



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 09:51 pm GMT

PDB ID : 2F63
Title : Solution structure of HPPK in complex with inhibitor analogs AMPCPP and HP-1
Authors : Yan, H.; Li, G.
Deposited on : 2005-11-28

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

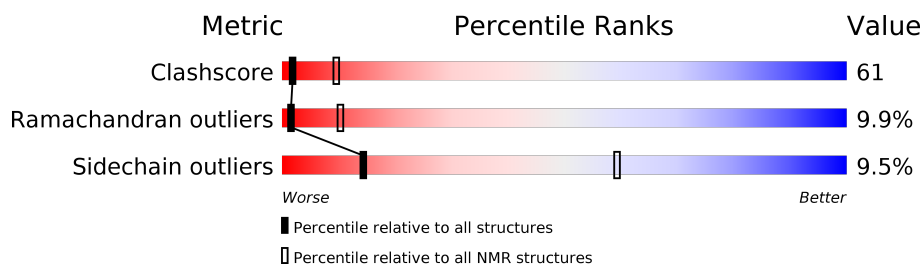
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

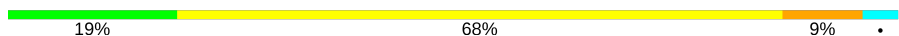
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	158	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:1-A:83, A:90-A:158 (152)	0.40	1

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 2 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2539 atoms, of which 1272 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase.

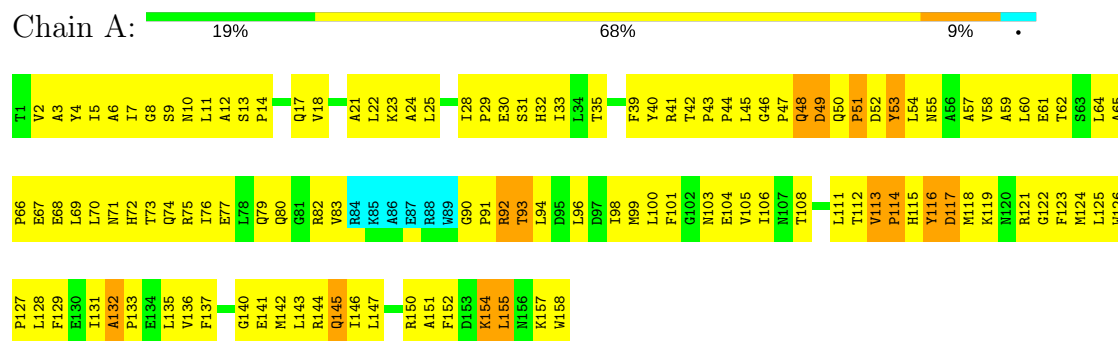
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	158	2539	811	1272	219	233	4	0

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: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase

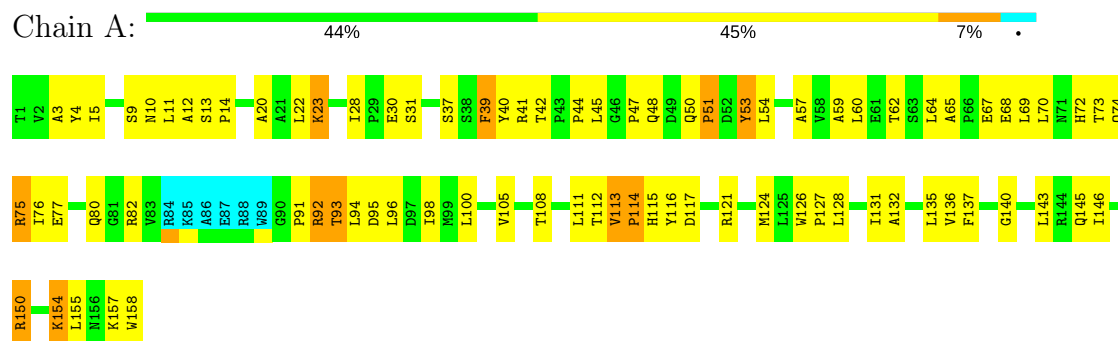


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

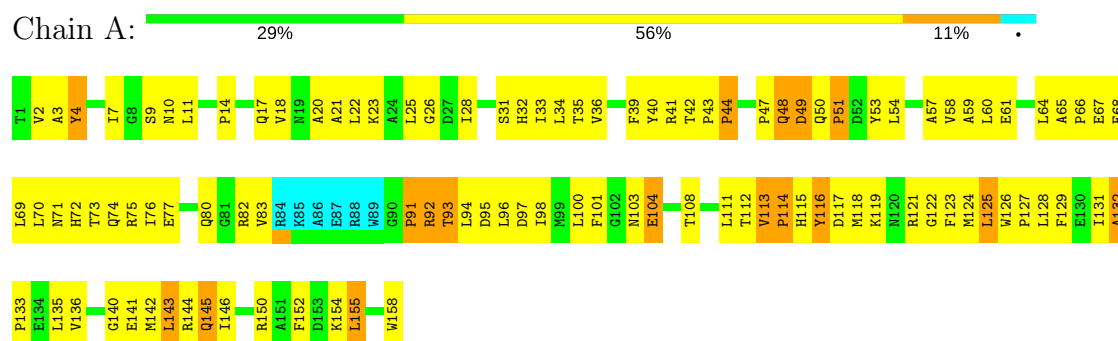
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



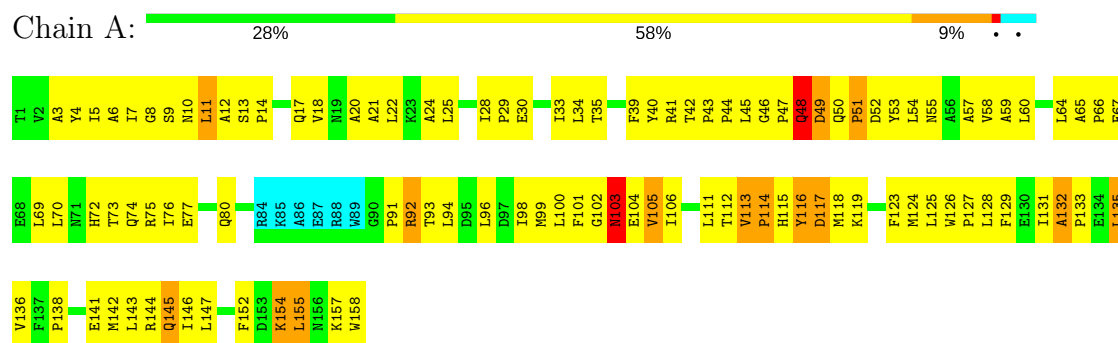
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



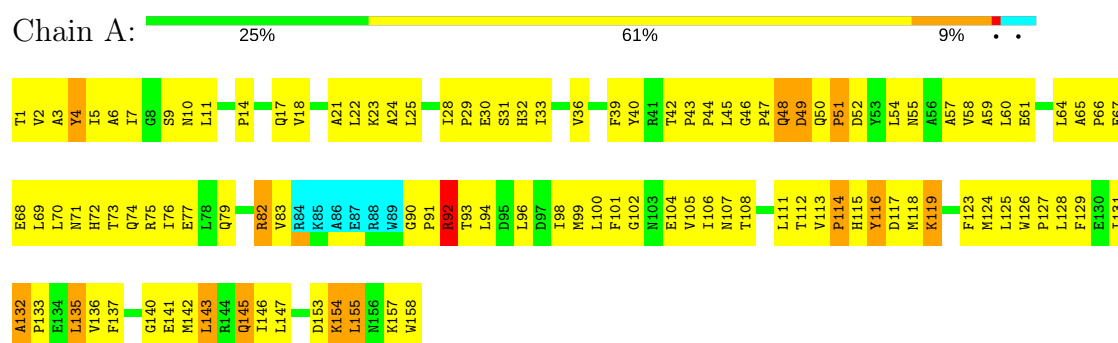
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



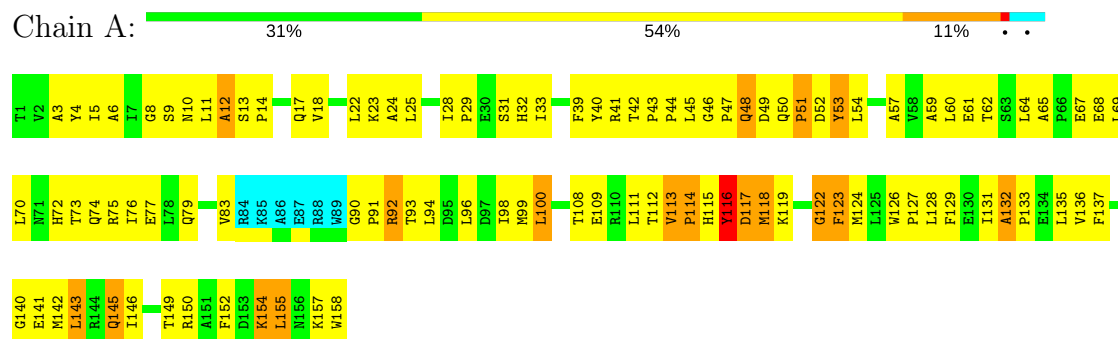
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



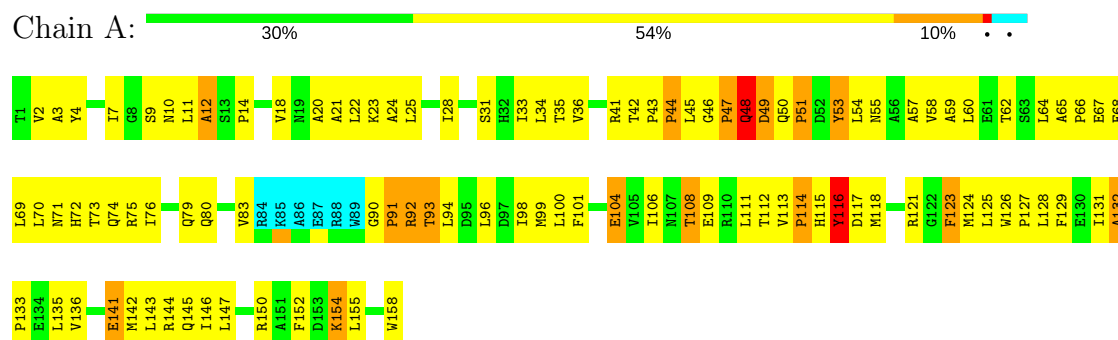
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



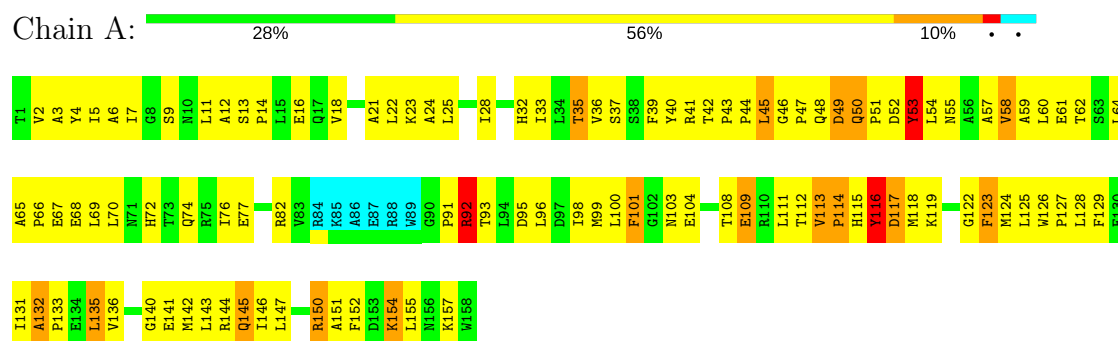
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



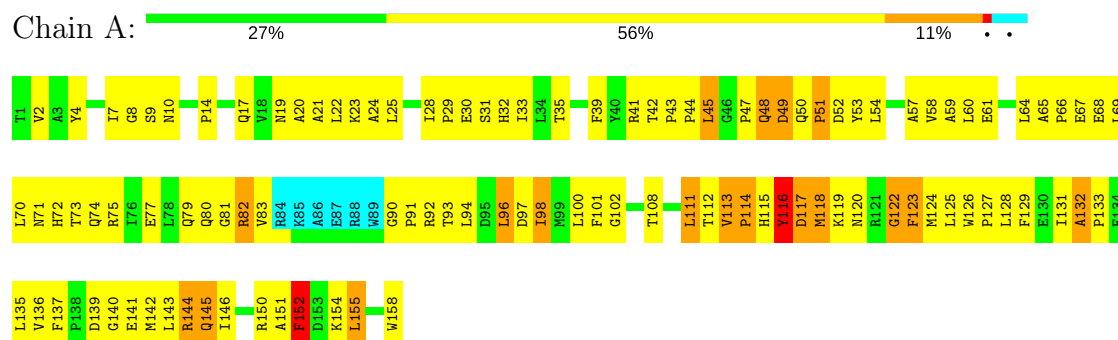
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



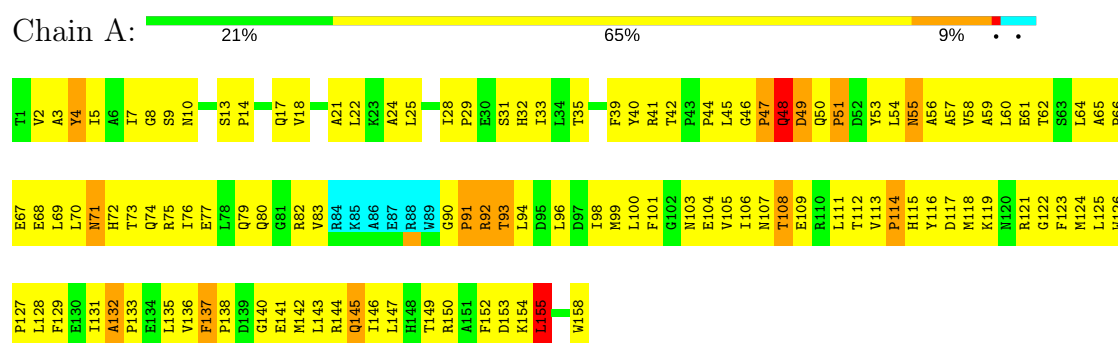
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



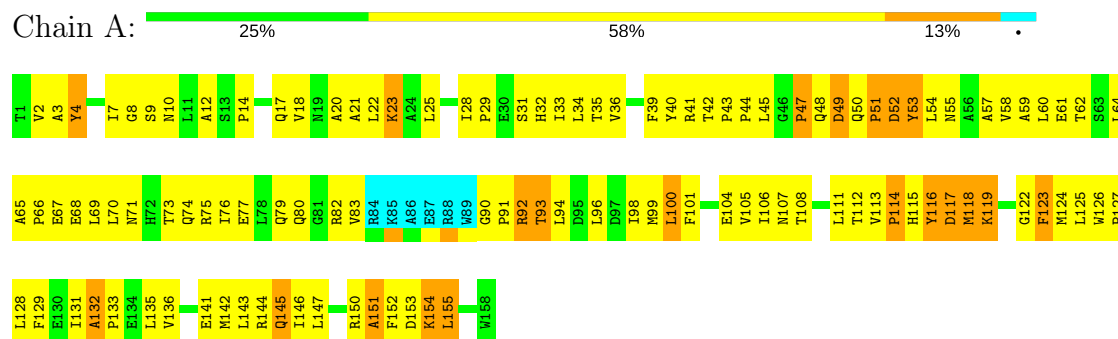
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



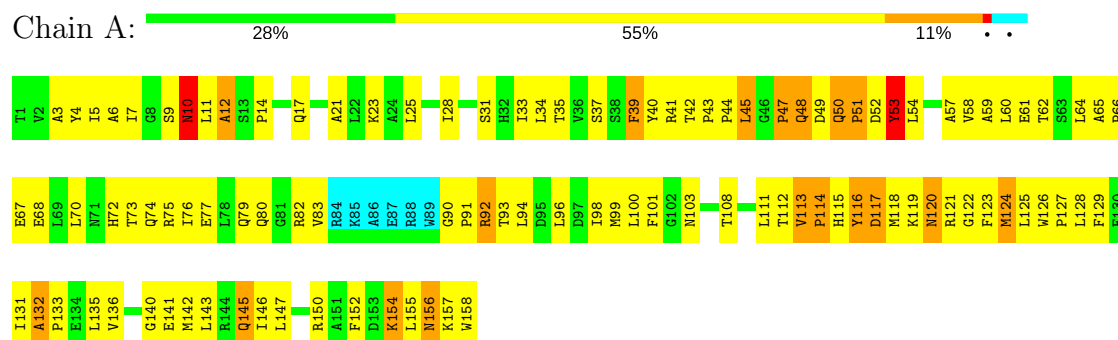
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



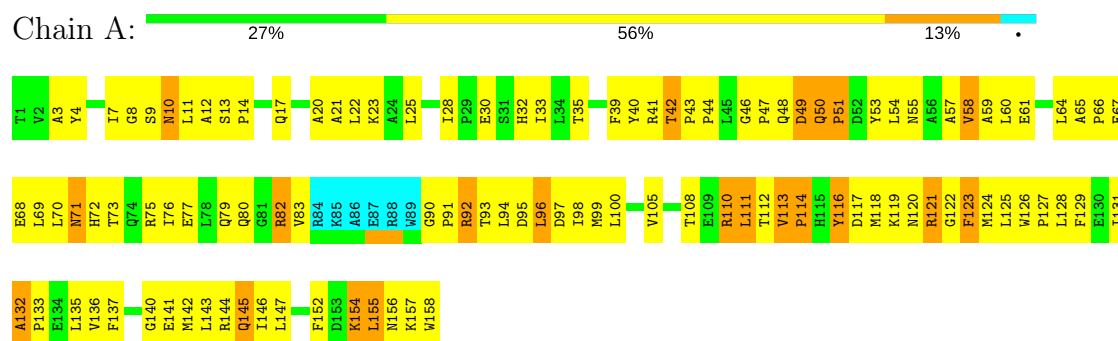
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



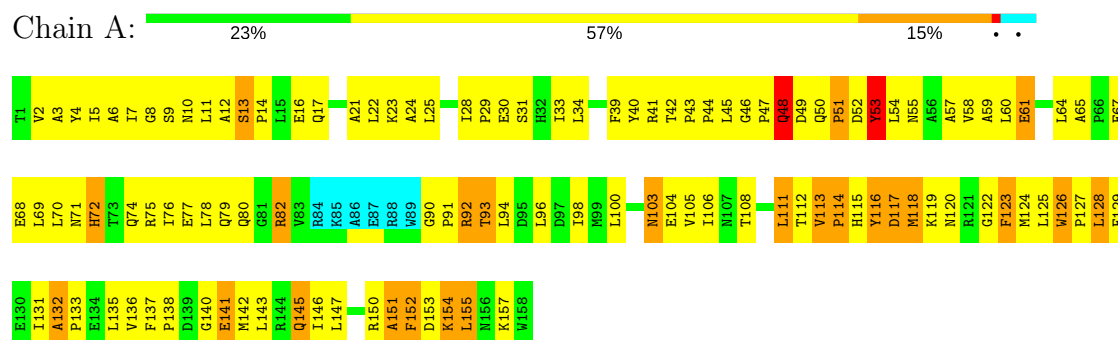
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



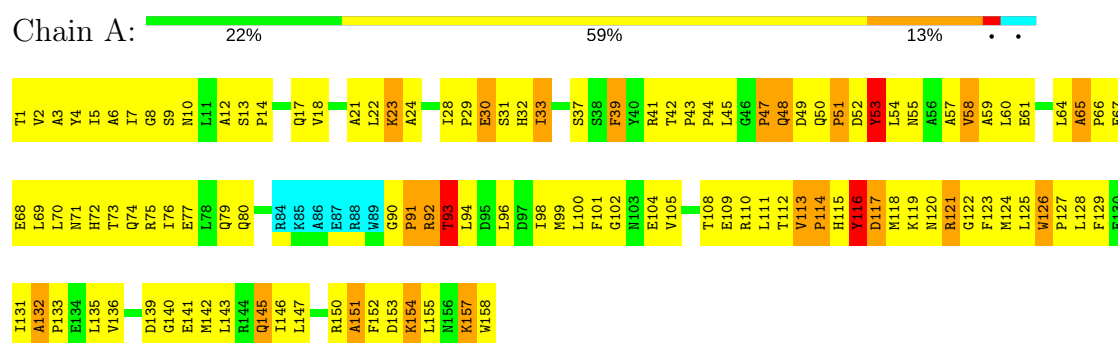
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



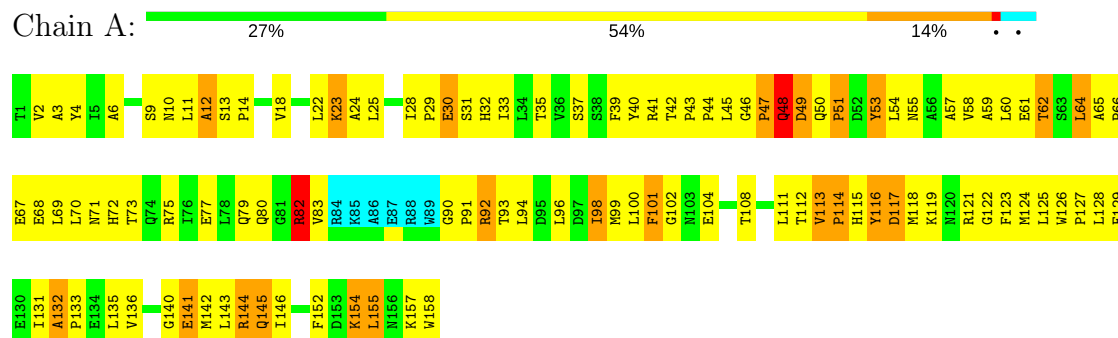
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: 2-amino-4-hydroxy-6-hydroxymethyldihydropteridine pyrophosphokinase



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
Aria	refinement	1.2
CNS	structure solution	1.0

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

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.34±0.05	0±1/1237 (0.0±0.1%)	0.45±0.02	0±0/1686 (0.0±0.0%)
All	All	0.35	7/25977 (0.0%)	0.45	0/35406 (0.0%)

All unique bond 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(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	53	TYR	CE2-CZ	-6.72	1.29	1.38	5	1
1	A	116	TYR	CE2-CZ	-6.57	1.30	1.38	6	4
1	A	53	TYR	CE1-CZ	6.20	1.46	1.38	5	1
1	A	116	TYR	CE1-CZ	6.07	1.46	1.38	6	1

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1208	1212	1208	148±22
All	All	25368	25452	25368	3117

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 61.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:PRO:HD2	0.97	1.37	12	15
1:A:67:GLU:HA	1:A:111:LEU:HG	0.96	1.35	6	16
1:A:44:PRO:HD3	1:A:53:TYR:HB3	0.95	1.37	15	4
1:A:123:PHE:HA	1:A:155:LEU:HD11	0.93	1.40	3	7
1:A:126:TRP:HB2	1:A:152:PHE:HA	0.92	1.37	20	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:97:ASP:HA	0.90	1.40	12	3
1:A:39:PHE:HB2	1:A:54:LEU:HD11	0.87	1.44	20	10
1:A:119:LYS:HA	1:A:125:LEU:HD11	0.85	1.48	14	14
1:A:113:VAL:HB	1:A:114:PRO:HD2	0.84	1.47	4	5
1:A:18:VAL:HG21	1:A:54:LEU:HD23	0.83	1.49	21	5
1:A:3:ALA:HB3	1:A:60:LEU:HB3	0.83	1.50	14	19
1:A:74:GLN:HA	1:A:96:LEU:HD11	0.83	1.50	8	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:111:LEU:HA	0.81	1.52	12	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:155:LEU:HA	0.81	1.52	13	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:128:LEU:HD12	0.80	1.52	15	20
1:A:28:ILE:HD11	1:A:76:ILE:HD11	0.80	1.50	14	7
1:A:18:VAL:HG21	1:A:54:LEU:HD22	0.79	1.52	14	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ILE:HD11	0.79	1.54	10	18
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:HA	0.79	1.54	11	10
1:A:70:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HG	0.79	1.55	17	1
1:A:76:ILE:HD12	1:A:96:LEU:HD11	0.79	1.52	19	6
1:A:10:ASN:HA	1:A:14:PRO:HG3	0.78	1.55	15	8
1:A:106:ILE:HD13	1:A:111:LEU:HD21	0.78	1.51	20	1
1:A:66:PRO:C	1:A:111:LEU:HD13	0.78	1.97	17	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD23	0.78	1.55	8	12
1:A:64:LEU:HD13	1:A:65:ALA:N	0.78	1.94	3	18
1:A:69:LEU:HD12	1:A:98:ILE:HD11	0.78	1.55	1	4
1:A:154:LYS:HG3	1:A:155:LEU:HD22	0.78	1.53	1	1
1:A:82:ARG:HD3	1:A:83:VAL:N	0.77	1.95	7	2
1:A:4:TYR:HB3	1:A:128:LEU:HD21	0.76	1.56	21	20
1:A:70:LEU:HD13	1:A:112:THR:H	0.76	1.40	19	7
1:A:4:TYR:HB3	1:A:128:LEU:HD11	0.76	1.57	18	20
1:A:70:LEU:HD22	1:A:111:LEU:HA	0.76	1.58	19	5
1:A:44:PRO:HB2	1:A:50:GLN:HA	0.76	1.57	6	6
1:A:83:VAL:H	1:A:93:THR:HG21	0.75	1.42	6	3
1:A:82:ARG:NE	1:A:82:ARG:HA	0.74	1.97	12	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:112:THR:N	0.74	1.98	12	16
1:A:123:PHE:HA	1:A:155:LEU:HD21	0.74	1.59	9	5
1:A:133:PRO:HA	1:A:143:LEU:HD13	0.74	1.58	11	2
1:A:44:PRO:HD2	1:A:50:GLN:HB3	0.74	1.58	15	2
1:A:67:GLU:C	1:A:111:LEU:HD12	0.73	2.04	17	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:14:PRO:HA	0.73	1.60	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:HG22	0.73	1.59	2	1
1:A:10:ASN:HD22	1:A:53:TYR:HB3	0.73	1.44	10	3
1:A:100:LEU:HD23	1:A:114:PRO:HG3	0.73	1.60	17	17
1:A:147:LEU:HD13	1:A:152:PHE:HB3	0.73	1.60	20	4
1:A:42:THR:HG21	1:A:155:LEU:HD22	0.73	1.60	21	1
1:A:48:GLN:HG2	1:A:49:ASP:N	0.73	1.99	12	5
1:A:125:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.73	1.60	14	4
1:A:69:LEU:HB3	1:A:98:ILE:HD11	0.73	1.59	14	2
1:A:66:PRO:O	1:A:111:LEU:HD13	0.72	1.82	17	5
1:A:77:GLU:HA	1:A:94:LEU:HD11	0.72	1.62	16	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:60:LEU:HD13	0.72	1.59	2	2
1:A:30:GLU:CD	1:A:69:LEU:HB2	0.72	2.05	21	1
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:VAL:N	0.72	1.99	6	7
1:A:128:LEU:HB3	1:A:143:LEU:HD21	0.72	1.59	12	12
1:A:46:GLY:H	1:A:50:GLN:HE22	0.72	1.27	11	1
1:A:47:PRO:HD2	1:A:90:GLY:HA3	0.72	1.60	14	8
1:A:73:THR:HB	1:A:96:LEU:HG	0.72	1.62	19	5
1:A:50:GLN:N	1:A:51:PRO:HD3	0.71	2.00	7	14
1:A:96:LEU:HD23	1:A:96:LEU:H	0.71	1.45	2	13
1:A:48:GLN:HG3	1:A:92:ARG:H	0.71	1.45	4	3
1:A:39:PHE:HB3	1:A:54:LEU:HD11	0.71	1.63	9	6
1:A:48:GLN:HG2	1:A:92:ARG:H	0.71	1.45	11	3
1:A:40:TYR:HA	1:A:157:LYS:HA	0.71	1.61	1	12
1:A:48:GLN:HE22	1:A:50:GLN:HE22	0.71	1.28	13	2
1:A:77:GLU:HB3	1:A:82:ARG:HD3	0.71	1.62	11	5
1:A:30:GLU:CG	1:A:62:THR:OG1	0.70	2.39	21	1
1:A:96:LEU:H	1:A:96:LEU:HD23	0.70	1.45	6	7
1:A:122:GLY:O	1:A:126:TRP:HB3	0.70	1.87	20	8
1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:PRO:CD	0.70	2.16	16	1
1:A:69:LEU:HD22	1:A:72:HIS:NE2	0.69	2.02	5	4
1:A:91:PRO:O	1:A:92:ARG:HB3	0.69	1.87	10	3
1:A:152:PHE:O	1:A:154:LYS:N	0.69	2.26	20	2
1:A:48:GLN:HE22	1:A:50:GLN:NE2	0.69	1.86	5	4
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:NE2	0.69	2.41	6	14
1:A:118:MET:HB2	1:A:124:MET:CB	0.69	2.17	5	13
1:A:47:PRO:O	1:A:48:GLN:HB3	0.68	1.88	10	4
1:A:108:THR:OG1	1:A:111:LEU:HB3	0.68	1.88	9	13
1:A:70:LEU:HD12	1:A:98:ILE:H	0.68	1.48	10	12
1:A:141:GLU:HB2	1:A:145:GLN:NE2	0.68	2.02	3	3
1:A:30:GLU:HG2	1:A:62:THR:OG1	0.68	1.88	21	1
1:A:77:GLU:HB3	1:A:82:ARG:HE	0.68	1.46	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:SER:HB2	1:A:14:PRO:HA	0.68	1.64	8	9
1:A:105:VAL:HA	1:A:113:VAL:HG21	0.68	1.65	1	4
1:A:65:ALA:HA	1:A:69:LEU:HB2	0.68	1.64	19	1
1:A:10:ASN:HD22	1:A:51:PRO:HD2	0.68	1.47	17	2
1:A:65:ALA:HA	1:A:69:LEU:CB	0.68	2.17	19	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:150:ARG:NH1	0.68	2.04	2	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:150:ARG:CZ	0.67	2.19	11	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:131:ILE:HG12	0.67	1.66	14	2
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:LEU:HD23	0.67	1.64	2	1
1:A:14:PRO:HG2	1:A:52:ASP:HB2	0.67	1.65	9	1
1:A:77:GLU:HA	1:A:94:LEU:HD23	0.67	1.65	7	8
1:A:12:ALA:HB3	1:A:93:THR:HG23	0.67	1.66	3	2
1:A:11:LEU:HD13	1:A:11:LEU:O	0.67	1.89	17	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:23:LYS:N	0.66	2.05	8	17
1:A:92:ARG:HH12	1:A:95:ASP:HB3	0.66	1.50	10	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:35:THR:HG23	0.66	1.64	3	3
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HB3	0.66	1.49	9	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:72:HIS:CD2	0.66	2.25	20	1
1:A:59:ALA:N	1:A:131:ILE:HB	0.66	2.05	4	20
1:A:11:LEU:HD21	1:A:92:ARG:NE	0.66	2.05	4	1
1:A:126:TRP:HB3	1:A:127:PRO:HD3	0.66	1.68	16	20
1:A:44:PRO:HG3	1:A:53:TYR:HB2	0.66	1.67	12	5
1:A:73:THR:HA	1:A:76:ILE:HD13	0.66	1.68	14	6
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:HD3	0.66	1.68	17	1
1:A:128:LEU:C	1:A:143:LEU:HD11	0.66	2.10	13	2
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:HE22	0.66	1.89	13	1
1:A:77:GLU:HG3	1:A:94:LEU:HG	0.65	1.65	3	4
1:A:99:MET:HE2	1:A:118:MET:HB3	0.65	1.69	8	1
1:A:141:GLU:HG3	1:A:145:GLN:NE2	0.65	2.06	4	10
1:A:69:LEU:HA	1:A:72:HIS:CD2	0.65	2.26	21	7
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:HG23	0.65	1.92	6	6
1:A:3:ALA:HB2	1:A:69:LEU:HD21	0.65	1.67	16	2
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:CZ	0.65	2.22	5	2
1:A:64:LEU:HD11	1:A:72:HIS:HD2	0.65	1.52	20	1
1:A:42:THR:O	1:A:53:TYR:HB2	0.65	1.91	19	4
1:A:67:GLU:CA	1:A:111:LEU:HD22	0.65	2.22	4	4
1:A:41:ARG:HB2	1:A:158:TRP:HA	0.65	1.69	16	15
1:A:9:SER:HA	1:A:93:THR:O	0.65	1.92	16	13
1:A:30:GLU:CA	1:A:64:LEU:HB2	0.65	2.22	21	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:92:ARG:HE	0.65	1.49	4	1
1:A:122:GLY:O	1:A:155:LEU:HD21	0.65	1.90	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:NE2	1:A:90:GLY:HA3	0.65	2.07	13	2
1:A:154:LYS:C	1:A:155:LEU:HD22	0.65	2.11	5	4
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:HB3	0.65	1.69	18	1
1:A:154:LYS:HB2	1:A:155:LEU:HD22	0.64	1.69	18	4
1:A:69:LEU:HD22	1:A:72:HIS:HE2	0.64	1.53	5	2
1:A:66:PRO:HB2	1:A:106:ILE:HD11	0.64	1.68	8	1
1:A:18:VAL:HG21	1:A:54:LEU:CD2	0.64	2.22	14	4
1:A:44:PRO:HB3	1:A:91:PRO:HG2	0.64	1.68	18	6
1:A:48:GLN:HE22	1:A:91:PRO:HD2	0.64	1.52	10	5
1:A:100:LEU:HD22	1:A:135:LEU:HD13	0.64	1.70	12	5
1:A:126:TRP:HB2	1:A:152:PHE:CA	0.64	2.18	20	1
1:A:111:LEU:C	1:A:111:LEU:HD13	0.64	2.14	19	9
1:A:32:HIS:O	1:A:61:GLU:HB3	0.63	1.93	21	14
1:A:4:TYR:HB2	1:A:100:LEU:HB2	0.63	1.70	17	9
1:A:100:LEU:HD13	1:A:135:LEU:HD13	0.63	1.69	18	2
1:A:147:LEU:HD22	1:A:152:PHE:HB3	0.63	1.71	8	4
1:A:67:GLU:HB3	1:A:111:LEU:HD22	0.63	1.71	2	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:93:THR:HG23	0.63	1.68	17	1
1:A:48:GLN:HE21	1:A:50:GLN:NE2	0.63	1.91	14	7
1:A:54:LEU:HD23	1:A:55:ASN:N	0.63	2.08	6	3
1:A:39:PHE:HB3	1:A:54:LEU:HD21	0.63	1.70	17	4
1:A:129:PHE:HA	1:A:133:PRO:HB3	0.63	1.69	2	20
1:A:28:ILE:HG21	1:A:72:HIS:CE1	0.63	2.29	3	7
1:A:150:ARG:NH2	1:A:152:PHE:HB2	0.63	2.08	11	2
1:A:124:MET:O	1:A:128:LEU:HB2	0.63	1.94	18	18
1:A:82:ARG:HB2	1:A:93:THR:OG1	0.63	1.92	7	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:53:TYR:HB3	0.63	2.09	21	5
1:A:150:ARG:HH21	1:A:152:PHE:HB2	0.63	1.53	11	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:33:ILE:HB	0.63	1.70	2	1
1:A:76:ILE:HD12	1:A:96:LEU:CD1	0.62	2.24	4	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	0.62	1.69	5	7
1:A:48:GLN:HE21	1:A:50:GLN:HE21	0.62	1.35	14	4
1:A:41:ARG:HA	1:A:53:TYR:O	0.62	1.94	18	4
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:HE	0.62	1.52	14	3
1:A:7:ILE:HD13	1:A:21:ALA:HB1	0.62	1.71	6	5
1:A:126:TRP:CE3	1:A:127:PRO:HD3	0.62	2.29	20	1
1:A:152:PHE:HB3	1:A:154:LYS:HG3	0.62	1.71	13	1
1:A:70:LEU:HB2	1:A:98:ILE:HG13	0.62	1.70	14	2
1:A:30:GLU:HB2	1:A:64:LEU:HB2	0.62	1.70	19	1
1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:VAL:N	0.62	2.09	16	12
1:A:5:ILE:HG12	1:A:98:ILE:HD13	0.62	1.71	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HD12	1:A:72:HIS:CD2	0.62	2.29	16	2
1:A:59:ALA:H	1:A:131:ILE:HB	0.62	1.55	9	19
1:A:4:TYR:CZ	1:A:135:LEU:HD12	0.62	2.30	12	5
1:A:100:LEU:HA	1:A:114:PRO:HG3	0.62	1.69	16	1
1:A:48:GLN:HB2	1:A:92:ARG:HA	0.62	1.72	18	5
1:A:28:ILE:HB	1:A:31:SER:OG	0.62	1.95	21	4
1:A:43:PRO:O	1:A:45:LEU:HD22	0.62	1.94	15	2
1:A:135:LEU:HD11	1:A:143:LEU:HB2	0.62	1.71	3	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:N	0.62	2.10	18	2
1:A:64:LEU:HD13	1:A:69:LEU:HA	0.62	1.72	20	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:65:ALA:H	0.62	2.07	21	1
1:A:113:VAL:CG2	1:A:114:PRO:HD2	0.62	2.21	12	15
1:A:111:LEU:HD22	1:A:112:THR:H	0.62	1.54	9	14
1:A:67:GLU:HA	1:A:111:LEU:HD22	0.61	1.72	4	3
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ASP:HB2	0.61	1.94	6	13
1:A:128:LEU:C	1:A:143:LEU:HD21	0.61	2.15	20	10
1:A:126:TRP:CB	1:A:152:PHE:HA	0.61	2.20	20	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:92:ARG:HA	0.61	1.72	21	2
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:NE	0.61	2.10	14	2
1:A:125:LEU:HB2	1:A:150:ARG:NH2	0.61	2.10	2	1
1:A:30:GLU:OE1	1:A:64:LEU:HB3	0.61	1.96	21	1
1:A:45:LEU:N	1:A:50:GLN:HG3	0.61	2.09	12	1
1:A:48:GLN:NE2	1:A:91:PRO:HD2	0.61	2.10	9	9
1:A:70:LEU:HD12	1:A:73:THR:OG1	0.61	1.94	17	3
1:A:111:LEU:HD12	1:A:112:THR:N	0.61	2.11	15	4
1:A:31:SER:CA	1:A:60:LEU:HD11	0.61	2.26	21	1
1:A:9:SER:H	1:A:53:TYR:HB2	0.61	1.54	3	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:113:VAL:HG11	0.61	1.71	1	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:ILE:HG12	0.61	1.70	17	2
1:A:55:ASN:HD21	1:A:155:LEU:HD23	0.60	1.56	10	1
1:A:29:PRO:HB2	1:A:64:LEU:HD23	0.60	1.73	19	1
1:A:13:SER:O	1:A:17:GLN:HG2	0.60	1.96	17	3
1:A:42:THR:HB	1:A:43:PRO:HD2	0.60	1.72	21	1
1:A:92:ARG:NH1	1:A:92:ARG:HB3	0.60	2.10	9	1
1:A:28:ILE:HG23	1:A:29:PRO:HD2	0.60	1.73	16	10
1:A:70:LEU:CB	1:A:111:LEU:HD23	0.60	2.26	14	10
1:A:10:ASN:HD22	1:A:10:ASN:N	0.60	1.95	15	1
1:A:40:TYR:HB2	1:A:55:ASN:HB3	0.60	1.73	13	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:79:GLN:HE21	0.60	1.56	14	3
1:A:146:ILE:O	1:A:150:ARG:HG2	0.60	1.97	19	5
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:HB3	0.60	1.73	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:HG3	0.60	2.12	8	1
1:A:92:ARG:C	1:A:92:ARG:HD3	0.60	2.16	14	1
1:A:5:ILE:HD13	1:A:73:THR:HG21	0.60	1.74	4	4
1:A:133:PRO:HA	1:A:143:LEU:HB3	0.60	1.72	17	5
1:A:70:LEU:HD12	1:A:98:ILE:HB	0.60	1.72	3	3
1:A:125:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD21	0.60	1.71	3	7
1:A:118:MET:CB	1:A:124:MET:HB2	0.60	2.27	20	2
1:A:23:LYS:HB3	1:A:23:LYS:NZ	0.60	2.12	21	3
1:A:92:ARG:HB3	1:A:92:ARG:NH1	0.60	2.10	1	1
1:A:30:GLU:CB	1:A:64:LEU:CB	0.59	2.80	21	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:48:GLN:HG3	0.59	1.73	2	1
1:A:70:LEU:O	1:A:74:GLN:HG2	0.59	1.97	4	16
1:A:10:ASN:HB2	1:A:51:PRO:HG2	0.59	1.73	10	4
1:A:31:SER:HB3	1:A:60:LEU:HD21	0.59	1.74	13	7
1:A:157:LYS:H	1:A:157:LYS:HD3	0.59	1.57	15	2
1:A:48:GLN:HE21	1:A:91:PRO:HD2	0.59	1.58	18	1
1:A:42:THR:C	1:A:53:TYR:HB2	0.59	2.17	15	4
1:A:151:ALA:HB3	1:A:154:LYS:HD3	0.59	1.74	20	1
1:A:46:GLY:N	1:A:50:GLN:HE22	0.59	1.96	8	4
1:A:42:THR:O	1:A:53:TYR:HB3	0.59	1.97	12	7
1:A:50:GLN:OE1	1:A:50:GLN:N	0.59	2.35	10	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:111:LEU:C	0.59	2.18	9	7
1:A:147:LEU:HB3	1:A:152:PHE:HD1	0.59	1.58	8	1
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:H	0.59	1.55	17	1
1:A:55:ASN:ND2	1:A:123:PHE:HB2	0.59	2.13	6	2
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:HD12	0.59	2.12	10	4
1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:PRO:CD	0.59	2.25	3	1
1:A:32:HIS:HB3	1:A:61:GLU:O	0.59	1.97	21	1
1:A:20:ALA:HB3	1:A:80:GLN:NE2	0.59	2.13	3	6
1:A:48:GLN:HE22	1:A:50:GLN:HE21	0.59	1.38	8	1
1:A:58:VAL:N	1:A:131:ILE:HG21	0.59	2.13	11	15
1:A:108:THR:OG1	1:A:111:LEU:HD12	0.59	1.97	13	5
1:A:92:ARG:CD	1:A:93:THR:HG23	0.58	2.27	11	3
1:A:40:TYR:HB3	1:A:155:LEU:HB3	0.58	1.75	14	4
1:A:118:MET:HB2	1:A:124:MET:HB3	0.58	1.75	5	3
1:A:30:GLU:HB2	1:A:64:LEU:HD23	0.58	1.75	12	9
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:HE21	0.58	1.96	21	11
1:A:69:LEU:HD12	1:A:72:HIS:NE2	0.58	2.13	16	1
1:A:55:ASN:ND2	1:A:155:LEU:HD13	0.58	2.12	3	1
1:A:10:ASN:CB	1:A:51:PRO:HD2	0.58	2.28	14	1
1:A:136:VAL:HA	1:A:141:GLU:O	0.58	1.98	4	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1:THR:HG23	1:A:102:GLY:HA3	0.58	1.73	9	2
1:A:46:GLY:HA3	1:A:90:GLY:N	0.58	2.14	7	4
1:A:150:ARG:HD3	1:A:151:ALA:H	0.58	1.58	11	1
1:A:48:GLN:HG2	1:A:92:ARG:N	0.58	2.12	11	2
1:A:51:PRO:HG2	1:A:53:TYR:CE2	0.58	2.33	6	2
1:A:9:SER:CB	1:A:14:PRO:HA	0.58	2.28	14	12
1:A:80:GLN:OE1	1:A:94:LEU:HD13	0.58	1.97	18	1
1:A:69:LEU:HD22	1:A:72:HIS:CE1	0.58	2.33	8	3
1:A:44:PRO:CD	1:A:53:TYR:HB3	0.58	2.26	19	3
1:A:123:PHE:HA	1:A:126:TRP:CZ3	0.58	2.33	20	1
1:A:126:TRP:CZ2	1:A:155:LEU:HB2	0.58	2.34	20	1
1:A:77:GLU:HG3	1:A:94:LEU:HB3	0.58	1.76	14	1
1:A:136:VAL:HB	1:A:142:MET:HG2	0.58	1.74	6	9
1:A:44:PRO:O	1:A:45:LEU:HB2	0.58	1.98	11	1
1:A:152:PHE:HB3	1:A:154:LYS:NZ	0.58	2.14	5	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:96:LEU:O	0.58	1.98	8	1
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:HG22	0.58	1.98	12	3
1:A:105:VAL:HA	1:A:113:VAL:HG11	0.58	1.76	7	3
1:A:10:ASN:ND2	1:A:44:PRO:HB3	0.57	2.13	4	1
1:A:65:ALA:HB3	1:A:66:PRO:HD3	0.57	1.75	19	1
1:A:146:ILE:HG22	1:A:150:ARG:HD2	0.57	1.74	11	1
1:A:77:GLU:HA	1:A:94:LEU:HD22	0.57	1.75	10	1
1:A:70:LEU:O	1:A:74:GLN:HB3	0.57	1.98	8	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:ARG:HB2	0.57	1.74	19	2
1:A:154:LYS:HB2	1:A:155:LEU:HD12	0.57	1.74	14	6
1:A:129:PHE:N	1:A:143:LEU:HD11	0.57	2.13	11	1
1:A:66:PRO:O	1:A:111:LEU:HG	0.57	1.99	19	4
1:A:147:LEU:HB3	1:A:152:PHE:HD2	0.57	1.59	19	2
1:A:7:ILE:HG13	1:A:96:LEU:HB3	0.57	1.77	9	2
1:A:118:MET:HB2	1:A:124:MET:HB2	0.57	1.75	12	5
1:A:100:LEU:HD12	1:A:124:MET:HE1	0.57	1.76	18	1
1:A:82:ARG:HB2	1:A:93:THR:HB	0.57	1.76	21	1
1:A:11:LEU:C	1:A:93:THR:HG22	0.57	2.19	7	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:53:TYR:CD2	0.57	2.34	6	2
1:A:36:VAL:HA	1:A:58:VAL:HG12	0.57	1.77	4	1
1:A:113:VAL:O	1:A:114:PRO:C	0.57	2.43	13	21
1:A:3:ALA:O	1:A:59:ALA:HA	0.57	2.00	8	4
1:A:55:ASN:HD22	1:A:127:PRO:HG2	0.57	1.60	17	1
1:A:122:GLY:O	1:A:127:PRO:HD3	0.57	2.00	20	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:51:PRO:HD2	0.57	1.76	21	3
1:A:30:GLU:CB	1:A:64:LEU:HB3	0.57	2.30	21	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	1:A:97:ASP:HA	0.57	2.25	12	1
1:A:67:GLU:C	1:A:111:LEU:CD1	0.57	2.74	17	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:64:LEU:HB3	0.56	2.30	21	1
1:A:42:THR:HB	1:A:155:LEU:HD22	0.56	1.77	11	4
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:HG23	0.56	1.77	11	2
1:A:64:LEU:HD13	1:A:65:ALA:H	0.56	1.57	3	4
1:A:22:LEU:HD22	1:A:36:VAL:HG21	0.56	1.75	6	2
1:A:72:HIS:O	1:A:75:ARG:HG2	0.56	2.00	10	3
1:A:46:GLY:O	1:A:50:GLN:NE2	0.56	2.37	5	12
1:A:69:LEU:HD13	1:A:69:LEU:C	0.56	2.21	19	7
1:A:31:SER:OG	1:A:60:LEU:HD11	0.56	2.01	8	3
1:A:145:GLN:NE2	1:A:146:ILE:N	0.56	2.53	20	9
1:A:8:GLY:O	1:A:94:LEU:HA	0.56	2.00	8	9
1:A:40:TYR:O	1:A:54:LEU:HD12	0.56	2.01	11	3
1:A:82:ARG:HD2	1:A:92:ARG:NH2	0.56	2.15	18	2
1:A:72:HIS:CE1	1:A:73:THR:HG23	0.56	2.35	8	1
1:A:50:GLN:HB3	1:A:53:TYR:CE2	0.56	2.36	9	1
1:A:126:TRP:N	1:A:147:LEU:HD21	0.56	2.15	20	1
1:A:7:ILE:HD12	1:A:7:ILE:N	0.56	2.15	2	2
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:TYR:HE1	0.56	1.61	12	2
1:A:100:LEU:HD22	1:A:135:LEU:HD21	0.56	1.76	17	1
1:A:30:GLU:CD	1:A:64:LEU:HB3	0.56	2.21	21	1
1:A:126:TRP:HD1	1:A:155:LEU:HB2	0.56	1.60	19	6
1:A:12:ALA:HB3	1:A:17:GLN:NE2	0.56	2.16	5	3
1:A:48:GLN:OE1	1:A:91:PRO:HB2	0.56	2.01	10	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:92:ARG:N	0.56	2.15	9	3
1:A:55:ASN:ND2	1:A:127:PRO:HG2	0.56	2.16	19	2
1:A:98:ILE:HD12	1:A:111:LEU:HD23	0.56	1.77	12	1
1:A:121:ARG:HH11	1:A:121:ARG:HA	0.56	1.61	6	1
1:A:143:LEU:HD13	1:A:143:LEU:O	0.56	2.00	7	4
1:A:147:LEU:HD13	1:A:152:PHE:CD2	0.56	2.35	18	2
1:A:133:PRO:CA	1:A:143:LEU:HD13	0.56	2.30	13	2
1:A:42:THR:N	1:A:53:TYR:O	0.56	2.38	9	2
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:HB2	0.56	2.16	1	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:GLU:N	0.56	2.15	17	1
1:A:106:ILE:O	1:A:113:VAL:HG13	0.56	2.00	14	2
1:A:123:PHE:HA	1:A:155:LEU:CD2	0.56	2.30	14	1
1:A:7:ILE:HG12	1:A:21:ALA:HB1	0.56	1.77	2	2
1:A:30:GLU:HB2	1:A:64:LEU:HB3	0.56	1.78	21	1
1:A:143:LEU:C	1:A:143:LEU:HD23	0.56	2.21	11	2
1:A:57:ALA:CB	1:A:128:LEU:HD12	0.56	2.30	15	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD11	1:A:121:ARG:NH2	0.56	2.16	9	1
1:A:70:LEU:H	1:A:111:LEU:HD11	0.56	1.61	17	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:OG1	0.55	2.01	19	4
1:A:57:ALA:C	1:A:131:ILE:HG21	0.55	2.22	3	16
1:A:9:SER:OG	1:A:14:PRO:HA	0.55	2.02	21	8
1:A:75:ARG:O	1:A:79:GLN:HG3	0.55	2.01	15	12
1:A:65:ALA:CA	1:A:69:LEU:HB2	0.55	2.30	19	1
1:A:123:PHE:HD1	1:A:123:PHE:N	0.55	1.99	11	1
1:A:43:PRO:HA	1:A:53:TYR:CD2	0.55	2.36	9	2
1:A:70:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HA	0.55	1.77	9	3
1:A:113:VAL:HB	1:A:114:PRO:CD	0.55	2.28	4	5
1:A:123:PHE:CD1	1:A:124:MET:HG3	0.55	2.37	17	4
1:A:45:LEU:HD22	1:A:121:ARG:NH2	0.55	2.16	13	2
1:A:49:ASP:OD2	1:A:51:PRO:HG3	0.55	2.01	13	2
1:A:42:THR:OG1	1:A:43:PRO:HD2	0.55	2.02	2	8
1:A:66:PRO:HA	1:A:101:PHE:CE2	0.55	2.35	21	2
1:A:34:LEU:HD22	1:A:35:THR:HG23	0.55	1.76	10	4
1:A:7:ILE:N	1:A:7:ILE:HD12	0.55	2.16	8	4
1:A:48:GLN:CB	1:A:92:ARG:HA	0.55	2.31	10	5
1:A:47:PRO:HD3	1:A:90:GLY:H	0.55	1.61	20	2
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:N	0.55	2.71	11	1
1:A:146:ILE:O	1:A:149:THR:HG22	0.55	2.00	5	1
1:A:133:PRO:HA	1:A:143:LEU:HD23	0.55	1.77	20	5
1:A:78:LEU:HD23	1:A:82:ARG:HB3	0.55	1.77	18	1
1:A:124:MET:HA	1:A:124:MET:CE	0.55	2.32	15	1
1:A:100:LEU:HD12	1:A:128:LEU:HD23	0.55	1.77	10	4
1:A:14:PRO:HB3	1:A:54:LEU:HB3	0.55	1.78	9	2
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:N	0.55	2.16	5	1
1:A:106:ILE:N	1:A:113:VAL:HG21	0.55	2.16	9	5
1:A:25:LEU:HD12	1:A:26:GLY:N	0.55	2.17	2	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:93:THR:HG23	0.55	1.78	20	3
1:A:33:ILE:HA	1:A:60:LEU:HA	0.55	1.79	9	4
1:A:67:GLU:HA	1:A:111:LEU:CG	0.55	2.30	14	4
1:A:2:VAL:HB	1:A:4:TYR:HE1	0.55	1.61	16	5
1:A:42:THR:HG21	1:A:155:LEU:HD12	0.55	1.77	8	1
1:A:155:LEU:HD12	1:A:155:LEU:N	0.55	2.16	9	2
1:A:10:ASN:HD21	1:A:44:PRO:HB3	0.54	1.60	4	2
1:A:104:GLU:OE2	1:A:113:VAL:HG23	0.54	2.02	21	2
1:A:69:LEU:HD23	1:A:70:LEU:N	0.54	2.18	21	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:94:LEU:HG	0.54	1.78	16	2
1:A:55:ASN:HD22	1:A:56:ALA:N	0.54	2.01	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:HB2	0.54	2.01	14	1
1:A:118:MET:O	1:A:125:LEU:HG	0.54	2.02	13	13
1:A:155:LEU:HD22	1:A:155:LEU:N	0.54	2.17	8	4
1:A:120:ASN:HA	1:A:150:ARG:HH11	0.54	1.63	8	1
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:OG1	0.54	2.01	17	3
1:A:11:LEU:HD21	1:A:92:ARG:O	0.54	2.02	2	1
1:A:126:TRP:CD2	1:A:127:PRO:HD3	0.54	2.38	20	1
1:A:31:SER:HA	1:A:60:LEU:HD11	0.54	1.78	21	1
1:A:48:GLN:HG2	1:A:50:GLN:H	0.54	1.62	19	1
1:A:92:ARG:O	1:A:92:ARG:HG2	0.54	2.02	16	1
1:A:48:GLN:CD	1:A:91:PRO:HD2	0.54	2.23	4	4
1:A:4:TYR:OH	1:A:135:LEU:HD23	0.54	2.02	7	5
1:A:151:ALA:O	1:A:152:PHE:C	0.54	2.46	12	1
1:A:17:GLN:OE1	1:A:94:LEU:HD13	0.54	2.03	16	1
1:A:33:ILE:N	1:A:60:LEU:HD12	0.54	2.18	9	9
1:A:29:PRO:O	1:A:30:GLU:HB2	0.54	2.01	21	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:51:PRO:HG2	0.54	1.78	8	2
1:A:155:LEU:HD23	1:A:155:LEU:H	0.54	1.63	20	1
1:A:40:TYR:O	1:A:54:LEU:HA	0.54	2.02	8	1
1:A:121:ARG:HA	1:A:121:ARG:CZ	0.54	2.32	17	2
1:A:10:ASN:HB2	1:A:51:PRO:CD	0.54	2.31	9	1
1:A:83:VAL:N	1:A:93:THR:HG21	0.54	2.18	2	2
1:A:42:THR:HB	1:A:155:LEU:HD23	0.54	1.78	4	2
1:A:45:LEU:O	1:A:90:GLY:HA2	0.54	2.02	4	3
1:A:69:LEU:HD12	1:A:98:ILE:HG12	0.54	1.78	19	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:111:LEU:HB2	0.54	1.80	20	4
1:A:128:LEU:O	1:A:131:ILE:HG13	0.54	2.03	21	2
1:A:82:ARG:C	1:A:82:ARG:HD3	0.54	2.22	7	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:98:ILE:N	0.54	2.18	17	3
1:A:5:ILE:HG21	1:A:96:LEU:HB2	0.54	1.79	16	2
1:A:82:ARG:NH1	1:A:94:LEU:HB3	0.54	2.18	12	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:97:ASP:CA	0.54	2.29	16	3
1:A:11:LEU:O	1:A:12:ALA:CB	0.53	2.56	15	1
1:A:126:TRP:CH2	1:A:155:LEU:HB2	0.53	2.37	20	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:59:ALA:HB1	0.53	1.79	13	1
1:A:65:ALA:CA	1:A:69:LEU:CB	0.53	2.85	19	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:112:THR:N	0.53	2.18	7	5
1:A:105:VAL:C	1:A:106:ILE:HD12	0.53	2.23	3	4
1:A:68:GLU:HG2	1:A:72:HIS:CD2	0.53	2.38	20	11
1:A:4:TYR:CD1	1:A:4:TYR:N	0.53	2.76	14	6
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:CB	0.53	2.56	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:VAL:HG11	1:A:59:ALA:HB1	0.53	1.79	16	6
1:A:76:ILE:O	1:A:80:GLN:HB2	0.53	2.03	19	2
1:A:69:LEU:O	1:A:73:THR:HG23	0.53	2.03	13	6
1:A:33:ILE:HG13	1:A:60:LEU:HD13	0.53	1.79	18	9
1:A:143:LEU:O	1:A:143:LEU:HD23	0.53	2.04	13	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:69:LEU:N	0.53	2.17	17	6
1:A:126:TRP:CZ3	1:A:155:LEU:HD12	0.53	2.39	20	1
1:A:64:LEU:HD23	1:A:65:ALA:N	0.53	2.18	20	1
1:A:50:GLN:N	1:A:51:PRO:CD	0.53	2.70	17	8
1:A:108:THR:HB	1:A:111:LEU:HB3	0.53	1.80	16	4
1:A:4:TYR:HB2	1:A:100:LEU:CB	0.53	2.34	6	13
1:A:115:HIS:O	1:A:117:ASP:N	0.53	2.42	16	14
1:A:122:GLY:C	1:A:155:LEU:HD21	0.53	2.24	5	3
1:A:125:LEU:HD12	1:A:150:ARG:HG3	0.53	1.80	8	1
1:A:48:GLN:OE1	1:A:51:PRO:HD2	0.53	2.04	3	1
1:A:99:MET:O	1:A:114:PRO:HA	0.53	2.04	4	13
1:A:41:ARG:HG3	1:A:52:ASP:O	0.53	2.03	19	2
1:A:119:LYS:HB3	1:A:146:ILE:HD13	0.53	1.79	11	1
1:A:6:ALA:HB2	1:A:124:MET:SD	0.53	2.43	15	1
1:A:7:ILE:HD13	1:A:96:LEU:HB3	0.53	1.79	15	1
1:A:77:GLU:HB2	1:A:96:LEU:HD12	0.53	1.81	8	1
1:A:96:LEU:HD23	1:A:96:LEU:N	0.53	2.19	1	8
1:A:4:TYR:CE2	1:A:132:ALA:HB3	0.53	2.39	17	11
1:A:102:GLY:O	1:A:135:LEU:HD21	0.53	2.02	21	2
1:A:49:ASP:C	1:A:50:GLN:HG2	0.53	2.23	11	2
1:A:92:ARG:HD2	1:A:93:THR:N	0.53	2.18	17	2
1:A:121:ARG:CZ	1:A:121:ARG:HA	0.53	2.34	1	1
1:A:29:PRO:HB2	1:A:30:GLU:OE1	0.53	2.04	18	3
1:A:18:VAL:O	1:A:22:LEU:HG	0.53	2.03	5	9
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:N	0.53	2.19	5	3
1:A:9:SER:HB2	1:A:17:GLN:OE1	0.53	2.04	10	1
1:A:123:PHE:O	1:A:127:PRO:HG2	0.52	2.04	2	10
1:A:30:GLU:HB2	1:A:64:LEU:CB	0.52	2.34	21	2
1:A:147:LEU:HB3	1:A:152:PHE:CD1	0.52	2.39	14	3
1:A:77:GLU:O	1:A:82:ARG:HG3	0.52	2.03	21	1
1:A:144:ARG:C	1:A:144:ARG:HD2	0.52	2.24	2	2
1:A:23:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HZ2	0.52	1.64	9	2
1:A:67:GLU:CA	1:A:111:LEU:HG	0.52	2.33	14	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:68:GLU:HB3	0.52	1.80	4	9
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:H	0.52	2.02	17	4
1:A:2:VAL:CG2	1:A:59:ALA:HB1	0.52	2.34	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:HE22	1:A:50:GLN:H	0.52	1.48	7	3
1:A:65:ALA:HA	1:A:69:LEU:H	0.52	1.64	19	1
1:A:41:ARG:HG2	1:A:53:TYR:CD2	0.52	2.39	11	3
1:A:39:PHE:HD2	1:A:54:LEU:HD21	0.52	1.64	8	1
1:A:48:GLN:CD	1:A:50:GLN:NE2	0.52	2.63	6	1
1:A:118:MET:HB3	1:A:124:MET:SD	0.52	2.44	20	5
1:A:59:ALA:HB2	1:A:131:ILE:HB	0.52	1.81	1	1
1:A:116:TYR:HA	1:A:119:LYS:NZ	0.52	2.19	19	1
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:HD2	0.52	1.82	7	2
1:A:55:ASN:HB3	1:A:123:PHE:CE1	0.52	2.40	7	1
1:A:68:GLU:O	1:A:72:HIS:N	0.52	2.43	18	2
1:A:10:ASN:ND2	1:A:51:PRO:HD2	0.52	2.19	17	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:60:LEU:HD13	0.52	1.80	9	3
1:A:116:TYR:N	1:A:116:TYR:CD1	0.52	2.78	17	4
1:A:147:LEU:O	1:A:151:ALA:N	0.52	2.43	10	2
1:A:76:ILE:HA	1:A:79:GLN:CG	0.52	2.34	19	1
1:A:150:ARG:HB3	1:A:152:PHE:CD1	0.52	2.39	5	2
1:A:80:GLN:HB3	1:A:82:ARG:NE	0.52	2.19	17	1
1:A:31:SER:OG	1:A:60:LEU:HD21	0.51	2.05	4	2
1:A:70:LEU:C	1:A:70:LEU:HD23	0.51	2.26	6	11
1:A:40:TYR:HB2	1:A:55:ASN:HD21	0.51	1.66	20	1
1:A:152:PHE:C	1:A:154:LYS:H	0.51	2.09	9	10
1:A:126:TRP:O	1:A:129:PHE:HB3	0.51	2.04	8	7
1:A:17:GLN:HA	1:A:80:GLN:NE2	0.51	2.20	16	6
1:A:42:THR:C	1:A:53:TYR:HB3	0.51	2.25	9	2
1:A:101:PHE:CE1	1:A:104:GLU:HG2	0.51	2.39	16	1
1:A:100:LEU:HA	1:A:114:PRO:HD3	0.51	1.82	4	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:17:GLN:HB2	0.51	1.82	4	2
1:A:6:ALA:O	1:A:96:LEU:HA	0.51	2.04	5	7
1:A:129:PHE:HB2	1:A:143:LEU:HD11	0.51	1.81	18	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:119:LYS:NZ	0.51	2.21	4	1
1:A:157:LYS:N	1:A:157:LYS:CD	0.51	2.73	15	2
1:A:145:GLN:HE21	1:A:146:ILE:N	0.51	2.02	20	4
1:A:6:ALA:HB1	1:A:55:ASN:HD21	0.51	1.63	11	2
1:A:47:PRO:HD2	1:A:90:GLY:CA	0.51	2.34	14	3
1:A:4:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HD12	0.51	2.40	4	2
1:A:40:TYR:CG	1:A:126:TRP:HZ2	0.51	2.23	20	1
1:A:121:ARG:HD3	1:A:122:GLY:H	0.51	1.66	13	2
1:A:133:PRO:CB	1:A:143:LEU:HD22	0.51	2.35	11	2
1:A:123:PHE:HA	1:A:155:LEU:HG	0.51	1.81	8	2
1:A:44:PRO:C	1:A:45:LEU:HD12	0.51	2.25	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:HG2	1:A:79:GLN:HE21	0.51	1.64	4	3
1:A:46:GLY:C	1:A:50:GLN:NE2	0.51	2.63	10	5
1:A:123:PHE:CD1	1:A:124:MET:HG2	0.51	2.41	5	3
1:A:42:THR:CB	1:A:155:LEU:HD12	0.51	2.36	17	3
1:A:69:LEU:HG	1:A:72:HIS:NE2	0.51	2.21	21	1
1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:PRO:HD2	0.51	1.82	16	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:155:LEU:CD2	0.51	2.33	21	1
1:A:46:GLY:N	1:A:50:GLN:NE2	0.51	2.58	8	2
1:A:54:LEU:HD12	1:A:158:TRP:HB2	0.51	1.83	10	2
1:A:131:ILE:O	1:A:132:ALA:HB2	0.51	2.06	3	19
1:A:68:GLU:HG3	1:A:72:HIS:CD2	0.51	2.41	19	1
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:HD23	0.51	2.21	20	1
1:A:77:GLU:HB3	1:A:82:ARG:CZ	0.51	2.36	21	1
1:A:43:PRO:O	1:A:45:LEU:HD13	0.51	2.05	11	1
1:A:103:ASN:O	1:A:138:PRO:HG3	0.51	2.04	10	4
1:A:7:ILE:HG23	1:A:94:LEU:CD1	0.51	2.36	13	3
1:A:128:LEU:HG	1:A:131:ILE:HD11	0.51	1.82	1	1
1:A:11:LEU:O	1:A:11:LEU:HD22	0.51	2.06	3	1
1:A:44:PRO:HD3	1:A:53:TYR:CD1	0.51	2.41	11	2
1:A:92:ARG:HD3	1:A:92:ARG:C	0.51	2.26	20	1
1:A:30:GLU:C	1:A:62:THR:OG1	0.51	2.49	21	1
1:A:69:LEU:C	1:A:69:LEU:HD13	0.51	2.25	3	4
1:A:10:ASN:OD1	1:A:53:TYR:HA	0.51	2.06	14	1
1:A:47:PRO:HD2	1:A:90:GLY:N	0.51	2.20	10	1
1:A:121:ARG:HE	1:A:121:ARG:HA	0.51	1.66	7	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:155:LEU:HD12	0.51	2.06	5	2
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:LEU:HD22	0.51	1.83	3	4
1:A:94:LEU:H	1:A:94:LEU:HD23	0.51	1.64	16	1
1:A:104:GLU:O	1:A:113:VAL:HG21	0.50	2.05	3	4
1:A:152:PHE:HB2	1:A:154:LYS:HG3	0.50	1.82	10	2
1:A:9:SER:OG	1:A:17:GLN:HB2	0.50	2.06	17	2
1:A:96:LEU:N	1:A:96:LEU:HD23	0.50	2.20	19	3
1:A:35:THR:O	1:A:58:VAL:HG23	0.50	2.07	12	7
1:A:129:PHE:HB2	1:A:143:LEU:HD21	0.50	1.82	11	1
1:A:10:ASN:CG	1:A:51:PRO:HD2	0.50	2.27	13	2
1:A:34:LEU:CD2	1:A:35:THR:HG23	0.50	2.36	10	4
1:A:2:VAL:HG13	1:A:59:ALA:HB1	0.50	1.82	19	2
1:A:76:ILE:HA	1:A:79:GLN:HG2	0.50	1.83	19	1
1:A:51:PRO:O	1:A:52:ASP:C	0.50	2.49	20	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:60:LEU:HD22	0.50	1.83	8	1
1:A:20:ALA:HA	1:A:23:LYS:HG2	0.50	1.84	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:HE22	1:A:90:GLY:HA3	0.50	1.66	14	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:121:ARG:HG2	0.50	2.21	15	1
1:A:100:LEU:HD13	1:A:135:LEU:HD23	0.50	1.84	17	1
1:A:99:MET:O	1:A:118:MET:HE1	0.50	2.07	10	1
1:A:31:SER:HA	1:A:62:THR:HB	0.50	1.83	20	6
1:A:64:LEU:HD22	1:A:69:LEU:N	0.50	2.21	20	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:111:LEU:HD22	0.50	2.37	2	2
1:A:152:PHE:N	1:A:152:PHE:CD1	0.50	2.79	12	2
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:HD23	0.50	2.26	14	4
1:A:142:MET:O	1:A:146:ILE:HG13	0.50	2.07	13	16
1:A:49:ASP:HB3	1:A:51:PRO:HD3	0.50	1.83	3	2
1:A:96:LEU:HD22	1:A:96:LEU:C	0.50	2.27	8	1
1:A:44:PRO:HD3	1:A:53:TYR:CB	0.50	2.28	19	3
1:A:121:ARG:CD	1:A:123:PHE:HB3	0.50	2.36	20	1
1:A:72:HIS:ND1	1:A:73:THR:N	0.50	2.59	13	5
1:A:106:ILE:HD12	1:A:106:ILE:O	0.50	2.06	8	1
1:A:157:LYS:HB2	1:A:157:LYS:NZ	0.50	2.21	8	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:79:GLN:NE2	0.50	2.22	14	1
1:A:45:LEU:O	1:A:90:GLY:HA3	0.50	2.07	6	1
1:A:69:LEU:HD23	1:A:98:ILE:HD11	0.50	1.82	6	1
1:A:129:PHE:O	1:A:133:PRO:HG3	0.50	2.07	17	19
1:A:73:THR:HB	1:A:96:LEU:CD1	0.50	2.37	12	4
1:A:70:LEU:CB	1:A:111:LEU:HG	0.50	2.34	17	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:C	0.50	2.27	17	1
1:A:150:ARG:CZ	1:A:152:PHE:HB2	0.50	2.36	2	1
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:CD	0.50	2.37	17	2
1:A:42:THR:HG21	1:A:55:ASN:CB	0.50	2.36	11	1
1:A:31:SER:HB2	1:A:60:LEU:HD21	0.50	1.84	9	4
1:A:34:LEU:HG	1:A:61:GLU:HB2	0.50	1.82	18	1
1:A:7:ILE:HG12	1:A:96:LEU:HB3	0.50	1.83	6	1
1:A:24:ALA:O	1:A:28:ILE:HG13	0.49	2.06	11	7
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ASP:HB3	0.49	2.07	19	2
1:A:135:LEU:CD1	1:A:143:LEU:HB2	0.49	2.37	3	1
1:A:48:GLN:NE2	1:A:50:GLN:OE1	0.49	2.45	10	1
1:A:48:GLN:HB2	1:A:92:ARG:CA	0.49	2.37	10	1
1:A:35:THR:OG1	1:A:59:ALA:HB3	0.49	2.06	21	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:60:LEU:HD22	0.49	1.85	12	2
1:A:58:VAL:C	1:A:131:ILE:HD12	0.49	2.28	8	3
1:A:30:GLU:O	1:A:64:LEU:HB2	0.49	2.06	12	1
1:A:70:LEU:HD22	1:A:98:ILE:H	0.49	1.65	12	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:93:THR:CG2	0.49	2.37	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LEU:HD12	1:A:65:ALA:H	0.49	1.68	21	1
1:A:82:ARG:CZ	1:A:94:LEU:HB3	0.49	2.37	12	1
1:A:44:PRO:HB2	1:A:91:PRO:CG	0.49	2.37	9	1
1:A:10:ASN:HB2	1:A:51:PRO:HB2	0.49	1.83	2	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:55:ASN:HB3	0.49	1.85	11	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:96:LEU:H	0.49	2.19	12	3
1:A:8:GLY:HA3	1:A:53:TYR:CE1	0.49	2.42	12	1
1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:HD1	0.49	2.06	14	3
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:VAL:H	0.49	1.64	21	7
1:A:47:PRO:O	1:A:48:GLN:CB	0.49	2.60	16	2
1:A:4:TYR:CZ	1:A:135:LEU:HD22	0.49	2.42	17	1
1:A:55:ASN:HB2	1:A:123:PHE:CE1	0.49	2.42	19	1
1:A:69:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CZ	0.49	2.42	11	1
1:A:152:PHE:HB3	1:A:154:LYS:HZ3	0.49	1.67	5	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:91:PRO:HB2	0.49	2.23	9	1
1:A:124:MET:O	1:A:128:LEU:HD13	0.49	2.06	1	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:110:ARG:HD3	0.49	2.22	17	1
1:A:92:ARG:CD	1:A:93:THR:HG22	0.49	2.35	2	1
1:A:24:ALA:HB3	1:A:76:ILE:HD13	0.49	1.85	19	1
1:A:70:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD23	0.49	1.83	12	1
1:A:12:ALA:HB3	1:A:17:GLN:OE1	0.49	2.06	15	1
1:A:48:GLN:OE1	1:A:90:GLY:HA3	0.49	2.08	9	1
1:A:126:TRP:CD1	1:A:155:LEU:HD13	0.49	2.43	14	3
1:A:136:VAL:HG23	1:A:141:GLU:O	0.49	2.08	20	3
1:A:149:THR:HG22	1:A:150:ARG:NH2	0.49	2.23	16	1
1:A:6:ALA:HB2	1:A:99:MET:CE	0.49	2.37	4	2
1:A:151:ALA:HB3	1:A:154:LYS:CD	0.49	2.37	20	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:92:ARG:CA	0.49	2.37	21	2
1:A:118:MET:HB2	1:A:124:MET:CG	0.49	2.37	18	1
1:A:123:PHE:N	1:A:123:PHE:CD1	0.49	2.81	18	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:155:LEU:HD12	0.49	1.83	18	1
1:A:44:PRO:O	1:A:45:LEU:HB3	0.49	2.08	18	1
1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CD1	0.49	2.80	13	6
1:A:44:PRO:HB2	1:A:50:GLN:HG3	0.49	1.84	16	1
1:A:48:GLN:CG	1:A:92:ARG:H	0.49	2.21	9	1
1:A:44:PRO:HB2	1:A:48:GLN:OE1	0.49	2.07	6	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:76:ILE:HG21	0.48	1.84	18	4
1:A:139:ASP:HB3	1:A:141:GLU:OE1	0.48	2.07	19	2
1:A:151:ALA:HB3	1:A:154:LYS:CG	0.48	2.38	20	1
1:A:17:GLN:OE1	1:A:93:THR:HB	0.48	2.08	5	1
1:A:121:ARG:HA	1:A:121:ARG:HE	0.48	1.68	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ASP:HB2	1:A:158:TRP:HZ3	0.48	1.68	4	2
1:A:4:TYR:HE2	1:A:132:ALA:O	0.48	1.91	9	7
1:A:70:LEU:HD23	1:A:70:LEU:C	0.48	2.28	14	4
1:A:10:ASN:HA	1:A:53:TYR:CD1	0.48	2.42	7	2
1:A:9:SER:CB	1:A:17:GLN:HB2	0.48	2.38	9	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:ASN:N	0.48	2.23	4	2
1:A:117:ASP:O	1:A:121:ARG:HB3	0.48	2.07	20	1
1:A:67:GLU:O	1:A:111:LEU:HB2	0.48	2.09	17	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:51:PRO:CD	0.48	2.39	19	1
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ASP:CB	0.48	2.61	12	6
1:A:118:MET:HG2	1:A:119:LYS:N	0.48	2.23	20	3
1:A:47:PRO:O	1:A:49:ASP:N	0.48	2.45	9	4
1:A:10:ASN:OD1	1:A:44:PRO:HG2	0.48	2.09	15	1
1:A:48:GLN:CG	1:A:49:ASP:N	0.48	2.76	8	1
1:A:55:ASN:HD22	1:A:56:ALA:H	0.48	1.51	13	1
1:A:108:THR:CB	1:A:111:LEU:HB3	0.48	2.38	16	1
1:A:10:ASN:HB2	1:A:51:PRO:HD2	0.48	1.85	14	2
1:A:135:LEU:O	1:A:142:MET:HB3	0.48	2.09	3	1
1:A:45:LEU:CA	1:A:50:GLN:HG3	0.48	2.39	6	1
1:A:4:TYR:HB3	1:A:128:LEU:CD2	0.48	2.33	21	5
1:A:154:LYS:CB	1:A:155:LEU:HD22	0.48	2.38	18	2
1:A:4:TYR:HE2	1:A:132:ALA:HB3	0.48	1.68	3	1
1:A:29:PRO:O	1:A:30:GLU:CB	0.48	2.61	21	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:92:ARG:O	0.48	2.08	18	2
1:A:66:PRO:HB3	1:A:101:PHE:CD2	0.48	2.43	14	5
1:A:70:LEU:HD12	1:A:98:ILE:N	0.48	2.22	7	3
1:A:68:GLU:O	1:A:72:HIS:HB3	0.48	2.09	18	1
1:A:98:ILE:HD12	1:A:111:LEU:CD2	0.48	2.38	12	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:155:LEU:HB3	0.48	1.84	8	1
1:A:72:HIS:HD1	1:A:73:THR:N	0.48	2.07	13	1
1:A:123:PHE:HB2	1:A:124:MET:SD	0.48	2.49	9	1
1:A:92:ARG:HG2	1:A:92:ARG:O	0.48	2.07	2	2
1:A:52:ASP:C	1:A:53:TYR:CG	0.48	2.87	11	4
1:A:135:LEU:O	1:A:142:MET:HA	0.48	2.09	5	4
1:A:77:GLU:OE2	1:A:95:ASP:HA	0.48	2.09	8	3
1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:PRO:CG	0.48	2.38	16	1
1:A:123:PHE:HD1	1:A:124:MET:HG3	0.48	1.68	17	2
1:A:92:ARG:HD3	1:A:92:ARG:O	0.48	2.09	14	1
1:A:66:PRO:HG3	1:A:101:PHE:CE2	0.48	2.44	6	1
1:A:122:GLY:C	1:A:155:LEU:HD11	0.48	2.28	9	4
1:A:48:GLN:HG2	1:A:92:ARG:HA	0.48	1.85	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ALA:HB1	1:A:131:ILE:HD13	0.48	1.86	3	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:69:LEU:HB2	0.48	2.39	21	1
1:A:106:ILE:N	1:A:106:ILE:HD12	0.48	2.24	18	2
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:CB	0.48	2.38	18	1
1:A:149:THR:HG22	1:A:150:ARG:HH21	0.48	1.68	8	2
1:A:13:SER:HB2	1:A:16:GLU:HB2	0.47	1.86	11	2
1:A:35:THR:OG1	1:A:36:VAL:N	0.47	2.47	11	1
1:A:52:ASP:O	1:A:53:TYR:HB2	0.47	2.09	18	1
1:A:47:PRO:O	1:A:50:GLN:NE2	0.47	2.46	12	1
1:A:44:PRO:HB2	1:A:91:PRO:HG3	0.47	1.85	9	1
1:A:82:ARG:HH21	1:A:93:THR:HG22	0.47	1.69	12	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:53:TYR:HB2	0.47	2.24	1	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:98:ILE:HG12	0.47	1.84	17	1
1:A:96:LEU:H	1:A:96:LEU:CD2	0.47	2.22	17	2
1:A:24:ALA:O	1:A:28:ILE:HG12	0.47	2.10	7	5
1:A:52:ASP:O	1:A:53:TYR:O	0.47	2.31	11	1
1:A:45:LEU:H	1:A:50:GLN:HG3	0.47	1.67	12	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:HB	0.47	2.08	15	4
1:A:48:GLN:NE2	1:A:91:PRO:CD	0.47	2.78	8	2
1:A:106:ILE:N	1:A:113:VAL:HG11	0.47	2.24	16	1
1:A:9:SER:O	1:A:14:PRO:HB3	0.47	2.08	16	1
1:A:42:THR:O	1:A:53:TYR:CB	0.47	2.61	11	2
1:A:42:THR:CB	1:A:155:LEU:HD22	0.47	2.39	16	3
1:A:91:PRO:O	1:A:92:ARG:HD3	0.47	2.09	18	1
1:A:82:ARG:HH12	1:A:94:LEU:HD23	0.47	1.69	12	1
1:A:144:ARG:HD2	1:A:144:ARG:C	0.47	2.30	13	2
1:A:106:ILE:H	1:A:113:VAL:HG11	0.47	1.70	14	3
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:HB3	0.47	2.10	18	2
1:A:23:LYS:O	1:A:23:LYS:HD2	0.47	2.10	9	2
1:A:11:LEU:HD12	1:A:11:LEU:O	0.47	2.09	4	1
1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:NE2	0.47	2.24	4	1
1:A:47:PRO:C	1:A:49:ASP:H	0.47	2.13	15	2
1:A:23:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HZ3	0.47	1.69	21	1
1:A:40:TYR:HB2	1:A:55:ASN:HB2	0.47	1.86	21	1
1:A:100:LEU:HD12	1:A:128:LEU:CD2	0.47	2.40	11	1
1:A:73:THR:O	1:A:96:LEU:HD21	0.47	2.09	13	3
1:A:77:GLU:CD	1:A:83:VAL:HG12	0.47	2.29	17	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:91:PRO:HB2	0.47	2.08	4	2
1:A:75:ARG:O	1:A:79:GLN:HG2	0.47	2.10	19	1
1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:PRO:CD	0.47	2.39	20	4
1:A:119:LYS:HA	1:A:125:LEU:CD1	0.47	2.40	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:PHE:HA	1:A:126:TRP:CE3	0.47	2.45	20	1
1:A:5:ILE:CG2	1:A:96:LEU:HB2	0.47	2.40	15	3
1:A:10:ASN:H	1:A:93:THR:HA	0.47	1.68	7	1
1:A:150:ARG:HB3	1:A:152:PHE:HD1	0.47	1.68	5	1
1:A:69:LEU:HA	1:A:72:HIS:NE2	0.47	2.24	8	4
1:A:11:LEU:HB3	1:A:93:THR:N	0.47	2.24	15	1
1:A:48:GLN:N	1:A:48:GLN:OE1	0.47	2.48	13	2
1:A:125:LEU:HD12	1:A:152:PHE:CE1	0.47	2.45	16	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:18:VAL:HG22	0.47	2.40	9	1
1:A:4:TYR:HA	1:A:131:ILE:HD11	0.47	1.87	6	1
1:A:115:HIS:O	1:A:118:MET:HE3	0.47	2.09	10	1
1:A:100:LEU:HD21	1:A:137:PHE:CZ	0.47	2.45	17	3
1:A:4:TYR:CB	1:A:128:LEU:HD21	0.47	2.37	20	4
1:A:121:ARG:HD2	1:A:123:PHE:HB3	0.47	1.85	21	1
1:A:121:ARG:HG2	1:A:124:MET:SD	0.47	2.49	21	1
1:A:142:MET:H	1:A:145:GLN:HB3	0.47	1.70	11	1
1:A:124:MET:HE1	1:A:128:LEU:HD22	0.47	1.85	18	1
1:A:143:LEU:CD1	1:A:147:LEU:HD12	0.47	2.39	18	1
1:A:72:HIS:C	1:A:72:HIS:ND1	0.47	2.68	18	1
1:A:55:ASN:ND2	1:A:56:ALA:N	0.47	2.63	13	1
1:A:48:GLN:N	1:A:48:GLN:NE2	0.47	2.63	6	1
1:A:69:LEU:HD12	1:A:98:ILE:CG1	0.47	2.40	19	1
1:A:150:ARG:HA	1:A:150:ARG:NE	0.47	2.25	6	4
1:A:10:ASN:HD21	1:A:44:PRO:HG3	0.47	1.69	18	1
1:A:120:ASN:HA	1:A:150:ARG:CZ	0.47	2.40	18	1
1:A:149:THR:HG23	1:A:150:ARG:NH1	0.47	2.25	5	1
1:A:71:ASN:O	1:A:74:GLN:HB2	0.47	2.10	6	5
1:A:116:TYR:N	1:A:116:TYR:HD1	0.47	2.08	17	2
1:A:34:LEU:HB2	1:A:61:GLU:HB2	0.47	1.86	9	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:82:ARG:HB3	0.47	1.87	14	1
1:A:125:LEU:HB3	1:A:143:LEU:HD11	0.47	1.86	2	1
1:A:48:GLN:HB2	1:A:92:ARG:CB	0.47	2.40	10	1
1:A:118:MET:CB	1:A:124:MET:CB	0.47	2.93	20	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:51:PRO:CD	0.47	2.39	21	2
1:A:69:LEU:HA	1:A:72:HIS:HD2	0.47	1.70	18	3
1:A:124:MET:SD	1:A:124:MET:N	0.47	2.88	8	1
1:A:150:ARG:HB3	1:A:152:PHE:CE1	0.47	2.44	13	1
1:A:92:ARG:NH2	1:A:95:ASP:HB3	0.47	2.25	17	1
1:A:157:LYS:N	1:A:157:LYS:HD3	0.46	2.26	15	2
1:A:39:PHE:CB	1:A:54:LEU:HD11	0.46	2.38	1	4
1:A:30:GLU:OE1	1:A:69:LEU:HB2	0.46	2.09	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLN:OE1	1:A:94:LEU:HD22	0.46	2.10	7	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:ILE:HD12	0.46	1.87	13	2
1:A:70:LEU:HB2	1:A:98:ILE:HG12	0.46	1.87	15	1
1:A:106:ILE:H	1:A:113:VAL:HG21	0.46	1.70	9	1
1:A:47:PRO:C	1:A:48:GLN:NE2	0.46	2.69	9	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:93:THR:HG23	0.46	1.86	17	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:ILE:HG13	0.46	1.87	2	1
1:A:48:GLN:HG2	1:A:50:GLN:OE1	0.46	2.09	10	1
1:A:120:ASN:C	1:A:121:ARG:HG2	0.46	2.30	19	3
1:A:76:ILE:HD12	1:A:76:ILE:N	0.46	2.25	10	3
1:A:52:ASP:O	1:A:53:TYR:CB	0.46	2.64	18	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:92:ARG:O	0.46	2.10	1	1
1:A:22:LEU:HA	1:A:25:LEU:HD23	0.46	1.87	2	1
1:A:113:VAL:O	1:A:115:HIS:N	0.46	2.49	2	13
1:A:5:ILE:HD11	1:A:69:LEU:HD11	0.46	1.86	19	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:64:LEU:CB	0.46	2.93	21	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:64:LEU:N	0.46	2.24	21	1
1:A:66:PRO:HB3	1:A:104:GLU:HG3	0.46	1.87	8	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:OE1	0.46	2.10	13	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:80:GLN:HG3	0.46	2.25	9	1
1:A:55:ASN:ND2	1:A:123:PHE:O	0.46	2.48	17	2
1:A:157:LYS:O	1:A:158:TRP:C	0.46	2.52	4	2
1:A:68:GLU:HG2	1:A:72:HIS:NE2	0.46	2.24	7	3
1:A:30:GLU:OE1	1:A:30:GLU:N	0.46	2.48	7	3
1:A:4:TYR:HB3	1:A:128:LEU:CD1	0.46	2.39	9	9
1:A:4:TYR:CB	1:A:128:LEU:HD11	0.46	2.38	18	2
1:A:69:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HD11	0.46	2.40	18	1
1:A:137:PHE:CD1	1:A:137:PHE:N	0.46	2.83	13	2
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:HD13	0.46	2.11	8	1
1:A:106:ILE:HD12	1:A:106:ILE:N	0.46	2.26	16	1
1:A:50:GLN:HB3	1:A:53:TYR:CD2	0.46	2.46	9	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:93:THR:HG22	0.46	1.87	9	1
1:A:28:ILE:HD13	1:A:72:HIS:ND1	0.46	2.26	5	1
1:A:72:HIS:O	1:A:75:ARG:HG3	0.46	2.10	1	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:53:TYR:CD2	0.46	2.46	17	1
1:A:36:VAL:HG23	1:A:58:VAL:HG12	0.46	1.88	2	1
1:A:99:MET:SD	1:A:124:MET:HG3	0.46	2.49	10	1
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:ALA:N	0.46	2.26	11	7
1:A:14:PRO:O	1:A:18:VAL:HG23	0.46	2.11	11	2
1:A:109:GLU:OE1	1:A:109:GLU:N	0.46	2.49	11	1
1:A:7:ILE:HD12	1:A:21:ALA:HB1	0.46	1.87	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:THR:O	1:A:96:LEU:HD11	0.46	2.09	16	3
1:A:69:LEU:CB	1:A:98:ILE:HD11	0.46	2.38	14	1
1:A:104:GLU:OE1	1:A:113:VAL:HG11	0.46	2.10	6	1
1:A:91:PRO:C	1:A:92:ARG:NE	0.46	2.69	10	1
1:A:94:LEU:HD21	1:A:96:LEU:HD22	0.46	1.88	10	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:51:PRO:HD2	0.46	1.86	19	3
1:A:121:ARG:HD3	1:A:123:PHE:HB3	0.46	1.86	20	1
1:A:82:ARG:CD	1:A:83:VAL:N	0.46	2.78	21	2
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:HG	0.46	2.11	3	4
1:A:48:GLN:HB3	1:A:92:ARG:HA	0.46	1.87	14	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:ILE:CG1	0.46	2.39	17	1
1:A:4:TYR:HB3	1:A:128:LEU:CG	0.46	2.40	3	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:95:ASP:HA	0.46	2.11	2	1
1:A:96:LEU:HG	1:A:96:LEU:O	0.46	2.11	18	4
1:A:44:PRO:HA	1:A:53:TYR:CE1	0.46	2.46	20	1
1:A:30:GLU:HB3	1:A:69:LEU:HD12	0.46	1.86	21	1
1:A:30:GLU:OE1	1:A:65:ALA:O	0.46	2.33	21	1
1:A:44:PRO:CB	1:A:50:GLN:HA	0.46	2.33	6	2
1:A:120:ASN:HA	1:A:150:ARG:HD2	0.46	1.87	12	1
1:A:17:GLN:O	1:A:21:ALA:HB2	0.46	2.11	12	4
1:A:67:GLU:HB3	1:A:108:THR:OG1	0.46	2.11	13	2
1:A:53:TYR:CE2	1:A:55:ASN:HB3	0.46	2.46	20	1
1:A:46:GLY:HA3	1:A:90:GLY:CA	0.46	2.41	7	3
1:A:33:ILE:HD13	1:A:58:VAL:HG21	0.46	1.87	11	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:44:PRO:HG3	0.46	2.26	18	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:104:GLU:HG2	0.46	2.46	16	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:146:ILE:HG21	0.46	1.88	16	1
1:A:67:GLU:HB2	1:A:108:THR:OG1	0.46	2.11	17	1
1:A:150:ARG:NE	1:A:152:PHE:HB2	0.46	2.26	2	1
1:A:4:TYR:HD1	1:A:4:TYR:N	0.46	2.09	13	3
1:A:28:ILE:HG21	1:A:72:HIS:NE2	0.46	2.25	16	2
1:A:99:MET:SD	1:A:128:LEU:HD13	0.46	2.51	5	1
1:A:28:ILE:HD13	1:A:72:HIS:CE1	0.46	2.46	5	2
1:A:101:PHE:HD1	1:A:101:PHE:O	0.46	1.94	16	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:124:MET:HG2	0.46	2.46	2	1
1:A:151:ALA:C	1:A:153:ASP:H	0.45	2.13	19	3
1:A:77:GLU:CA	1:A:94:LEU:HD23	0.45	2.40	5	1
1:A:48:GLN:HE21	1:A:90:GLY:HA3	0.45	1.69	13	1
1:A:55:ASN:HD22	1:A:55:ASN:H	0.45	1.53	20	1
1:A:30:GLU:C	1:A:62:THR:HG1	0.45	2.13	21	1
1:A:143:LEU:HD11	1:A:147:LEU:HD12	0.45	1.88	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ASN:N	1:A:10:ASN:ND2	0.45	2.62	15	1
1:A:10:ASN:O	1:A:51:PRO:HG2	0.45	2.12	15	1
1:A:120:ASN:O	1:A:121:ARG:HD2	0.45	2.11	9	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:TYR:CE1	0.45	2.45	9	1
1:A:48:GLN:CG	1:A:92:ARG:HA	0.45	2.42	10	1
1:A:22:LEU:O	1:A:33:ILE:HD12	0.45	2.11	20	4
1:A:48:GLN:HG2	1:A:92:ARG:CA	0.45	2.41	20	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:51:PRO:HG3	0.45	2.10	7	1
1:A:14:PRO:CB	1:A:54:LEU:HB3	0.45	2.41	18	1
1:A:68:GLU:HA	1:A:71:ASN:HB3	0.45	1.87	13	2
1:A:154:LYS:C	1:A:155:LEU:HD12	0.45	2.31	13	2
1:A:5:ILE:HG23	1:A:97:ASP:O	0.45	2.11	9	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:CD	0.45	2.31	14	1
1:A:44:PRO:HD3	1:A:52:ASP:HA	0.45	1.88	10	1
1:A:150:ARG:NE	1:A:150:ARG:HA	0.45	2.26	20	3
1:A:10:ASN:ND2	1:A:53:TYR:CD2	0.45	2.84	7	2
1:A:9:SER:OG	1:A:54:LEU:HB3	0.45	2.11	7	1
1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CD1	0.45	2.85	15	2
1:A:10:ASN:HD21	1:A:91:PRO:HB2	0.45	1.70	9	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:82:ARG:HD3	0.45	1.87	14	1
1:A:66:PRO:HG3	1:A:101:PHE:CE1	0.45	2.46	19	1
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD23	0.45	2.27	16	3
1:A:72:HIS:ND1	1:A:72:HIS:C	0.45	2.69	16	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:152:PHE:CZ	0.45	2.47	10	2
1:A:91:PRO:HA	1:A:92:ARG:NH2	0.45	2.25	10	1
1:A:45:LEU:O	1:A:91:PRO:HD3	0.45	2.12	21	2
1:A:118:MET:HG3	1:A:119:LYS:N	0.45	2.27	7	4
1:A:117:ASP:O	1:A:120:ASN:ND2	0.45	2.50	15	1
1:A:101:PHE:O	1:A:104:GLU:HG2	0.45	2.12	13	1
1:A:129:PHE:HA	1:A:143:LEU:CD2	0.45	2.42	13	1
1:A:152:PHE:CD1	1:A:152:PHE:O	0.45	2.69	16	1
1:A:76:ILE:HB	1:A:96:LEU:HD11	0.45	1.88	3	1
1:A:30:GLU:CB	1:A:64:LEU:HB2	0.45	2.42	21	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:150:ARG:HD3	0.45	1.88	11	1
1:A:19:ASN:O	1:A:23:LYS:HB2	0.45	2.11	12	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:53:TYR:HA	0.45	1.87	17	1
1:A:31:SER:HA	1:A:62:THR:CB	0.45	2.42	20	4
1:A:11:LEU:O	1:A:93:THR:HG22	0.45	2.12	11	2
1:A:122:GLY:HA2	1:A:150:ARG:NH2	0.45	2.27	11	1
1:A:66:PRO:HG3	1:A:104:GLU:OE2	0.45	2.11	14	1
1:A:77:GLU:O	1:A:82:ARG:HB3	0.45	2.11	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:HE22	1:A:50:GLN:N	0.45	2.10	7	1
1:A:152:PHE:CD2	1:A:154:LYS:HE2	0.45	2.47	15	4
1:A:40:TYR:HB2	1:A:55:ASN:OD1	0.45	2.12	16	2
1:A:10:ASN:HA	1:A:14:PRO:HD3	0.45	1.89	9	1
1:A:43:PRO:HA	1:A:53:TYR:HD2	0.45	1.72	9	1
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:HG13	0.45	2.12	1	1
1:A:83:VAL:O	1:A:92:ARG:NH1	0.45	2.50	4	1
1:A:110:ARG:NE	1:A:110:ARG:HA	0.45	2.27	19	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:58:VAL:HG21	0.45	1.89	19	1
1:A:83:VAL:O	1:A:92:ARG:NE	0.45	2.50	15	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:108:THR:HG21	0.45	1.88	9	1
1:A:153:ASP:O	1:A:154:LYS:C	0.44	2.54	20	2
1:A:125:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HG	0.44	1.89	18	1
1:A:83:VAL:HB	1:A:92:ARG:NH2	0.44	2.27	5	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:93:THR:O	0.44	2.50	15	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:155:LEU:HD12	0.44	2.42	8	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:73:THR:HG22	0.44	2.43	8	1
1:A:129:PHE:HB2	1:A:147:LEU:HD11	0.44	1.89	6	2
1:A:11:LEU:HD11	1:A:93:THR:HB	0.44	1.87	2	1
1:A:13:SER:OG	1:A:16:GLU:HB2	0.44	2.12	20	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:92:ARG:NE	0.44	2.27	21	1
1:A:125:LEU:HA	1:A:143:LEU:HD21	0.44	1.88	7	1
1:A:143:LEU:HD13	1:A:143:LEU:C	0.44	2.31	18	1
1:A:31:SER:HB2	1:A:60:LEU:HD11	0.44	1.88	18	1
1:A:47:PRO:N	1:A:48:GLN:NE2	0.44	2.64	9	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:143:LEU:HD22	0.44	1.89	1	1
1:A:66:PRO:HB3	1:A:101:PHE:CE2	0.44	2.47	3	1
1:A:113:VAL:CB	1:A:114:PRO:HD2	0.44	2.33	4	2
1:A:69:LEU:C	1:A:71:ASN:N	0.44	2.71	21	1
1:A:129:PHE:CB	1:A:143:LEU:HD21	0.44	2.42	11	1
1:A:23:LYS:O	1:A:23:LYS:HD3	0.44	2.13	17	3
1:A:17:GLN:OE1	1:A:93:THR:HG23	0.44	2.12	15	1
1:A:128:LEU:HA	1:A:131:ILE:HG12	0.44	1.89	1	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:51:PRO:HG3	0.44	2.33	6	1
1:A:11:LEU:C	1:A:11:LEU:HD12	0.44	2.32	2	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:128:LEU:CD1	0.44	2.42	21	2
1:A:66:PRO:HB3	1:A:104:GLU:OE2	0.44	2.13	11	1
1:A:3:ALA:HB1	1:A:98:ILE:HD11	0.44	1.89	11	1
1:A:100:LEU:HD21	1:A:137:PHE:CE1	0.44	2.47	5	2
1:A:74:GLN:O	1:A:77:GLU:HB2	0.44	2.11	20	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:150:ARG:HG3	0.44	2.42	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:O	1:A:92:ARG:HD3	0.44	2.12	12	1
1:A:137:PHE:N	1:A:137:PHE:CD1	0.44	2.86	10	4
1:A:123:PHE:HA	1:A:155:LEU:CD1	0.44	2.43	16	2
1:A:14:PRO:HG2	1:A:52:ASP:OD2	0.44	2.13	5	2
1:A:152:PHE:O	1:A:153:ASP:C	0.44	2.55	20	1
1:A:44:PRO:HB3	1:A:91:PRO:CG	0.44	2.43	11	2
1:A:69:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CE1	0.44	2.47	11	1
1:A:123:PHE:HD1	1:A:124:MET:HG2	0.44	1.72	12	1
1:A:129:PHE:CE1	1:A:144:ARG:HD3	0.44	2.47	14	1
1:A:91:PRO:C	1:A:93:THR:H	0.44	2.15	6	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:H	0.44	1.72	6	1
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:HD12	0.44	2.32	2	1
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD23	0.44	2.13	10	1
1:A:55:ASN:HB3	1:A:123:PHE:CD1	0.44	2.46	7	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:51:PRO:HD2	0.44	2.13	18	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:17:GLN:HB2	0.44	1.90	18	1
1:A:80:GLN:HA	1:A:80:GLN:OE1	0.44	2.13	16	2
1:A:53:TYR:CE2	1:A:91:PRO:HG2	0.44	2.48	10	1
1:A:91:PRO:O	1:A:92:ARG:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:92:ARG:O	0.44	2.13	10	1
1:A:4:TYR:CE2	1:A:132:ALA:O	0.44	2.71	10	4
1:A:145:GLN:NE2	1:A:145:GLN:C	0.44	2.71	10	5
1:A:121:ARG:CG	1:A:123:PHE:HB3	0.44	2.42	20	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:93:THR:HG21	0.44	1.89	21	1
1:A:47:PRO:O	1:A:48:GLN:NE2	0.44	2.50	12	2
1:A:121:ARG:HB3	1:A:121:ARG:NH1	0.44	2.26	8	1
1:A:39:PHE:HD2	1:A:54:LEU:HD11	0.44	1.73	14	1
1:A:31:SER:HB3	1:A:60:LEU:HD11	0.44	1.89	14	1
1:A:9:SER:O	1:A:53:TYR:HB2	0.44	2.13	20	1
1:A:143:LEU:HD12	1:A:143:LEU:C	0.44	2.33	1	1
1:A:47:PRO:C	1:A:48:GLN:HE21	0.44	2.17	6	1
1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE21	0.43	1.73	4	1
1:A:124:MET:N	1:A:124:MET:SD	0.43	2.91	9	4
1:A:43:PRO:HG2	1:A:123:PHE:HZ	0.43	1.73	18	1
1:A:129:PHE:CA	1:A:143:LEU:HD21	0.43	2.43	13	1
1:A:142:MET:C	1:A:144:ARG:N	0.43	2.72	3	1
1:A:11:LEU:O	1:A:12:ALA:HB2	0.43	2.12	6	1
1:A:99:MET:HE2	1:A:128:LEU:HD13	0.43	1.90	21	1
1:A:144:ARG:HD3	1:A:144:ARG:C	0.43	2.33	12	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:28:ILE:CD1	0.43	2.43	11	1
1:A:7:ILE:HG22	1:A:18:VAL:HG22	0.43	1.88	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HB3	1:A:111:LEU:CG	0.43	2.36	17	1
1:A:44:PRO:HG2	1:A:50:GLN:NE2	0.43	2.28	14	2
1:A:23:LYS:HD3	1:A:23:LYS:O	0.43	2.12	18	2
1:A:44:PRO:CG	1:A:53:TYR:HB2	0.43	2.44	8	3
1:A:124:MET:HA	1:A:124:MET:HE2	0.43	1.88	15	1
1:A:147:LEU:CD2	1:A:152:PHE:HB3	0.43	2.42	8	2
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:CG2	0.43	2.67	13	1
1:A:20:ALA:HB3	1:A:80:GLN:HE22	0.43	1.73	1	1
1:A:145:GLN:NE2	1:A:146:ILE:HG12	0.43	2.28	21	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:132:ALA:HB3	0.43	1.90	14	2
1:A:150:ARG:HH11	1:A:150:ARG:HG2	0.43	1.73	11	1
1:A:41:ARG:N	1:A:156:ASN:O	0.43	2.51	17	2
1:A:77:GLU:HA	1:A:82:ARG:HH12	0.43	1.74	12	1
1:A:83:VAL:HB	1:A:93:THR:OG1	0.43	2.14	12	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:50:GLN:HA	0.43	2.13	15	1
1:A:156:ASN:HD22	1:A:156:ASN:N	0.43	2.11	15	1
1:A:70:LEU:HA	1:A:73:THR:OG1	0.43	2.13	8	1
1:A:144:ARG:O	1:A:144:ARG:HD2	0.43	2.13	2	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:92:ARG:NH1	0.43	2.28	21	1
1:A:107:ASN:HD21	1:A:113:VAL:HG12	0.43	1.74	7	1
1:A:82:ARG:HD2	1:A:92:ARG:HH12	0.43	1.74	13	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:113:VAL:HB	0.43	2.49	16	1
1:A:44:PRO:HD2	1:A:50:GLN:HG2	0.43	1.90	9	1
1:A:9:SER:N	1:A:53:TYR:HB2	0.43	2.27	3	1
1:A:76:ILE:HD12	1:A:76:ILE:H	0.43	1.74	20	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:111:LEU:CD2	0.43	2.40	2	2
1:A:28:ILE:HB	1:A:31:SER:HB2	0.43	1.90	1	2
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HG3	0.43	1.72	17	1
1:A:144:ARG:O	1:A:144:ARG:HD3	0.43	2.13	11	1
1:A:53:TYR:N	1:A:53:TYR:CD1	0.43	2.86	18	1
1:A:156:ASN:ND2	1:A:156:ASN:O	0.43	2.51	15	1
1:A:110:ARG:N	1:A:110:ARG:HD2	0.43	2.29	20	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:68:GLU:HB3	0.43	2.44	2	5
1:A:123:PHE:CD1	1:A:124:MET:N	0.43	2.87	15	1
1:A:67:GLU:HB2	1:A:108:THR:HG21	0.43	1.91	14	2
1:A:135:LEU:O	1:A:142:MET:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:135:LEU:CG	1:A:143:LEU:HB2	0.43	2.43	3	1
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CD1	0.43	2.81	10	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:23:LYS:C	0.43	2.33	14	2
1:A:44:PRO:HA	1:A:53:TYR:CZ	0.43	2.48	21	1
1:A:72:HIS:O	1:A:75:ARG:HB2	0.43	2.14	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:N	1:A:48:GLN:CD	0.43	2.72	13	2
1:A:125:LEU:C	1:A:147:LEU:HD11	0.43	2.34	14	2
1:A:10:ASN:ND2	1:A:11:LEU:H	0.43	2.11	15	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:23:LYS:O	0.43	2.14	15	1
1:A:55:ASN:OD1	1:A:155:LEU:HD23	0.43	2.14	13	1
1:A:83:VAL:O	1:A:92:ARG:HD2	0.43	2.14	14	1
1:A:4:TYR:OH	1:A:135:LEU:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:125:LEU:O	1:A:147:LEU:HD11	0.43	2.14	20	1
1:A:147:LEU:HD22	1:A:152:PHE:CA	0.43	2.44	20	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:131:ILE:C	0.43	2.34	21	1
1:A:69:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HG12	0.43	2.44	21	1
1:A:116:TYR:CD1	1:A:116:TYR:N	0.43	2.86	11	2
1:A:75:ARG:C	1:A:79:GLN:HG3	0.43	2.33	18	1
1:A:149:THR:CG2	1:A:150:ARG:N	0.43	2.82	5	1
1:A:99:MET:HE1	1:A:124:MET:HA	0.43	1.90	5	1
1:A:47:PRO:C	1:A:48:GLN:HG3	0.43	2.34	15	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:54:LEU:C	0.43	2.34	8	1
1:A:144:ARG:HD3	1:A:144:ARG:O	0.43	2.14	6	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:68:GLU:OE1	0.42	2.13	21	1
1:A:48:GLN:HE21	1:A:91:PRO:CD	0.42	2.27	8	1
1:A:7:ILE:HG21	1:A:21:ALA:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:76:ILE:N	1:A:76:ILE:HD12	0.42	2.29	2	2
1:A:91:PRO:O	1:A:93:THR:N	0.42	2.52	9	1
1:A:10:ASN:HA	1:A:53:TYR:CG	0.42	2.49	6	1
1:A:4:TYR:HA	1:A:131:ILE:CD1	0.42	2.44	6	1
1:A:44:PRO:HD2	1:A:50:GLN:C	0.42	2.34	6	1
1:A:152:PHE:C	1:A:154:LYS:N	0.42	2.73	20	2
1:A:72:HIS:O	1:A:75:ARG:HB3	0.42	2.14	20	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:PRO:C	0.42	2.58	18	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:98:ILE:H	0.42	2.27	12	2
1:A:120:ASN:HD22	1:A:120:ASN:C	0.42	2.17	15	1
1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:PRO:N	0.42	2.29	16	1
1:A:149:THR:HG22	1:A:150:ARG:CZ	0.42	2.44	16	1
1:A:146:ILE:O	1:A:150:ARG:HD2	0.42	2.13	1	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:132:ALA:N	0.42	2.29	21	1
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:HD2	0.42	2.35	9	2
1:A:126:TRP:CD1	1:A:155:LEU:HB2	0.42	2.47	13	4
1:A:30:GLU:OE1	1:A:64:LEU:HD23	0.42	2.14	18	1
1:A:74:GLN:NE2	1:A:74:GLN:HA	0.42	2.29	5	1
1:A:62:THR:HG21	1:A:69:LEU:HD21	0.42	1.92	1	2
1:A:39:PHE:CD1	1:A:39:PHE:N	0.42	2.87	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ARG:HH11	1:A:93:THR:N	0.42	2.11	1	1
1:A:151:ALA:C	1:A:152:PHE:CD1	0.42	2.93	20	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:143:LEU:CD1	0.42	2.44	14	2
1:A:50:GLN:HB2	1:A:53:TYR:CE1	0.42	2.49	18	1
1:A:41:ARG:HB3	1:A:156:ASN:O	0.42	2.15	10	1
1:A:123:PHE:CA	1:A:155:LEU:HD11	0.42	2.32	21	1
1:A:124:MET:O	1:A:127:PRO:HD2	0.42	2.14	11	1
1:A:43:PRO:HA	1:A:53:TYR:HB3	0.42	1.90	9	1
1:A:147:LEU:HB3	1:A:152:PHE:HB3	0.42	1.91	14	1
1:A:68:GLU:O	1:A:71:ASN:HB2	0.42	2.14	14	1
1:A:53:TYR:CE1	1:A:55:ASN:HB3	0.42	2.49	10	1
1:A:82:ARG:HB3	1:A:93:THR:OG1	0.42	2.15	17	1
1:A:119:LYS:O	1:A:150:ARG:HD2	0.42	2.15	14	1
1:A:32:HIS:O	1:A:61:GLU:N	0.42	2.53	4	1
1:A:4:TYR:CD2	1:A:131:ILE:HD11	0.42	2.50	21	1
1:A:101:PHE:HB3	1:A:104:GLU:CG	0.42	2.45	11	1
1:A:9:SER:O	1:A:53:TYR:HB3	0.42	2.15	7	1
1:A:47:PRO:CD	1:A:90:GLY:HA3	0.42	2.42	12	1
1:A:70:LEU:O	1:A:74:GLN:N	0.42	2.52	8	1
1:A:101:PHE:O	1:A:102:GLY:C	0.42	2.58	16	1
1:A:70:LEU:HB2	1:A:98:ILE:CG1	0.42	2.43	9	1
1:A:147:LEU:HB3	1:A:152:PHE:CD2	0.42	2.46	19	1
1:A:129:PHE:HB2	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.44	20	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:131:ILE:CD1	0.42	2.44	21	2
1:A:11:LEU:CD2	1:A:11:LEU:N	0.42	2.83	5	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:73:THR:HG22	0.42	1.90	8	1
1:A:8:GLY:HA2	1:A:54:LEU:O	0.42	2.14	16	3
1:A:147:LEU:HD13	1:A:152:PHE:CB	0.42	2.45	14	1
1:A:51:PRO:HD2	1:A:53:TYR:CD2	0.42	2.49	6	1
1:A:120:ASN:CA	1:A:150:ARG:HD2	0.42	2.45	20	1
1:A:122:GLY:O	1:A:155:LEU:HD23	0.42	2.14	8	1
1:A:129:PHE:HA	1:A:143:LEU:HD21	0.42	1.92	13	1
1:A:121:ARG:NH1	1:A:121:ARG:HA	0.42	2.29	6	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:N	0.42	2.30	6	1
1:A:2:VAL:HA	1:A:60:LEU:O	0.42	2.15	11	1
1:A:10:ASN:HB2	1:A:51:PRO:HD3	0.42	1.92	9	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:THR:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:59:ALA:HA	1:A:131:ILE:HD12	0.41	1.92	4	1
1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:OE1	0.41	2.53	18	2
1:A:44:PRO:HB3	1:A:91:PRO:CD	0.41	2.45	11	1
1:A:51:PRO:HG2	1:A:53:TYR:HE2	0.41	1.74	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:O	1:A:12:ALA:HB3	0.41	2.15	15	1
1:A:62:THR:HG21	1:A:69:LEU:CD2	0.41	2.45	8	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:94:LEU:HD21	0.41	1.91	9	1
1:A:48:GLN:CD	1:A:50:GLN:H	0.41	2.18	3	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:82:ARG:HD3	0.41	2.15	10	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:93:THR:HG21	0.41	1.92	10	1
1:A:48:GLN:CD	1:A:49:ASP:H	0.41	2.18	11	1
1:A:6:ALA:HB1	1:A:123:PHE:CZ	0.41	2.50	7	1
1:A:12:ALA:O	1:A:17:GLN:HG2	0.41	2.15	18	2
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:H	0.41	1.75	5	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:158:TRP:HB2	0.41	2.45	15	1
1:A:50:GLN:HA	1:A:50:GLN:OE1	0.41	2.14	13	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:11:LEU:HD23	0.41	2.15	16	1
1:A:99:MET:HE2	1:A:124:MET:HG2	0.41	1.92	16	1
1:A:68:GLU:O	1:A:71:ASN:HB3	0.41	2.14	17	1
1:A:103:ASN:HB2	1:A:138:PRO:HD3	0.41	1.90	3	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:53:TYR:CE2	0.41	2.49	6	1
1:A:66:PRO:O	1:A:111:LEU:CG	0.41	2.69	19	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:79:GLN:NE2	0.41	2.30	20	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:91:PRO:HB3	0.41	2.50	21	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:93:THR:O	0.41	2.14	21	1
1:A:59:ALA:N	1:A:131:ILE:HD12	0.41	2.30	12	1
1:A:46:GLY:C	1:A:50:GLN:HE22	0.41	2.17	8	1
1:A:123:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HD11	0.41	1.91	6	1
1:A:12:ALA:HB3	1:A:17:GLN:CD	0.41	2.35	10	1
1:A:145:GLN:HE22	1:A:146:ILE:HG12	0.41	1.75	20	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:155:LEU:HD22	0.41	2.39	21	1
1:A:149:THR:HG23	1:A:150:ARG:HG2	0.41	1.92	5	1
1:A:31:SER:HG	1:A:60:LEU:HD11	0.41	1.73	8	1
1:A:44:PRO:HG3	1:A:53:TYR:HD2	0.41	1.74	16	1
1:A:34:LEU:O	1:A:34:LEU:HD13	0.41	2.14	9	1
1:A:80:GLN:NE2	1:A:82:ARG:HH21	0.41	2.12	17	1
1:A:1:THR:HG22	1:A:2:VAL:N	0.41	2.31	19	1
1:A:47:PRO:O	1:A:48:GLN:C	0.41	2.59	20	1
1:A:73:THR:HA	1:A:76:ILE:HD12	0.41	1.90	1	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HG	0.41	2.14	17	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:96:LEU:O	0.41	2.15	17	1
1:A:104:GLU:HB2	1:A:113:VAL:HG21	0.41	1.91	19	1
1:A:30:GLU:HA	1:A:64:LEU:HB2	0.41	1.89	21	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:52:ASP:O	0.41	2.68	11	1
1:A:118:MET:SD	1:A:119:LYS:N	0.41	2.93	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:PRO:HG3	1:A:53:TYR:CB	0.41	2.43	8	1
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD23	0.41	2.35	20	1
1:A:47:PRO:C	1:A:49:ASP:N	0.41	2.74	15	1
1:A:43:PRO:CA	1:A:53:TYR:HB3	0.41	2.45	9	1
1:A:8:GLY:HA2	1:A:53:TYR:HE1	0.41	1.75	17	1
1:A:11:LEU:HD11	1:A:93:THR:N	0.41	2.31	3	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:143:LEU:H	0.41	2.28	3	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:50:GLN:OE1	0.41	2.16	3	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:121:ARG:HG2	0.41	2.16	7	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:CZ	0.41	2.45	12	1
1:A:101:PHE:HE2	1:A:111:LEU:HD11	0.41	1.74	16	1
1:A:44:PRO:HD2	1:A:50:GLN:CD	0.41	2.36	9	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:154:LYS:HB2	0.41	2.31	4	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:73:THR:HG21	0.41	2.44	4	1
1:A:2:VAL:CG1	1:A:59:ALA:HB1	0.41	2.45	19	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:53:TYR:CE1	0.41	2.51	20	1
1:A:98:ILE:HG13	1:A:101:PHE:CZ	0.41	2.51	11	1
1:A:108:THR:HB	1:A:109:GLU:OE1	0.41	2.16	11	1
1:A:41:ARG:CA	1:A:53:TYR:O	0.41	2.67	18	1
1:A:145:GLN:C	1:A:145:GLN:NE2	0.41	2.74	12	3
1:A:14:PRO:O	1:A:54:LEU:HD23	0.41	2.16	15	1
1:A:22:LEU:O	1:A:33:ILE:HD11	0.41	2.15	8	1
1:A:44:PRO:HG3	1:A:53:TYR:CG	0.41	2.50	8	1
1:A:144:ARG:C	1:A:144:ARG:HD3	0.41	2.36	6	2
1:A:96:LEU:CD2	1:A:96:LEU:N	0.41	2.84	16	1
1:A:101:PHE:HB3	1:A:104:GLU:OE2	0.41	2.16	6	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:50:GLN:HG3	0.41	1.93	6	1
1:A:23:LYS:HD3	1:A:23:LYS:C	0.41	2.36	2	1
1:A:104:GLU:H	1:A:104:GLU:CD	0.41	2.19	2	1
1:A:53:TYR:CD1	1:A:53:TYR:C	0.41	2.95	10	1
1:A:69:LEU:CD1	1:A:69:LEU:C	0.41	2.90	8	2
1:A:31:SER:CB	1:A:60:LEU:HD11	0.41	2.46	21	1
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:LEU:CD2	0.41	2.46	18	1
1:A:128:LEU:O	1:A:131:ILE:HG12	0.41	2.15	12	1
1:A:100:LEU:HA	1:A:114:PRO:CG	0.41	2.44	16	1
1:A:37:SER:HA	1:A:130:GLU:OE1	0.40	2.15	20	1
1:A:77:GLU:HB3	1:A:82:ARG:NE	0.40	2.24	7	1
1:A:121:ARG:HB3	1:A:121:ARG:HH11	0.40	1.75	8	1
1:A:8:GLY:HA3	1:A:53:TYR:OH	0.40	2.16	13	1
1:A:92:ARG:CG	1:A:92:ARG:HH11	0.40	2.30	4	1
1:A:55:ASN:HD22	1:A:55:ASN:N	0.40	2.14	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:TRP:HE1	1:A:157:LYS:NZ	0.40	2.14	15	1
1:A:126:TRP:CE3	1:A:152:PHE:HB2	0.40	2.51	8	1
1:A:73:THR:CA	1:A:76:ILE:HD13	0.40	2.45	13	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:11:LEU:HG	0.40	2.17	10	1
1:A:10:ASN:H	1:A:17:GLN:HE22	0.40	1.58	15	1
1:A:4:TYR:CD1	1:A:100:LEU:HB3	0.40	2.51	8	1
1:A:8:GLY:HA3	1:A:53:TYR:CZ	0.40	2.51	8	1
1:A:137:PHE:C	1:A:139:ASP:N	0.40	2.75	16	1
1:A:123:PHE:HD1	1:A:124:MET:N	0.40	2.15	6	1
1:A:7:ILE:HG12	1:A:96:LEU:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:127:PRO:O	1:A:131:ILE:HG23	0.40	2.17	4	1
1:A:116:TYR:HA	1:A:119:LYS:HZ3	0.40	1.75	19	1
1:A:98:ILE:O	1:A:98:ILE:CG2	0.40	2.68	12	1
1:A:118:MET:SD	1:A:125:LEU:HD21	0.40	2.56	8	1
1:A:149:THR:HG22	1:A:150:ARG:NH1	0.40	2.31	16	1
1:A:135:LEU:HD13	1:A:135:LEU:C	0.40	2.36	1	1
1:A:49:ASP:CB	1:A:51:PRO:HD3	0.40	2.47	3	1
1:A:47:PRO:CD	1:A:90:GLY:N	0.40	2.84	10	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:112:THR:N	0.40	2.20	19	1
1:A:53:TYR:HD2	1:A:91:PRO:HB3	0.40	1.76	21	1
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:HD13	0.40	2.31	12	1
1:A:98:ILE:HG23	1:A:101:PHE:HB2	0.40	1.93	12	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:C	0.40	2.37	16	1
1:A:44:PRO:CG	1:A:50:GLN:HA	0.40	2.47	16	1
1:A:44:PRO:HD3	1:A:51:PRO:O	0.40	2.16	2	1
1:A:46:GLY:N	1:A:50:GLN:HE21	0.40	2.13	10	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	150/158 (95%)	109±5 (73±3%)	26±3 (18±2%)	15±3 (10±2%)	1	10
All	All	3150/3318 (95%)	2286 (73%)	553 (18%)	311 (10%)	1	10

All 40 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	117	ASP	21
1	A	114	PRO	21
1	A	132	ALA	20
1	A	116	TYR	18
1	A	154	LYS	18
1	A	51	PRO	18
1	A	49	ASP	18
1	A	47	PRO	16
1	A	140	GLY	16
1	A	12	ALA	13
1	A	48	GLN	11
1	A	91	PRO	10
1	A	37	SER	9
1	A	109	GLU	9
1	A	93	THR	9
1	A	13	SER	8
1	A	45	LEU	7
1	A	53	TYR	6
1	A	155	LEU	6
1	A	10	ASN	5
1	A	151	ALA	5
1	A	92	ARG	5
1	A	102	GLY	4
1	A	44	PRO	4
1	A	52	ASP	4
1	A	103	ASN	3
1	A	153	ASP	3
1	A	58	VAL	3
1	A	43	PRO	3
1	A	152	PHE	3
1	A	122	GLY	2
1	A	98	ILE	2
1	A	30	GLU	2
1	A	105	VAL	2
1	A	82	ARG	2
1	A	56	ALA	1
1	A	81	GLY	1
1	A	50	GLN	1
1	A	65	ALA	1
1	A	139	ASP	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	132/137 (96%)	119±3 (91±2%)	13±3 (9±2%)	14	59
All	All	2772/2877 (96%)	2509 (91%)	263 (9%)	14	59

All 64 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	145	GLN	21
1	A	116	TYR	20
1	A	92	ARG	20
1	A	113	VAL	15
1	A	48	GLN	12
1	A	155	LEU	9
1	A	82	ARG	8
1	A	123	PHE	7
1	A	53	TYR	7
1	A	103	ASN	6
1	A	118	MET	6
1	A	39	PHE	5
1	A	108	THR	5
1	A	23	LYS	5
1	A	143	LEU	5
1	A	71	ASN	5
1	A	4	TYR	5
1	A	96	LEU	4
1	A	126	TRP	4
1	A	75	ARG	4
1	A	104	GLU	4
1	A	111	LEU	4
1	A	119	LYS	4
1	A	152	PHE	4
1	A	144	ARG	4
1	A	101	PHE	4
1	A	50	GLN	3
1	A	112	THR	3
1	A	121	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	141	GLU	3
1	A	100	LEU	3
1	A	61	GLU	3
1	A	93	THR	3
1	A	107	ASN	3
1	A	135	LEU	3
1	A	64	LEU	2
1	A	106	ILE	2
1	A	137	PHE	2
1	A	150	ARG	2
1	A	72	HIS	2
1	A	62	THR	2
1	A	55	ASN	2
1	A	156	ASN	2
1	A	74	GLN	2
1	A	139	ASP	2
1	A	42	THR	1
1	A	70	LEU	1
1	A	41	ARG	1
1	A	120	ASN	1
1	A	110	ARG	1
1	A	98	ILE	1
1	A	80	GLN	1
1	A	10	ASN	1
1	A	33	ILE	1
1	A	125	LEU	1
1	A	11	LEU	1
1	A	52	ASP	1
1	A	79	GLN	1
1	A	97	ASP	1
1	A	124	MET	1
1	A	30	GLU	1
1	A	35	THR	1
1	A	128	LEU	1
1	A	157	LYS	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided