLU:HB3	0.44	2.13	13	1
1:A:86:SER:C	1:A:129:LEU:CD2	0.44	2.86	16	1
2:B:14:PHE:O	2:B:15:GLU:HG3	0.44	2.13	16	1
1:A:35:THR:HB	2:B:19:HIS:C	0.43	2.34	1	1
1:A:161:THR:O	1:A:163:LYS:HD2	0.43	2.13	11	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:C	0.43	2.56	13	2
1:A:27:LYS:CB	2:B:27:GLY:O	0.43	2.66	20	1
1:A:27:LYS:HB3	2:B:27:GLY:O	0.43	2.12	20	1
1:A:80:VAL:O	1:A:113:VAL:HB	0.43	2.12	20	1
1:A:52:THR:O	1:A:52:THR:OG1	0.43	2.36	17	1
1:A:5:LYS:HA	1:A:54:GLY:O	0.43	2.13	15	1
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:CE2	0.43	2.48	15	1
1:A:72:TYR:HB2	1:A:73:PRO:HD3	0.43	1.88	15	1
1:A:157:CYS:HA	1:A:165:LEU:CD2	0.43	2.43	9	2
1:A:10:GLY:O	2:B:35:GLN:CD	0.43	2.56	3	1
1:A:35:THR:O	2:B:20:VAL:HB	0.43	2.13	6	2
1:A:82:PHE:C	1:A:115:THR:OG1	0.43	2.56	7	1
1:A:65:ASP:O	1:A:69:PRO:HD2	0.43	2.12	8	3
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:CG2	0.43	2.66	8	1
1:A:86:SER:O	1:A:133:LYS:HG2	0.43	2.13	8	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:ALA:N	0.43	2.51	13	2
1:A:40:TYR:HB3	2:B:16:HIS:HB2	0.43	1.89	18	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:HB2	0.43	1.89	16	1
2:B:32:ILE:CG1	2:B:33:PRO:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD23	0.43	2.34	10	1
1:A:35:THR:HG21	2:B:28:GLU:OE2	0.43	2.13	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:CG1	0.43	2.65	17	1
1:A:118:ASP:OD2	1:A:160:LEU:HB2	0.43	2.12	17	1
1:A:69:PRO:O	1:A:71:SER:N	0.43	2.50	4	1
1:A:37:PHE:HB3	2:B:20:VAL:HA	0.43	1.88	4	1
1:A:139:PRO:O	1:A:143:GLU:CG	0.43	2.66	3	1
1:A:37:PHE:HB3	2:B:20:VAL:CA	0.43	2.42	3	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:39:ASN:OD1	0.43	2.71	7	1
2:B:5:ARG:CD	2:B:5:ARG:H	0.43	2.26	7	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:108:THR:CG2	0.43	3.01	12	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:78:PHE:CZ	0.43	2.71	8	1
2:B:32:ILE:HB	2:B:33:PRO:CD	0.43	2.42	8	1
1:A:112:LEU:O	1:A:155:VAL:N	0.43	2.51	18	1
1:A:79:LEU:HG	1:A:169:PHE:CD2	0.43	2.48	16	1
1:A:69:PRO:HD2	1:A:70:LEU:CD2	0.43	2.43	9	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:HG3	0.43	2.13	19	1
1:A:132:ASN:O	1:A:132:ASN:ND2	0.43	2.49	20	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:97:TRP:CE3	0.43	2.48	20	1
1:A:80:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HA	0.43	1.90	15	1
1:A:38:ASP:N	2:B:19:HIS:N	0.43	2.66	15	1
1:A:82:PHE:CD2	1:A:83:SER:O	0.43	2.71	3	2
1:A:18:CYS:SG	1:A:19:LEU:HD13	0.43	2.54	14	1
1:A:87:PRO:O	1:A:133:LYS:HB3	0.43	2.13	4	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:90:PHE:O	0.43	2.72	4	1
2:B:25:VAL:HG12	2:B:26:THR:HB	0.43	1.90	2	1
1:A:38:ASP:C	1:A:57:ASP:OD2	0.43	2.57	5	1
1:A:58:THR:HG1	2:B:36:TRP:HD1	0.43	1.49	5	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:18:ILE:HG12	0.43	1.90	12	1
1:A:14:VAL:HG21	2:B:28:GLU:OE2	0.43	2.12	12	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:165:LEU:CD2	0.43	3.01	6	1
1:A:1:MET:HA	1:A:177:LEU:HB3	0.43	1.89	8	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:76:ASP:OD1	0.43	2.66	18	1
1:A:44:VAL:CG1	2:B:13:ASP:HB3	0.43	2.43	16	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:122:ASP:OD2	0.43	2.13	1	1
2:B:34:GLU:OE1	2:B:34:GLU:C	0.43	2.56	19	1
1:A:2:GLN:HA	1:A:177:LEU:CD2	0.43	2.40	11	1
1:A:74:GLN:OE1	1:A:75:THR:OG1	0.43	2.35	11	1
1:A:61:GLN:O	1:A:62:GLU:C	0.43	2.55	10	1
1:A:84:VAL:CG2	1:A:120:ARG:HG3	0.43	2.44	10	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:87:PRO:HD2	0.43	1.90	10	2
1:A:9:VAL:HG11	1:A:78:PHE:CB	0.43	2.44	10	2
1:A:119:LEU:HD12	1:A:122:ASP:HB3	0.43	1.88	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:H	1:A:69:PRO:HD2	0.43	1.71	17	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:17:THR:N	0.43	2.81	15	1
1:A:58:THR:HB	2:B:36:TRP:CB	0.43	2.43	14	1
1:A:37:PHE:CD2	2:B:18:ILE:CD1	0.43	3.01	4	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:N	0.43	2.28	4	1
1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:OD1	0.43	2.52	2	1
1:A:105:CYS:CB	1:A:106:PRO:HD2	0.43	2.43	5	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:53:LEU:HD11	0.43	1.90	3	1
1:A:36:VAL:N	2:B:20:VAL:CG1	0.43	2.82	7	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:79:LEU:C	0.43	2.32	7	1
2:B:5:ARG:N	2:B:5:ARG:HD2	0.43	2.28	7	1
1:A:162:GLN:OE1	1:A:163:LYS:N	0.43	2.51	12	1
1:A:28:PHE:HB3	2:B:27:GLY:O	0.43	2.13	12	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.43	2.82	8	2
1:A:38:ASP:O	1:A:55:LEU:HD13	0.43	2.14	8	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:C	0.43	2.32	13	1
1:A:85:VAL:HG21	1:A:125:THR:HG23	0.43	1.89	16	1
1:A:8:VAL:O	2:B:37:ALA:CB	0.43	2.66	16	1
1:A:9:VAL:CA	2:B:37:ALA:CB	0.43	2.97	16	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:162:GLN:OE1	0.43	2.72	19	1
1:A:48:GLY:O	1:A:50:PRO:HD3	0.43	2.13	20	3
1:A:22:SER:HB2	2:B:27:GLY:CA	0.43	2.44	11	1
1:A:70:LEU:HD21	2:B:37:ALA:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:157:CYS:HB2	1:A:165:LEU:HD12	0.43	1.89	20	1
1:A:58:THR:OG1	2:B:36:TRP:CB	0.43	2.66	17	1
1:A:62:GLU:HG2	1:A:65:ASP:CB	0.43	2.44	15	1
1:A:157:CYS:CA	1:A:165:LEU:CD2	0.43	2.96	9	2
1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CD1	0.43	2.86	5	1
2:B:26:THR:O	2:B:26:THR:HG23	0.43	2.13	5	1
1:A:101:ILE:HG23	1:A:101:ILE:O	0.43	2.13	12	1
1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	0.43	1.73	12	1
1:A:70:LEU:H	1:A:70:LEU:CD2	0.43	2.25	6	1
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:CD1	0.43	2.44	13	1
1:A:35:THR:C	2:B:20:VAL:HG21	0.43	2.34	13	1
1:A:46:ILE:HA	2:B:10:LEU:O	0.43	2.13	16	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:116:GLN:CG	0.43	2.44	9	1
1:A:121:ASP:OD1	1:A:121:ASP:C	0.43	2.57	1	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:38:ASP:N	0.43	2.87	19	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:HG13	0.43	2.14	11	1
1:A:59:ALA:C	1:A:61:GLN:N	0.43	2.71	11	2
1:A:81:CYS:HB2	1:A:115:THR:OG1	0.43	2.13	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:LEU:CD1	1:A:149:LEU:H	0.43	2.25	18	2
1:A:37:PHE:CG	2:B:20:VAL:HB	0.43	2.49	15	1
1:A:59:ALA:C	2:B:21:GLY:HA2	0.43	2.34	15	1
1:A:12:GLY:HA2	2:B:35:GLN:HG3	0.43	1.91	15	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:LYS:CD	0.43	2.67	4	1
1:A:25:THR:O	1:A:26:ASN:CG	0.43	2.57	2	1
1:A:11:ASP:OD2	1:A:81:CYS:C	0.43	2.57	2	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:162:GLN:HG2	0.43	2.48	12	1
1:A:45:MET:HA	1:A:49:GLU:C	0.43	2.34	8	2
1:A:65:ASP:O	1:A:69:PRO:CG	0.43	2.66	8	2
1:A:161:THR:O	1:A:163:LYS:NZ	0.43	2.47	13	1
1:A:161:THR:CG2	1:A:162:GLN:N	0.43	2.82	16	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:125:THR:HG21	0.43	2.43	9	1
1:A:18:CYS:HB2	2:B:28:GLU:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:159:ALA:HB1	0.43	1.90	11	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:168:VAL:CG1	0.43	2.44	20	1
1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:OD1	0.43	2.52	17	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:ASN:C	0.43	2.57	15	1
2:B:24:ALA:HA	2:B:28:GLU:OE1	0.43	2.14	15	1
1:A:25:THR:OG1	2:B:27:GLY:HA2	0.43	2.13	4	1
1:A:120:ARG:CA	1:A:126:ILE:HD11	0.43	2.43	2	1
1:A:26:ASN:C	1:A:27:LYS:HD2	0.43	2.34	2	1
1:A:62:GLU:HG3	1:A:62:GLU:O	0.43	2.13	12	1
1:A:4:ILE:HG12	1:A:77:VAL:CG2	0.43	2.41	12	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:20:VAL:O	0.43	2.33	12	1
2:B:23:ASP:N	2:B:23:ASP:OD1	0.43	2.52	12	1
1:A:26:ASN:O	1:A:27:LYS:CE	0.43	2.66	6	1
1:A:84:VAL:HG23	1:A:120:ARG:HG3	0.43	1.90	6	1
1:A:14:VAL:C	2:B:35:GLN:CG	0.43	2.87	8	1
1:A:27:LYS:O	2:B:28:GLU:HB2	0.43	2.13	18	1
1:A:153:LYS:HE2	1:A:171:GLU:OE2	0.43	2.13	13	1
1:A:101:ILE:HG23	1:A:104:HIS:CA	0.43	2.44	9	1
1:A:92:ASN:O	1:A:96:LYS:HB2	0.43	2.13	1	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:38:ARG:N	0.43	2.52	11	1
1:A:26:ASN:N	1:A:26:ASN:ND2	0.43	2.67	20	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:65:ASP:O	0.43	2.36	13	2
1:A:104:HIS:CG	1:A:105:CYS:N	0.43	2.86	17	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:161:THR:C	0.43	2.92	17	1
2:B:21:GLY:O	2:B:22:PHE:CG	0.43	2.71	2	1
1:A:19:LEU:HD13	2:B:29:PHE:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:174:LEU:HD12	2:B:3:LYS:CD	0.43	2.44	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:PHE:HB3	2:B:28:GLU:HB3	0.43	1.91	5	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:90:PHE:CD1	0.43	3.07	7	1
1:A:92:ASN:O	1:A:96:LYS:HG2	0.43	2.14	12	1
1:A:5:LYS:O	1:A:76:ASP:HA	0.43	2.13	8	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:17:THR:CG2	0.43	2.43	8	1
1:A:118:ASP:CG	1:A:118:ASP:O	0.43	2.57	13	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:14:PHE:HB2	0.43	2.44	1	1
1:A:18:CYS:SG	1:A:57:ASP:OD2	0.43	2.77	19	1
1:A:37:PHE:CA	2:B:18:ILE:HG23	0.43	2.44	20	1
1:A:70:LEU:HD22	2:B:37:ALA:CA	0.43	2.43	20	1
1:A:68:ARG:HA	2:B:36:TRP:CH2	0.43	2.48	20	1
1:A:89:SER:OG	1:A:89:SER:O	0.43	2.35	17	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:CD	0.43	2.67	15	1
1:A:6:CYS:CB	1:A:16:LYS:HE3	0.43	2.44	14	1
2:B:5:ARG:HD3	2:B:6:PRO:CD	0.43	2.44	4	1
1:A:6:CYS:CB	1:A:55:LEU:HD23	0.43	2.41	2	1
1:A:162:GLN:C	1:A:163:LYS:HG3	0.43	2.35	3	1
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:VAL:CG2	0.43	2.44	3	1
1:A:162:GLN:CD	1:A:163:LYS:N	0.43	2.72	12	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:ALA:C	0.43	2.57	6	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:ASN:CG	0.43	2.57	8	1
1:A:55:LEU:HG	1:A:55:LEU:O	0.43	2.13	18	1
1:A:22:SER:O	1:A:27:LYS:N	0.43	2.51	16	1
1:A:107:LYS:HD3	1:A:150:LYS:HB2	0.43	1.91	9	1
1:A:165:LEU:H	1:A:165:LEU:HD12	0.43	1.72	1	1
1:A:43:THR:HG23	1:A:51:TYR:N	0.43	2.29	1	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:19:HIS:O	0.43	2.29	1	1
2:B:8:ILE:H	2:B:8:ILE:CD1	0.43	2.27	1	2
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:SER:N	0.43	2.82	13	2
1:A:7:VAL:HG11	2:B:36:TRP:CD2	0.43	2.49	19	1
1:A:28:PHE:CD2	1:A:160:LEU:HD22	0.43	2.49	20	1
1:A:10:GLY:O	1:A:11:ASP:C	0.43	2.57	5	2
2:B:5:ARG:NH1	2:B:5:ARG:HG3	0.43	2.29	17	1
2:B:32:ILE:CG2	2:B:33:PRO:HD2	0.43	2.43	9	2
1:A:57:ASP:HA	2:B:36:TRP:CZ3	0.43	2.49	15	1
1:A:15:GLY:C	1:A:18:CYS:SG	0.43	2.97	14	1
1:A:98:VAL:O	1:A:106:PRO:HB3	0.43	2.14	14	1
1:A:37:PHE:N	2:B:20:VAL:CG1	0.43	2.82	14	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:THR:HG23	0.43	2.13	4	1
1:A:13:ALA:O	2:B:33:PRO:CG	0.43	2.67	2	1
1:A:23:TYR:HB3	1:A:163:LYS:CD	0.43	2.43	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:CYS:HB2	1:A:55:LEU:CA	0.43	2.44	2	1
1:A:14:VAL:HB	1:A:81:CYS:CB	0.43	2.43	2	1
1:A:38:ASP:HB2	2:B:19:HIS:CB	0.43	2.43	2	1
1:A:98:VAL:HB	1:A:99:PRO:CD	0.43	2.44	3	1
1:A:37:PHE:HB2	2:B:20:VAL:N	0.43	2.29	3	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:60:GLY:HA2	0.43	2.49	7	1
1:A:94:LYS:CB	1:A:145:LEU:HD21	0.43	2.44	8	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:LEU:HD23	0.43	1.91	18	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:15:GLY:HA3	0.43	2.43	13	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:163:LYS:CA	0.43	3.01	16	1
1:A:47:GLY:HA2	2:B:8:ILE:CG1	0.43	2.44	16	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:20:VAL:HG11	0.43	2.13	9	1
1:A:62:GLU:OE2	2:B:20:VAL:HA	0.42	2.14	11	1
1:A:36:VAL:HA	2:B:26:THR:OG1	0.42	2.14	20	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:97:TRP:CD2	0.42	2.48	20	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:36:TRP:CA	0.42	2.67	10	1
1:A:70:LEU:HD21	2:B:37:ALA:CA	0.42	2.44	14	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:68:ARG:HG2	0.42	2.14	12	2
1:A:36:VAL:C	1:A:58:THR:O	0.42	2.57	4	1
1:A:102:THR:CG2	1:A:106:PRO:HG3	0.42	2.43	2	1
1:A:174:LEU:HD12	2:B:3:LYS:CE	0.42	2.44	2	1
1:A:26:ASN:HB2	1:A:27:LYS:HD2	0.42	1.90	2	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:56:PHE:HE1	0.42	1.74	2	1
1:A:37:PHE:O	1:A:57:ASP:CG	0.42	2.58	5	1
1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:O	0.42	2.14	5	1
1:A:42:VAL:CA	2:B:15:GLU:HB3	0.42	2.44	5	1
1:A:107:LYS:NZ	1:A:150:LYS:HB2	0.42	2.29	12	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:TYR:OH	0.42	2.14	12	1
1:A:40:TYR:HB2	2:B:15:GLU:HB3	0.42	1.91	12	1
2:B:31:GLY:O	2:B:32:ILE:CG1	0.42	2.67	12	1
1:A:12:GLY:CA	2:B:34:GLU:CA	0.42	2.97	12	1
1:A:101:ILE:O	1:A:104:HIS:N	0.42	2.51	6	1
1:A:132:ASN:ND2	1:A:133:LYS:HD3	0.42	2.29	6	1
1:A:37:PHE:HA	1:A:58:THR:O	0.42	2.14	8	1
1:A:95:GLU:C	1:A:99:PRO:HG3	0.42	2.34	8	1
1:A:117:ILE:HG13	1:A:158:SER:OG	0.42	2.13	18	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TYR:HB3	0.42	2.14	13	1
1:A:37:PHE:CB	1:A:59:ALA:CB	0.42	2.97	16	1
1:A:104:HIS:ND1	1:A:104:HIS:C	0.42	2.73	9	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:159:ALA:CA	0.42	3.02	1	1
1:A:160:LEU:O	1:A:162:GLN:HG3	0.42	2.14	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:LEU:HA	1:A:132:ASN:OD1	0.42	2.14	20	2
1:A:174:LEU:O	1:A:178:GLU:CB	0.42	2.67	20	1
1:A:36:VAL:HA	2:B:26:THR:CB	0.42	2.43	20	1
1:A:46:ILE:C	1:A:48:GLY:N	0.42	2.73	15	3
1:A:83:SER:CB	1:A:115:THR:OG1	0.42	2.67	10	1
1:A:94:LYS:CB	1:A:145:LEU:HD11	0.42	2.44	10	1
1:A:159:ALA:N	1:A:165:LEU:HD12	0.42	2.29	10	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:55:LEU:HD12	0.42	2.14	10	1
2:B:18:ILE:C	2:B:18:ILE:HD13	0.42	2.34	17	1
1:A:14:VAL:HG23	2:B:36:TRP:HZ2	0.42	1.74	15	1
1:A:161:THR:O	1:A:162:GLN:CG	0.42	2.67	15	1
1:A:40:TYR:HB3	1:A:55:LEU:CG	0.42	2.44	15	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:N	0.42	2.30	15	1
1:A:9:VAL:O	2:B:35:GLN:CD	0.42	2.57	14	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:THR:OG1	0.42	2.37	2	1
1:A:76:ASP:O	1:A:78:PHE:CE1	0.42	2.72	8	2
1:A:64:TYR:CG	1:A:65:ASP:N	0.42	2.86	7	1
1:A:159:ALA:C	1:A:162:GLN:HG3	0.42	2.34	12	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:TYR:CE2	0.42	2.49	6	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:LEU:CD1	0.42	2.67	8	1
2:B:7:GLU:OE1	2:B:9:SER:N	0.42	2.52	8	1
1:A:75:THR:HG23	1:A:108:THR:HG23	0.42	1.91	18	1
1:A:4:ILE:HG13	1:A:76:ASP:CA	0.42	2.44	18	1
1:A:22:SER:CA	1:A:27:LYS:HA	0.42	2.44	16	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:SER:HB3	0.42	1.89	16	1
1:A:74:GLN:CD	1:A:74:GLN:O	0.42	2.57	9	1
1:A:45:MET:HG3	2:B:12:SER:OG	0.42	2.13	9	1
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:NE2	0.42	2.52	20	1
1:A:58:THR:OG1	2:B:36:TRP:HB3	0.42	2.15	17	1
1:A:12:GLY:CA	2:B:35:GLN:HG3	0.42	2.43	15	1
1:A:39:ASN:HB2	2:B:16:HIS:CB	0.42	2.43	15	1
1:A:4:ILE:HB	1:A:176:ALA:CB	0.42	2.43	14	1
1:A:85:VAL:HG23	1:A:86:SER:N	0.42	2.29	4	1
1:A:163:LYS:O	1:A:163:LYS:CG	0.42	2.67	2	1
1:A:42:VAL:HG21	2:B:13:ASP:OD2	0.42	2.14	2	1
1:A:22:SER:OG	2:B:28:GLU:HG3	0.42	2.14	5	1
1:A:59:ALA:CB	1:A:64:TYR:CZ	0.42	3.01	3	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:68:ARG:HB2	0.42	2.14	3	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:CD2	0.42	2.98	7	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:HG12	0.42	2.15	12	1
1:A:100:GLU:HB3	1:A:105:CYS:CB	0.42	2.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:O	2:B:37:ALA:HA	0.42	2.14	6	1
1:A:71:SER:CA	2:B:37:ALA:O	0.42	2.66	6	1
1:A:72:TYR:C	1:A:72:TYR:CD1	0.42	2.91	18	1
2:B:7:GLU:OE1	2:B:7:GLU:HA	0.42	2.14	18	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HB2	0.42	2.13	13	1
1:A:44:VAL:HG12	2:B:13:ASP:CG	0.42	2.35	16	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:CB	0.42	2.68	1	2
1:A:83:SER:HA	1:A:115:THR:OG1	0.42	2.14	10	1
1:A:58:THR:CG2	1:A:58:THR:O	0.42	2.67	15	1
1:A:6:CYS:N	1:A:54:GLY:O	0.42	2.53	15	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:161:THR:CA	0.42	2.45	14	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:TYR:HB3	0.42	2.13	14	2
1:A:85:VAL:CG2	1:A:129:LEU:CB	0.42	2.97	14	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:145:LEU:CD1	0.42	2.40	7	2
1:A:94:LYS:CE	1:A:145:LEU:CD2	0.42	2.97	12	1
1:A:12:GLY:O	2:B:35:GLN:NE2	0.42	2.52	6	1
1:A:13:ALA:HA	2:B:32:ILE:O	0.42	2.14	13	1
1:A:8:VAL:O	2:B:36:TRP:CG	0.42	2.73	13	1
1:A:60:GLY:O	1:A:61:GLN:HB2	0.42	2.13	16	1
1:A:142:ALA:O	1:A:145:LEU:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:28:PHE:C	2:B:28:GLU:OE1	0.42	2.58	1	1
1:A:10:GLY:O	1:A:13:ALA:N	0.42	2.50	10	1
1:A:40:TYR:CD1	2:B:17:THR:HG22	0.42	2.49	10	1
1:A:36:VAL:CB	2:B:20:VAL:HB	0.42	2.44	10	2
1:A:68:ARG:HG3	1:A:69:PRO:N	0.42	2.29	15	2
1:A:69:PRO:C	1:A:71:SER:N	0.42	2.73	17	1
1:A:39:ASN:CB	2:B:18:ILE:CD1	0.42	2.97	17	1
1:A:102:THR:HB	1:A:108:THR:OG1	0.42	2.14	14	1
1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASP:N	0.42	2.30	14	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD13	0.42	2.29	14	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:165:LEU:CB	0.42	2.45	4	1
2:B:22:PHE:CD2	2:B:26:THR:OG1	0.42	2.65	4	1
1:A:113:VAL:HG22	1:A:168:VAL:CG2	0.42	2.44	2	1
1:A:128:LYS:HD2	1:A:129:LEU:HD12	0.42	1.92	2	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:26:THR:HG22	0.42	2.14	2	1
1:A:51:TYR:OH	2:B:4:GLU:O	0.42	2.37	2	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:13:ASP:O	0.42	2.67	3	1
1:A:61:GLN:HA	2:B:21:GLY:CA	0.42	2.45	7	1
1:A:61:GLN:C	1:A:62:GLU:HG2	0.42	2.34	12	1
1:A:97:TRP:CH2	1:A:149:LEU:HB3	0.42	2.49	6	1
1:A:26:ASN:CG	1:A:35:THR:HG22	0.42	2.35	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:GLY:H	2:B:9:SER:CB	0.42	2.26	6	1
1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CD2	0.42	2.87	8	1
1:A:6:CYS:C	1:A:7:VAL:HG23	0.42	2.35	8	1
1:A:10:GLY:HA2	2:B:38:ARG:N	0.42	2.30	16	1
1:A:155:VAL:O	1:A:156:GLU:CG	0.42	2.67	16	1
1:A:18:CYS:HB3	2:B:26:THR:O	0.42	2.14	16	1
2:B:36:TRP:CE3	2:B:36:TRP:CA	0.42	3.03	1	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:174:LEU:H	0.42	2.26	3	2
1:A:8:VAL:HG12	1:A:16:LYS:HB3	0.42	1.92	19	1
1:A:27:LYS:O	2:B:26:THR:C	0.42	2.57	11	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:53:LEU:C	0.42	2.35	20	1
1:A:64:TYR:C	1:A:66:ARG:N	0.42	2.73	20	1
1:A:77:VAL:HG23	1:A:111:LEU:CD2	0.42	2.45	20	1
1:A:46:ILE:HD13	1:A:51:TYR:CD2	0.42	2.50	10	1
2:B:22:PHE:CE2	2:B:31:GLY:HA2	0.42	2.49	10	1
1:A:81:CYS:CB	1:A:113:VAL:HB	0.42	2.45	4	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:63:ASP:CG	0.42	2.93	4	1
1:A:74:GLN:OE1	1:A:74:GLN:N	0.42	2.52	4	1
1:A:119:LEU:CG	1:A:125:THR:HG21	0.42	2.45	5	2
1:A:23:TYR:HE2	1:A:158:SER:O	0.42	1.96	3	1
1:A:9:VAL:HG21	1:A:78:PHE:CD2	0.42	2.49	3	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:79:LEU:O	0.42	2.15	7	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:111:LEU:H	0.42	2.28	12	1
1:A:2:GLN:HE21	1:A:177:LEU:HD22	0.42	1.72	12	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:68:ARG:HG3	0.42	2.14	12	1
1:A:70:LEU:HA	2:B:37:ALA:HA	0.42	1.92	8	1
1:A:40:TYR:HB2	2:B:16:HIS:CB	0.42	2.45	18	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:N	0.42	2.88	18	1
1:A:38:ASP:OD2	2:B:19:HIS:N	0.42	2.53	18	1
2:B:27:GLY:C	2:B:28:GLU:CD	0.42	2.78	13	1
1:A:106:PRO:C	1:A:107:LYS:CG	0.42	2.88	16	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:159:ALA:C	0.42	2.93	16	1
1:A:98:VAL:O	1:A:101:ILE:HD13	0.42	2.15	1	1
2:B:13:ASP:C	2:B:13:ASP:OD1	0.42	2.58	1	1
1:A:66:ARG:O	1:A:69:PRO:HD2	0.42	2.14	19	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:22:SER:N	0.42	2.29	16	2
1:A:107:LYS:O	1:A:108:THR:C	0.42	2.58	10	3
1:A:19:LEU:HD22	2:B:29:PHE:HB2	0.42	1.92	17	3
1:A:23:TYR:HB2	1:A:163:LYS:HD3	0.42	1.91	14	1
1:A:87:PRO:O	1:A:88:SER:O	0.42	2.37	4	1
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:SER:H	0.42	1.75	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:CG1	2:B:20:VAL:CG1	0.42	2.98	12	1
1:A:39:ASN:HB2	2:B:18:ILE:CD1	0.42	2.44	12	1
1:A:40:TYR:CD2	2:B:15:GLU:CG	0.42	3.03	6	1
1:A:75:THR:C	1:A:76:ASP:OD1	0.42	2.57	8	1
2:B:34:GLU:OE1	2:B:34:GLU:HA	0.42	2.13	8	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:154:TYR:CA	0.42	2.44	13	1
2:B:10:LEU:HD13	2:B:10:LEU:H	0.42	1.74	13	1
1:A:59:ALA:HA	1:A:63:ASP:CA	0.42	2.44	16	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:CB	0.42	2.44	16	1
1:A:81:CYS:SG	1:A:115:THR:HG23	0.42	2.55	1	1
1:A:160:LEU:O	1:A:162:GLN:CD	0.42	2.58	19	1
2:B:32:ILE:CD1	2:B:32:ILE:N	0.42	2.80	19	1
1:A:99:PRO:O	1:A:101:ILE:HG12	0.42	2.15	11	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.72	11	1
1:A:83:SER:HB2	1:A:115:THR:OG1	0.42	2.15	10	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:28:PHE:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:HB3	0.42	1.90	10	1
1:A:22:SER:O	1:A:27:LYS:HG2	0.42	2.14	17	1
1:A:89:SER:OG	1:A:92:ASN:ND2	0.42	2.53	17	1
1:A:37:PHE:CA	2:B:19:HIS:O	0.42	2.68	15	1
1:A:163:LYS:CA	1:A:165:LEU:HD13	0.42	2.45	14	1
1:A:169:PHE:O	1:A:173:ILE:CD1	0.42	2.68	14	1
1:A:77:VAL:CG1	1:A:176:ALA:CB	0.42	2.95	14	1
1:A:94:LYS:HD3	1:A:145:LEU:HD13	0.42	1.92	4	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:159:ALA:O	0.42	2.15	4	2
1:A:61:GLN:CG	2:B:21:GLY:N	0.42	2.82	4	1
1:A:61:GLN:HG3	2:B:21:GLY:N	0.42	2.30	4	1
1:A:173:ILE:HG22	1:A:174:LEU:HD13	0.42	1.90	2	1
2:B:3:LYS:O	2:B:4:GLU:OE2	0.42	2.38	2	1
1:A:137:ILE:HG23	1:A:142:ALA:HB2	0.42	1.92	8	1
1:A:70:LEU:HG	2:B:37:ALA:HA	0.42	1.90	18	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:132:ASN:CB	0.42	2.44	16	1
1:A:9:VAL:CA	2:B:37:ALA:HB3	0.42	2.44	16	1
1:A:5:LYS:O	1:A:75:THR:HB	0.42	2.15	1	1
1:A:9:VAL:HB	1:A:80:VAL:HG12	0.42	1.91	1	1
1:A:45:MET:HB2	2:B:11:PRO:O	0.42	2.15	1	2
1:A:146:ALA:CB	1:A:151:ALA:HB3	0.42	2.45	14	4
2:B:4:GLU:CB	2:B:7:GLU:OE2	0.42	2.68	11	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:N	0.42	2.44	20	1
1:A:3:THR:CA	1:A:52:THR:HB	0.42	2.45	20	1
1:A:45:MET:HB2	2:B:11:PRO:HG2	0.42	1.91	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:THR:O	1:A:142:ALA:CB	0.42	2.68	15	1
2:B:27:GLY:CA	2:B:28:GLU:OE1	0.42	2.68	15	1
2:B:31:GLY:O	2:B:32:ILE:HD13	0.42	2.15	15	1
2:B:14:PHE:C	2:B:15:GLU:HG3	0.42	2.34	14	1
1:A:97:TRP:O	1:A:100:GLU:HG3	0.42	2.15	2	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:159:ALA:CA	0.42	2.43	5	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:176:ALA:O	0.42	2.14	8	1
1:A:59:ALA:HB3	1:A:65:ASP:CG	0.42	2.35	8	1
1:A:93:VAL:C	1:A:94:LYS:HD3	0.42	2.34	16	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:LEU:HD21	0.42	1.91	19	1
1:A:125:THR:CG2	1:A:126:ILE:N	0.42	2.82	9	3
1:A:21:ILE:CB	2:B:26:THR:HG22	0.42	2.45	20	1
1:A:35:THR:O	2:B:26:THR:HG21	0.42	2.14	20	1
1:A:115:THR:C	1:A:116:GLN:CG	0.42	2.88	15	1
1:A:80:VAL:O	1:A:80:VAL:CG1	0.42	2.68	15	1
1:A:122:ASP:O	1:A:122:ASP:OD1	0.42	2.38	14	1
1:A:163:LYS:C	1:A:165:LEU:HD13	0.42	2.35	14	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:51:TYR:HB2	0.42	1.92	14	1
1:A:128:LYS:HD2	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.44	2	1
1:A:117:ILE:O	1:A:117:ILE:CD1	0.42	2.59	3	1
1:A:129:LEU:CA	1:A:134:GLN:NE2	0.42	2.83	3	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.42	2.93	3	1
1:A:159:ALA:O	1:A:162:GLN:HG3	0.42	2.14	12	1
1:A:59:ALA:HA	2:B:20:VAL:HG13	0.42	1.92	12	1
1:A:157:CYS:HA	1:A:163:LYS:O	0.42	2.15	6	1
1:A:20:LEU:N	1:A:23:TYR:CE2	0.42	2.87	6	1
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:HG22	0.42	2.15	6	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:20:VAL:HG21	0.42	2.14	13	1
1:A:42:VAL:CG1	2:B:13:ASP:HB2	0.41	2.44	1	1
1:A:127:GLU:O	1:A:131:LYS:HD3	0.41	2.16	19	1
1:A:110:PHE:O	1:A:152:VAL:HB	0.41	2.15	11	1
1:A:13:ALA:O	2:B:35:GLN:HA	0.41	2.14	11	1
1:A:4:ILE:CG2	1:A:4:ILE:O	0.41	2.67	20	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:17:THR:HG1	0.41	2.28	20	1
2:B:32:ILE:HB	2:B:33:PRO:HD2	0.41	1.92	20	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:62:GLU:OE2	0.41	2.73	17	1
1:A:16:LYS:NZ	1:A:19:LEU:HD23	0.41	2.31	15	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:145:LEU:C	0.41	2.87	14	1
1:A:18:CYS:HB2	2:B:28:GLU:C	0.41	2.35	14	1
1:A:144:LYS:O	1:A:148:ASP:CG	0.41	2.59	4	1
1:A:11:ASP:OD2	1:A:81:CYS:O	0.41	2.38	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:CYS:HB2	1:A:55:LEU:HB2	0.41	1.91	2	1
1:A:2:GLN:O	1:A:52:THR:OG1	0.41	2.37	5	1
1:A:130:ALA:CA	1:A:134:GLN:OE1	0.41	2.68	7	1
1:A:39:ASN:O	2:B:16:HIS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:17:THR:OG1	2:B:36:TRP:CD1	0.41	2.69	8	1
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLN:O	0.41	2.37	18	1
1:A:49:GLU:OE2	2:B:4:GLU:HG3	0.41	2.15	16	1
1:A:93:VAL:O	1:A:97:TRP:HB2	0.41	2.15	16	1
2:B:5:ARG:HD2	2:B:6:PRO:HD3	0.41	1.92	16	1
2:B:33:PRO:HB2	2:B:36:TRP:CH2	0.41	2.49	1	1
1:A:118:ASP:O	1:A:118:ASP:CG	0.41	2.57	17	3
1:A:18:CYS:SG	1:A:57:ASP:CB	0.41	3.09	19	1
1:A:65:ASP:N	1:A:65:ASP:OD1	0.41	2.52	19	1
1:A:35:THR:H	2:B:25:VAL:HG12	0.41	1.74	11	1
1:A:52:THR:O	1:A:53:LEU:HB2	0.41	2.13	20	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:65:ASP:C	0.41	2.58	20	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:17:THR:HG1	0.41	1.72	20	1
1:A:148:ASP:C	1:A:149:LEU:HD12	0.41	2.36	15	1
1:A:155:VAL:CG1	1:A:167:ASN:HB3	0.41	2.45	14	1
1:A:174:LEU:O	1:A:178:GLU:HB2	0.41	2.15	4	1
1:A:10:GLY:C	2:B:35:GLN:OE1	0.41	2.58	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:VAL:C	0.41	2.58	5	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:165:LEU:H	0.41	2.29	3	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:83:SER:O	0.41	2.73	3	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:HB2	0.41	2.54	7	1
1:A:68:ARG:HG3	1:A:69:PRO:HD3	0.41	1.91	7	1
1:A:161:THR:C	1:A:162:GLN:HG3	0.41	2.34	6	1
1:A:47:GLY:N	2:B:9:SER:HB2	0.41	2.30	6	1
2:B:35:GLN:CD	2:B:38:ARG:HG2	0.41	2.35	1	1
1:A:61:GLN:HG3	2:B:22:PHE:HA	0.41	1.92	11	1
1:A:118:ASP:C	1:A:119:LEU:HG	0.41	2.35	20	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:134:GLN:OE1	0.41	2.16	20	1
1:A:174:LEU:O	1:A:178:GLU:HB3	0.41	2.15	20	1
1:A:27:LYS:HG2	2:B:27:GLY:C	0.41	2.35	20	1
1:A:160:LEU:HD22	2:B:28:GLU:C	0.41	2.35	10	1
1:A:59:ALA:CB	1:A:65:ASP:HB3	0.41	2.45	17	1
1:A:102:THR:HB	1:A:106:PRO:HG2	0.41	1.92	15	1
2:B:24:ALA:CA	2:B:28:GLU:CD	0.41	2.89	15	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:63:ASP:CG	0.41	2.93	4	1
1:A:61:GLN:HA	2:B:21:GLY:HA3	0.41	1.91	7	1
1:A:117:ILE:HG12	1:A:163:LYS:HG2	0.41	1.92	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:HG11	1:A:62:GLU:OE2	0.41	2.15	6	1
1:A:68:ARG:HB3	1:A:69:PRO:HD3	0.41	1.91	6	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:15:GLU:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:77:VAL:CG1	1:A:176:ALA:HA	0.41	2.45	16	1
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:CA	0.41	2.68	9	1
1:A:90:PHE:CG	1:A:137:ILE:HG12	0.41	2.50	1	1
1:A:163:LYS:O	1:A:164:GLY:C	0.41	2.59	1	1
1:A:86:SER:O	1:A:133:LYS:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:134:GLN:NE2	1:A:134:GLN:CA	0.41	2.83	20	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:56:PHE:O	0.41	2.15	10	1
1:A:118:ASP:CB	1:A:162:GLN:HG3	0.41	2.45	14	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:163:LYS:HZ2	0.41	2.28	14	1
1:A:55:LEU:O	1:A:56:PHE:CG	0.41	2.73	4	1
2:B:35:GLN:HA	2:B:36:TRP:CE3	0.41	2.49	2	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:75:THR:CG2	0.41	2.42	5	1
1:A:62:GLU:OE2	2:B:18:ILE:CG2	0.41	2.68	3	1
2:B:22:PHE:HB3	2:B:25:VAL:HB	0.41	1.92	12	1
2:B:31:GLY:O	2:B:32:ILE:HG13	0.41	2.15	12	1
2:B:34:GLU:HG2	2:B:38:ARG:CA	0.41	2.45	8	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:78:PHE:CA	0.41	2.45	13	1
1:A:19:LEU:CD1	2:B:29:PHE:HB3	0.41	2.44	16	1
2:B:4:GLU:O	2:B:7:GLU:OE1	0.41	2.38	16	1
1:A:52:THR:O	1:A:177:LEU:HD21	0.41	2.15	19	1
1:A:36:VAL:CG2	2:B:28:GLU:HG3	0.41	2.46	11	1
2:B:34:GLU:HG2	2:B:37:ALA:C	0.41	2.35	20	1
1:A:96:LYS:O	1:A:100:GLU:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:69:PRO:O	1:A:72:TYR:CG	0.41	2.73	17	1
1:A:26:ASN:ND2	2:B:27:GLY:HA3	0.41	2.31	4	1
1:A:11:ASP:OD2	1:A:81:CYS:N	0.41	2.54	2	1
1:A:36:VAL:CG2	2:B:26:THR:CG2	0.41	2.96	5	1
1:A:1:MET:HA	1:A:177:LEU:CD2	0.41	2.46	3	1
1:A:100:GLU:O	1:A:101:ILE:CG1	0.41	2.68	12	1
1:A:22:SER:HB3	1:A:23:TYR:CE2	0.41	2.51	12	1
1:A:36:VAL:HG22	2:B:25:VAL:HG12	0.41	1.91	12	1
1:A:156:GLU:O	1:A:164:GLY:O	0.41	2.38	6	1
1:A:159:ALA:CB	2:B:29:PHE:CB	0.41	2.98	13	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:145:LEU:HG	0.41	1.93	13	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:176:ALA:CB	0.41	2.99	16	1
1:A:19:LEU:HB3	1:A:165:LEU:HD11	0.41	1.93	9	1
1:A:38:ASP:OD1	2:B:19:HIS:CE1	0.41	2.73	1	1
1:A:18:CYS:SG	1:A:57:ASP:CG	0.41	2.98	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:GLN:HG2	2:B:23:ASP:CB	0.41	2.46	19	1
1:A:8:VAL:CB	2:B:35:GLN:OE1	0.41	2.68	11	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:111:LEU:HB2	0.41	1.90	20	2
1:A:128:LYS:O	1:A:131:LYS:HG2	0.41	2.16	10	1
1:A:42:VAL:HB	2:B:14:PHE:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:38:ASP:HB3	1:A:55:LEU:CD1	0.41	2.45	10	1
1:A:46:ILE:HG12	1:A:49:GLU:O	0.41	2.16	4	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:60:GLY:N	0.41	2.84	4	1
1:A:76:ASP:O	1:A:108:THR:HG22	0.41	2.16	2	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:137:ILE:CD1	0.41	3.03	2	1
1:A:61:GLN:HB3	2:B:21:GLY:O	0.41	2.16	3	1
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:91:GLU:HG2	0.41	2.50	12	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:115:THR:CG2	0.41	2.46	6	1
1:A:23:TYR:HB3	1:A:163:LYS:CG	0.41	2.46	8	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:17:THR:HG21	0.41	1.93	8	1
1:A:58:THR:HG22	1:A:59:ALA:N	0.41	2.31	9	2
1:A:119:LEU:O	1:A:121:ASP:N	0.41	2.54	13	1
1:A:85:VAL:HA	1:A:129:LEU:CG	0.41	2.45	13	1
1:A:139:PRO:O	1:A:154:TYR:CE2	0.41	2.73	13	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:153:LYS:C	0.41	2.89	13	1
1:A:36:VAL:O	1:A:57:ASP:HB2	0.41	2.16	9	2
1:A:86:SER:C	1:A:129:LEU:HD23	0.41	2.36	16	1
1:A:169:PHE:N	1:A:169:PHE:CD1	0.41	2.88	16	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:163:LYS:CB	0.41	3.03	16	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:160:LEU:O	0.41	2.72	9	1
1:A:66:ARG:C	1:A:70:LEU:CD2	0.41	2.83	9	1
1:A:68:ARG:O	1:A:72:TYR:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:144:LYS:O	1:A:148:ASP:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:122:ASP:OD2	1:A:124:SER:HB2	0.41	2.16	20	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:36:VAL:O	0.41	2.68	20	1
1:A:78:PHE:C	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.89	10	1
1:A:109:PRO:HB3	1:A:175:ALA:O	0.41	2.16	4	1
1:A:40:TYR:HB3	2:B:15:GLU:HB2	0.41	1.92	3	2
1:A:105:CYS:SG	1:A:106:PRO:CD	0.41	3.08	5	1
1:A:57:ASP:N	2:B:18:ILE:HD11	0.41	2.25	5	1
1:A:66:ARG:HG3	1:A:67:LEU:N	0.41	2.31	3	1
1:A:77:VAL:HG22	1:A:77:VAL:O	0.41	2.16	7	1
1:A:2:GLN:H	1:A:2:GLN:NE2	0.41	2.13	8	1
1:A:74:GLN:O	1:A:74:GLN:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:174:LEU:HD23	1:A:174:LEU:H	0.41	1.75	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:CG	0.41	2.68	19	1
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:CD1	0.41	2.64	20	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:122:ASP:HB3	0.41	2.46	17	1
1:A:120:ARG:O	1:A:121:ASP:C	0.41	2.57	17	1
1:A:2:GLN:OE1	1:A:49:GLU:OE1	0.41	2.39	17	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:62:GLU:HG3	0.41	2.51	17	1
1:A:83:SER:HA	1:A:115:THR:O	0.41	2.16	17	1
1:A:38:ASP:H	2:B:19:HIS:N	0.41	2.14	15	1
1:A:49:GLU:CG	2:B:4:GLU:CG	0.41	2.99	15	1
1:A:5:LYS:HD2	1:A:73:PRO:CG	0.41	2.45	15	1
1:A:45:MET:HG3	2:B:12:SER:HB2	0.41	1.92	4	1
1:A:102:THR:CB	1:A:106:PRO:HG2	0.41	2.46	2	1
1:A:38:ASP:CA	2:B:18:ILE:CD1	0.41	2.99	5	1
1:A:11:ASP:C	1:A:11:ASP:OD1	0.41	2.59	3	1
1:A:139:PRO:HA	1:A:154:TYR:CD1	0.41	2.50	7	1
1:A:4:ILE:HD11	1:A:76:ASP:HA	0.41	1.92	18	1
1:A:112:LEU:HG	1:A:154:TYR:HA	0.41	1.90	13	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:17:THR:HB	0.41	1.91	13	1
1:A:132:ASN:O	1:A:134:GLN:NE2	0.41	2.54	16	1
1:A:45:MET:O	2:B:10:LEU:HG	0.41	2.16	16	1
2:B:38:ARG:CG	2:B:38:ARG:NH1	0.41	2.83	16	1
1:A:110:PHE:C	1:A:152:VAL:HG12	0.41	2.36	1	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:75:THR:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:140:GLU:O	1:A:144:LYS:HD3	0.41	2.16	19	1
1:A:40:TYR:HB2	1:A:56:PHE:CD2	0.41	2.50	19	1
1:A:27:LYS:CA	2:B:27:GLY:HA3	0.41	2.46	19	1
1:A:28:PHE:HA	2:B:28:GLU:HG2	0.41	1.92	19	1
1:A:18:CYS:HB3	2:B:26:THR:CA	0.41	2.45	19	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:172:ALA:CB	0.41	2.45	11	1
1:A:121:ASP:O	1:A:121:ASP:OD1	0.41	2.38	11	1
2:B:34:GLU:OE1	2:B:37:ALA:N	0.41	2.54	11	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:18:ILE:HG23	0.41	1.92	20	1
2:B:34:GLU:HG2	2:B:37:ALA:O	0.41	2.16	20	1
1:A:27:LYS:CD	2:B:25:VAL:HG12	0.41	2.46	10	1
1:A:100:GLU:C	1:A:101:ILE:CG2	0.41	2.87	17	1
2:B:20:VAL:HG21	2:B:26:THR:CB	0.41	2.44	17	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:162:GLN:CB	0.41	3.04	17	1
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:HA	0.41	2.16	17	1
1:A:119:LEU:O	1:A:120:ARG:C	0.41	2.59	4	2
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LYS:HG2	0.41	2.16	16	2
1:A:22:SER:HA	2:B:27:GLY:O	0.41	2.16	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:CYS:SG	1:A:165:LEU:HG	0.41	2.56	14	1
1:A:42:VAL:HG11	2:B:14:PHE:CA	0.41	2.46	14	1
1:A:39:ASN:O	2:B:16:HIS:HB3	0.41	2.15	14	1
1:A:42:VAL:HG13	2:B:14:PHE:CA	0.41	2.45	4	1
1:A:105:CYS:O	1:A:107:LYS:HE3	0.41	2.15	2	1
1:A:112:LEU:HD23	1:A:112:LEU:O	0.41	2.15	5	1
1:A:39:ASN:CG	1:A:55:LEU:HG	0.41	2.36	5	1
1:A:80:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CZ	0.41	2.51	5	1
1:A:35:THR:O	2:B:20:VAL:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:158:SER:OG	1:A:162:GLN:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:38:ASP:C	1:A:55:LEU:CD1	0.41	2.90	3	1
1:A:36:VAL:O	1:A:57:ASP:CG	0.41	2.59	7	1
1:A:162:GLN:OE1	1:A:163:LYS:HG2	0.41	2.15	12	1
1:A:60:GLY:CA	2:B:22:PHE:CD2	0.41	3.03	12	1
1:A:78:PHE:HE2	1:A:108:THR:HG21	0.41	1.75	12	1
1:A:81:CYS:CB	1:A:115:THR:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:43:THR:O	2:B:12:SER:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:154:TYR:C	1:A:154:TYR:CD1	0.41	2.94	6	1
1:A:158:SER:HB3	1:A:162:GLN:HB2	0.41	1.91	8	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:16:LYS:HB2	0.41	2.46	8	1
1:A:36:VAL:N	2:B:20:VAL:HB	0.41	2.29	8	1
1:A:7:VAL:CB	1:A:75:THR:HG21	0.41	2.45	13	1
1:A:158:SER:CB	1:A:161:THR:HB	0.41	2.46	13	1
1:A:103:HIS:HB2	1:A:106:PRO:CG	0.41	2.45	16	1
1:A:132:ASN:OD1	1:A:133:LYS:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:40:TYR:CD1	0.41	2.72	16	1
1:A:107:LYS:HD3	1:A:150:LYS:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:39:ASN:HB3	2:B:17:THR:HA	0.41	1.93	9	1
1:A:121:ASP:O	1:A:123:PRO:HD3	0.41	2.15	11	1
1:A:61:GLN:CG	2:B:22:PHE:HA	0.41	2.45	11	1
1:A:8:VAL:O	2:B:35:GLN:HB3	0.41	2.16	11	2
1:A:92:ASN:C	1:A:95:GLU:HG2	0.41	2.36	20	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LYS:HB3	0.41	2.15	17	1
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:N	0.41	2.54	5	1
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ASP:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:95:GLU:O	1:A:99:PRO:HG2	0.41	2.16	7	1
1:A:76:ASP:O	1:A:109:PRO:HD2	0.41	2.16	12	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:77:VAL:HG21	0.41	2.44	12	1
2:B:7:GLU:OE1	2:B:7:GLU:C	0.41	2.59	8	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:57:ASP:OD1	0.41	2.35	13	1
2:B:32:ILE:HD11	2:B:35:GLN:CG	0.41	2.45	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:VAL:HG11	1:A:120:ARG:O	0.41	2.16	16	1
1:A:16:LYS:CB	1:A:169:PHE:CE2	0.41	3.04	16	1
1:A:159:ALA:HB1	2:B:29:PHE:CD1	0.41	2.50	16	1
1:A:69:PRO:HD2	1:A:70:LEU:HD22	0.41	1.93	9	1
1:A:5:LYS:HB3	1:A:75:THR:HA	0.40	1.92	1	1
2:B:36:TRP:N	2:B:36:TRP:CD2	0.40	2.89	1	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:169:PHE:CD2	0.40	2.51	19	1
1:A:101:ILE:HA	1:A:105:CYS:O	0.40	2.17	11	1
1:A:158:SER:N	1:A:162:GLN:HB3	0.40	2.30	11	1
2:B:8:ILE:HD12	2:B:9:SER:HB3	0.40	1.91	11	1
1:A:116:GLN:C	1:A:118:ASP:N	0.40	2.75	10	1
2:B:34:GLU:OE2	2:B:36:TRP:HA	0.40	2.15	10	1
1:A:37:PHE:CE2	2:B:18:ILE:CG1	0.40	3.04	17	1
1:A:157:CYS:CA	1:A:163:LYS:HB3	0.40	2.46	15	1
1:A:164:GLY:O	1:A:166:LYS:N	0.40	2.54	2	1
1:A:25:THR:C	1:A:26:ASN:CG	0.40	2.80	2	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ASN:OD1	0.40	2.16	5	1
1:A:42:VAL:HB	2:B:15:GLU:CB	0.40	2.45	5	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:51:TYR:HB3	0.40	1.91	3	1
1:A:3:THR:HA	1:A:52:THR:HB	0.40	1.91	7	1
1:A:59:ALA:O	1:A:60:GLY:O	0.40	2.39	12	1
2:B:35:GLN:O	2:B:36:TRP:CD1	0.40	2.74	8	1
1:A:35:THR:C	2:B:26:THR:HB	0.40	2.36	13	1
1:A:18:CYS:C	1:A:19:LEU:HD22	0.40	2.36	16	1
1:A:17:THR:N	1:A:57:ASP:OD2	0.40	2.54	19	1
1:A:117:ILE:HG12	1:A:162:GLN:NE2	0.40	2.31	11	1
1:A:64:TYR:CE2	2:B:19:HIS:CG	0.40	3.10	20	1
1:A:9:VAL:O	2:B:35:GLN:OE1	0.40	2.39	20	1
1:A:118:ASP:OD1	1:A:161:THR:HB	0.40	2.16	10	1
1:A:39:ASN:O	2:B:17:THR:OG1	0.40	2.39	17	1
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:N	0.40	2.53	17	1
1:A:72:TYR:CB	1:A:73:PRO:HD3	0.40	2.45	15	1
1:A:63:ASP:CG	2:B:20:VAL:CG1	0.40	2.90	15	1
1:A:94:LYS:HD3	1:A:145:LEU:CD1	0.40	2.46	4	1
1:A:129:LEU:C	1:A:134:GLN:NE2	0.40	2.75	3	1
1:A:129:LEU:HA	1:A:134:GLN:CD	0.40	2.36	3	1
1:A:158:SER:C	1:A:162:GLN:CB	0.40	2.89	12	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:56:PHE:HB2	0.40	2.15	12	1
1:A:64:TYR:CE1	2:B:18:ILE:HG12	0.40	2.51	12	1
1:A:70:LEU:HD22	2:B:36:TRP:CZ2	0.40	2.52	12	1
1:A:158:SER:HB2	1:A:163:LYS:HB2	0.40	1.94	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:CYS:SG	2:B:29:PHE:CD1	0.40	3.04	6	1
1:A:70:LEU:CD1	2:B:36:TRP:C	0.40	2.83	6	1
1:A:126:ILE:HD12	1:A:129:LEU:CD1	0.40	2.47	8	1
1:A:133:LYS:C	1:A:135:LYS:N	0.40	2.74	8	1
1:A:174:LEU:HB3	2:B:3:LYS:NZ	0.40	2.31	18	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:9:VAL:N	0.40	2.84	16	1
1:A:16:LYS:HG3	1:A:157:CYS:SG	0.40	2.56	9	1
2:B:35:GLN:OE1	2:B:38:ARG:HG3	0.40	2.16	1	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:61:GLN:CB	0.40	2.46	19	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:172:ALA:HB2	0.40	1.92	11	1
1:A:95:GLU:HG3	1:A:96:LYS:N	0.40	2.31	20	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:166:LYS:HA	0.40	1.92	10	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:145:LEU:CD1	0.40	3.04	17	1
2:B:31:GLY:C	2:B:33:PRO:CD	0.40	2.90	15	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:53:LEU:HD12	0.40	1.92	14	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:75:THR:OG1	0.40	2.17	2	1
1:A:37:PHE:HA	2:B:20:VAL:HG11	0.40	1.94	5	1
1:A:42:VAL:CG2	2:B:14:PHE:C	0.40	2.90	3	1
2:B:24:ALA:CA	2:B:28:GLU:OE1	0.40	2.69	13	1
1:A:130:ALA:HA	1:A:134:GLN:CA	0.40	2.46	16	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:51:TYR:HB2	0.40	2.42	16	1
1:A:35:THR:C	1:A:37:PHE:N	0.40	2.75	9	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:CD2	0.40	2.43	1	1
1:A:37:PHE:O	2:B:20:VAL:HB	0.40	2.16	19	1
1:A:102:THR:N	1:A:105:CYS:O	0.40	2.54	11	1
1:A:157:CYS:HA	1:A:162:GLN:HG2	0.40	1.93	11	1
1:A:153:LYS:HD2	1:A:155:VAL:HG13	0.40	1.93	10	1
1:A:62:GLU:HG2	2:B:19:HIS:O	0.40	2.17	10	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:90:PHE:HB2	0.40	2.51	15	1
1:A:169:PHE:O	1:A:173:ILE:HG13	0.40	2.15	14	1
1:A:158:SER:HB3	1:A:161:THR:HB	0.40	1.92	2	1
1:A:42:VAL:HG23	2:B:14:PHE:N	0.40	2.31	2	1
1:A:86:SER:O	1:A:134:GLN:HA	0.40	2.17	3	1
1:A:153:LYS:HB3	1:A:171:GLU:OE1	0.40	2.17	3	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:165:LEU:CG	0.40	3.04	3	1
1:A:85:VAL:O	1:A:86:SER:HB3	0.40	2.16	3	1
1:A:89:SER:O	1:A:90:PHE:C	0.40	2.58	3	1
1:A:35:THR:O	2:B:26:THR:HB	0.40	2.17	7	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:80:VAL:O	0.40	2.16	12	1
1:A:133:LYS:O	1:A:135:LYS:HD2	0.40	2.15	8	1
1:A:70:LEU:H	1:A:70:LEU:HD13	0.40	1.75	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:24:ALA:O	2:B:28:GLU:HG2	0.40	2.17	8	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:175:ALA:HB2	0.40	1.93	18	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:159:ALA:CB	0.40	2.97	18	1
1:A:9:VAL:HA	2:B:36:TRP:CE2	0.40	2.50	13	1
1:A:16:LYS:HG3	1:A:165:LEU:O	0.40	2.16	16	1
1:A:40:TYR:HB3	2:B:15:GLU:CG	0.40	2.46	16	1
1:A:92:ASN:ND2	1:A:93:VAL:CG2	0.40	2.85	9	1
1:A:8:VAL:CB	1:A:15:GLY:HA2	0.40	2.46	11	1
1:A:58:THR:HA	2:B:36:TRP:CE2	0.40	2.51	20	1
1:A:70:LEU:CD2	2:B:37:ALA:HA	0.40	2.44	20	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:159:ALA:CB	0.40	3.00	10	1
1:A:120:ARG:C	1:A:122:ASP:N	0.40	2.73	17	1
1:A:69:PRO:CB	2:B:36:TRP:O	0.40	2.69	17	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:154:TYR:HA	0.40	2.47	15	1
1:A:35:THR:OG1	2:B:20:VAL:HG23	0.40	2.16	15	1
1:A:118:ASP:HB3	1:A:161:THR:CG2	0.40	2.46	14	1
1:A:26:ASN:CG	2:B:27:GLY:HA3	0.40	2.37	4	1
1:A:81:CYS:CB	1:A:115:THR:HG21	0.40	2.47	2	1
1:A:91:GLU:O	1:A:95:GLU:HG2	0.40	2.17	3	1
1:A:90:PHE:CD2	1:A:137:ILE:HG12	0.40	2.52	12	1
1:A:97:TRP:CH2	1:A:98:VAL:HG22	0.40	2.52	6	1
1:A:133:LYS:O	1:A:135:LYS:CG	0.40	2.69	8	1
1:A:2:GLN:N	1:A:177:LEU:HD23	0.40	2.31	8	1
1:A:60:GLY:HA3	2:B:20:VAL:HG23	0.40	1.94	8	1
1:A:9:VAL:HA	2:B:36:TRP:NE1	0.40	2.32	13	1
2:B:34:GLU:HG3	2:B:38:ARG:HB3	0.40	1.91	16	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	170/178 (96%)	127±4 (75±2%)	27±4 (16±2%)	17±3 (10±2%)	1	11
2	B	37/46 (80%)	21±2 (56±6%)	10±2 (27±6%)	6±2 (17±5%)	0	4
All	All	4140/4480 (92%)	2954 (71%)	733 (18%)	453 (11%)	1	9

All 80 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	119	LEU	20
1	A	118	ASP	20
1	A	101	ILE	18
1	A	36	VAL	17
1	A	27	LYS	17
2	B	7	GLU	17
2	B	5	ARG	16
1	A	76	ASP	15
2	B	22	PHE	14
2	B	34	GLU	13
1	A	102	THR	13
1	A	104	HIS	12
1	A	37	PHE	11
1	A	159	ALA	10
1	A	3	THR	10
1	A	42	VAL	10
1	A	151	ALA	10
1	A	58	THR	10
2	B	37	ALA	9
1	A	28	PHE	8
2	B	36	TRP	8
2	B	8	ILE	7
1	A	63	ASP	7
1	A	105	CYS	7
1	A	25	THR	7
1	A	13	ALA	7
1	A	64	TYR	6
1	A	65	ASP	6
1	A	14	VAL	6
1	A	86	SER	6
2	B	31	GLY	6
1	A	74	GLN	6
1	A	88	SER	5
1	A	162	GLN	5
2	B	18	ILE	4
2	B	15	GLU	4
1	A	71	SER	4
1	A	61	GLN	4
2	B	12	SER	3
1	A	62	GLU	3
1	A	9	VAL	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	70	LEU	3
1	A	72	TYR	3
1	A	68	ARG	3
1	A	12	GLY	3
2	B	23	ASP	3
2	B	24	ALA	2
2	B	27	GLY	2
2	B	30	THR	2
1	A	38	ASP	2
1	A	107	LYS	2
1	A	134	GLN	2
2	B	14	PHE	2
2	B	21	GLY	2
2	B	28	GLU	2
1	A	11	ASP	2
2	B	3	LYS	2
1	A	60	GLY	2
1	A	59	ALA	2
1	A	160	LEU	2
1	A	73	PRO	2
1	A	163	LYS	2
1	A	10	GLY	2
1	A	89	SER	2
2	B	11	PRO	2
1	A	15	GLY	2
1	A	152	VAL	1
2	B	16	HIS	1
1	A	69	PRO	1
1	A	47	GLY	1
1	A	133	LYS	1
1	A	7	VAL	1
1	A	106	PRO	1
2	B	32	ILE	1
1	A	26	ASN	1
1	A	150	LYS	1
1	A	165	LEU	1
1	A	164	GLY	1
1	A	85	VAL	1
2	B	9	SER	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	152/158 (96%)	113±5 (75±3%)	39±5 (25±3%)	3	24
2	B	32/40 (80%)	23±2 (73±7%)	9±2 (27±7%)	2	21
All	All	3680/3960 (93%)	2732 (74%)	948 (26%)	2	24

All 146 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	165	LEU	20
1	A	117	ILE	20
1	A	92	ASN	20
2	B	5	ARG	20
1	A	177	LEU	19
1	A	174	LEU	19
1	A	134	GLN	18
1	A	155	VAL	17
1	A	4	ILE	16
1	A	70	LEU	16
2	B	10	LEU	15
2	B	22	PHE	14
1	A	74	GLN	14
2	B	8	ILE	13
1	A	133	LYS	13
1	A	16	LYS	13
1	A	120	ARG	13
1	A	27	LYS	13
1	A	44	VAL	13
1	A	149	LEU	12
1	A	135	LYS	12
1	A	68	ARG	12
1	A	110	PHE	12
1	A	153	LYS	11
1	A	1	MET	11
1	A	178	GLU	10
1	A	160	LEU	10
1	A	131	LYS	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	94	LYS	10
1	A	77	VAL	10
2	B	18	ILE	10
2	B	3	LYS	10
1	A	107	LYS	10
1	A	126	ILE	9
1	A	95	GLU	9
1	A	2	GLN	9
1	A	64	TYR	9
2	B	38	ARG	9
1	A	96	LYS	9
2	B	29	PHE	9
2	B	36	TRP	8
1	A	104	HIS	8
1	A	161	THR	8
1	A	128	LYS	8
1	A	132	ASN	8
1	A	144	LYS	8
1	A	162	GLN	8
1	A	163	LYS	8
1	A	72	TYR	8
2	B	17	THR	8
1	A	119	LEU	7
1	A	37	PHE	7
2	B	15	GLU	7
1	A	86	SER	7
1	A	5	LYS	7
1	A	9	VAL	7
1	A	42	VAL	7
1	A	28	PHE	7
1	A	137	ILE	7
1	A	55	LEU	7
1	A	20	LEU	7
1	A	129	LEU	6
1	A	71	SER	6
2	B	16	HIS	6
1	A	63	ASP	6
2	B	28	GLU	6
1	A	66	ARG	6
1	A	23	TYR	6
2	B	35	GLN	6
1	A	25	THR	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	TYR	5
2	B	26	THR	5
1	A	19	LEU	5
1	A	152	VAL	5
1	A	38	ASP	5
1	A	100	GLU	5
1	A	85	VAL	5
1	A	166	LYS	5
2	B	7	GLU	5
1	A	147	ARG	5
1	A	102	THR	5
1	A	61	GLN	5
1	A	101	ILE	4
1	A	67	LEU	4
1	A	39	ASN	4
1	A	49	GLU	4
2	B	32	ILE	4
1	A	62	GLU	4
2	B	34	GLU	4
2	B	13	ASP	4
1	A	35	THR	4
2	B	25	VAL	4
1	A	88	SER	4
1	A	79	LEU	4
1	A	58	THR	4
1	A	116	GLN	4
1	A	57	ASP	3
1	A	21	ILE	3
1	A	156	GLU	3
1	A	167	ASN	3
1	A	89	SER	3
1	A	158	SER	3
2	B	12	SER	3
1	A	105	CYS	3
1	A	56	PHE	3
1	A	143	GLU	3
1	A	7	VAL	3
1	A	90	PHE	3
1	A	8	VAL	3
1	A	154	TYR	3
1	A	40	TYR	3
1	A	45	MET	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	150	LYS	3
1	A	103	HIS	3
1	A	75	THR	2
2	B	14	PHE	2
1	A	14	VAL	2
1	A	170	ASP	2
1	A	127	GLU	2
1	A	145	LEU	2
1	A	76	ASP	2
1	A	91	GLU	2
1	A	140	GLU	2
1	A	118	ASP	2
1	A	65	ASP	2
1	A	81	CYS	2
1	A	84	VAL	2
1	A	26	ASN	2
1	A	122	ASP	2
1	A	112	LEU	2
1	A	141	THR	1
1	A	169	PHE	1
1	A	157	CYS	1
1	A	24	THR	1
1	A	111	LEU	1
1	A	115	THR	1
1	A	6	CYS	1
1	A	78	PHE	1
1	A	53	LEU	1
1	A	46	ILE	1
1	A	168	VAL	1
2	B	30	THR	1
2	B	2	SER	1
1	A	171	GLU	1
1	A	121	ASP	1
1	A	52	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [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