



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 07:22 pm GMT

PDB ID : 1PAV
Title : SOLUTION NMR STRUCTURE OF HYPOTHETICAL PROTEIN TA1414
OF THERMOPLASMA ACIDOPHILUM
Authors : Monleon, D.; Yee, A.; Liu, C.S.; Arrowsmith, C.; Celda, B.
Deposited on : 2003-05-14

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

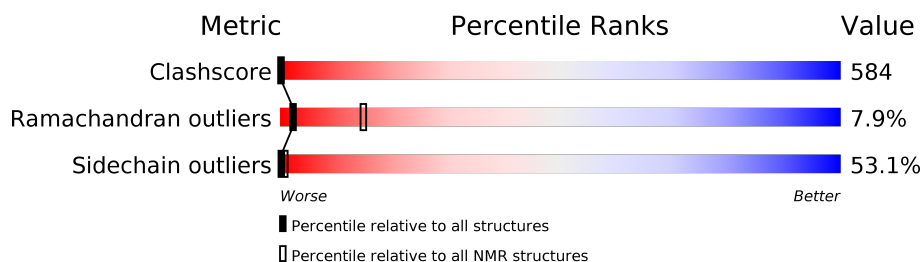
1 Overall quality at a glance

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	78	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 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:2-A:78 (77)	0.14	3

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1122 atoms, of which 514 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Hypothetical protein Ta1170/Ta1414.

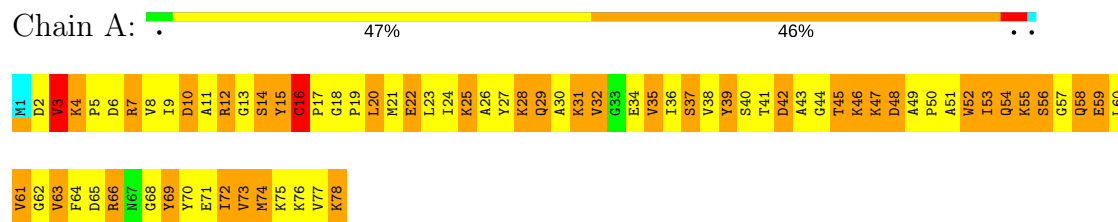
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	78	Total	C	H	N	O	S	0
			1122	389	514	102	113	4	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

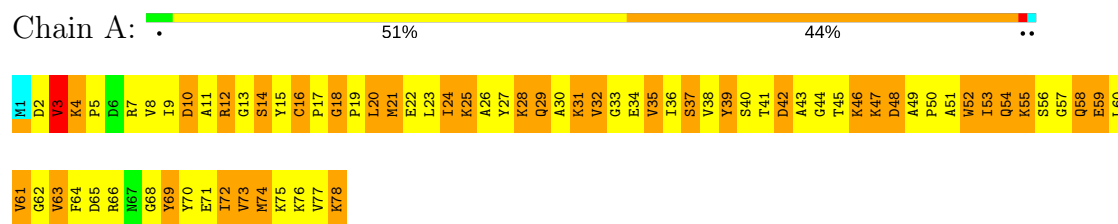


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

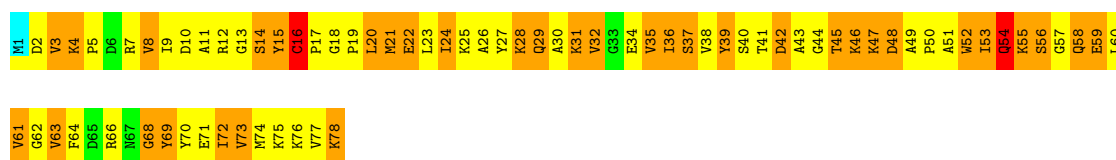
- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

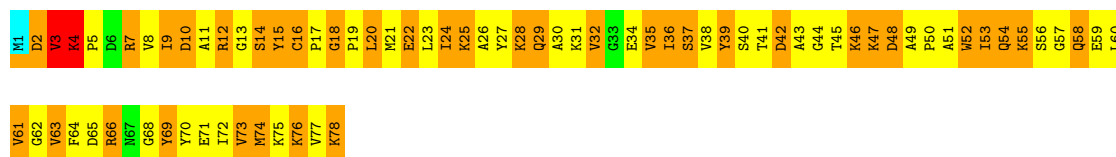




4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

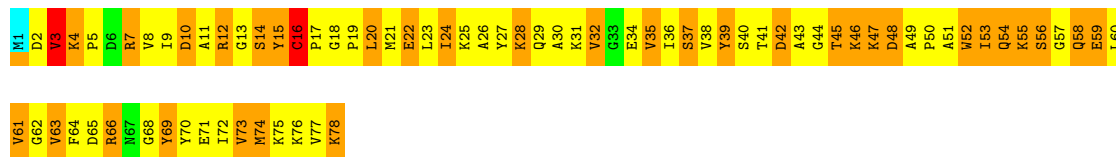
Chain A: . 45% 47% ..



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

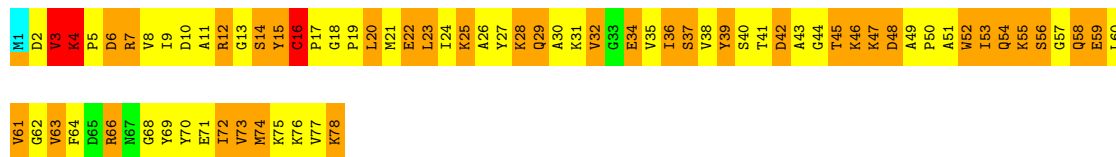
Chain A: . 50% 42% ..



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

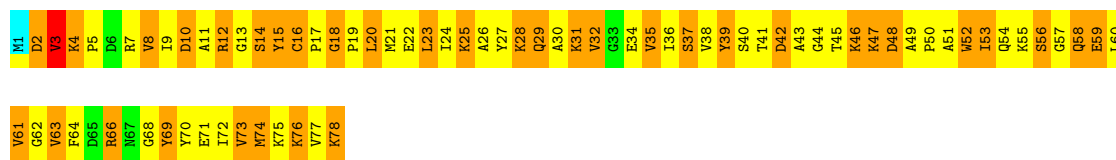
Chain A: . 46% 45% ..



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

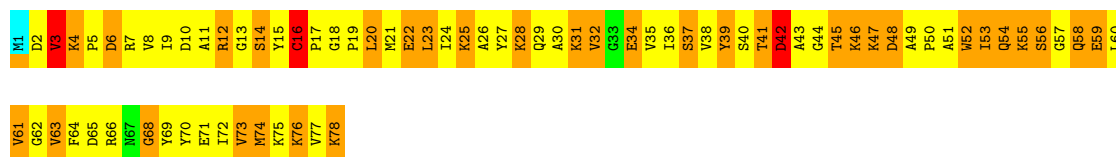
Chain A: 5% 46% 46% ..



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

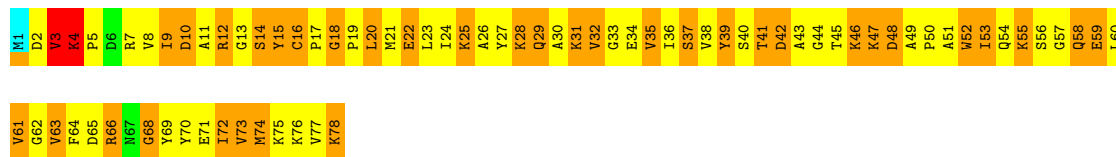
Chain A: . 50% 42% ..



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

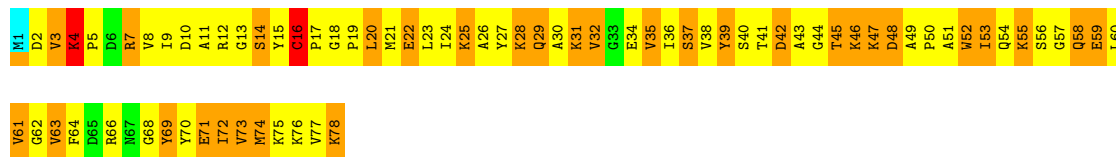
Chain A: . 49% 45% ..



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

Chain A: 5% 51% 40% ..



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Hypothetical protein Ta1170/Ta1414

Chain A: . 47% 47% .

V61	D1	V62	D2	V63	D3	V64	D4	V65	D5	V66	D6	V67	D7	V68	D8	V69	D9	V70	D10	V71	D11	V72	D12	V73	D13	V74	D14	V75	D15	V76	D16	V77	D17	V78	D18	V79	D19	V80	D20	V81	D21	V82	D22	V83	D23	V84	D24	V85	D25	V86	D26	V87	D27	V88	D28	V89	D29	V90	D30	V91	D31	V92	D32	V93	D33	V94	D34	V95	D35	V96	D36	V97	D37	V98	D38	V99	D39	V100	D40	V101	D41	V102	D42	V103	D43	V104	D44	V105	D45	V106	D46	V107	D47	V108	D48	V109	D49	V110	D50	V111	D51	V112	D52	V113	D53	V114	D54	V115	D55	V116	D56	V117	D57	V118	D58	V119	D59	V120	D60
V61	D61	V62	D62	V63	D63	V64	D64	V65	D65	V66	D66	V67	D67	V68	D68	V69	D69	V70	D70	V71	D71	V72	D72	V73	D73	V74	D74	V75	D75	V76	D76	V77	D77	V78	D78	V79	D79	V80	D80	V81	D81	V82	D82	V83	D83	V84	D84	V85	D85	V86	D86	V87	D87	V88	D88	V89	D89	V90	D90	V91	D91	V92	D92	V93	D93	V94	D94	V95	D95	V96	D96	V97	D97	V98	D98	V99	D99	V100	D100																																								

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *Initial manual assignment of unambiguous NOEs. Further assignment of spectra by NOAH routine at DYANA..*

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry.*

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

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](#)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [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	600	507	608	705±34
All	All	6000	5070	6081	7054

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 584.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:HA	1:A:52:TRP:CE2	1.67	1.17	10	10
1:A:59:GLU:CB	1:A:75:LYS:HB3	1.63	1.24	4	10
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CD2	1.61	1.20	10	9
1:A:45:THR:HG22	1:A:70:TYR:CE1	1.61	1.25	5	5
1:A:16:CYS:SG	1:A:20:LEU:HD12	1.59	1.32	10	4
1:A:23:LEU:CB	1:A:52:TRP:HB2	1.59	1.10	5	10
1:A:5:PRO:CA	1:A:35:VAL:CG2	1.59	1.78	10	6
1:A:45:THR:CG2	1:A:70:TYR:CE1	1.59	1.85	2	5
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:LYS:CB	1.57	1.25	2	10
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:HB3	1.57	1.29	3	10
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:CD	1.57	1.68	4	9
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:HB	1.56	1.13	10	6
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CD2	1.56	1.32	9	10
1:A:5:PRO:HB3	1:A:35:VAL:CB	1.56	1.07	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:THR:CG2	1:A:70:TYR:HE1	1.56	1.07	4	5
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:CG2	1.55	1.26	10	7
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:CG2	1.55	1.82	5	7
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:HG22	1.54	1.05	5	1
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:CB	1.54	1.82	10	10
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:HG23	1.54	1.32	9	6
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:HG22	1.53	1.31	5	1
1:A:2:ASP:CB	1:A:35:VAL:HG11	1.52	1.35	8	7
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:CE2	1.51	1.89	1	10
1:A:5:PRO:HB3	1:A:35:VAL:CA	1.51	1.33	6	7
1:A:17:PRO:C	1:A:19:PRO:HD2	1.50	1.21	6	10
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:HB3	1.49	1.07	8	9
1:A:49:ALA:HA	1:A:52:TRP:CE2	1.48	1.42	7	10
1:A:11:ALA:HB3	1:A:19:PRO:CG	1.47	1.35	10	10
1:A:20:LEU:HD12	1:A:48:ASP:CG	1.47	1.21	3	6
1:A:20:LEU:HA	1:A:52:TRP:NE1	1.46	1.18	4	10
1:A:23:LEU:HB2	1:A:52:TRP:CB	1.46	1.39	6	10
1:A:5:PRO:CG	1:A:35:VAL:HB	1.46	1.37	3	6
1:A:20:LEU:O	1:A:52:TRP:CG	1.46	1.67	8	10
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:O	1.46	1.64	5	8
1:A:27:TYR:CB	1:A:56:SER:HB3	1.46	1.41	2	10
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CE1	1.46	1.43	9	7
1:A:11:ALA:HB3	1:A:19:PRO:CB	1.45	1.35	10	10
1:A:5:PRO:HA	1:A:35:VAL:CG2	1.45	0.94	10	1
1:A:38:VAL:O	1:A:71:GLU:CB	1.45	1.64	1	3
1:A:32:VAL:HG22	1:A:77:VAL:C	1.44	1.27	8	1
1:A:31:LYS:O	1:A:76:LYS:CB	1.44	1.63	6	9
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:C	1.44	1.86	10	8
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CZ	1.43	2.00	3	7
1:A:40:SER:OG	1:A:70:TYR:CZ	1.43	1.69	3	7
1:A:9:ILE:HG12	1:A:38:VAL:CB	1.43	1.42	8	3
1:A:9:ILE:O	1:A:39:TYR:CD1	1.43	1.67	4	1
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HD3	1.43	1.11	2	7
1:A:16:CYS:HB3	1:A:20:LEU:CB	1.42	1.29	1	9
1:A:23:LEU:CB	1:A:52:TRP:CB	1.42	1.96	5	8
1:A:9:ILE:HG23	1:A:38:VAL:CA	1.42	1.41	4	3
1:A:14:SER:HB3	1:A:18:GLY:C	1.41	1.15	5	10
1:A:49:ALA:CB	1:A:70:TYR:OH	1.40	1.68	1	2
1:A:14:SER:HB3	1:A:19:PRO:N	1.40	1.26	9	10
1:A:20:LEU:O	1:A:52:TRP:CD1	1.39	1.73	8	10
1:A:19:PRO:CD	1:A:70:TYR:OH	1.39	1.68	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:CB	1.37	2.00	3	9
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:CB	1.36	1.79	10	6
1:A:14:SER:CB	1:A:18:GLY:C	1.36	1.94	9	10
1:A:45:THR:CB	1:A:52:TRP:HZ2	1.36	1.34	3	2
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:SD	1.36	1.59	10	3
1:A:17:PRO:O	1:A:19:PRO:CD	1.35	1.72	6	5
1:A:9:ILE:O	1:A:39:TYR:CE1	1.35	1.78	4	1
1:A:39:TYR:HA	1:A:71:GLU:CB	1.35	1.51	5	10
1:A:9:ILE:HG12	1:A:38:VAL:CG2	1.35	1.51	6	3
1:A:23:LEU:HG	1:A:52:TRP:CE3	1.35	1.55	9	5
1:A:40:SER:O	1:A:70:TYR:N	1.34	1.59	6	7
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CG	1.34	1.58	5	10
1:A:14:SER:HB3	1:A:19:PRO:CD	1.33	1.53	4	10
1:A:27:TYR:HB3	1:A:56:SER:CB	1.33	1.51	3	10
1:A:17:PRO:C	1:A:19:PRO:CD	1.33	1.97	6	10
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:NE1	1.33	1.91	6	10
1:A:40:SER:N	1:A:70:TYR:O	1.33	1.61	10	1
1:A:9:ILE:O	1:A:38:VAL:HA	1.32	1.20	5	10
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CD2	1.32	2.11	5	10
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CD2	1.32	2.13	10	8
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CE1	1.32	2.12	2	7
1:A:14:SER:O	1:A:15:TYR:CD1	1.32	1.82	9	7
1:A:59:GLU:N	1:A:75:LYS:O	1.31	1.63	7	10
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:O	1.31	1.25	6	9
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:C	1.31	1.95	6	7
1:A:5:PRO:HB2	1:A:35:VAL:C	1.31	1.46	3	7
1:A:38:VAL:O	1:A:71:GLU:HB2	1.31	1.20	10	3
1:A:61:VAL:HG23	1:A:73:VAL:O	1.31	1.16	1	8
1:A:46:LYS:HG3	1:A:70:TYR:CD1	1.30	1.60	1	2
1:A:39:TYR:CA	1:A:71:GLU:HB3	1.30	1.54	8	10
1:A:32:VAL:CG2	1:A:78:LYS:N	1.30	1.94	8	1
1:A:40:SER:OG	1:A:70:TYR:CE2	1.30	1.74	8	7
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:SER:O	1.30	1.79	8	3
1:A:45:THR:HG22	1:A:70:TYR:CD1	1.29	1.61	9	5
1:A:31:LYS:O	1:A:76:LYS:HB2	1.29	1.06	2	9
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:HG3	1.29	1.58	8	10
1:A:33:GLY:N	1:A:76:LYS:O	1.28	1.63	1	1
1:A:3:VAL:H	1:A:61:VAL:CG1	1.28	1.40	7	10
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:SER:O	1.27	1.28	8	3
1:A:36:ILE:HG23	1:A:76:LYS:NZ	1.27	1.41	6	3
1:A:27:TYR:CD2	1:A:56:SER:HA	1.27	1.64	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:O	1:A:76:LYS:N	1.27	1.68	1	10
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CE2	1.26	1.64	5	10
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CD1	1.26	1.65	8	8
1:A:7:ARG:NH1	1:A:8:VAL:O	1.25	1.69	6	6
1:A:20:LEU:CD1	1:A:48:ASP:CG	1.25	2.03	8	5
1:A:9:ILE:CG1	1:A:38:VAL:CG2	1.25	2.14	4	3
1:A:27:TYR:CG	1:A:56:SER:HB3	1.25	1.63	2	7
1:A:19:PRO:HB2	1:A:52:TRP:CH2	1.24	1.66	5	10
1:A:49:ALA:HB2	1:A:70:TYR:OH	1.24	1.33	10	2
1:A:64:PHE:CE1	1:A:72:ILE:HD11	1.24	1.67	2	5
1:A:16:CYS:SG	1:A:20:LEU:CD1	1.23	2.26	10	4
1:A:39:TYR:HA	1:A:71:GLU:CA	1.23	1.62	10	10
1:A:20:LEU:HB2	1:A:48:ASP:CB	1.23	1.61	5	10
1:A:2:ASP:CG	1:A:35:VAL:HG12	1.23	1.53	9	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:SD	1.23	1.72	1	4
1:A:38:VAL:C	1:A:71:GLU:HB2	1.23	1.51	1	3
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:HD2	1.22	1.45	10	1
1:A:11:ALA:O	1:A:40:SER:HA	1.22	1.29	1	10
1:A:23:LEU:HD11	1:A:72:ILE:CG2	1.22	1.62	8	7
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CZ3	1.22	1.92	8	10
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:CE	1.22	2.01	1	7
1:A:20:LEU:HA	1:A:52:TRP:CZ2	1.20	1.69	1	10
1:A:19:PRO:CG	1:A:70:TYR:OH	1.20	1.89	6	8
1:A:31:LYS:O	1:A:76:LYS:HB3	1.20	1.29	10	7
1:A:20:LEU:HD23	1:A:20:LEU:O	1.20	1.29	10	3
1:A:2:ASP:OD1	1:A:35:VAL:HG12	1.20	1.36	9	1
1:A:58:GLN:HE22	1:A:76:LYS:NZ	1.20	1.33	1	3
1:A:2:ASP:CB	1:A:35:VAL:CG1	1.19	2.20	8	9
1:A:39:TYR:CA	1:A:71:GLU:CB	1.19	2.20	5	10
1:A:58:GLN:CG	1:A:76:LYS:HE3	1.19	1.65	10	2
1:A:58:GLN:OE1	1:A:74:MET:SD	1.19	2.01	1	3
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:N	1.19	1.76	8	10
1:A:17:PRO:O	1:A:19:PRO:N	1.19	1.73	6	5
1:A:23:LEU:CD2	1:A:49:ALA:O	1.18	1.89	3	5
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:SER:C	1.18	2.10	8	3
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:HD23	1.18	1.59	4	5
1:A:19:PRO:CD	1:A:45:THR:HG21	1.18	1.69	10	1
1:A:23:LEU:HB3	1:A:74:MET:SD	1.18	1.76	2	4
1:A:3:VAL:N	1:A:61:VAL:HG11	1.18	1.53	7	8
1:A:15:TYR:CE1	1:A:16:CYS:HB2	1.18	1.72	2	8
1:A:19:PRO:HD2	1:A:45:THR:CG2	1.18	1.68	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:ILE:CG2	1:A:76:LYS:HZ3	1.18	1.52	6	2
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:HD23	1.17	1.38	4	2
1:A:45:THR:CB	1:A:52:TRP:CZ2	1.17	2.16	3	2
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:CD2	1.17	2.12	2	5
1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:HD12	1.17	1.60	7	4
1:A:49:ALA:HB3	1:A:70:TYR:OH	1.16	1.24	1	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:38:VAL:CG2	1.16	1.56	5	1
1:A:11:ALA:O	1:A:40:SER:CA	1.16	1.94	3	10
1:A:59:GLU:CB	1:A:75:LYS:CB	1.16	2.06	3	10
1:A:5:PRO:CA	1:A:35:VAL:CB	1.16	2.14	10	6
1:A:45:THR:OG1	1:A:52:TRP:CE2	1.16	1.98	3	1
1:A:49:ALA:CA	1:A:52:TRP:CE2	1.15	2.29	7	10
1:A:36:ILE:CG2	1:A:76:LYS:HE3	1.15	1.71	9	5
1:A:17:PRO:HB3	1:A:44:GLY:H	1.15	0.98	8	10
1:A:61:VAL:HG21	1:A:73:VAL:CB	1.15	1.71	5	8
1:A:16:CYS:O	1:A:45:THR:CA	1.15	1.90	1	1
1:A:20:LEU:HB2	1:A:48:ASP:HB3	1.15	1.18	1	10
1:A:27:TYR:HB3	1:A:56:SER:HB3	1.14	1.16	5	10
1:A:23:LEU:HD22	1:A:49:ALA:O	1.14	1.38	7	5
1:A:16:CYS:SG	1:A:48:ASP:OD2	1.14	2.04	5	4
1:A:32:VAL:CG2	1:A:77:VAL:C	1.14	2.16	8	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:72:ILE:CG2	1.13	1.71	1	3
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:CZ2	1.13	2.29	1	10
1:A:16:CYS:C	1:A:44:GLY:O	1.13	1.79	7	7
1:A:20:LEU:HD23	1:A:20:LEU:C	1.13	1.63	1	3
1:A:61:VAL:HG23	1:A:73:VAL:C	1.13	1.47	10	4
1:A:20:LEU:CD2	1:A:20:LEU:C	1.12	2.17	10	5
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:CG	1.12	2.19	10	10
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CZ	1.12	1.73	4	7
1:A:23:LEU:HB3	1:A:74:MET:HE3	1.12	1.12	9	3
1:A:5:PRO:CA	1:A:35:VAL:HB	1.12	1.74	10	6
1:A:23:LEU:HB2	1:A:52:TRP:CG	1.12	1.78	5	7
1:A:23:LEU:CG	1:A:52:TRP:CE3	1.12	2.32	9	6
1:A:11:ALA:HB2	1:A:19:PRO:HB3	1.12	1.14	6	10
1:A:36:ILE:N	1:A:76:LYS:HZ1	1.12	1.43	6	2
1:A:20:LEU:CB	1:A:48:ASP:HB3	1.11	1.74	5	10
1:A:15:TYR:O	1:A:19:PRO:HD2	1.11	1.43	6	10
1:A:7:ARG:HD3	1:A:36:ILE:HB	1.11	1.22	9	6
1:A:7:ARG:HE	1:A:29:GLN:CG	1.11	1.58	5	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:52:TRP:CZ2	1.11	0.77	3	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:72:ILE:HG21	1.11	1.22	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:HG21	1.11	1.15	7	6
1:A:30:ALA:HB1	1:A:76:LYS:HG3	1.11	1.22	8	10
1:A:16:CYS:O	1:A:44:GLY:O	1.11	1.68	7	8
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE1	1.11	1.80	8	8
1:A:17:PRO:O	1:A:19:PRO:HD2	1.11	1.28	6	4
1:A:14:SER:CB	1:A:19:PRO:HD3	1.10	1.77	4	10
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CG	1.10	2.31	5	10
1:A:14:SER:CB	1:A:19:PRO:CD	1.10	2.29	4	10
1:A:23:LEU:HD13	1:A:52:TRP:CE3	1.10	1.79	3	5
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:CD	1.10	1.75	2	10
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:HG23	1.10	1.11	2	6
1:A:53:ILE:HD11	1:A:58:GLN:O	1.10	1.43	4	6
1:A:46:LYS:HG3	1:A:70:TYR:CE1	1.10	1.82	1	1
1:A:14:SER:O	1:A:15:TYR:CD2	1.10	2.04	7	4
1:A:9:ILE:C	1:A:39:TYR:CE1	1.10	2.24	4	1
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:HG11	1.09	1.21	1	7
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:HE3	1.09	1.77	10	4
1:A:11:ALA:N	1:A:39:TYR:O	1.09	1.85	7	10
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:CG2	1.09	1.74	5	1
1:A:59:GLU:H	1:A:75:LYS:C	1.09	1.49	6	10
1:A:11:ALA:O	1:A:40:SER:CB	1.09	2.00	6	10
1:A:61:VAL:HG22	1:A:73:VAL:O	1.09	1.36	5	3
1:A:3:VAL:HG23	1:A:61:VAL:HG12	1.09	1.21	9	7
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:TYR:CD2	1.08	1.70	2	5
1:A:53:ILE:CB	1:A:74:MET:SD	1.08	2.40	10	2
1:A:9:ILE:HG23	1:A:38:VAL:HA	1.08	1.23	8	3
1:A:14:SER:CB	1:A:19:PRO:N	1.08	2.13	5	10
1:A:9:ILE:CG1	1:A:38:VAL:CB	1.08	2.32	8	3
1:A:32:VAL:HG22	1:A:78:LYS:N	1.08	1.56	8	1
1:A:9:ILE:O	1:A:38:VAL:CA	1.08	2.01	5	10
1:A:39:TYR:HA	1:A:71:GLU:HB3	1.08	1.14	2	10
1:A:5:PRO:CA	1:A:35:VAL:HG23	1.08	1.56	10	5
1:A:45:THR:HG23	1:A:49:ALA:HB2	1.08	1.26	5	7
1:A:16:CYS:HB3	1:A:20:LEU:HB3	1.08	1.22	9	4
1:A:9:ILE:CG1	1:A:38:VAL:HG23	1.08	1.77	4	3
1:A:23:LEU:CD1	1:A:52:TRP:CE3	1.08	2.37	7	7
1:A:23:LEU:HB3	1:A:74:MET:CE	1.08	1.78	9	4
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:CB	1.08	1.79	9	3
1:A:61:VAL:HG21	1:A:73:VAL:C	1.07	1.57	10	8
1:A:12:ARG:HD3	1:A:12:ARG:N	1.07	1.61	8	7
1:A:61:VAL:HG21	1:A:73:VAL:CA	1.07	1.78	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:ILE:HG23	1:A:76:LYS:HE3	1.07	1.21	4	5
1:A:16:CYS:HB3	1:A:20:LEU:HB2	1.07	1.19	7	9
1:A:16:CYS:SG	1:A:48:ASP:CG	1.07	2.33	2	5
1:A:19:PRO:C	1:A:52:TRP:CH2	1.07	2.26	1	10
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:CB	1.07	2.02	1	10
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:HD3	1.07	1.69	7	8
1:A:76:LYS:HA	1:A:76:LYS:HE2	1.07	1.13	10	2
1:A:9:ILE:HG12	1:A:38:VAL:HB	1.07	1.23	6	3
1:A:7:ARG:CD	1:A:36:ILE:HB	1.07	1.78	9	10
1:A:23:LEU:CD2	1:A:72:ILE:HG21	1.06	1.79	1	1
1:A:5:PRO:HB2	1:A:36:ILE:N	1.06	1.65	6	10
1:A:36:ILE:HG12	1:A:76:LYS:NZ	1.06	1.63	8	3
1:A:34:GLU:HB3	1:A:76:LYS:CG	1.06	1.79	9	10
1:A:27:TYR:CD2	1:A:56:SER:CB	1.06	2.38	2	10
1:A:9:ILE:CG1	1:A:38:VAL:HB	1.06	1.79	8	3
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:HD3	1.06	1.62	1	1
1:A:7:ARG:HG3	1:A:7:ARG:HH11	1.06	1.11	9	1
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CE2	1.06	2.37	7	10
1:A:64:PHE:CE1	1:A:72:ILE:CD1	1.06	2.38	2	5
1:A:9:ILE:HG23	1:A:38:VAL:N	1.06	1.66	8	3
1:A:35:VAL:CA	1:A:76:LYS:NZ	1.06	2.19	3	3
1:A:32:VAL:HG23	1:A:78:LYS:N	1.06	1.63	8	1
1:A:11:ALA:HB3	1:A:19:PRO:HG3	1.05	1.28	3	10
1:A:2:ASP:HB2	1:A:35:VAL:CG1	1.05	1.75	8	7
1:A:17:PRO:CD	1:A:70:TYR:CE2	1.05	2.39	10	1
1:A:20:LEU:N	1:A:52:TRP:CZ2	1.05	2.24	1	10
1:A:7:ARG:HG2	1:A:8:VAL:H	1.05	1.11	4	10
1:A:74:MET:O	1:A:76:LYS:NZ	1.05	1.87	7	3
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HD2	1.05	1.51	6	7
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:CE	1.05	1.80	2	4
1:A:35:VAL:HA	1:A:74:MET:O	1.05	1.52	2	6
1:A:39:TYR:CD1	1:A:39:TYR:N	1.04	2.19	1	5
1:A:27:TYR:CB	1:A:56:SER:CB	1.04	2.33	2	10
1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CD1	1.04	2.19	4	5
1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:ILE:CG1	1.04	1.65	2	8
1:A:5:PRO:CG	1:A:35:VAL:CB	1.04	2.24	1	5
1:A:23:LEU:HB2	1:A:52:TRP:HB2	1.04	1.17	4	10
1:A:61:VAL:HG21	1:A:73:VAL:HB	1.04	1.26	7	8
1:A:23:LEU:HB3	1:A:52:TRP:HB2	1.04	1.28	3	6
1:A:19:PRO:C	1:A:52:TRP:CZ2	1.04	2.31	6	10
1:A:45:THR:HG21	1:A:70:TYR:HE1	1.04	1.11	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:VAL:C	1:A:76:LYS:NZ	1.04	2.09	3	3
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:H	1.04	1.64	8	9
1:A:58:GLN:OE1	1:A:74:MET:HE3	1.04	1.51	2	2
1:A:38:VAL:HG11	1:A:52:TRP:CZ3	1.04	1.87	5	2
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:HG22	1.04	1.23	5	1
1:A:16:CYS:HB2	1:A:20:LEU:HB3	1.03	1.20	3	6
1:A:38:VAL:HG13	1:A:72:ILE:H	1.03	1.07	8	9
1:A:14:SER:O	1:A:15:TYR:HD1	1.03	1.23	2	3
1:A:9:ILE:HG13	1:A:38:VAL:HG23	1.03	1.26	8	3
1:A:58:GLN:HE22	1:A:76:LYS:CE	1.03	1.67	2	3
1:A:7:ARG:HH21	1:A:29:GLN:CB	1.03	1.65	10	6
1:A:58:GLN:OE1	1:A:74:MET:CE	1.03	2.07	2	3
1:A:16:CYS:O	1:A:45:THR:HA	1.03	1.39	1	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:CA	1.03	2.37	4	3
1:A:35:VAL:CA	1:A:76:LYS:HZ2	1.03	1.67	3	2
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:CB	1.02	2.37	7	9
1:A:7:ARG:NH1	1:A:29:GLN:HB3	1.02	1.69	7	2
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:HD3	1.02	0.96	3	4
1:A:24:ILE:CA	1:A:27:TYR:CD2	1.02	2.36	2	5
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CE2	1.02	2.39	8	8
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:SER:C	1.02	1.72	8	3
1:A:9:ILE:HD12	1:A:37:SER:O	1.02	1.52	3	2
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:CG2	1.02	1.85	6	5
1:A:14:SER:O	1:A:15:TYR:CG	1.02	2.13	3	9
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:HD13	1.02	1.82	7	4
1:A:15:TYR:CE2	1:A:16:CYS:SG	1.02	2.53	4	2
1:A:2:ASP:CB	1:A:75:LYS:HD2	1.01	1.84	6	4
1:A:20:LEU:HD22	1:A:20:LEU:C	1.01	1.74	9	2
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:HG21	1.01	1.32	6	5
1:A:19:PRO:HD2	1:A:70:TYR:OH	1.01	1.43	8	8
1:A:27:TYR:HB2	1:A:58:GLN:OE1	1.01	1.54	8	3
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:CG1	1.01	1.81	1	9
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:CB	1.01	1.85	2	6
1:A:27:TYR:HA	1:A:58:GLN:NE2	1.01	1.71	8	8
1:A:38:VAL:C	1:A:39:TYR:HD1	1.01	1.57	2	10
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:HD22	1.01	1.73	2	5
1:A:17:PRO:HD2	1:A:70:TYR:CE2	1.01	1.91	10	1
1:A:7:ARG:CG	1:A:7:ARG:HH11	1.01	1.68	9	3
1:A:12:ARG:HG3	1:A:69:TYR:CE1	1.01	1.90	7	1
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CH2	1.00	2.14	8	10
1:A:35:VAL:C	1:A:76:LYS:HZ1	1.00	1.55	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:TYR:CE2	1:A:18:GLY:HA2	1.00	1.90	1	3
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:SD	1.00	1.96	9	6
1:A:48:ASP:O	1:A:52:TRP:CD1	1.00	2.14	9	10
1:A:7:ARG:HD3	1:A:9:ILE:HD11	1.00	1.28	2	4
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:CD	1.00	2.25	8	3
1:A:49:ALA:HA	1:A:52:TRP:NE1	1.00	1.71	2	10
1:A:64:PHE:CE1	1:A:72:ILE:CG1	1.00	2.44	5	9
1:A:38:VAL:HG11	1:A:52:TRP:HZ3	1.00	1.12	5	1
1:A:15:TYR:CD2	1:A:16:CYS:N	0.99	2.30	4	3
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:HG22	0.99	1.87	1	1
1:A:7:ARG:HD2	1:A:36:ILE:HB	0.99	1.31	10	7
1:A:58:GLN:CD	1:A:76:LYS:HE3	0.99	1.78	10	2
1:A:12:ARG:CD	1:A:12:ARG:N	0.99	2.25	7	5
1:A:20:LEU:H	1:A:45:THR:CG2	0.99	1.70	10	1
1:A:36:ILE:HG13	1:A:74:MET:SD	0.99	1.96	7	4
1:A:4:LYS:N	1:A:5:PRO:CD	0.99	2.26	8	10
1:A:34:GLU:HB3	1:A:76:LYS:HG3	0.99	1.32	9	7
1:A:20:LEU:N	1:A:45:THR:CG2	0.99	2.25	10	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:38:VAL:HG21	0.99	1.34	5	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:74:MET:SD	0.99	1.96	4	5
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CG	0.99	1.93	8	8
1:A:75:LYS:O	1:A:77:VAL:HG13	0.99	1.57	6	3
1:A:34:GLU:O	1:A:75:LYS:CA	0.98	2.11	2	10
1:A:40:SER:O	1:A:69:TYR:CA	0.98	2.12	8	7
1:A:23:LEU:HD12	1:A:49:ALA:O	0.98	1.58	4	5
1:A:38:VAL:HG13	1:A:72:ILE:N	0.98	1.73	8	6
1:A:5:PRO:HG3	1:A:35:VAL:CG1	0.98	1.88	4	5
1:A:2:ASP:CG	1:A:35:VAL:HG11	0.98	1.79	10	1
1:A:15:TYR:HD1	1:A:17:PRO:C	0.98	1.62	2	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:70:TYR:CZ	0.98	1.93	1	1
1:A:7:ARG:HD2	1:A:36:ILE:CG2	0.98	1.89	2	9
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CE3	0.98	2.16	8	10
1:A:61:VAL:HB	1:A:73:VAL:HG23	0.98	1.33	4	10
1:A:20:LEU:N	1:A:45:THR:HG22	0.98	1.74	10	1
1:A:39:TYR:HA	1:A:71:GLU:HA	0.98	1.30	10	9
1:A:3:VAL:C	1:A:5:PRO:CD	0.97	2.31	1	10
1:A:34:GLU:O	1:A:75:LYS:HA	0.97	1.59	8	10
1:A:76:LYS:HA	1:A:76:LYS:CE	0.97	1.88	5	2
1:A:27:TYR:CG	1:A:56:SER:CB	0.97	2.47	2	4
1:A:20:LEU:HD12	1:A:48:ASP:CB	0.97	1.88	8	3
1:A:19:PRO:HB2	1:A:52:TRP:HH2	0.97	1.16	2	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:TYR:CD2	1:A:56:SER:HB3	0.97	1.92	2	8
1:A:34:GLU:O	1:A:75:LYS:C	0.97	2.02	4	10
1:A:27:TYR:CD2	1:A:56:SER:CA	0.97	2.47	1	10
1:A:49:ALA:CA	1:A:52:TRP:NE1	0.97	2.27	4	10
1:A:23:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HG22	0.97	1.33	8	6
1:A:20:LEU:CD2	1:A:20:LEU:O	0.97	2.11	2	2
1:A:9:ILE:O	1:A:39:TYR:HD1	0.97	1.42	4	1
1:A:10:ASP:CG	1:A:39:TYR:CE2	0.97	2.36	10	10
1:A:4:LYS:N	1:A:5:PRO:HD3	0.97	1.75	8	10
1:A:75:LYS:O	1:A:77:VAL:HG23	0.97	1.57	7	4
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:HB2	0.97	1.74	1	3
1:A:19:PRO:CD	1:A:45:THR:CG2	0.97	2.37	10	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:72:ILE:CG2	0.96	2.41	8	5
1:A:17:PRO:HB3	1:A:44:GLY:N	0.96	1.74	8	7
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:HG23	0.96	1.90	1	7
1:A:36:ILE:CG1	1:A:74:MET:SD	0.96	2.53	7	5
1:A:26:ALA:HB1	1:A:36:ILE:HD13	0.96	1.37	5	1
1:A:3:VAL:N	1:A:61:VAL:CG1	0.96	2.21	7	10
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:HB2	0.96	1.37	2	1
1:A:39:TYR:HD1	1:A:39:TYR:N	0.96	1.54	10	4
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:HD2	0.96	1.33	6	4
1:A:61:VAL:CG2	1:A:74:MET:N	0.96	2.28	6	5
1:A:19:PRO:CB	1:A:52:TRP:CH2	0.96	2.48	5	10
1:A:36:ILE:CG2	1:A:76:LYS:CE	0.95	2.43	4	5
1:A:45:THR:OG1	1:A:49:ALA:HB2	0.95	1.60	6	3
1:A:45:THR:CB	1:A:70:TYR:HE1	0.95	1.73	7	5
1:A:17:PRO:CB	1:A:44:GLY:H	0.95	1.72	6	7
1:A:15:TYR:CD1	1:A:18:GLY:N	0.95	2.35	6	4
1:A:19:PRO:HG2	1:A:45:THR:CB	0.95	1.90	1	10
1:A:9:ILE:HD11	1:A:36:ILE:HB	0.95	1.38	2	3
1:A:20:LEU:HD12	1:A:48:ASP:OD1	0.95	1.60	3	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:49:ALA:O	0.95	2.15	9	4
1:A:48:ASP:HB3	1:A:52:TRP:HE1	0.95	1.20	1	8
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CD1	0.95	1.97	5	10
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:CD	0.95	1.62	3	7
1:A:57:GLY:O	1:A:78:LYS:N	0.95	2.00	5	10
1:A:20:LEU:O	1:A:52:TRP:CD2	0.95	2.19	1	9
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:CG	0.95	2.44	8	10
1:A:23:LEU:N	1:A:52:TRP:HE3	0.95	1.59	4	10
1:A:15:TYR:CG	1:A:16:CYS:N	0.95	2.35	5	3
1:A:21:MET:O	1:A:24:ILE:HG13	0.95	1.61	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:TYR:CD2	1:A:18:GLY:HA2	0.94	1.97	1	4
1:A:2:ASP:C	1:A:5:PRO:HD3	0.94	1.82	9	10
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:CG	0.94	1.92	8	9
1:A:6:ASP:N	1:A:35:VAL:HG23	0.94	1.75	10	3
1:A:2:ASP:OD2	1:A:75:LYS:HD2	0.94	1.61	9	2
1:A:9:ILE:HG23	1:A:38:VAL:CB	0.94	1.92	4	3
1:A:76:LYS:HZ2	1:A:76:LYS:N	0.94	1.61	7	1
1:A:36:ILE:HG23	1:A:76:LYS:CE	0.94	1.91	4	6
1:A:19:PRO:HG3	1:A:40:SER:HB2	0.94	1.35	9	10
1:A:7:ARG:HG2	1:A:8:VAL:N	0.94	1.75	6	10
1:A:53:ILE:CD1	1:A:58:GLN:O	0.94	2.14	4	6
1:A:15:TYR:CD1	1:A:18:GLY:HA2	0.94	1.95	9	7
1:A:59:GLU:HB3	1:A:75:LYS:HB3	0.94	1.36	3	9
1:A:20:LEU:HD22	1:A:20:LEU:O	0.94	1.62	9	2
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:CD1	0.94	2.45	7	4
1:A:61:VAL:HG21	1:A:74:MET:N	0.94	1.77	6	3
1:A:15:TYR:HD1	1:A:16:CYS:N	0.94	1.58	6	6
1:A:7:ARG:HD3	1:A:9:ILE:CD1	0.94	1.93	2	4
1:A:45:THR:HB	1:A:70:TYR:CE2	0.94	1.98	10	1
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:HG13	0.94	1.92	9	3
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:TYR:HD2	0.94	1.13	2	5
1:A:53:ILE:HD13	1:A:53:ILE:O	0.94	1.62	4	2
1:A:24:ILE:HG12	1:A:52:TRP:HB3	0.94	1.40	4	3
1:A:3:VAL:H	1:A:61:VAL:HG11	0.94	0.77	7	7
1:A:49:ALA:N	1:A:52:TRP:NE1	0.93	2.16	7	10
1:A:66:ARG:CD	1:A:66:ARG:H	0.93	1.74	3	2
1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:HD1	0.93	1.56	5	6
1:A:49:ALA:HA	1:A:52:TRP:CD2	0.93	1.97	7	9
1:A:23:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HG21	0.93	1.39	8	3
1:A:44:GLY:O	1:A:47:LYS:HG2	0.93	1.63	6	10
1:A:53:ILE:C	1:A:53:ILE:HD13	0.93	1.84	4	3
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:HG3	0.93	1.36	8	3
1:A:23:LEU:N	1:A:52:TRP:CE3	0.93	2.37	5	10
1:A:39:TYR:CB	1:A:71:GLU:HB3	0.93	1.93	5	10
1:A:61:VAL:CB	1:A:73:VAL:HG23	0.93	1.93	4	4
1:A:2:ASP:CG	1:A:35:VAL:CG1	0.93	2.37	9	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:49:ALA:O	0.92	1.61	3	2
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:HD2	0.92	1.38	7	9
1:A:36:ILE:HD12	1:A:76:LYS:HE2	0.92	1.39	2	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:48:ASP:OD2	0.92	1.63	6	2
1:A:31:LYS:C	1:A:76:LYS:HB3	0.92	1.83	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HD12	1:A:52:TRP:CE3	0.92	1.99	6	3
1:A:19:PRO:CG	1:A:70:TYR:CZ	0.92	2.52	8	7
1:A:11:ALA:HB3	1:A:19:PRO:HB3	0.92	1.06	6	6
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:HG22	0.92	1.26	5	1
1:A:40:SER:O	1:A:69:TYR:C	0.92	2.07	8	7
1:A:16:CYS:O	1:A:48:ASP:HB2	0.91	1.65	4	10
1:A:15:TYR:CD1	1:A:17:PRO:C	0.91	2.43	2	4
1:A:64:PHE:CZ	1:A:72:ILE:HD11	0.91	1.99	5	5
1:A:9:ILE:HD11	1:A:36:ILE:HD12	0.91	1.42	7	1
1:A:14:SER:HB3	1:A:19:PRO:HD3	0.91	1.38	1	5
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:HG2	0.91	1.96	7	3
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:O	0.91	2.17	6	4
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:NZ	0.91	2.15	1	3
1:A:19:PRO:HG2	1:A:45:THR:CG2	0.91	1.95	7	9
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CZ	0.91	2.00	5	10
1:A:14:SER:OG	1:A:18:GLY:C	0.91	2.07	4	10
1:A:17:PRO:O	1:A:20:LEU:N	0.90	2.04	3	5
1:A:3:VAL:C	1:A:5:PRO:HD2	0.90	1.86	1	10
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:HB	0.90	1.94	4	8
1:A:5:PRO:HA	1:A:35:VAL:CB	0.90	1.81	10	1
1:A:38:VAL:HG11	1:A:72:ILE:HG22	0.90	1.43	1	1
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:CG2	0.90	2.16	5	5
1:A:23:LEU:HB2	1:A:52:TRP:CD2	0.90	2.02	7	6
1:A:49:ALA:HB2	1:A:70:TYR:CZ	0.90	2.00	10	2
1:A:19:PRO:CD	1:A:70:TYR:HH	0.90	1.70	8	3
1:A:19:PRO:HG2	1:A:45:THR:HB	0.90	1.42	1	9
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:HB2	0.90	1.42	1	5
1:A:48:ASP:C	1:A:52:TRP:NE1	0.90	2.25	9	10
1:A:5:PRO:CB	1:A:36:ILE:N	0.90	2.34	7	10
1:A:23:LEU:HD13	1:A:74:MET:SD	0.90	2.06	10	2
1:A:23:LEU:HG	1:A:52:TRP:HE3	0.90	1.16	9	4
1:A:23:LEU:CD1	1:A:72:ILE:HG21	0.90	1.97	9	4
1:A:20:LEU:N	1:A:45:THR:OG1	0.90	2.03	9	5
1:A:15:TYR:CD1	1:A:16:CYS:N	0.90	2.39	6	7
1:A:45:THR:OG1	1:A:52:TRP:CH2	0.90	1.81	3	1
1:A:5:PRO:HB3	1:A:35:VAL:C	0.90	1.75	1	5
1:A:23:LEU:CB	1:A:52:TRP:CE3	0.89	2.55	4	9
1:A:40:SER:O	1:A:69:TYR:HA	0.89	1.64	8	7
1:A:15:TYR:CZ	1:A:16:CYS:SG	0.89	2.66	5	2
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CZ	0.89	2.01	8	3
1:A:38:VAL:N	1:A:72:ILE:O	0.89	2.06	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ILE:CG1	1:A:58:GLN:O	0.89	2.21	5	10
1:A:5:PRO:HG3	1:A:35:VAL:CB	0.89	1.97	1	5
1:A:5:PRO:HB3	1:A:35:VAL:CG2	0.89	1.97	4	5
1:A:71:GLU:O	1:A:72:ILE:HD12	0.89	1.68	7	4
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:CD	0.88	1.98	6	9
1:A:5:PRO:C	1:A:35:VAL:HG23	0.88	1.88	10	2
1:A:27:TYR:CB	1:A:58:GLN:OE1	0.88	2.21	8	4
1:A:7:ARG:HB2	1:A:36:ILE:HG22	0.88	1.43	6	5
1:A:37:SER:HA	1:A:73:VAL:CG1	0.88	1.99	4	8
1:A:45:THR:HG23	1:A:49:ALA:CB	0.88	1.99	7	4
1:A:23:LEU:CG	1:A:74:MET:SD	0.88	2.62	1	5
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:CE	0.88	2.52	4	4
1:A:23:LEU:HB2	1:A:52:TRP:CE3	0.88	2.04	7	7
1:A:19:PRO:HG2	1:A:45:THR:HG21	0.87	1.46	7	9
1:A:36:ILE:HG21	1:A:76:LYS:HE3	0.87	1.42	9	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:22:GLU:C	0.87	1.88	4	3
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:CA	0.87	2.29	10	7
1:A:2:ASP:CA	1:A:35:VAL:HG11	0.87	1.98	6	6
1:A:36:ILE:HG23	1:A:76:LYS:HZ3	0.87	1.17	3	2
1:A:36:ILE:CG2	1:A:76:LYS:NZ	0.87	2.27	6	2
1:A:36:ILE:O	1:A:73:VAL:HA	0.87	1.69	4	8
1:A:12:ARG:NH2	1:A:41:THR:OG1	0.87	2.07	2	2
1:A:3:VAL:HA	1:A:61:VAL:HG11	0.87	1.44	6	7
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:HE3	0.87	1.47	5	3
1:A:15:TYR:HD1	1:A:18:GLY:N	0.87	1.67	2	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:36:ILE:HD12	0.87	1.46	8	2
1:A:24:ILE:HG23	1:A:52:TRP:HA	0.87	1.45	8	4
1:A:38:VAL:C	1:A:39:TYR:CD1	0.86	2.48	2	10
1:A:20:LEU:C	1:A:52:TRP:CD2	0.86	2.49	1	10
1:A:59:GLU:O	1:A:74:MET:HA	0.86	1.71	8	10
1:A:46:LYS:HA	1:A:70:TYR:CE1	0.86	2.05	1	2
1:A:2:ASP:CB	1:A:35:VAL:CG2	0.86	2.53	6	5
1:A:27:TYR:CG	1:A:56:SER:HA	0.86	2.05	5	10
1:A:64:PHE:CE1	1:A:72:ILE:HG13	0.86	2.06	7	5
1:A:27:TYR:CD1	1:A:28:LYS:N	0.86	2.43	8	10
1:A:40:SER:HG	1:A:70:TYR:HE2	0.86	1.12	3	2
1:A:46:LYS:N	1:A:70:TYR:CE2	0.86	2.43	1	1
1:A:2:ASP:CB	1:A:35:VAL:HG21	0.86	2.00	6	5
1:A:7:ARG:HD2	1:A:36:ILE:HG21	0.86	1.47	2	4
1:A:20:LEU:CD1	1:A:48:ASP:OD2	0.86	2.22	3	3
1:A:32:VAL:HG22	1:A:77:VAL:CA	0.86	1.99	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:CB	1:A:74:MET:SD	0.86	2.63	4	4
1:A:31:LYS:C	1:A:76:LYS:CB	0.86	2.43	6	7
1:A:20:LEU:HG	1:A:48:ASP:OD1	0.86	1.71	2	7
1:A:34:GLU:CB	1:A:76:LYS:HB2	0.86	2.01	10	4
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:CE	0.85	2.53	10	5
1:A:9:ILE:HG13	1:A:38:VAL:CG2	0.85	1.90	8	3
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:HD2	0.85	1.29	1	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:35:VAL:CG1	0.85	2.23	9	1
1:A:20:LEU:C	1:A:52:TRP:CE2	0.85	2.48	8	10
1:A:39:TYR:CA	1:A:71:GLU:HB2	0.85	1.98	10	3
1:A:19:PRO:CG	1:A:40:SER:HB2	0.85	2.00	9	10
1:A:7:ARG:CD	1:A:9:ILE:HD11	0.85	2.02	7	5
1:A:17:PRO:CG	1:A:70:TYR:CE2	0.85	2.60	10	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:76:LYS:H	0.85	1.68	7	1
1:A:36:ILE:HG12	1:A:76:LYS:HZ1	0.85	1.30	8	1
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:CB	0.85	2.39	1	7
1:A:23:LEU:CD2	1:A:53:ILE:HG22	0.85	2.00	6	3
1:A:32:VAL:CG2	1:A:78:LYS:CA	0.85	2.55	8	1
1:A:17:PRO:CA	1:A:19:PRO:HD2	0.85	2.02	1	10
1:A:23:LEU:CB	1:A:74:MET:HE3	0.85	2.01	9	3
1:A:23:LEU:HB3	1:A:52:TRP:CB	0.85	1.83	7	4
1:A:15:TYR:CD1	1:A:18:GLY:CA	0.85	2.60	6	5
1:A:7:ARG:HD2	1:A:36:ILE:CB	0.85	2.01	6	8
1:A:11:ALA:O	1:A:40:SER:OG	0.84	1.94	6	10
1:A:20:LEU:CD1	1:A:48:ASP:OD1	0.84	2.23	8	8
1:A:18:GLY:N	1:A:19:PRO:CD	0.84	2.40	10	10
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:CA	0.84	2.00	2	5
1:A:27:TYR:HA	1:A:58:GLN:HE22	0.84	1.31	2	4
1:A:2:ASP:N	1:A:75:LYS:HB2	0.84	1.87	7	5
1:A:23:LEU:CD2	1:A:72:ILE:CG2	0.84	2.47	1	2
1:A:46:LYS:CA	1:A:70:TYR:CZ	0.84	2.60	1	1
1:A:39:TYR:HB3	1:A:71:GLU:HB3	0.84	1.46	5	10
1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:ILE:HG12	0.84	1.29	8	3
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:SER:O	0.84	1.66	8	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:16:CYS:HB2	0.84	2.06	2	7
1:A:7:ARG:CZ	1:A:9:ILE:HD11	0.84	2.02	1	3
1:A:20:LEU:C	1:A:52:TRP:CD1	0.84	2.51	8	10
1:A:45:THR:CB	1:A:70:TYR:CE2	0.84	2.61	10	1
1:A:5:PRO:HG3	1:A:35:VAL:HB	0.84	1.47	1	1
1:A:70:TYR:CD1	1:A:71:GLU:N	0.84	2.46	10	2
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:HG21	0.84	1.96	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LYS:CG	1:A:70:TYR:CD1	0.83	2.56	1	2
1:A:58:GLN:HE22	1:A:76:LYS:CD	0.83	1.61	2	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:36:ILE:CB	0.83	2.03	2	2
1:A:45:THR:C	1:A:70:TYR:CE2	0.83	2.52	1	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:HE1	0.83	1.33	6	8
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:N	0.83	2.38	4	3
1:A:74:MET:SD	1:A:74:MET:N	0.83	2.52	6	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:MET:N	0.83	1.86	3	3
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:HD13	0.83	1.50	7	4
1:A:19:PRO:HG3	1:A:40:SER:CB	0.83	2.04	9	10
1:A:11:ALA:HB2	1:A:19:PRO:CB	0.83	1.73	10	9
1:A:45:THR:HG21	1:A:70:TYR:CE1	0.83	1.94	7	5
1:A:10:ASP:CG	1:A:39:TYR:CZ	0.83	2.51	10	10
1:A:36:ILE:HG21	1:A:76:LYS:CE	0.83	2.04	9	4
1:A:23:LEU:CB	1:A:52:TRP:HE3	0.83	1.86	4	6
1:A:3:VAL:CG2	1:A:61:VAL:HG12	0.83	2.00	10	5
1:A:38:VAL:O	1:A:71:GLU:CG	0.82	2.27	1	3
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:HG3	0.82	1.89	10	10
1:A:9:ILE:HG13	1:A:36:ILE:HD13	0.82	1.48	9	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:C	0.82	1.92	6	8
1:A:23:LEU:HD12	1:A:52:TRP:CD2	0.82	2.08	9	2
1:A:12:ARG:CB	1:A:12:ARG:HH11	0.82	1.86	5	2
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:HD12	0.82	2.04	5	2
1:A:58:GLN:CD	1:A:76:LYS:HD3	0.82	1.94	6	3
1:A:2:ASP:CB	1:A:35:VAL:HG12	0.82	2.05	10	3
1:A:26:ALA:HB1	1:A:36:ILE:HD12	0.82	1.50	6	3
1:A:74:MET:O	1:A:76:LYS:CE	0.82	2.28	3	3
1:A:7:ARG:CD	1:A:36:ILE:CB	0.82	2.58	9	7
1:A:15:TYR:CE1	1:A:16:CYS:CB	0.82	2.60	2	3
1:A:20:LEU:HD22	1:A:21:MET:N	0.82	1.90	2	5
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:CE	0.82	2.05	5	5
1:A:76:LYS:CA	1:A:76:LYS:HE2	0.82	1.91	5	1
1:A:15:TYR:CG	1:A:18:GLY:N	0.82	2.48	6	5
1:A:34:GLU:HB3	1:A:76:LYS:HG2	0.82	1.51	7	5
1:A:63:VAL:O	1:A:71:GLU:O	0.81	1.98	6	10
1:A:36:ILE:N	1:A:76:LYS:NZ	0.81	2.26	6	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:HG23	0.81	2.06	4	4
1:A:9:ILE:HD13	1:A:23:LEU:HD23	0.81	1.53	8	2
1:A:35:VAL:HA	1:A:76:LYS:NZ	0.81	1.89	3	2
1:A:36:ILE:O	1:A:74:MET:HE3	0.81	1.76	3	2
1:A:7:ARG:HD3	1:A:9:ILE:CG1	0.81	2.06	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HD13	1:A:52:TRP:CZ3	0.81	2.10	3	3
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:SER:O	0.81	2.28	3	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:N	0.81	2.35	8	9
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:LYS:HB3	0.81	0.81	9	8
1:A:46:LYS:CG	1:A:70:TYR:CE1	0.81	2.64	1	1
1:A:48:ASP:C	1:A:52:TRP:HE1	0.81	1.79	9	10
1:A:17:PRO:HG2	1:A:40:SER:CB	0.81	2.06	10	2
1:A:46:LYS:HG3	1:A:70:TYR:HB2	0.80	1.53	7	5
1:A:39:TYR:CA	1:A:71:GLU:CA	0.80	2.55	10	7
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:HA	0.80	1.53	9	10
1:A:45:THR:CG2	1:A:52:TRP:CZ2	0.80	2.64	10	2
1:A:39:TYR:CA	1:A:71:GLU:HA	0.80	2.06	10	8
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:SD	0.80	2.69	5	6
1:A:20:LEU:HD23	1:A:52:TRP:CD1	0.80	2.12	2	2
1:A:32:VAL:HG23	1:A:78:LYS:CA	0.80	2.05	8	1
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:CA	0.80	2.07	8	10
1:A:20:LEU:CG	1:A:48:ASP:HB3	0.80	2.06	8	8
1:A:45:THR:CB	1:A:70:TYR:CE1	0.80	2.40	7	5
1:A:46:LYS:HG2	1:A:64:PHE:HB3	0.80	1.50	9	8
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:CB	0.80	2.06	2	1
1:A:66:ARG:HD2	1:A:66:ARG:H	0.80	1.34	3	1
1:A:9:ILE:C	1:A:38:VAL:HG23	0.80	1.97	4	9
1:A:58:GLN:HE22	1:A:76:LYS:HZ3	0.80	1.18	1	2
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:CG2	0.80	2.38	10	6
1:A:24:ILE:HD12	1:A:25:LYS:N	0.80	1.92	6	3
1:A:69:TYR:O	1:A:69:TYR:CD1	0.80	2.35	6	2
1:A:20:LEU:HA	1:A:52:TRP:HE1	0.80	1.34	5	3
1:A:15:TYR:CD2	1:A:18:GLY:CA	0.80	2.64	1	3
1:A:39:TYR:CA	1:A:70:TYR:O	0.80	2.29	10	1
1:A:58:GLN:CG	1:A:76:LYS:CE	0.80	2.58	10	2
1:A:2:ASP:CG	1:A:75:LYS:HD2	0.80	1.96	3	5
1:A:17:PRO:CG	1:A:70:TYR:CD2	0.80	2.65	10	1
1:A:36:ILE:O	1:A:74:MET:SD	0.80	2.40	6	1
1:A:7:ARG:NE	1:A:9:ILE:HD11	0.79	1.91	1	4
1:A:3:VAL:HG23	1:A:61:VAL:CG1	0.79	2.05	10	7
1:A:7:ARG:HB3	1:A:36:ILE:HB	0.79	1.52	8	8
1:A:5:PRO:CA	1:A:35:VAL:HG21	0.79	1.72	10	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:HB2	0.79	2.07	10	2
1:A:15:TYR:CD1	1:A:15:TYR:C	0.79	2.55	2	4
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:CE	0.79	2.07	6	2
1:A:19:PRO:N	1:A:45:THR:HG21	0.79	1.91	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:PRO:HA	1:A:35:VAL:HG21	0.79	0.79	10	1
1:A:50:PRO:HG3	1:A:64:PHE:CZ	0.79	2.12	5	4
1:A:57:GLY:O	1:A:77:VAL:N	0.79	2.16	1	10
1:A:40:SER:OG	1:A:70:TYR:OH	0.79	1.99	3	7
1:A:7:ARG:NE	1:A:29:GLN:CG	0.79	2.43	5	1
1:A:15:TYR:N	1:A:42:ASP:OD2	0.79	2.16	4	5
1:A:11:ALA:HB1	1:A:14:SER:HB2	0.79	1.54	7	10
1:A:19:PRO:CG	1:A:70:TYR:CE1	0.79	2.66	8	8
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HG2	0.79	1.93	10	2
1:A:27:TYR:HA	1:A:58:GLN:CD	0.79	1.98	6	3
1:A:20:LEU:CB	1:A:52:TRP:NE1	0.79	2.46	8	10
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CZ	0.78	2.66	7	10
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ALA:HB2	0.78	1.78	8	7
1:A:58:GLN:CG	1:A:74:MET:HE2	0.78	2.08	8	3
1:A:24:ILE:CG2	1:A:52:TRP:HA	0.78	2.08	10	4
1:A:66:ARG:CD	1:A:66:ARG:N	0.78	2.40	3	2
1:A:17:PRO:HG2	1:A:40:SER:OG	0.78	1.78	1	2
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:HE2	0.78	1.53	9	2
1:A:3:VAL:CA	1:A:61:VAL:CG1	0.78	2.60	6	8
1:A:24:ILE:HD13	1:A:55:LYS:HE3	0.78	1.55	2	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:38:VAL:HG11	0.78	2.09	6	4
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:SD	0.78	2.71	9	5
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:HG3	0.78	1.78	9	1
1:A:7:ARG:HH12	1:A:29:GLN:HB3	0.78	1.33	7	1
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:HD3	0.78	1.56	3	8
1:A:73:VAL:C	1:A:74:MET:HG3	0.78	1.99	3	4
1:A:9:ILE:N	1:A:39:TYR:HE1	0.78	1.76	5	9
1:A:32:VAL:CG2	1:A:78:LYS:C	0.78	2.52	8	1
1:A:2:ASP:CB	1:A:75:LYS:HB2	0.78	2.08	9	2
1:A:35:VAL:N	1:A:76:LYS:HZ2	0.78	1.77	3	1
1:A:49:ALA:HB3	1:A:72:ILE:HG13	0.78	1.54	9	2
1:A:2:ASP:OD2	1:A:75:LYS:CD	0.78	2.32	9	1
1:A:2:ASP:CG	1:A:75:LYS:HB2	0.78	1.99	9	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:7:ARG:HG3	0.78	1.89	9	1
1:A:36:ILE:CG2	1:A:76:LYS:HE2	0.78	2.08	7	1
1:A:16:CYS:HB3	1:A:48:ASP:CB	0.78	2.08	1	8
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:HE2	0.78	1.55	8	3
1:A:34:GLU:H	1:A:76:LYS:HB2	0.77	1.40	9	7
1:A:23:LEU:HD22	1:A:74:MET:HG3	0.77	1.56	10	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:74:MET:CG	0.77	2.09	10	5
1:A:20:LEU:C	1:A:52:TRP:CG	0.77	2.57	8	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:PHE:CE1	1:A:72:ILE:HG12	0.77	2.13	8	6
1:A:3:VAL:HA	1:A:61:VAL:CG1	0.77	2.07	6	2
1:A:35:VAL:CG1	1:A:75:LYS:HB2	0.77	2.09	1	6
1:A:41:THR:OG1	1:A:69:TYR:CD1	0.77	2.37	7	1
1:A:21:MET:HA	1:A:24:ILE:HG13	0.77	1.57	2	5
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:HB2	0.77	1.56	8	5
1:A:16:CYS:CA	1:A:44:GLY:O	0.77	2.33	10	7
1:A:40:SER:CB	1:A:45:THR:HG21	0.77	2.09	1	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:34:GLU:O	0.77	2.03	9	1
1:A:7:ARG:CG	1:A:8:VAL:N	0.77	2.48	2	10
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:CB	0.77	2.09	6	5
1:A:19:PRO:O	1:A:22:GLU:N	0.77	2.18	5	10
1:A:27:TYR:HB3	1:A:56:SER:CA	0.77	2.09	5	5
1:A:23:LEU:HG	1:A:52:TRP:CZ3	0.77	2.15	2	3
1:A:53:ILE:CD1	1:A:53:ILE:C	0.77	2.52	4	1
1:A:63:VAL:C	1:A:64:PHE:CD1	0.77	2.58	9	6
1:A:3:VAL:H	1:A:61:VAL:HG13	0.77	1.39	6	4
1:A:52:TRP:CZ2	1:A:70:TYR:OH	0.77	2.37	10	1
1:A:40:SER:HB3	1:A:70:TYR:CE2	0.76	2.11	4	8
1:A:9:ILE:CG1	1:A:38:VAL:HG21	0.76	2.10	4	3
1:A:7:ARG:CG	1:A:9:ILE:HD11	0.76	2.10	5	2
1:A:49:ALA:HA	1:A:52:TRP:CZ2	0.76	2.13	7	6
1:A:9:ILE:CG2	1:A:38:VAL:HA	0.76	2.06	6	3
1:A:9:ILE:HG12	1:A:38:VAL:HG21	0.76	1.55	4	3
1:A:9:ILE:CG1	1:A:36:ILE:HD12	0.76	2.10	5	1
1:A:48:ASP:O	1:A:51:ALA:N	0.76	2.19	5	10
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:HD12	0.76	2.11	4	3
1:A:43:ALA:N	1:A:70:TYR:CE2	0.76	2.52	5	8
1:A:6:ASP:H	1:A:35:VAL:HG23	0.76	1.40	10	3
1:A:16:CYS:CB	1:A:48:ASP:CB	0.76	2.63	1	8
1:A:14:SER:C	1:A:15:TYR:CD1	0.76	2.58	9	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:HG13	0.76	1.81	5	4
1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:ILE:HG13	0.76	1.38	5	6
1:A:19:PRO:CG	1:A:45:THR:HB	0.75	2.11	1	9
1:A:27:TYR:HD2	1:A:56:SER:CB	0.75	1.91	3	9
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:HE3	0.75	2.10	4	4
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:CA	0.75	2.64	7	6
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:HG12	0.75	2.11	2	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:52:TRP:O	0.75	1.79	4	4
1:A:36:ILE:HG23	1:A:76:LYS:HE2	0.75	1.58	7	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:HB	0.75	1.57	1	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:PRO:HA	1:A:35:VAL:HG23	0.75	1.57	3	5
1:A:20:LEU:HA	1:A:52:TRP:CD1	0.75	2.15	2	5
1:A:14:SER:HB2	1:A:19:PRO:HD3	0.75	1.57	5	5
1:A:23:LEU:HD21	1:A:72:ILE:HG23	0.75	1.58	1	1
1:A:9:ILE:C	1:A:38:VAL:HA	0.75	2.01	7	10
1:A:15:TYR:CE1	1:A:18:GLY:HA2	0.75	2.15	9	4
1:A:15:TYR:CE2	1:A:16:CYS:CB	0.75	2.70	4	2
1:A:69:TYR:CD1	1:A:69:TYR:O	0.75	2.40	3	6
1:A:49:ALA:HB3	1:A:72:ILE:CD1	0.75	2.10	7	4
1:A:40:SER:HB3	1:A:45:THR:CG2	0.75	2.12	1	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:49:ALA:HB2	0.75	2.02	7	4
1:A:9:ILE:HD11	1:A:36:ILE:CG1	0.75	2.11	2	1
1:A:21:MET:HA	1:A:24:ILE:CG1	0.75	2.10	9	6
1:A:13:GLY:HA2	1:A:42:ASP:CG	0.75	2.02	9	10
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:CG1	0.75	2.65	2	2
1:A:7:ARG:NE	1:A:8:VAL:O	0.75	2.20	4	1
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:HE3	0.75	1.58	10	1
1:A:7:ARG:HE	1:A:29:GLN:HG3	0.74	1.41	5	1
1:A:19:PRO:HD3	1:A:70:TYR:HH	0.74	1.41	8	3
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HE3	0.74	1.96	10	2
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:CE	0.74	1.93	7	2
1:A:7:ARG:HD3	1:A:9:ILE:HG13	0.74	1.58	7	2
1:A:76:LYS:HZ2	1:A:76:LYS:H	0.74	0.82	7	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:74:MET:CA	0.74	2.66	6	4
1:A:35:VAL:CA	1:A:74:MET:O	0.74	2.34	2	5
1:A:10:ASP:HB2	1:A:39:TYR:CD2	0.74	2.17	5	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:23:LEU:HD23	0.74	2.13	4	2
1:A:63:VAL:O	1:A:64:PHE:CD1	0.74	2.40	1	10
1:A:37:SER:HA	1:A:73:VAL:HG13	0.74	1.59	6	7
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:CG1	0.74	2.65	3	7
1:A:36:ILE:HD11	1:A:58:GLN:OE1	0.74	1.81	3	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:HG23	0.74	1.81	1	5
1:A:23:LEU:HD23	1:A:74:MET:HG2	0.74	1.60	5	2
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:HB3	0.74	1.57	8	7
1:A:50:PRO:O	1:A:54:GLN:NE2	0.74	2.21	1	1
1:A:19:PRO:HD3	1:A:70:TYR:OH	0.74	1.78	6	6
1:A:16:CYS:HG	1:A:48:ASP:CG	0.74	1.80	9	1
1:A:72:ILE:O	1:A:74:MET:CE	0.74	2.36	5	2
1:A:10:ASP:HB3	1:A:39:TYR:CE1	0.73	2.17	5	7
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:HB2	0.73	1.82	1	7
1:A:9:ILE:H	1:A:39:TYR:HE1	0.73	1.26	5	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:ILE:CD1	0.73	1.91	9	1
1:A:13:GLY:HA2	1:A:42:ASP:OD1	0.73	1.83	7	5
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:HB3	0.73	1.82	1	8
1:A:58:GLN:CD	1:A:76:LYS:CE	0.73	2.56	10	3
1:A:38:VAL:HG21	1:A:52:TRP:HZ3	0.73	1.42	10	8
1:A:5:PRO:HG3	1:A:35:VAL:HG12	0.73	1.59	2	5
1:A:45:THR:HB	1:A:52:TRP:HZ2	0.73	1.41	10	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:70:TYR:HE1	0.73	2.02	1	1
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:CD1	0.73	2.71	3	10
1:A:10:ASP:CA	1:A:39:TYR:CD1	0.73	2.71	5	10
1:A:19:PRO:CG	1:A:45:THR:HG21	0.73	2.13	10	1
1:A:2:ASP:HB2	1:A:35:VAL:HG13	0.73	1.59	8	6
1:A:7:ARG:CB	1:A:36:ILE:HB	0.73	2.14	8	8
1:A:6:ASP:N	1:A:35:VAL:CG2	0.73	2.51	5	2
1:A:71:GLU:C	1:A:71:GLU:CD	0.73	2.46	9	1
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:N	0.73	1.97	4	10
1:A:53:ILE:HA	1:A:56:SER:OG	0.73	1.83	4	10
1:A:9:ILE:CD1	1:A:22:GLU:O	0.73	2.36	6	2
1:A:32:VAL:HB	1:A:78:LYS:N	0.73	1.98	6	9
1:A:17:PRO:O	1:A:20:LEU:HB3	0.73	1.84	9	5
1:A:3:VAL:C	1:A:5:PRO:HD3	0.73	2.00	1	10
1:A:42:ASP:O	1:A:43:ALA:HB3	0.73	1.84	10	5
1:A:39:TYR:C	1:A:70:TYR:O	0.73	2.27	10	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:48:ASP:OD1	0.73	2.37	5	2
1:A:61:VAL:CG2	1:A:74:MET:HA	0.72	2.14	9	4
1:A:58:GLN:CG	1:A:74:MET:HB2	0.72	2.14	8	4
1:A:36:ILE:HD13	1:A:74:MET:O	0.72	1.82	2	1
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:HB2	0.72	1.58	10	4
1:A:2:ASP:OD2	1:A:35:VAL:CG1	0.72	2.37	10	1
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:CG	0.72	2.52	10	2
1:A:24:ILE:HG12	1:A:52:TRP:CB	0.72	2.12	4	2
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:CB	0.72	2.64	7	7
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:CB	0.72	2.14	1	8
1:A:27:TYR:HA	1:A:76:LYS:HD2	0.72	1.62	10	2
1:A:7:ARG:HH21	1:A:29:GLN:HB2	0.72	1.45	2	5
1:A:17:PRO:HB3	1:A:42:ASP:HB3	0.72	1.62	7	9
1:A:12:ARG:H	1:A:12:ARG:NH1	0.72	1.83	7	1
1:A:46:LYS:N	1:A:70:TYR:CZ	0.72	2.58	1	1
1:A:58:GLN:CG	1:A:74:MET:HE3	0.72	2.14	10	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:36:ILE:HD11	0.72	2.15	4	2
1:A:39:TYR:CB	1:A:71:GLU:CB	0.72	2.67	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ALA:N	1:A:52:TRP:HE1	0.72	1.79	4	7
1:A:15:TYR:HE2	1:A:16:CYS:SG	0.72	2.06	4	1
1:A:3:VAL:CA	1:A:61:VAL:HG11	0.72	2.14	9	10
1:A:76:LYS:HE2	1:A:76:LYS:CA	0.72	2.00	10	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:76:LYS:HE2	0.72	2.13	2	3
1:A:24:ILE:HG23	1:A:52:TRP:CA	0.72	2.14	8	4
1:A:63:VAL:O	1:A:64:PHE:HD1	0.71	1.67	9	6
1:A:23:LEU:CD1	1:A:74:MET:SD	0.71	2.78	10	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ALA:CB	0.71	2.38	8	3
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:CD2	0.71	2.73	10	6
1:A:7:ARG:CD	1:A:9:ILE:CD1	0.71	2.68	7	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:73:VAL:HB	0.71	2.15	6	2
1:A:24:ILE:HD12	1:A:24:ILE:C	0.71	2.06	6	1
1:A:48:ASP:HB3	1:A:52:TRP:NE1	0.71	2.00	1	1
1:A:17:PRO:CG	1:A:40:SER:OG	0.71	2.38	10	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:H	0.71	1.45	3	5
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:CD	0.71	2.68	4	6
1:A:23:LEU:CD1	1:A:72:ILE:HG22	0.71	2.15	2	5
1:A:37:SER:CA	1:A:73:VAL:CG1	0.71	2.68	4	4
1:A:49:ALA:CA	1:A:52:TRP:CZ2	0.71	2.74	7	5
1:A:17:PRO:CB	1:A:44:GLY:N	0.71	2.46	6	3
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:N	0.71	2.39	10	4
1:A:23:LEU:HD22	1:A:36:ILE:HD11	0.71	1.61	4	2
1:A:32:VAL:HB	1:A:78:LYS:C	0.71	2.06	6	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:52:TRP:CG	0.71	2.20	9	2
1:A:36:ILE:HG12	1:A:76:LYS:CE	0.71	2.14	8	3
1:A:45:THR:OG1	1:A:49:ALA:CB	0.71	2.38	6	1
1:A:46:LYS:O	1:A:64:PHE:CZ	0.71	2.43	10	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:16:CYS:CB	0.71	2.74	6	7
1:A:22:GLU:HB2	1:A:52:TRP:CZ3	0.70	2.21	5	10
1:A:53:ILE:CB	1:A:74:MET:HB3	0.70	2.16	8	5
1:A:59:GLU:HB3	1:A:75:LYS:CB	0.70	2.03	3	4
1:A:36:ILE:HG21	1:A:76:LYS:HZ1	0.70	1.46	4	4
1:A:2:ASP:CG	1:A:75:LYS:CB	0.70	2.59	9	1
1:A:12:ARG:NH1	1:A:12:ARG:H	0.70	1.85	5	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:26:ALA:O	0.70	2.25	7	1
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:CA	0.70	2.39	6	9
1:A:47:LYS:O	1:A:50:PRO:HD2	0.70	1.86	10	3
1:A:20:LEU:CG	1:A:48:ASP:OD1	0.70	2.39	9	5
1:A:52:TRP:CD1	1:A:52:TRP:N	0.70	2.57	10	4
1:A:27:TYR:HA	1:A:58:GLN:OE1	0.70	1.85	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:HD13	1:A:74:MET:CE	0.70	2.16	6	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:52:TRP:HZ2	0.70	1.99	10	1
1:A:2:ASP:OD2	1:A:35:VAL:CG2	0.70	2.39	2	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:36:ILE:HD13	0.70	2.15	5	1
1:A:33:GLY:CA	1:A:76:LYS:O	0.70	2.39	1	1
1:A:40:SER:CB	1:A:45:THR:CG2	0.70	2.69	1	1
1:A:19:PRO:HD2	1:A:45:THR:HB	0.70	1.63	7	9
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:CG1	0.70	2.17	10	7
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:CG	0.70	2.39	9	1
1:A:26:ALA:HB1	1:A:36:ILE:CD1	0.70	2.15	6	4
1:A:39:TYR:N	1:A:71:GLU:HB2	0.70	2.01	5	3
1:A:68:GLY:C	1:A:69:TYR:CD1	0.70	2.65	8	1
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CD2	0.70	2.44	6	10
1:A:45:THR:HB	1:A:52:TRP:CZ2	0.70	2.21	10	1
1:A:32:VAL:HG21	1:A:78:LYS:C	0.70	2.07	8	1
1:A:7:ARG:CD	1:A:9:ILE:CG1	0.70	2.69	7	2
1:A:70:TYR:CG	1:A:71:GLU:N	0.70	2.59	1	2
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:HA	0.70	1.63	4	5
1:A:7:ARG:HE	1:A:29:GLN:CD	0.70	1.89	5	1
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CD1	0.69	2.68	5	10
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:CA	0.69	2.17	2	7
1:A:23:LEU:HD11	1:A:38:VAL:CG1	0.69	2.17	3	4
1:A:40:SER:N	1:A:70:TYR:C	0.69	2.46	10	1
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HE2	0.69	2.00	2	4
1:A:35:VAL:CG1	1:A:75:LYS:CB	0.69	2.70	3	6
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:CB	0.69	2.16	2	5
1:A:15:TYR:CE1	1:A:16:CYS:SG	0.69	2.85	6	2
1:A:15:TYR:CE1	1:A:20:LEU:HD12	0.69	2.22	5	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:CG2	0.69	2.40	9	5
1:A:44:GLY:O	1:A:47:LYS:CG	0.69	2.40	6	9
1:A:24:ILE:HA	1:A:56:SER:OG	0.69	1.87	3	6
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:CG	0.69	2.70	6	3
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:HG12	0.69	1.87	5	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:26:ALA:HB2	0.69	1.63	1	4
1:A:15:TYR:N	1:A:17:PRO:HB2	0.69	2.03	7	8
1:A:39:TYR:HB3	1:A:71:GLU:CB	0.69	2.17	10	2
1:A:7:ARG:CB	1:A:36:ILE:HG22	0.69	2.15	6	2
1:A:52:TRP:N	1:A:52:TRP:CD1	0.69	2.60	2	6
1:A:10:ASP:HA	1:A:39:TYR:H	0.69	1.48	5	10
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:CB	0.69	2.18	8	6
1:A:6:ASP:H	1:A:35:VAL:CG2	0.69	2.00	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:N	1:A:76:LYS:HB2	0.69	2.03	10	5
1:A:66:ARG:HD3	1:A:66:ARG:C	0.69	2.06	3	1
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:HG22	0.69	1.63	1	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:48:ASP:HB2	0.69	2.18	10	8
1:A:3:VAL:N	1:A:5:PRO:HD3	0.69	2.01	9	10
1:A:2:ASP:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.69	1.65	7	3
1:A:37:SER:CA	1:A:73:VAL:HG12	0.69	2.17	4	2
1:A:35:VAL:C	1:A:76:LYS:HZ2	0.69	1.91	6	1
1:A:5:PRO:CD	1:A:35:VAL:HB	0.69	2.17	6	5
1:A:44:GLY:O	1:A:47:LYS:HD3	0.69	1.87	4	10
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:CG1	0.69	2.41	10	5
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:HE2	0.68	1.62	10	1
1:A:48:ASP:CB	1:A:52:TRP:HE1	0.68	2.00	1	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:ILE:HD13	0.68	1.88	10	2
1:A:12:ARG:NH2	1:A:69:TYR:HB3	0.68	2.03	2	2
1:A:7:ARG:HG2	1:A:9:ILE:HD11	0.68	1.66	5	1
1:A:34:GLU:N	1:A:76:LYS:O	0.68	2.22	8	9
1:A:15:TYR:N	1:A:17:PRO:CB	0.68	2.55	4	8
1:A:38:VAL:O	1:A:71:GLU:CA	0.68	2.41	10	3
1:A:27:TYR:CB	1:A:56:SER:CA	0.68	2.70	5	7
1:A:20:LEU:CA	1:A:45:THR:HG22	0.68	2.18	10	1
1:A:7:ARG:HB3	1:A:36:ILE:HA	0.68	1.63	9	4
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:C	0.68	2.52	1	2
1:A:45:THR:HB	1:A:70:TYR:HE2	0.68	1.48	10	1
1:A:49:ALA:HB3	1:A:72:ILE:HG12	0.68	1.63	6	4
1:A:12:ARG:HB2	1:A:12:ARG:HH11	0.68	1.46	5	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:36:ILE:HD12	0.68	1.64	5	1
1:A:66:ARG:HD3	1:A:66:ARG:N	0.68	2.03	3	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:53:ILE:HG22	0.68	1.65	6	5
1:A:9:ILE:N	1:A:39:TYR:CE1	0.68	2.62	5	8
1:A:59:GLU:N	1:A:77:VAL:HG22	0.68	2.04	10	1
1:A:63:VAL:CG2	1:A:73:VAL:HG22	0.68	2.19	10	3
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:HG2	0.68	1.49	10	2
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:HG13	0.68	1.64	9	2
1:A:20:LEU:HD23	1:A:48:ASP:OD1	0.68	1.89	5	2
1:A:12:ARG:CG	1:A:69:TYR:CE1	0.68	2.74	7	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:68:GLY:O	0.68	2.11	8	2
1:A:26:ALA:O	1:A:29:GLN:N	0.68	2.25	3	10
1:A:58:GLN:C	1:A:75:LYS:O	0.68	2.32	6	9
1:A:16:CYS:HB3	1:A:20:LEU:CG	0.68	2.17	9	3
1:A:9:ILE:CA	1:A:38:VAL:HG23	0.68	2.19	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:CYS:SG	1:A:20:LEU:HG	0.68	2.29	5	2
1:A:19:PRO:HG3	1:A:70:TYR:OH	0.68	1.87	6	1
1:A:76:LYS:HZ3	1:A:78:LYS:HG3	0.68	1.49	5	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:HB3	0.68	2.18	7	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:48:ASP:CB	0.67	2.63	8	3
1:A:53:ILE:HD13	1:A:53:ILE:C	0.67	2.09	3	2
1:A:49:ALA:HB3	1:A:72:ILE:CG1	0.67	2.19	7	4
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:LYS:CG	0.67	2.18	6	8
1:A:45:THR:HG22	1:A:52:TRP:CZ2	0.67	2.24	10	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:HG3	0.67	2.20	6	2
1:A:40:SER:HB2	1:A:70:TYR:CE1	0.67	2.21	2	7
1:A:36:ILE:CG1	1:A:76:LYS:HE2	0.67	2.19	7	3
1:A:24:ILE:HB	1:A:27:TYR:HE2	0.67	1.49	5	5
1:A:9:ILE:HG12	1:A:36:ILE:CD1	0.67	2.19	5	1
1:A:35:VAL:HA	1:A:76:LYS:HZ2	0.67	1.43	3	1
1:A:16:CYS:CA	1:A:48:ASP:HB2	0.67	2.19	1	9
1:A:20:LEU:CB	1:A:48:ASP:CB	0.67	2.53	5	10
1:A:20:LEU:O	1:A:52:TRP:CB	0.67	2.43	10	10
1:A:27:TYR:CA	1:A:58:GLN:NE2	0.67	2.54	8	2
1:A:15:TYR:CE2	1:A:16:CYS:HB2	0.67	2.25	4	2
1:A:24:ILE:HG22	1:A:52:TRP:HA	0.67	1.66	10	3
1:A:9:ILE:O	1:A:39:TYR:N	0.67	2.27	5	10
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:CB	0.67	2.19	2	3
1:A:27:TYR:CA	1:A:58:GLN:OE1	0.67	2.43	6	3
1:A:16:CYS:HB2	1:A:17:PRO:O	0.67	1.90	7	6
1:A:32:VAL:HA	1:A:76:LYS:C	0.67	2.10	8	9
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:N	0.67	2.28	5	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:TYR:CD1	0.67	2.47	8	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:OH	0.67	1.80	8	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:N	0.67	2.04	7	6
1:A:17:PRO:O	1:A:18:GLY:C	0.67	2.33	6	4
1:A:2:ASP:OD2	1:A:35:VAL:HG21	0.67	1.90	2	2
1:A:7:ARG:HD2	1:A:36:ILE:HG22	0.67	1.67	5	1
1:A:7:ARG:NE	1:A:9:ILE:CG1	0.67	2.58	7	1
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:CG	0.67	2.58	10	4
1:A:5:PRO:CG	1:A:35:VAL:CG1	0.67	2.65	6	5
1:A:48:ASP:C	1:A:52:TRP:CD1	0.67	2.69	7	9
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:CE	0.67	2.20	8	3
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:CG	0.66	2.19	3	5
1:A:7:ARG:NH2	1:A:26:ALA:HA	0.66	2.05	7	2
1:A:24:ILE:CB	1:A:27:TYR:HE2	0.66	2.00	1	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:GLN:CA	1:A:75:LYS:O	0.66	2.43	4	9
1:A:7:ARG:HH21	1:A:29:GLN:HB3	0.66	1.47	10	4
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:HE2	0.66	2.19	2	1
1:A:15:TYR:CG	1:A:18:GLY:HA2	0.66	2.23	6	3
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:CD1	0.66	2.19	3	4
1:A:71:GLU:C	1:A:72:ILE:CD1	0.66	2.54	7	4
1:A:7:ARG:HD3	1:A:36:ILE:HD13	0.66	1.67	8	2
1:A:9:ILE:HD13	1:A:36:ILE:HD12	0.66	1.66	5	1
1:A:40:SER:HG	1:A:70:TYR:CZ	0.66	1.47	8	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:MET:N	0.66	2.58	4	7
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:CD	0.66	2.60	5	8
1:A:51:ALA:O	1:A:54:GLN:HB3	0.66	1.91	2	8
1:A:23:LEU:H	1:A:52:TRP:HE3	0.66	1.28	10	2
1:A:43:ALA:N	1:A:70:TYR:CD2	0.66	2.64	5	8
1:A:20:LEU:C	1:A:52:TRP:NE1	0.66	2.48	6	2
1:A:30:ALA:HB1	1:A:76:LYS:CG	0.66	2.11	7	6
1:A:15:TYR:CD1	1:A:17:PRO:O	0.66	2.49	2	1
1:A:59:GLU:H	1:A:75:LYS:CA	0.66	2.03	6	7
1:A:19:PRO:CG	1:A:45:THR:CB	0.66	2.73	7	6
1:A:38:VAL:HG21	1:A:52:TRP:CZ3	0.66	2.26	10	4
1:A:2:ASP:CG	1:A:75:LYS:CG	0.66	2.64	9	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:36:ILE:CD1	0.66	2.20	1	2
1:A:23:LEU:CG	1:A:52:TRP:HE3	0.66	1.84	9	4
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:CG	0.65	2.74	9	2
1:A:16:CYS:O	1:A:45:THR:C	0.65	2.34	1	9
1:A:45:THR:CG2	1:A:70:TYR:CD1	0.65	2.50	9	4
1:A:53:ILE:CB	1:A:74:MET:HE2	0.65	2.21	9	2
1:A:39:TYR:HB2	1:A:69:TYR:CD2	0.65	2.27	4	7
1:A:31:LYS:O	1:A:34:GLU:HB2	0.65	1.91	5	6
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:HG12	0.65	2.22	6	4
1:A:58:GLN:HB3	1:A:76:LYS:CD	0.65	2.21	3	3
1:A:27:TYR:HB2	1:A:76:LYS:NZ	0.65	2.07	10	1
1:A:36:ILE:HG12	1:A:76:LYS:HE2	0.65	1.68	9	3
1:A:26:ALA:CB	1:A:36:ILE:CD1	0.65	2.75	5	3
1:A:14:SER:C	1:A:15:TYR:CD2	0.65	2.70	7	3
1:A:36:ILE:N	1:A:74:MET:O	0.65	2.30	6	8
1:A:23:LEU:CA	1:A:52:TRP:HE3	0.65	2.04	4	6
1:A:61:VAL:HG11	1:A:73:VAL:HB	0.65	1.67	6	3
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:CD1	0.65	2.75	7	4
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:HG2	0.65	1.92	1	1
1:A:20:LEU:N	1:A:45:THR:HG21	0.65	2.04	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLN:HG2	1:A:30:ALA:N	0.65	2.03	5	1
1:A:7:ARG:CG	1:A:8:VAL:H	0.65	2.04	10	6
1:A:2:ASP:CB	1:A:75:LYS:CD	0.65	2.71	3	6
1:A:24:ILE:H	1:A:52:TRP:HB3	0.65	1.52	4	10
1:A:7:ARG:NE	1:A:29:GLN:CD	0.65	2.50	5	2
1:A:58:GLN:HG2	1:A:76:LYS:HE3	0.65	1.65	5	2
1:A:2:ASP:HB3	1:A:5:PRO:CG	0.65	2.21	9	1
1:A:58:GLN:HE22	1:A:76:LYS:HD2	0.65	1.47	6	3
1:A:7:ARG:CD	1:A:36:ILE:HD13	0.65	2.22	8	1
1:A:15:TYR:H	1:A:42:ASP:CB	0.65	2.05	4	10
1:A:35:VAL:HA	1:A:76:LYS:HZ1	0.65	1.51	7	1
1:A:63:VAL:CG2	1:A:72:ILE:HA	0.64	2.23	10	1
1:A:40:SER:C	1:A:70:TYR:CD2	0.64	2.70	7	7
1:A:9:ILE:HD11	1:A:36:ILE:CD1	0.64	2.21	7	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:O	0.64	2.45	2	1
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:NE	0.64	2.45	6	3
1:A:52:TRP:O	1:A:55:LYS:HG2	0.64	1.92	8	4
1:A:20:LEU:CG	1:A:48:ASP:CB	0.64	2.75	8	6
1:A:37:SER:HB2	1:A:73:VAL:HG13	0.64	1.68	5	6
1:A:8:VAL:C	1:A:9:ILE:HG13	0.64	2.12	3	3
1:A:24:ILE:CG2	1:A:52:TRP:O	0.64	2.46	5	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:17:PRO:O	0.64	2.45	4	6
1:A:36:ILE:CG1	1:A:74:MET:CE	0.64	2.75	2	3
1:A:35:VAL:HA	1:A:75:LYS:HA	0.64	1.70	1	7
1:A:7:ARG:HD3	1:A:36:ILE:CB	0.64	2.12	9	1
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:HB2	0.64	2.04	1	6
1:A:36:ILE:HG21	1:A:76:LYS:NZ	0.64	2.07	4	4
1:A:23:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HG21	0.64	1.69	9	1
1:A:35:VAL:CG1	1:A:75:LYS:CA	0.64	2.75	2	5
1:A:17:PRO:CB	1:A:19:PRO:HD2	0.64	2.23	10	10
1:A:57:GLY:O	1:A:78:LYS:HG3	0.64	1.92	6	3
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:HB	0.64	2.23	6	5
1:A:23:LEU:HD21	1:A:74:MET:HG3	0.64	1.67	6	1
1:A:13:GLY:HA2	1:A:42:ASP:CB	0.63	2.22	3	9
1:A:59:GLU:N	1:A:75:LYS:C	0.63	2.32	2	10
1:A:42:ASP:O	1:A:43:ALA:CB	0.63	2.46	10	3
1:A:23:LEU:HD23	1:A:53:ILE:CG2	0.63	2.21	6	3
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:CA	0.63	2.23	9	9
1:A:77:VAL:CG1	1:A:77:VAL:O	0.63	2.46	5	1
1:A:61:VAL:HB	1:A:73:VAL:CG2	0.63	2.23	10	7
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:CE	0.63	2.23	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ALA:O	1:A:31:LYS:HG2	0.63	1.93	4	4
1:A:45:THR:C	1:A:49:ALA:HB2	0.63	2.13	8	4
1:A:15:TYR:CZ	1:A:18:GLY:HA2	0.63	2.26	1	5
1:A:45:THR:C	1:A:49:ALA:CB	0.63	2.67	6	3
1:A:2:ASP:H	1:A:35:VAL:CG1	0.63	2.05	8	2
1:A:70:TYR:CE1	1:A:71:GLU:O	0.63	2.52	1	1
1:A:49:ALA:N	1:A:50:PRO:CD	0.63	2.61	8	10
1:A:23:LEU:HD22	1:A:74:MET:CE	0.63	2.23	2	1
1:A:15:TYR:N	1:A:42:ASP:OD1	0.63	2.31	6	5
1:A:39:TYR:CB	1:A:69:TYR:CE2	0.63	2.81	6	7
1:A:63:VAL:HG21	1:A:73:VAL:HG22	0.63	1.71	10	4
1:A:20:LEU:N	1:A:52:TRP:CE2	0.63	2.59	3	6
1:A:18:GLY:N	1:A:19:PRO:HD2	0.63	2.08	5	5
1:A:21:MET:CB	1:A:24:ILE:HD11	0.63	2.22	9	1
1:A:41:THR:N	1:A:70:TYR:CD2	0.63	2.67	7	6
1:A:10:ASP:OD1	1:A:39:TYR:CE2	0.63	2.51	4	7
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:CA	0.63	2.74	2	9
1:A:53:ILE:CA	1:A:74:MET:SD	0.63	2.86	10	1
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:LYS:CA	0.63	2.20	2	5
1:A:74:MET:O	1:A:76:LYS:HE3	0.63	1.94	6	2
1:A:41:THR:CB	1:A:69:TYR:CD1	0.63	2.82	7	1
1:A:16:CYS:O	1:A:48:ASP:CB	0.63	2.45	2	10
1:A:9:ILE:HG21	1:A:38:VAL:HB	0.63	1.71	9	4
1:A:7:ARG:NE	1:A:9:ILE:HG12	0.63	2.09	7	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:58:GLN:OE1	0.63	2.46	3	1
1:A:40:SER:HB2	1:A:45:THR:HG21	0.62	1.70	1	1
1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:HD13	0.62	2.09	2	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:7:ARG:CG	0.62	2.39	9	2
1:A:49:ALA:CB	1:A:52:TRP:CZ2	0.62	2.81	7	4
1:A:7:ARG:NH1	1:A:29:GLN:NE2	0.62	2.47	6	2
1:A:69:TYR:O	1:A:69:TYR:CG	0.62	2.51	1	4
1:A:8:VAL:C	1:A:9:ILE:HG12	0.62	2.13	1	3
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:CB	0.62	2.47	9	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:10:ASP:N	0.62	2.31	4	5
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:CB	0.62	2.77	10	2
1:A:7:ARG:HG2	1:A:7:ARG:HH11	0.62	1.53	10	2
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:HE3	0.62	1.71	2	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:36:ILE:HG13	0.62	1.71	7	1
1:A:46:LYS:HG2	1:A:64:PHE:CG	0.62	2.29	1	2
1:A:19:PRO:CD	1:A:45:THR:HB	0.62	2.23	7	9
1:A:47:LYS:C	1:A:50:PRO:HD2	0.62	2.15	1	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CD2	0.62	2.27	10	1
1:A:27:TYR:CD2	1:A:56:SER:OG	0.62	2.53	2	1
1:A:61:VAL:CG1	1:A:73:VAL:HB	0.62	2.23	6	1
1:A:53:ILE:CG1	1:A:74:MET:HB3	0.62	2.25	4	5
1:A:69:TYR:CG	1:A:69:TYR:O	0.62	2.52	6	4
1:A:7:ARG:CB	1:A:36:ILE:HA	0.62	2.25	5	4
1:A:34:GLU:O	1:A:75:LYS:HG3	0.62	1.93	8	5
1:A:39:TYR:HB3	1:A:69:TYR:CE2	0.62	2.30	6	5
1:A:11:ALA:HB2	1:A:22:GLU:HG2	0.62	1.71	9	5
1:A:9:ILE:HB	1:A:37:SER:O	0.62	1.95	9	2
1:A:23:LEU:HD11	1:A:38:VAL:HG11	0.62	1.71	6	4
1:A:17:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE2	0.62	2.29	10	1
1:A:38:VAL:O	1:A:72:ILE:N	0.62	2.32	10	2
1:A:46:LYS:HG2	1:A:64:PHE:CD1	0.62	2.29	10	5
1:A:36:ILE:O	1:A:73:VAL:CA	0.62	2.48	4	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:22:GLU:O	0.62	1.93	6	2
1:A:2:ASP:N	1:A:35:VAL:HG11	0.62	2.08	6	3
1:A:59:GLU:OE2	1:A:60:LEU:N	0.62	2.32	6	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:8:VAL:O	0.62	2.48	6	1
1:A:63:VAL:HG23	1:A:63:VAL:O	0.62	1.95	4	1
1:A:2:ASP:H	1:A:35:VAL:HG12	0.62	1.53	8	1
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:NZ	0.62	2.10	2	3
1:A:16:CYS:O	1:A:48:ASP:N	0.62	2.32	2	10
1:A:23:LEU:HD21	1:A:38:VAL:CG1	0.62	2.25	9	2
1:A:15:TYR:HD1	1:A:15:TYR:C	0.62	1.92	8	2
1:A:2:ASP:H	1:A:75:LYS:HB2	0.61	1.55	1	3
1:A:49:ALA:HB2	1:A:52:TRP:CZ2	0.61	2.28	7	3
1:A:37:SER:CA	1:A:73:VAL:HG13	0.61	2.23	6	4
1:A:10:ASP:OD2	1:A:39:TYR:CE2	0.61	2.53	6	2
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:O	0.61	2.48	3	3
1:A:23:LEU:HD22	1:A:74:MET:HE2	0.61	1.70	2	1
1:A:37:SER:HA	1:A:73:VAL:HG12	0.61	1.66	4	2
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CD1	0.61	2.59	6	8
1:A:34:GLU:CB	1:A:76:LYS:CG	0.61	2.70	9	2
1:A:32:VAL:CG1	1:A:78:LYS:C	0.61	2.68	6	1
1:A:23:LEU:CA	1:A:52:TRP:CB	0.61	2.77	5	3
1:A:7:ARG:HD3	1:A:9:ILE:HG12	0.61	1.70	3	1
1:A:53:ILE:HG13	1:A:74:MET:HB3	0.61	1.70	8	5
1:A:77:VAL:HG12	1:A:77:VAL:O	0.61	1.93	9	3
1:A:7:ARG:NE	1:A:29:GLN:NE2	0.61	2.49	10	1
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:CD2	0.61	2.43	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:TYR:HD1	1:A:18:GLY:HA2	0.61	1.54	5	1
1:A:27:TYR:HD2	1:A:56:SER:OG	0.61	1.78	3	3
1:A:76:LYS:HZ3	1:A:78:LYS:CG	0.61	2.07	5	1
1:A:19:PRO:CG	1:A:40:SER:CB	0.61	2.73	9	9
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:CG	0.61	2.24	6	5
1:A:61:VAL:HG21	1:A:73:VAL:CG2	0.61	2.26	4	2
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:HD2	0.61	2.21	7	3
1:A:38:VAL:CA	1:A:39:TYR:HD1	0.61	2.07	2	7
1:A:5:PRO:HG2	1:A:73:VAL:HG12	0.61	1.71	5	4
1:A:15:TYR:CD2	1:A:16:CYS:HB2	0.61	2.31	9	1
1:A:16:CYS:C	1:A:48:ASP:HB2	0.61	2.16	4	8
1:A:58:GLN:HA	1:A:77:VAL:N	0.60	2.11	9	10
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:HA	0.60	2.25	9	10
1:A:17:PRO:CG	1:A:40:SER:CB	0.60	2.78	10	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:9:ILE:HD11	0.60	2.11	10	1
1:A:29:GLN:C	1:A:29:GLN:CD	0.60	2.59	8	2
1:A:61:VAL:CG2	1:A:73:VAL:CG2	0.60	2.78	4	4
1:A:24:ILE:N	1:A:52:TRP:HB3	0.60	2.11	5	5
1:A:36:ILE:HG12	1:A:74:MET:SD	0.60	2.36	8	2
1:A:21:MET:CG	1:A:24:ILE:CD1	0.60	2.78	1	1
1:A:35:VAL:CG1	1:A:75:LYS:HA	0.60	2.26	1	5
1:A:7:ARG:HB3	1:A:36:ILE:CB	0.60	2.26	8	8
1:A:9:ILE:O	1:A:38:VAL:C	0.60	2.37	5	7
1:A:58:GLN:HA	1:A:75:LYS:O	0.60	1.94	4	9
1:A:16:CYS:CA	1:A:44:GLY:C	0.60	2.68	10	1
1:A:34:GLU:CA	1:A:76:LYS:HB2	0.60	2.27	10	2
1:A:15:TYR:HD1	1:A:16:CYS:CB	0.60	2.09	6	3
1:A:9:ILE:CD1	1:A:22:GLU:C	0.60	2.69	4	1
1:A:27:TYR:CG	1:A:56:SER:CA	0.60	2.81	5	10
1:A:49:ALA:HB2	1:A:70:TYR:CE1	0.60	2.32	10	1
1:A:16:CYS:SG	1:A:48:ASP:OD1	0.60	2.59	3	2
1:A:2:ASP:OD1	1:A:35:VAL:CG2	0.60	2.49	1	1
1:A:57:GLY:HA3	1:A:78:LYS:HG3	0.60	1.71	10	4
1:A:7:ARG:CB	1:A:36:ILE:CG2	0.60	2.80	6	1
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CZ2	0.60	2.49	6	3
1:A:61:VAL:HG22	1:A:73:VAL:C	0.60	1.89	5	2
1:A:23:LEU:HD21	1:A:72:ILE:HG22	0.60	1.72	3	2
1:A:37:SER:HB2	1:A:73:VAL:CG1	0.60	2.26	2	4
1:A:36:ILE:CG1	1:A:74:MET:HE3	0.60	2.26	2	2
1:A:9:ILE:C	1:A:39:TYR:HE1	0.60	1.96	4	1
1:A:59:GLU:O	1:A:75:LYS:N	0.60	2.34	6	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:HG3	0.60	2.12	9	2
1:A:19:PRO:CB	1:A:52:TRP:HH2	0.60	1.91	6	8
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:HE3	0.60	2.26	2	1
1:A:7:ARG:HE	1:A:8:VAL:C	0.60	1.98	4	1
1:A:66:ARG:HD3	1:A:66:ARG:H	0.60	1.55	3	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:26:ALA:HB2	0.60	2.27	6	3
1:A:45:THR:O	1:A:70:TYR:OH	0.60	2.19	1	1
1:A:7:ARG:CG	1:A:7:ARG:NH1	0.60	2.65	10	2
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:HE2	0.60	2.27	10	1
1:A:32:VAL:HA	1:A:77:VAL:N	0.60	2.11	8	8
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:HA	0.60	1.96	9	1
1:A:27:TYR:CB	1:A:58:GLN:CD	0.59	2.70	8	2
1:A:21:MET:HA	1:A:24:ILE:HG12	0.59	1.72	9	1
1:A:29:GLN:HE21	1:A:30:ALA:N	0.59	1.95	10	1
1:A:73:VAL:CA	1:A:74:MET:HE2	0.59	2.26	5	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:36:ILE:HD12	0.59	2.26	8	1
1:A:32:VAL:HA	1:A:77:VAL:CA	0.59	2.26	8	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:HD2	0.59	1.97	6	2
1:A:10:ASP:HA	1:A:39:TYR:CD1	0.59	2.32	7	10
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:CG1	0.59	2.51	9	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:69:TYR:CB	0.59	2.66	2	2
1:A:14:SER:HB2	1:A:19:PRO:CD	0.59	2.18	5	3
1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:PRO:HG2	0.59	1.74	10	6
1:A:58:GLN:HA	1:A:76:LYS:HA	0.59	1.72	10	9
1:A:34:GLU:H	1:A:76:LYS:CB	0.59	2.11	10	3
1:A:76:LYS:HE3	1:A:76:LYS:N	0.59	2.12	3	2
1:A:10:ASP:OD1	1:A:39:TYR:CZ	0.59	2.55	8	3
1:A:7:ARG:HD3	1:A:29:GLN:CD	0.59	2.18	5	1
1:A:59:GLU:HG3	1:A:75:LYS:HZ3	0.59	1.56	4	1
1:A:53:ILE:HA	1:A:74:MET:CE	0.59	2.28	9	2
1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:PRO:CG	0.59	2.28	4	7
1:A:53:ILE:HA	1:A:74:MET:HE2	0.59	1.74	9	2
1:A:10:ASP:HA	1:A:39:TYR:O	0.59	1.97	10	10
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:HE2	0.59	1.57	10	1
1:A:58:GLN:C	1:A:77:VAL:HG22	0.59	2.18	10	2
1:A:19:PRO:O	1:A:52:TRP:CE2	0.59	2.55	6	5
1:A:15:TYR:CZ	1:A:16:CYS:HB2	0.59	2.33	4	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:52:TRP:CZ3	0.59	2.84	7	2
1:A:7:ARG:NH1	1:A:26:ALA:CA	0.59	2.66	7	1
1:A:39:TYR:HA	1:A:70:TYR:O	0.59	1.95	10	1
1:A:63:VAL:CG1	1:A:71:GLU:OE2	0.59	2.51	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ARG:CG	1:A:12:ARG:HH11	0.59	2.10	5	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:4:LYS:O	0.59	2.51	8	3
1:A:45:THR:CB	1:A:70:TYR:HE2	0.59	2.05	10	1
1:A:36:ILE:HG13	1:A:74:MET:CE	0.59	2.28	6	3
1:A:9:ILE:C	1:A:39:TYR:CD1	0.59	2.60	4	1
1:A:12:ARG:HG3	1:A:69:TYR:CZ	0.59	2.32	7	1
1:A:45:THR:C	1:A:70:TYR:CZ	0.58	2.77	1	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:48:ASP:HB3	0.58	1.74	2	7
1:A:26:ALA:HB1	1:A:29:GLN:OE1	0.58	1.98	5	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:26:ALA:HB1	0.58	2.28	7	1
1:A:5:PRO:HB2	1:A:35:VAL:O	0.58	1.97	1	3
1:A:12:ARG:H	1:A:12:ARG:HE	0.58	1.40	10	4
1:A:27:TYR:HD1	1:A:28:LYS:N	0.58	1.93	8	4
1:A:9:ILE:HD13	1:A:74:MET:HE1	0.58	1.75	6	1
1:A:40:SER:HB3	1:A:45:THR:HG21	0.58	1.73	1	1
1:A:7:ARG:HH11	1:A:7:ARG:HG2	0.58	1.57	1	2
1:A:7:ARG:NE	1:A:29:GLN:HG2	0.58	2.13	6	1
1:A:58:GLN:HA	1:A:76:LYS:CA	0.58	2.28	10	9
1:A:17:PRO:O	1:A:45:THR:HB	0.58	1.99	8	2
1:A:15:TYR:CA	1:A:42:ASP:OD2	0.58	2.51	7	3
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:HE	0.58	1.97	4	3
1:A:23:LEU:CD1	1:A:52:TRP:CD2	0.58	2.83	9	1
1:A:20:LEU:CB	1:A:52:TRP:HE1	0.58	2.08	8	6
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:HG3	0.58	1.74	10	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:52:TRP:HB3	0.58	1.75	10	2
1:A:23:LEU:CD2	1:A:74:MET:CE	0.58	2.82	2	1
1:A:15:TYR:CE2	1:A:20:LEU:HD12	0.58	2.33	9	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:CG	0.58	2.28	8	3
1:A:53:ILE:HG12	1:A:58:GLN:O	0.58	1.98	1	5
1:A:9:ILE:CG2	1:A:22:GLU:HB3	0.58	2.29	1	1
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:CG	0.58	2.27	10	6
1:A:75:LYS:O	1:A:77:VAL:HG22	0.58	1.99	10	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:53:ILE:CB	0.58	2.29	6	3
1:A:9:ILE:O	1:A:39:TYR:HE1	0.58	1.65	4	1
1:A:2:ASP:O	1:A:5:PRO:HD3	0.58	1.98	9	3
1:A:3:VAL:N	1:A:61:VAL:HG13	0.58	2.11	6	1
1:A:14:SER:CA	1:A:19:PRO:HD3	0.58	2.28	10	7
1:A:61:VAL:HB	1:A:73:VAL:CB	0.58	2.29	6	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:NE2	0.58	2.66	3	2
1:A:12:ARG:HG3	1:A:69:TYR:CD2	0.58	2.34	8	1
1:A:58:GLN:HB2	1:A:74:MET:C	0.58	2.19	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ALA:HB1	1:A:14:SER:CB	0.57	2.29	3	10
1:A:10:ASP:CB	1:A:39:TYR:CE1	0.57	2.87	5	8
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:HA	0.57	1.76	2	6
1:A:14:SER:C	1:A:15:TYR:CG	0.57	2.77	3	7
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:HB	0.57	1.75	2	2
1:A:2:ASP:OD2	1:A:35:VAL:HG11	0.57	1.97	10	1
1:A:24:ILE:CG1	1:A:52:TRP:HB3	0.57	2.24	4	1
1:A:21:MET:O	1:A:24:ILE:HD13	0.57	2.00	1	1
1:A:27:TYR:CB	1:A:76:LYS:NZ	0.57	2.68	10	2
1:A:61:VAL:CB	1:A:73:VAL:CB	0.57	2.82	6	2
1:A:50:PRO:HA	1:A:72:ILE:HD12	0.57	1.75	9	1
1:A:21:MET:C	1:A:24:ILE:HG13	0.57	2.20	8	3
1:A:20:LEU:HD11	1:A:48:ASP:OD1	0.57	1.96	8	2
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:N	0.57	2.68	8	10
1:A:23:LEU:HB3	1:A:74:MET:HE1	0.57	1.74	10	1
1:A:17:PRO:CA	1:A:44:GLY:CA	0.57	2.81	3	6
1:A:45:THR:CG2	1:A:52:TRP:CH2	0.57	2.88	5	6
1:A:8:VAL:O	1:A:9:ILE:HG13	0.57	1.98	5	2
1:A:36:ILE:CG1	1:A:76:LYS:HZ1	0.57	2.11	8	1
1:A:62:GLY:C	1:A:63:VAL:HG23	0.57	2.20	9	5
1:A:46:LYS:NZ	1:A:66:ARG:HG3	0.57	2.14	6	1
1:A:9:ILE:C	1:A:38:VAL:CG2	0.57	2.72	1	5
1:A:21:MET:CA	1:A:24:ILE:CG1	0.57	2.82	9	2
1:A:63:VAL:HG12	1:A:71:GLU:CD	0.57	2.20	9	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:53:ILE:CG2	0.57	2.79	6	1
1:A:48:ASP:O	1:A:52:TRP:HD1	0.57	1.80	9	3
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:HG2	0.57	1.76	6	2
1:A:24:ILE:HG22	1:A:55:LYS:HB2	0.57	1.76	5	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:74:MET:HA	0.57	1.77	6	2
1:A:16:CYS:HA	1:A:44:GLY:O	0.57	1.97	10	1
1:A:30:ALA:CB	1:A:76:LYS:NZ	0.57	2.67	2	2
1:A:2:ASP:HB3	1:A:5:PRO:HG3	0.57	1.75	9	1
1:A:73:VAL:C	1:A:74:MET:SD	0.57	2.83	6	1
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:HB3	0.57	1.76	2	4
1:A:50:PRO:CA	1:A:72:ILE:HD12	0.57	2.30	9	1
1:A:17:PRO:CG	1:A:44:GLY:H	0.57	2.12	6	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:26:ALA:CB	0.57	2.30	8	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:9:ILE:CD1	0.56	2.82	1	1
1:A:53:ILE:CA	1:A:74:MET:HE2	0.56	2.30	9	2
1:A:63:VAL:HG12	1:A:71:GLU:OE2	0.56	1.99	9	1
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:CG2	0.56	2.76	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:CYS:HB3	1:A:48:ASP:HB3	0.56	1.77	10	4
1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:OD2	0.56	2.38	2	1
1:A:20:LEU:CA	1:A:45:THR:OG1	0.56	2.50	9	4
1:A:12:ARG:H	1:A:12:ARG:HH11	0.56	1.42	7	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:CD1	0.56	2.83	7	1
1:A:30:ALA:HB2	1:A:36:ILE:HG21	0.56	1.77	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:36:ILE:CD1	0.56	2.25	8	2
1:A:59:GLU:OE1	1:A:75:LYS:CE	0.56	2.53	3	1
1:A:48:ASP:C	1:A:50:PRO:HD2	0.56	2.21	4	10
1:A:24:ILE:HG22	1:A:52:TRP:O	0.56	2.01	6	3
1:A:38:VAL:HB	1:A:74:MET:HE1	0.56	1.76	7	2
1:A:7:ARG:NH2	1:A:8:VAL:O	0.56	2.38	4	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:70:TYR:CE1	0.56	2.90	1	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:73:VAL:CG2	0.56	2.79	4	2
1:A:42:ASP:N	1:A:70:TYR:HE2	0.56	1.99	9	7
1:A:2:ASP:OD2	1:A:35:VAL:HG12	0.56	1.99	9	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:72:ILE:HG13	0.56	2.35	6	4
1:A:9:ILE:HB	1:A:38:VAL:HG23	0.56	1.72	5	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:26:ALA:CB	0.56	2.84	7	1
1:A:5:PRO:HB3	1:A:35:VAL:HA	0.56	1.65	10	2
1:A:51:ALA:O	1:A:54:GLN:CB	0.56	2.53	3	4
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:SER:C	0.56	1.96	4	1
1:A:32:VAL:CB	1:A:78:LYS:C	0.56	2.74	6	1
1:A:21:MET:CA	1:A:24:ILE:HD13	0.56	2.31	1	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:36:ILE:HD13	0.56	2.30	1	1
1:A:57:GLY:O	1:A:77:VAL:C	0.56	2.44	8	5
1:A:59:GLU:CD	1:A:75:LYS:HD3	0.56	2.21	3	1
1:A:46:LYS:CA	1:A:70:TYR:CE1	0.56	2.85	1	1
1:A:58:GLN:CA	1:A:76:LYS:HA	0.56	2.31	10	9
1:A:15:TYR:OH	1:A:16:CYS:SG	0.56	2.62	5	1
1:A:17:PRO:CB	1:A:44:GLY:CA	0.55	2.83	8	2
1:A:7:ARG:NH1	1:A:26:ALA:HB1	0.55	2.16	7	1
1:A:19:PRO:O	1:A:22:GLU:HB2	0.55	2.02	8	7
1:A:10:ASP:CA	1:A:39:TYR:CG	0.55	2.89	5	8
1:A:7:ARG:HB3	1:A:36:ILE:CA	0.55	2.30	10	3
1:A:44:GLY:O	1:A:47:LYS:CD	0.55	2.54	4	7
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:CG	0.55	2.31	10	2
1:A:7:ARG:NH1	1:A:9:ILE:CD1	0.55	2.68	10	1
1:A:15:TYR:CZ	1:A:16:CYS:CB	0.55	2.89	5	1
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:CB	0.55	2.84	7	9
1:A:34:GLU:HB3	1:A:76:LYS:HB2	0.55	1.78	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:ARG:HH11	1:A:7:ARG:CG	0.55	2.14	1	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:74:MET:CA	0.55	2.30	6	2
1:A:15:TYR:HD1	1:A:18:GLY:CA	0.55	2.08	2	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:MET:HG3	0.55	2.31	8	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:74:MET:CE	0.55	2.84	1	3
1:A:20:LEU:HG	1:A:48:ASP:CG	0.55	2.22	5	6
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:CB	0.55	2.30	10	2
1:A:2:ASP:CG	1:A:75:LYS:CD	0.55	2.75	2	2
1:A:21:MET:HB3	1:A:24:ILE:HD11	0.55	1.78	9	1
1:A:21:MET:O	1:A:24:ILE:CG1	0.55	2.54	9	3
1:A:36:ILE:H	1:A:36:ILE:HD13	0.55	1.62	2	1
1:A:2:ASP:N	1:A:35:VAL:CG1	0.55	2.70	6	3
1:A:21:MET:CA	1:A:24:ILE:HG13	0.55	2.31	2	5
1:A:12:ARG:HG3	1:A:69:TYR:CE2	0.55	2.37	8	1
1:A:2:ASP:CG	1:A:35:VAL:HG21	0.55	2.21	1	3
1:A:36:ILE:CD1	1:A:36:ILE:N	0.55	2.70	2	1
1:A:27:TYR:HB3	1:A:58:GLN:OE1	0.55	2.02	2	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:38:VAL:HG11	0.55	1.79	6	1
1:A:16:CYS:HB3	1:A:48:ASP:HB2	0.55	1.76	7	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:72:ILE:CG2	0.54	2.31	1	1
1:A:19:PRO:CA	1:A:52:TRP:CH2	0.54	2.90	6	6
1:A:21:MET:O	1:A:24:ILE:HG12	0.54	2.02	10	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:52:TRP:CD2	0.54	2.36	5	3
1:A:7:ARG:CB	1:A:9:ILE:HD11	0.54	2.31	5	2
1:A:7:ARG:CD	1:A:9:ILE:HG13	0.54	2.29	7	1
1:A:53:ILE:CA	1:A:74:MET:CE	0.54	2.85	9	2
1:A:27:TYR:HA	1:A:76:LYS:CD	0.54	2.32	10	2
1:A:21:MET:HG2	1:A:24:ILE:CD1	0.54	2.33	1	1
1:A:45:THR:HB	1:A:70:TYR:CZ	0.54	2.36	10	1
1:A:41:THR:N	1:A:70:TYR:CE2	0.54	2.76	6	5
1:A:45:THR:CB	1:A:49:ALA:HB2	0.54	2.32	6	1
1:A:7:ARG:CD	1:A:29:GLN:CD	0.54	2.75	5	1
1:A:19:PRO:CA	1:A:45:THR:HG21	0.54	2.32	10	1
1:A:37:SER:CB	1:A:73:VAL:HG13	0.54	2.33	6	3
1:A:32:VAL:HG23	1:A:78:LYS:CB	0.54	2.33	8	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:72:ILE:CG2	0.54	2.33	1	1
1:A:32:VAL:N	1:A:78:LYS:HD3	0.54	2.17	7	5
1:A:36:ILE:HD12	1:A:76:LYS:CE	0.54	2.24	2	1
1:A:19:PRO:HD2	1:A:45:THR:OG1	0.54	2.03	10	1
1:A:17:PRO:CG	1:A:44:GLY:N	0.54	2.70	6	2
1:A:31:LYS:H	1:A:76:LYS:HG3	0.54	1.62	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:O	1:A:56:SER:OG	0.54	2.25	5	2
1:A:12:ARG:CG	1:A:12:ARG:NH1	0.54	2.69	5	1
1:A:24:ILE:CG2	1:A:55:LYS:HB2	0.54	2.32	4	3
1:A:32:VAL:HB	1:A:77:VAL:C	0.54	2.21	2	3
1:A:45:THR:HG21	1:A:52:TRP:CH2	0.54	2.38	5	5
1:A:7:ARG:HH11	1:A:8:VAL:C	0.54	2.05	6	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:78:LYS:HD2	0.54	2.17	5	1
1:A:12:ARG:HH11	1:A:12:ARG:HB2	0.54	1.61	7	1
1:A:59:GLU:O	1:A:74:MET:CA	0.54	2.54	8	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:CG	0.54	2.86	6	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:52:TRP:CZ3	0.54	2.38	7	3
1:A:2:ASP:CB	1:A:75:LYS:HD3	0.54	2.32	2	2
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:HE2	0.54	1.79	6	1
1:A:31:LYS:NZ	1:A:32:VAL:O	0.54	2.40	6	1
1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ILE:HD11	0.54	1.80	5	2
1:A:17:PRO:C	1:A:19:PRO:N	0.53	2.62	1	2
1:A:46:LYS:HG3	1:A:70:TYR:CG	0.53	2.37	10	1
1:A:27:TYR:CB	1:A:76:LYS:HZ1	0.53	2.16	10	2
1:A:36:ILE:O	1:A:36:ILE:HG13	0.53	2.01	5	1
1:A:53:ILE:HB	1:A:74:MET:HG2	0.53	1.80	5	3
1:A:53:ILE:HG12	1:A:58:GLN:HG2	0.53	1.80	4	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:29:GLN:CB	0.53	2.71	4	2
1:A:7:ARG:HE	1:A:9:ILE:HG12	0.53	1.62	7	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:42:ASP:CG	0.53	2.77	6	8
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:H	0.53	1.99	10	2
1:A:53:ILE:C	1:A:53:ILE:CD1	0.53	2.77	5	1
1:A:23:LEU:HA	1:A:26:ALA:HB3	0.53	1.79	8	1
1:A:12:ARG:HH21	1:A:41:THR:HG1	0.53	1.42	2	1
1:A:35:VAL:CA	1:A:76:LYS:HZ1	0.53	2.00	3	1
1:A:27:TYR:CB	1:A:56:SER:C	0.53	2.77	5	4
1:A:58:GLN:HA	1:A:77:VAL:H	0.53	1.64	5	9
1:A:7:ARG:NE	1:A:29:GLN:HE21	0.53	2.01	9	2
1:A:61:VAL:HG22	1:A:74:MET:HA	0.53	1.81	9	2
1:A:71:GLU:O	1:A:71:GLU:CD	0.53	2.46	9	1
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:N	0.53	2.16	3	3
1:A:9:ILE:HD11	1:A:26:ALA:HB1	0.53	1.80	7	1
1:A:56:SER:CB	1:A:58:GLN:OE1	0.53	2.56	8	1
1:A:38:VAL:HG23	1:A:74:MET:CE	0.53	2.33	5	1
1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:HD12	0.53	2.14	7	1
1:A:72:ILE:O	1:A:74:MET:HE2	0.53	2.03	7	1
1:A:70:TYR:C	1:A:70:TYR:CD1	0.53	2.82	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:GLY:HA2	1:A:77:VAL:HG12	0.53	1.79	8	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:72:ILE:HG21	0.53	1.74	1	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:52:TRP:CA	0.53	2.33	7	3
1:A:62:GLY:C	1:A:63:VAL:HG13	0.53	2.23	10	5
1:A:57:GLY:C	1:A:76:LYS:HZ3	0.53	2.07	10	1
1:A:19:PRO:HB2	1:A:52:TRP:CZ3	0.53	2.31	5	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:23:LEU:N	0.53	2.18	4	1
1:A:51:ALA:O	1:A:54:GLN:HB2	0.53	2.03	3	1
1:A:63:VAL:O	1:A:71:GLU:OE2	0.53	2.27	9	1
1:A:7:ARG:CD	1:A:36:ILE:CG2	0.53	2.77	9	2
1:A:7:ARG:NE	1:A:9:ILE:HB	0.53	2.19	4	1
1:A:46:LYS:HG3	1:A:70:TYR:HD1	0.53	1.55	10	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:CG1	0.53	2.32	5	1
1:A:10:ASP:HA	1:A:39:TYR:N	0.53	2.19	5	9
1:A:39:TYR:CB	1:A:69:TYR:CD2	0.53	2.92	4	5
1:A:19:PRO:C	1:A:52:TRP:CE2	0.53	2.78	6	5
1:A:23:LEU:CD1	1:A:74:MET:CE	0.53	2.87	3	1
1:A:27:TYR:O	1:A:78:LYS:CE	0.52	2.57	1	1
1:A:34:GLU:C	1:A:76:LYS:H	0.52	2.04	4	4
1:A:53:ILE:HD13	1:A:54:GLN:N	0.52	2.19	2	3
1:A:45:THR:C	1:A:49:ALA:H	0.52	2.00	6	2
1:A:20:LEU:CG	1:A:48:ASP:CG	0.52	2.76	8	7
1:A:19:PRO:HD2	1:A:45:THR:CB	0.52	2.34	10	2
1:A:8:VAL:O	1:A:9:ILE:CD1	0.52	2.57	9	2
1:A:53:ILE:HA	1:A:56:SER:CB	0.52	2.35	8	5
1:A:24:ILE:HG12	1:A:52:TRP:CA	0.52	2.34	4	2
1:A:58:GLN:CB	1:A:75:LYS:C	0.52	2.78	4	9
1:A:41:THR:OG1	1:A:69:TYR:HA	0.52	2.04	1	5
1:A:3:VAL:O	1:A:5:PRO:HD2	0.52	2.04	1	10
1:A:20:LEU:CA	1:A:52:TRP:HE1	0.52	2.02	6	2
1:A:71:GLU:O	1:A:72:ILE:CD1	0.52	2.50	7	2
1:A:27:TYR:HD2	1:A:56:SER:CA	0.52	2.08	10	4
1:A:35:VAL:CA	1:A:76:LYS:HZ3	0.52	2.15	7	1
1:A:38:VAL:CA	1:A:39:TYR:CD1	0.52	2.92	4	7
1:A:9:ILE:HG23	1:A:22:GLU:HB3	0.52	1.82	1	2
1:A:7:ARG:CB	1:A:36:ILE:CB	0.52	2.86	8	5
1:A:24:ILE:HG22	1:A:27:TYR:CE2	0.52	2.40	2	1
1:A:37:SER:CB	1:A:73:VAL:CG1	0.52	2.88	4	2
1:A:21:MET:HA	1:A:24:ILE:CD1	0.52	2.35	4	2
1:A:64:PHE:CZ	1:A:72:ILE:CD1	0.52	2.84	5	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:72:ILE:CA	0.52	2.86	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:TYR:HB2	1:A:56:SER:O	0.52	2.05	5	4
1:A:46:LYS:NZ	1:A:66:ARG:CG	0.52	2.73	6	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:38:VAL:CG1	0.52	2.85	3	2
1:A:20:LEU:HG	1:A:48:ASP:CB	0.52	2.34	2	3
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:HB	0.52	2.35	8	3
1:A:58:GLN:CD	1:A:76:LYS:HE2	0.52	2.25	1	2
1:A:7:ARG:CZ	1:A:26:ALA:HA	0.52	2.35	7	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:75:LYS:HG3	0.52	1.81	8	1
1:A:15:TYR:CE2	1:A:18:GLY:CA	0.51	2.81	1	1
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:CA	0.51	2.87	9	8
1:A:53:ILE:CG2	1:A:74:MET:SD	0.51	2.97	10	1
1:A:20:LEU:HB2	1:A:52:TRP:HE1	0.51	1.65	3	7
1:A:49:ALA:HB3	1:A:50:PRO:HD3	0.51	1.82	10	9
1:A:48:ASP:O	1:A:51:ALA:HB3	0.51	2.05	10	8
1:A:49:ALA:HA	1:A:52:TRP:CD1	0.51	2.39	2	7
1:A:4:LYS:HG3	1:A:4:LYS:O	0.51	2.05	8	2
1:A:10:ASP:N	1:A:39:TYR:CE1	0.51	2.54	5	1
1:A:15:TYR:OH	1:A:20:LEU:HD13	0.51	2.04	4	1
1:A:34:GLU:CB	1:A:76:LYS:CB	0.51	2.84	10	2
1:A:53:ILE:HG13	1:A:58:GLN:O	0.51	2.05	2	4
1:A:30:ALA:HB2	1:A:36:ILE:CG2	0.51	2.35	6	1
1:A:38:VAL:CG2	1:A:74:MET:HE1	0.51	2.36	5	1
1:A:33:GLY:H	1:A:76:LYS:C	0.51	1.99	1	1
1:A:12:ARG:HH11	1:A:12:ARG:N	0.51	2.03	7	1
1:A:7:ARG:HH22	1:A:26:ALA:HA	0.51	1.65	7	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:26:ALA:CB	0.51	2.88	8	2
1:A:58:GLN:NE2	1:A:76:LYS:HZ3	0.51	1.89	1	2
1:A:49:ALA:N	1:A:50:PRO:HD2	0.51	2.20	8	10
1:A:7:ARG:NE	1:A:26:ALA:HB1	0.51	2.21	2	1
1:A:63:VAL:CG2	1:A:73:VAL:CG2	0.51	2.88	9	1
1:A:34:GLU:CB	1:A:76:LYS:HG2	0.51	2.32	7	1
1:A:46:LYS:CG	1:A:64:PHE:HB3	0.51	2.35	3	2
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:HG3	0.51	2.36	9	2
1:A:46:LYS:HG2	1:A:64:PHE:CB	0.51	2.35	3	5
1:A:15:TYR:HD1	1:A:16:CYS:CA	0.51	2.19	6	3
1:A:23:LEU:HA	1:A:74:MET:HE1	0.51	1.82	2	1
1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:OD1	0.51	2.43	6	2
1:A:36:ILE:CB	1:A:76:LYS:NZ	0.51	2.73	6	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:76:LYS:HE2	0.51	1.82	7	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:24:ILE:HD11	0.51	2.36	2	2
1:A:2:ASP:HB2	1:A:75:LYS:HD3	0.51	1.81	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLY:C	1:A:63:VAL:CG2	0.51	2.79	9	1
1:A:17:PRO:HB3	1:A:44:GLY:CA	0.51	2.36	8	2
1:A:3:VAL:HG23	1:A:61:VAL:HB	0.51	1.81	7	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:42:ASP:OD1	0.51	2.58	7	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:47:LYS:HD3	0.50	2.37	6	3
1:A:15:TYR:CZ	1:A:20:LEU:HD12	0.50	2.41	9	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:HG3	0.50	2.05	6	2
1:A:20:LEU:HD22	1:A:21:MET:HG3	0.50	1.83	10	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:74:MET:HG2	0.50	2.36	7	3
1:A:12:ARG:NH1	1:A:12:ARG:N	0.50	2.56	5	1
1:A:38:VAL:CG1	1:A:52:TRP:CZ3	0.50	2.80	5	1
1:A:64:PHE:HD1	1:A:70:TYR:HE1	0.50	1.47	1	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:36:ILE:O	0.50	2.06	10	1
1:A:55:LYS:HZ2	1:A:55:LYS:HB2	0.50	1.67	2	1
1:A:57:GLY:HA3	1:A:78:LYS:HB3	0.50	1.84	6	1
1:A:4:LYS:CD	1:A:4:LYS:O	0.50	2.59	8	1
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:HD2	0.50	2.26	2	2
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:CB	0.50	2.85	2	1
1:A:41:THR:C	1:A:43:ALA:N	0.50	2.64	7	5
1:A:71:GLU:OE2	1:A:71:GLU:C	0.50	2.48	9	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:76:LYS:CE	0.50	2.36	6	1
1:A:34:GLU:C	1:A:76:LYS:HZ2	0.50	2.09	3	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:52:TRP:HE3	0.50	2.16	3	2
1:A:27:TYR:C	1:A:27:TYR:CD1	0.50	2.85	2	4
1:A:77:VAL:O	1:A:78:LYS:C	0.50	2.50	5	7
1:A:23:LEU:HB3	1:A:53:ILE:N	0.50	2.21	6	3
1:A:35:VAL:N	1:A:76:LYS:NZ	0.50	2.54	3	2
1:A:10:ASP:OD1	1:A:10:ASP:N	0.50	2.43	3	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:SER:C	0.50	2.79	3	1
1:A:12:ARG:H	1:A:12:ARG:NE	0.50	2.05	3	4
1:A:63:VAL:O	1:A:63:VAL:CG2	0.50	2.59	4	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:8:VAL:O	0.50	2.59	4	1
1:A:53:ILE:CG1	1:A:58:GLN:HG3	0.50	2.36	3	1
1:A:58:GLN:HB2	1:A:76:LYS:HE3	0.50	1.83	3	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:55:LYS:HZ2	0.50	1.64	2	1
1:A:31:LYS:N	1:A:76:LYS:HG3	0.50	2.21	5	2
1:A:58:GLN:CD	1:A:74:MET:HB2	0.50	2.27	9	2
1:A:7:ARG:CG	1:A:36:ILE:HB	0.50	2.36	10	1
1:A:36:ILE:HD11	1:A:74:MET:CE	0.50	2.36	2	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:26:ALA:CB	0.50	2.37	7	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:20:LEU:HG	0.50	2.36	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:VAL:O	1:A:71:GLU:OE1	0.50	2.30	3	2
1:A:62:GLY:C	1:A:63:VAL:CG1	0.49	2.80	4	3
1:A:59:GLU:N	1:A:75:LYS:CA	0.49	2.74	3	5
1:A:42:ASP:N	1:A:70:TYR:CE2	0.49	2.80	9	5
1:A:34:GLU:CB	1:A:76:LYS:HG3	0.49	2.23	9	1
1:A:46:LYS:HZ3	1:A:70:TYR:HB3	0.49	1.67	6	1
1:A:49:ALA:N	1:A:52:TRP:CE2	0.49	2.81	1	2
1:A:2:ASP:CB	1:A:5:PRO:HG3	0.49	2.36	9	1
1:A:17:PRO:O	1:A:19:PRO:CA	0.49	2.58	6	2
1:A:57:GLY:C	1:A:78:LYS:HG3	0.49	2.26	6	2
1:A:36:ILE:O	1:A:74:MET:N	0.49	2.41	5	3
1:A:22:GLU:O	1:A:25:LYS:HG3	0.49	2.07	10	3
1:A:40:SER:CB	1:A:70:TYR:CG	0.49	2.89	6	4
1:A:32:VAL:CA	1:A:77:VAL:HA	0.49	2.37	8	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:52:TRP:HA	0.49	1.84	4	3
1:A:13:GLY:C	1:A:42:ASP:OD1	0.49	2.51	9	4
1:A:58:GLN:CB	1:A:76:LYS:HD3	0.49	2.38	6	2
1:A:3:VAL:CA	1:A:5:PRO:CD	0.49	2.91	1	10
1:A:35:VAL:CA	1:A:75:LYS:HA	0.49	2.38	2	4
1:A:16:CYS:N	1:A:44:GLY:C	0.49	2.65	10	1
1:A:22:GLU:CB	1:A:52:TRP:CZ3	0.49	2.95	6	1
1:A:34:GLU:O	1:A:75:LYS:CG	0.49	2.61	8	2
1:A:24:ILE:C	1:A:24:ILE:HD12	0.49	2.28	8	1
1:A:7:ARG:CD	1:A:36:ILE:HD12	0.49	2.38	3	1
1:A:39:TYR:CB	1:A:71:GLU:HB2	0.49	2.35	10	1
1:A:17:PRO:HA	1:A:44:GLY:HA3	0.49	1.83	3	3
1:A:58:GLN:CB	1:A:74:MET:HB2	0.49	2.38	8	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ALA:N	0.49	2.42	1	2
1:A:3:VAL:CA	1:A:5:PRO:HD3	0.49	2.37	1	10
1:A:49:ALA:CB	1:A:70:TYR:CE1	0.49	2.96	10	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:12:ARG:H	0.49	2.20	5	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:35:VAL:HG22	0.49	2.07	1	1
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:HB3	0.49	2.21	1	2
1:A:21:MET:O	1:A:24:ILE:CD1	0.49	2.61	5	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:74:MET:HG2	0.49	1.85	4	1
1:A:76:LYS:N	1:A:76:LYS:CE	0.49	2.75	3	1
1:A:46:LYS:CG	1:A:70:TYR:HB2	0.48	2.35	7	2
1:A:7:ARG:NH1	1:A:26:ALA:C	0.48	2.65	7	1
1:A:46:LYS:O	1:A:64:PHE:CE1	0.48	2.66	10	1
1:A:34:GLU:C	1:A:76:LYS:NZ	0.48	2.66	7	1
1:A:59:GLU:OE1	1:A:75:LYS:NZ	0.48	2.46	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PRO:CB	1:A:19:PRO:CD	0.48	2.91	1	2
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:CD	0.48	2.82	10	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LYS:CG	0.48	2.38	7	2
1:A:14:SER:OG	1:A:18:GLY:CA	0.48	2.52	3	4
1:A:70:TYR:CD1	1:A:70:TYR:C	0.48	2.87	2	6
1:A:8:VAL:HG23	1:A:8:VAL:O	0.48	2.09	6	2
1:A:73:VAL:O	1:A:74:MET:HG3	0.48	2.08	3	2
1:A:53:ILE:HG12	1:A:58:GLN:CG	0.48	2.38	4	1
1:A:20:LEU:HB2	1:A:48:ASP:HB2	0.48	1.79	6	2
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:CG	0.48	2.19	5	1
1:A:17:PRO:C	1:A:70:TYR:OH	0.48	2.50	8	1
1:A:44:GLY:HA2	1:A:47:LYS:HD3	0.48	1.84	6	3
1:A:41:THR:HG23	1:A:68:GLY:O	0.48	2.09	10	1
1:A:24:ILE:CA	1:A:27:TYR:HD2	0.48	1.89	2	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:HB	0.48	2.25	2	1
1:A:58:GLN:CD	1:A:76:LYS:CD	0.48	2.65	4	1
1:A:27:TYR:HA	1:A:76:LYS:NZ	0.48	2.23	2	2
1:A:15:TYR:CD2	1:A:16:CYS:CB	0.48	2.96	9	2
1:A:14:SER:HG	1:A:18:GLY:C	0.48	2.08	9	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:52:TRP:HE3	0.48	1.55	3	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:CG	0.48	2.61	1	1
1:A:7:ARG:HG2	1:A:9:ILE:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:49:ALA:CA	1:A:52:TRP:CD1	0.48	2.97	2	7
1:A:32:VAL:HB	1:A:78:LYS:CA	0.48	2.38	7	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:53:ILE:HB	0.48	1.86	6	2
1:A:15:TYR:HD1	1:A:16:CYS:HB2	0.48	1.64	8	3
1:A:24:ILE:CB	1:A:27:TYR:CE2	0.48	2.94	5	4
1:A:46:LYS:NZ	1:A:66:ARG:HD2	0.48	2.24	8	2
1:A:20:LEU:O	1:A:52:TRP:CE2	0.47	2.65	1	1
1:A:5:PRO:CB	1:A:35:VAL:HG23	0.47	2.17	10	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:40:SER:HB2	0.47	1.85	10	1
1:A:9:ILE:CB	1:A:38:VAL:HA	0.47	2.39	9	2
1:A:24:ILE:HG21	1:A:55:LYS:NZ	0.47	2.24	2	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:39:TYR:CZ	0.47	2.68	10	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:16:CYS:SG	0.47	3.07	6	2
1:A:76:LYS:H	1:A:76:LYS:CE	0.47	2.21	3	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:26:ALA:HB1	0.47	2.39	7	1
1:A:48:ASP:O	1:A:52:TRP:NE1	0.47	2.45	10	1
1:A:15:TYR:OH	1:A:20:LEU:CD1	0.47	2.61	4	1
1:A:49:ALA:CB	1:A:72:ILE:HB	0.47	2.35	1	1
1:A:10:ASP:CA	1:A:39:TYR:O	0.47	2.62	10	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ALA:CB	1:A:19:PRO:CD	0.47	2.91	2	2
1:A:17:PRO:CB	1:A:42:ASP:HB3	0.47	2.36	7	3
1:A:36:ILE:CG1	1:A:76:LYS:CE	0.47	2.90	8	2
1:A:22:GLU:CA	1:A:22:GLU:OE1	0.47	2.61	5	1
1:A:32:VAL:HG23	1:A:77:VAL:HA	0.47	1.85	10	2
1:A:63:VAL:CG2	1:A:73:VAL:HG21	0.47	2.40	9	1
1:A:41:THR:O	1:A:43:ALA:N	0.47	2.48	7	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:39:TYR:N	0.47	2.77	5	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:64:PHE:CZ	0.47	2.93	5	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:42:ASP:CB	0.47	2.92	3	1
1:A:14:SER:OG	1:A:18:GLY:HA3	0.47	1.96	1	1
1:A:40:SER:HB3	1:A:45:THR:HG22	0.47	1.85	1	1
1:A:57:GLY:CA	1:A:78:LYS:HG3	0.47	2.39	10	2
1:A:63:VAL:O	1:A:63:VAL:HG23	0.47	2.10	10	2
1:A:24:ILE:HD13	1:A:55:LYS:CE	0.47	2.34	2	1
1:A:53:ILE:O	1:A:54:GLN:C	0.47	2.53	4	3
1:A:23:LEU:HD13	1:A:49:ALA:O	0.47	2.06	9	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:75:LYS:CA	0.47	2.62	9	1
1:A:34:GLU:C	1:A:76:LYS:HG2	0.47	2.30	3	3
1:A:49:ALA:HB2	1:A:72:ILE:HD13	0.47	1.78	4	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:36:ILE:HD12	0.47	2.34	7	1
1:A:19:PRO:C	1:A:21:MET:N	0.47	2.67	4	6
1:A:27:TYR:N	1:A:58:GLN:OE1	0.47	2.47	10	1
1:A:46:LYS:HE3	1:A:70:TYR:CB	0.47	2.39	2	1
1:A:5:PRO:HG2	1:A:73:VAL:CG1	0.47	2.39	5	1
1:A:52:TRP:O	1:A:56:SER:OG	0.47	2.28	7	1
1:A:46:LYS:HZ2	1:A:66:ARG:HG3	0.47	1.70	6	1
1:A:76:LYS:CA	1:A:76:LYS:CE	0.47	2.69	5	1
1:A:13:GLY:O	1:A:42:ASP:OD1	0.47	2.33	1	2
1:A:58:GLN:CG	1:A:74:MET:CB	0.47	2.91	1	2
1:A:7:ARG:HD3	1:A:36:ILE:CG1	0.47	2.40	10	1
1:A:23:LEU:CA	1:A:74:MET:HE1	0.47	2.39	2	1
1:A:36:ILE:CG1	1:A:74:MET:HE2	0.47	2.40	2	2
1:A:21:MET:CG	1:A:24:ILE:HD11	0.47	2.39	9	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:64:PHE:N	0.47	2.80	9	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:24:ILE:C	0.47	2.80	6	1
1:A:30:ALA:HB3	1:A:76:LYS:HZ2	0.47	1.69	4	1
1:A:38:VAL:HA	1:A:39:TYR:CD1	0.47	2.40	4	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:55:LYS:CG	0.47	2.40	8	1
1:A:19:PRO:O	1:A:21:MET:N	0.46	2.48	4	5
1:A:9:ILE:HD12	1:A:22:GLU:O	0.46	2.10	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:THR:HG23	1:A:72:ILE:HD13	0.46	1.87	3	1
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:HD2	0.46	2.24	2	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:71:GLU:N	0.46	2.47	9	1
1:A:59:GLU:HG3	1:A:75:LYS:NZ	0.46	2.25	4	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:HG12	0.46	2.10	4	1
1:A:27:TYR:O	1:A:78:LYS:NZ	0.46	2.48	4	1
1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:PRO:CD	0.46	2.40	10	3
1:A:24:ILE:CG2	1:A:52:TRP:CA	0.46	2.88	10	2
1:A:51:ALA:O	1:A:55:LYS:HD3	0.46	2.10	2	2
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:HG2	0.46	2.40	6	1
1:A:36:ILE:C	1:A:73:VAL:HG12	0.46	2.30	4	1
1:A:7:ARG:HH12	1:A:26:ALA:C	0.46	2.08	7	1
1:A:33:GLY:CA	1:A:77:VAL:HG12	0.46	2.40	8	1
1:A:40:SER:HB2	1:A:70:TYR:CE2	0.46	2.44	10	1
1:A:52:TRP:HD1	1:A:52:TRP:N	0.46	2.06	2	2
1:A:59:GLU:CD	1:A:75:LYS:HZ2	0.46	2.13	4	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:74:MET:CG	0.46	2.40	7	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:66:ARG:HB3	0.46	2.25	10	3
1:A:34:GLU:O	1:A:76:LYS:NZ	0.46	2.47	7	1
1:A:32:VAL:HA	1:A:77:VAL:HA	0.46	1.86	8	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:25:LYS:N	0.46	2.25	10	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:41:THR:OG1	0.46	2.63	2	1
1:A:59:GLU:N	1:A:75:LYS:N	0.46	2.63	3	4
1:A:32:VAL:N	1:A:78:LYS:CD	0.46	2.79	6	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:34:GLU:HB3	0.46	1.87	10	2
1:A:9:ILE:HG21	1:A:23:LEU:HD23	0.46	1.86	2	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:41:THR:OG1	0.46	2.49	2	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:55:LYS:HG2	0.46	1.88	8	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:61:VAL:CG1	0.46	2.83	10	2
1:A:5:PRO:HB2	1:A:36:ILE:CA	0.46	2.37	6	5
1:A:24:ILE:CD1	1:A:25:LYS:N	0.46	2.74	6	1
1:A:4:LYS:HA	1:A:4:LYS:CE	0.46	2.41	5	1
1:A:21:MET:CG	1:A:24:ILE:HD12	0.46	2.41	1	1
1:A:11:ALA:C	1:A:40:SER:HA	0.46	2.20	1	5
1:A:72:ILE:HD13	1:A:73:VAL:N	0.46	2.25	1	1
1:A:32:VAL:CA	1:A:78:LYS:HD3	0.46	2.41	6	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:74:MET:CG	0.46	2.94	5	3
1:A:12:ARG:HE	1:A:12:ARG:N	0.46	2.05	3	1
1:A:20:LEU:CB	1:A:45:THR:HG22	0.45	2.40	10	1
1:A:57:GLY:HA3	1:A:78:LYS:CG	0.45	2.41	10	2
1:A:34:GLU:HB3	1:A:76:LYS:CB	0.45	2.42	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:SER:OG	1:A:18:GLY:O	0.45	2.33	9	1
1:A:63:VAL:HB	1:A:71:GLU:OE2	0.45	2.11	9	1
1:A:36:ILE:HG12	1:A:74:MET:CE	0.45	2.41	4	1
1:A:58:GLN:HG3	1:A:74:MET:SD	0.45	2.51	8	1
1:A:63:VAL:HG23	1:A:72:ILE:HA	0.45	1.87	10	1
1:A:73:VAL:C	1:A:74:MET:CG	0.45	2.84	4	2
1:A:15:TYR:CE1	1:A:18:GLY:CA	0.45	2.97	6	1
1:A:2:ASP:HB3	1:A:35:VAL:HB	0.45	1.89	9	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:66:ARG:CB	0.45	2.80	6	1
1:A:27:TYR:CA	1:A:58:GLN:HE22	0.45	2.13	8	1
1:A:54:GLN:HE21	1:A:54:GLN:N	0.45	2.08	1	1
1:A:35:VAL:HG12	1:A:74:MET:C	0.45	2.32	2	1
1:A:16:CYS:SG	1:A:48:ASP:CB	0.45	3.05	9	3
1:A:20:LEU:HB2	1:A:52:TRP:NE1	0.45	2.26	9	2
1:A:46:LYS:HE2	1:A:70:TYR:CB	0.45	2.41	6	1
1:A:30:ALA:HB2	1:A:76:LYS:HE3	0.45	1.84	4	1
1:A:21:MET:CA	1:A:24:ILE:HG12	0.45	2.42	10	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:26:ALA:CA	0.45	2.95	7	1
1:A:26:ALA:O	1:A:29:GLN:HB3	0.45	2.12	8	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:42:ASP:HB2	0.45	2.41	3	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:58:GLN:NE2	0.45	2.26	3	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:72:ILE:HG22	0.45	2.42	9	1
1:A:58:GLN:HB2	1:A:74:MET:HB2	0.45	1.87	8	1
1:A:18:GLY:N	1:A:19:PRO:HD3	0.45	2.24	4	4
1:A:27:TYR:CD1	1:A:27:TYR:C	0.45	2.90	8	3
1:A:46:LYS:CE	1:A:70:TYR:CB	0.45	2.95	6	1
1:A:27:TYR:CE1	1:A:28:LYS:HB2	0.45	2.47	5	1
1:A:53:ILE:CA	1:A:56:SER:OG	0.45	2.60	4	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:PRO:HG3	0.45	2.12	7	1
1:A:29:GLN:OE1	1:A:29:GLN:O	0.45	2.34	1	1
1:A:7:ARG:HG3	1:A:29:GLN:NE2	0.45	2.26	8	1
1:A:72:ILE:HD13	1:A:73:VAL:H	0.45	1.72	1	1
1:A:58:GLN:CD	1:A:74:MET:CE	0.45	2.86	10	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:74:MET:HE3	0.45	1.83	6	1
1:A:45:THR:O	1:A:50:PRO:HD3	0.45	2.11	6	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:53:ILE:HG22	0.45	1.82	6	1
1:A:58:GLN:CD	1:A:74:MET:HE3	0.44	2.31	10	1
1:A:7:ARG:HE	1:A:29:GLN:HB3	0.44	1.71	2	2
1:A:53:ILE:O	1:A:55:LYS:N	0.44	2.50	4	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:22:GLU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:24:ILE:HB	1:A:27:TYR:CE2	0.44	2.40	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:GLU:HG3	1:A:75:LYS:CE	0.44	2.42	5	1
1:A:59:GLU:HG3	1:A:75:LYS:HE3	0.44	1.88	5	1
1:A:66:ARG:HD3	1:A:66:ARG:O	0.44	2.12	3	1
1:A:58:GLN:OE1	1:A:74:MET:HB2	0.44	2.12	1	1
1:A:36:ILE:HG13	1:A:74:MET:HE3	0.44	1.87	2	1
1:A:7:ARG:HE	1:A:29:GLN:NE2	0.44	2.08	10	1
1:A:27:TYR:CA	1:A:58:GLN:CD	0.44	2.77	6	2
1:A:38:VAL:HG22	1:A:39:TYR:N	0.44	2.27	8	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:72:ILE:HD11	0.44	1.90	7	3
1:A:73:VAL:C	1:A:74:MET:HE2	0.44	2.33	5	1
1:A:47:LYS:O	1:A:50:PRO:CD	0.44	2.63	10	1
1:A:17:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CD2	0.44	2.44	10	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:HG3	0.44	2.43	10	1
1:A:7:ARG:HD3	1:A:29:GLN:OE1	0.44	2.13	5	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:52:TRP:CB	0.44	2.43	8	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:38:VAL:HG11	0.44	1.87	3	1
1:A:7:ARG:NH2	1:A:29:GLN:CD	0.44	2.70	3	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ALA:HB3	0.44	2.13	1	1
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:HE2	0.44	1.72	6	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:26:ALA:CB	0.44	2.80	7	1
1:A:36:ILE:HG12	1:A:76:LYS:HZ3	0.44	1.62	8	1
1:A:17:PRO:CG	1:A:19:PRO:HD2	0.44	2.42	4	3
1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ILE:CD1	0.44	2.42	5	1
1:A:35:VAL:C	1:A:76:LYS:HZ3	0.44	2.16	7	1
1:A:44:GLY:C	1:A:47:LYS:HD3	0.44	2.33	6	7
1:A:50:PRO:CA	1:A:72:ILE:CD1	0.44	2.95	9	1
1:A:38:VAL:CB	1:A:74:MET:HE1	0.44	2.43	5	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ALA:N	0.44	2.51	8	1
1:A:45:THR:HB	1:A:70:TYR:OH	0.44	2.13	8	1
1:A:76:LYS:CE	1:A:76:LYS:CA	0.44	2.76	10	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:VAL:HG22	0.44	2.12	9	1
1:A:2:ASP:CG	1:A:35:VAL:CG2	0.43	2.85	1	1
1:A:35:VAL:C	1:A:36:ILE:CG2	0.43	2.86	5	2
1:A:19:PRO:HG3	1:A:40:SER:OG	0.43	2.13	8	3
1:A:53:ILE:CB	1:A:74:MET:CE	0.43	2.92	9	2
1:A:73:VAL:O	1:A:74:MET:HG2	0.43	2.14	10	1
1:A:39:TYR:HB2	1:A:69:TYR:HD2	0.43	1.72	2	1
1:A:2:ASP:HB3	1:A:5:PRO:CD	0.43	2.43	9	1
1:A:36:ILE:HD12	1:A:36:ILE:C	0.43	2.33	9	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:12:ARG:N	0.43	2.80	5	1
1:A:33:GLY:N	1:A:77:VAL:HA	0.43	2.29	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:PRO:N	1:A:45:THR:CG2	0.43	2.70	10	1
1:A:60:LEU:HD12	1:A:61:VAL:N	0.43	2.28	5	3
1:A:13:GLY:C	1:A:42:ASP:CG	0.43	2.77	6	4
1:A:12:ARG:HB3	1:A:69:TYR:HE1	0.43	1.73	7	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:SER:N	0.43	2.81	3	1
1:A:10:ASP:HA	1:A:39:TYR:CG	0.43	2.47	9	4
1:A:68:GLY:O	1:A:69:TYR:CG	0.43	2.72	8	1
1:A:58:GLN:CA	1:A:76:LYS:CE	0.43	2.97	10	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:52:TRP:HB3	0.43	2.22	5	2
1:A:27:TYR:O	1:A:78:LYS:HE3	0.43	2.14	1	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:70:TYR:OH	0.43	2.13	1	1
1:A:26:ALA:C	1:A:76:LYS:NZ	0.43	2.72	1	1
1:A:14:SER:O	1:A:15:TYR:CE1	0.43	2.55	9	1
1:A:36:ILE:O	1:A:73:VAL:HG12	0.43	2.12	4	1
1:A:19:PRO:CD	1:A:45:THR:CB	0.43	2.97	7	1
1:A:22:GLU:N	1:A:22:GLU:OE1	0.43	2.52	8	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:74:MET:CE	0.43	2.96	1	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:74:MET:CG	0.43	2.97	10	1
1:A:58:GLN:HE21	1:A:76:LYS:HD2	0.43	1.34	6	1
1:A:41:THR:HB	1:A:69:TYR:CE1	0.43	2.49	7	1
1:A:32:VAL:CG2	1:A:77:VAL:CA	0.43	2.85	8	1
1:A:76:LYS:HE3	1:A:76:LYS:H	0.43	1.71	6	1
1:A:56:SER:OG	1:A:74:MET:CE	0.42	2.66	9	2
1:A:2:ASP:OD1	1:A:35:VAL:HG21	0.42	2.14	1	1
1:A:71:GLU:OE2	1:A:71:GLU:O	0.42	2.37	9	1
1:A:70:TYR:O	1:A:70:TYR:CD1	0.42	2.73	8	1
1:A:38:VAL:HG12	1:A:39:TYR:N	0.42	2.29	5	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:49:ALA:C	0.42	2.30	3	1
1:A:21:MET:HA	1:A:24:ILE:HG23	0.42	1.92	1	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:69:TYR:CB	0.42	2.98	2	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:69:TYR:HB2	0.42	2.44	2	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:58:GLN:HE21	0.42	1.75	6	1
1:A:7:ARG:NE	1:A:9:ILE:CD1	0.42	2.83	7	1
1:A:34:GLU:C	1:A:76:LYS:N	0.42	2.62	1	1
1:A:5:PRO:C	1:A:35:VAL:CG2	0.42	2.61	10	1
1:A:39:TYR:CB	1:A:70:TYR:O	0.42	2.67	10	1
1:A:36:ILE:HD12	1:A:74:MET:HB2	0.42	1.85	10	1
1:A:53:ILE:HB	1:A:58:GLN:HG3	0.42	1.91	2	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:MET:CA	0.42	2.45	3	2
1:A:15:TYR:CD2	1:A:16:CYS:CA	0.42	3.01	4	1
1:A:15:TYR:C	1:A:44:GLY:HA3	0.42	2.35	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ILE:HA	1:A:56:SER:HB2	0.42	1.92	8	1
1:A:75:LYS:O	1:A:76:LYS:C	0.42	2.57	10	3
1:A:50:PRO:HG3	1:A:64:PHE:HZ	0.42	1.74	10	1
1:A:27:TYR:HB3	1:A:58:GLN:CD	0.42	2.35	2	1
1:A:36:ILE:HG12	1:A:74:MET:HE2	0.42	1.92	2	1
1:A:30:ALA:H	1:A:76:LYS:NZ	0.42	2.12	2	1
1:A:23:LEU:CA	1:A:52:TRP:HB3	0.42	2.44	5	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:74:MET:HE3	0.42	2.44	1	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:24:ILE:HD11	0.42	1.91	2	1
1:A:57:GLY:O	1:A:77:VAL:CG2	0.42	2.67	2	1
1:A:12:ARG:HE	1:A:12:ARG:H	0.42	1.58	6	1
1:A:31:LYS:HZ2	1:A:34:GLU:HB2	0.42	1.74	6	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:22:GLU:HB3	0.42	2.45	6	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:36:ILE:HG13	0.42	2.45	3	2
1:A:36:ILE:HD13	1:A:58:GLN:HE22	0.42	1.74	3	1
1:A:63:VAL:CB	1:A:71:GLU:OE2	0.42	2.68	9	1
1:A:36:ILE:CG1	1:A:76:LYS:NZ	0.42	2.83	6	1
1:A:27:TYR:HB3	1:A:56:SER:C	0.42	2.34	5	1
1:A:55:LYS:HZ2	1:A:55:LYS:CB	0.42	2.28	2	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:69:TYR:CE1	0.42	3.03	7	1
1:A:59:GLU:OE1	1:A:75:LYS:HD3	0.42	2.15	3	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:70:TYR:HB3	0.41	2.29	6	1
1:A:44:GLY:HA2	1:A:47:LYS:CE	0.41	2.46	1	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:36:ILE:HD11	0.41	1.90	8	1
1:A:40:SER:C	1:A:70:TYR:H	0.41	2.07	8	1
1:A:17:PRO:HB2	1:A:70:TYR:HH	0.41	1.39	3	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:74:MET:HE1	0.41	2.43	10	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:38:VAL:HG13	0.41	1.92	5	1
1:A:59:GLU:HG2	1:A:77:VAL:HG21	0.41	1.92	7	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:74:MET:CG	0.41	2.44	6	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:72:ILE:N	0.41	2.80	7	2
1:A:24:ILE:HG12	1:A:25:LYS:N	0.41	2.27	1	1
1:A:48:ASP:O	1:A:49:ALA:C	0.41	2.59	1	2
1:A:72:ILE:O	1:A:74:MET:HE1	0.41	2.14	5	1
1:A:7:ARG:CZ	1:A:29:GLN:CB	0.41	2.95	7	1
1:A:19:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CZ	0.41	2.44	8	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:21:MET:N	0.41	2.31	5	1
1:A:58:GLN:HG2	1:A:76:LYS:CE	0.41	2.41	5	1
1:A:21:MET:HG2	1:A:24:ILE:HD12	0.41	1.91	4	1
1:A:53:ILE:CG2	1:A:74:MET:HG2	0.41	2.45	3	1
1:A:27:TYR:HB2	1:A:76:LYS:HZ2	0.41	1.72	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LYS:NZ	1:A:78:LYS:CG	0.41	2.82	5	1
1:A:10:ASP:CA	1:A:39:TYR:CE1	0.41	3.03	7	1
1:A:2:ASP:N	1:A:61:VAL:CG1	0.41	2.84	7	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:76:LYS:N	0.41	2.44	7	1
1:A:17:PRO:HD2	1:A:70:TYR:CZ	0.41	2.42	10	1
1:A:48:ASP:O	1:A:51:ALA:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:68:GLY:O	0.41	2.53	2	1
1:A:36:ILE:CD1	1:A:76:LYS:CE	0.41	2.99	6	1
1:A:31:LYS:O	1:A:34:GLU:CB	0.41	2.62	5	1
1:A:69:TYR:CZ	1:A:71:GLU:OE1	0.41	2.74	4	1
1:A:7:ARG:HE	1:A:9:ILE:HB	0.41	1.76	4	1
1:A:59:GLU:OE1	1:A:75:LYS:CD	0.41	2.68	3	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE2	0.41	2.45	10	1
1:A:73:VAL:C	1:A:74:MET:HG2	0.41	2.36	10	1
1:A:7:ARG:NH1	1:A:7:ARG:HG2	0.41	2.28	9	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:74:MET:HE1	0.41	1.91	6	1
1:A:41:THR:HB	1:A:69:TYR:CD1	0.41	2.51	7	1
1:A:33:GLY:N	1:A:77:VAL:HG12	0.41	2.30	8	1
1:A:57:GLY:C	1:A:76:LYS:NZ	0.41	2.74	10	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:TYR:CD2	0.41	2.74	8	1
1:A:32:VAL:CA	1:A:76:LYS:C	0.41	2.87	8	1
1:A:31:LYS:O	1:A:76:LYS:CG	0.40	2.57	6	1
1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:HD3	0.40	2.31	4	1
1:A:15:TYR:H	1:A:42:ASP:CG	0.40	2.19	7	2
1:A:20:LEU:CG	1:A:48:ASP:OD2	0.40	2.70	3	1
1:A:53:ILE:CA	1:A:74:MET:HE3	0.40	2.46	1	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:53:ILE:H	0.40	1.75	7	1
1:A:32:VAL:HG22	1:A:77:VAL:HA	0.40	1.89	8	1
1:A:34:GLU:HB2	1:A:76:LYS:HB2	0.40	1.86	10	1
1:A:70:TYR:CD1	1:A:70:TYR:O	0.40	2.75	2	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:SER:C	0.40	2.60	9	1
1:A:46:LYS:CD	1:A:70:TYR:HB2	0.40	2.46	6	1
1:A:19:PRO:O	1:A:20:LEU:C	0.40	2.59	5	1
1:A:23:LEU:C	1:A:56:SER:OG	0.40	2.60	5	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:74:MET:CG	0.40	2.46	4	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:69:TYR:CE1	0.40	2.51	7	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:48:ASP:CG	0.40	2.89	7	1
1:A:55:LYS:NZ	1:A:55:LYS:CB	0.40	2.84	2	1
1:A:36:ILE:HD13	1:A:76:LYS:HD2	0.40	1.94	6	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:78:LYS:CD	0.40	2.83	5	1
1:A:58:GLN:CA	1:A:75:LYS:C	0.40	2.89	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:VAL:N	1:A:76:LYS:HZ3	0.40	2.14	7	1
1:A:53:ILE:N	1:A:74:MET:SD	0.40	2.95	10	1
1:A:26:ALA:C	1:A:28:LYS:N	0.40	2.75	7	1
1:A:19:PRO:HA	1:A:22:GLU:OE1	0.40	2.15	8	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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	76/78 (97%)	56±1 (73±2%)	15±2 (19±2%)	6±1 (8±1%)	2	15
All	All	760/780 (97%)	555 (73%)	145 (19%)	60 (8%)	2	15

All 10 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	3	VAL	10
1	A	16	CYS	10
1	A	63	VAL	10
1	A	68	GLY	10
1	A	4	LYS	10
1	A	18	GLY	4
1	A	2	ASP	2
1	A	54	GLN	2
1	A	43	ALA	1
1	A	42	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	64/65 (98%)	30±2 (47±3%)	34±2 (53±3%)	0 1
All	All	640/650 (98%)	300 (47%)	340 (53%)	0 1

All 50 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	58	GLN	10
1	A	39	TYR	10
1	A	47	LYS	10
1	A	46	LYS	10
1	A	53	ILE	10
1	A	25	LYS	10
1	A	61	VAL	10
1	A	42	ASP	10
1	A	14	SER	10
1	A	73	VAL	10
1	A	28	LYS	10
1	A	32	VAL	10
1	A	55	LYS	10
1	A	37	SER	10
1	A	78	LYS	10
1	A	48	ASP	10
1	A	66	ARG	10
1	A	52	TRP	10
1	A	20	LEU	10
1	A	59	GLU	9
1	A	12	ARG	8
1	A	74	MET	8
1	A	29	GLN	8
1	A	3	VAL	7
1	A	69	TYR	7
1	A	22	GLU	7
1	A	35	VAL	7
1	A	72	ILE	6
1	A	54	GLN	6
1	A	31	LYS	6
1	A	15	TYR	6
1	A	45	THR	6
1	A	7	ARG	5
1	A	65	ASP	5
1	A	10	ASP	5
1	A	16	CYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	SER	5
1	A	36	ILE	4
1	A	24	ILE	4
1	A	4	LYS	4
1	A	34	GLU	3
1	A	8	VAL	3
1	A	76	LYS	3
1	A	23	LEU	3
1	A	41	THR	2
1	A	6	ASP	2
1	A	9	ILE	2
1	A	21	MET	2
1	A	71	GLU	1
1	A	70	TYR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided