



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 20, 2018 – 02:08 pm GMT

PDB ID : 2JRC
Title : Solution structure of Peptidyl-tRNA Hydrolase from Mycobacterium tuberculosis H37Rv.
Authors : Pulavarti, S.V.S.R.K.; Jain, A.; Pathak, P.P.; Arora, A.
Deposited on : 2007-06-22

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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 : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : trunk30686
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk30686

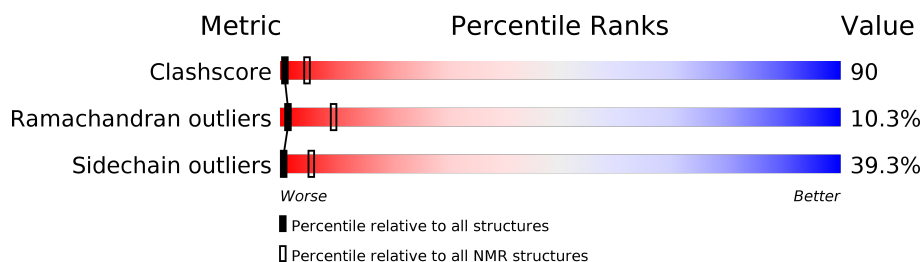
1 Overall quality at a glance

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	136279	12091
Ramachandran outliers	132675	10835
Sidechain outliers	132484	10811

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	204	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 40 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:3-A:138, A:147-A:191 (181)	0.60	15

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 6 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 18, 19, 20, 21, 24, 26, 28, 30, 31, 33, 34, 35, 36, 38, 39
2	1, 7, 37
3	27, 29
4	22, 40
5	12, 17
6	2, 14
Single-model clusters	23; 25; 32

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2681 atoms, of which 1241 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptidyl-tRNA hydrolase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	191	Total	C	H	N	O	S	0
			2681	904	1241	274	257	5	

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

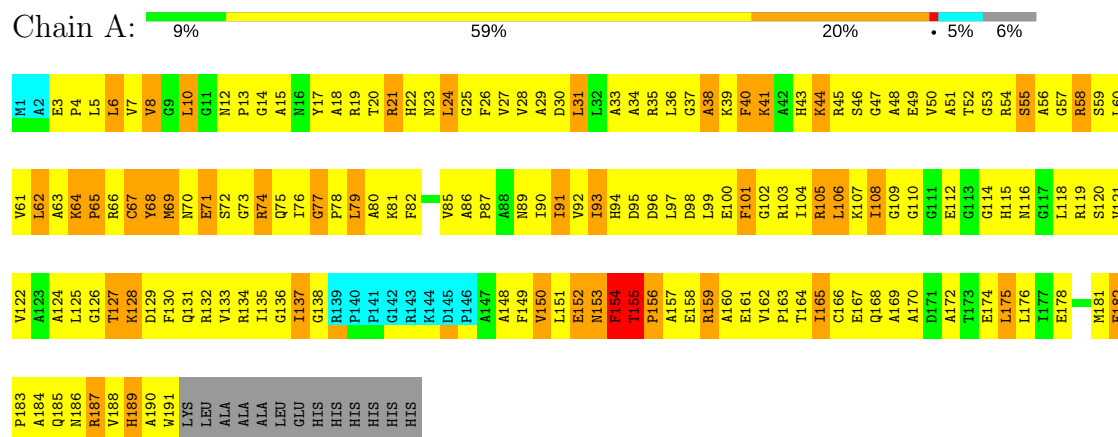
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	192	LYS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	193	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	194	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	195	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	196	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	197	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	198	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	199	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	200	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	201	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	202	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	203	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865
A	204	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65865

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: Peptidyl-tRNA hydrolase

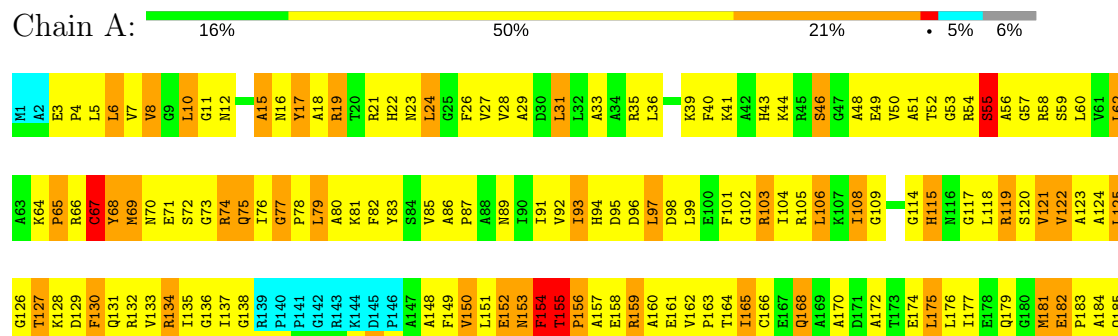


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

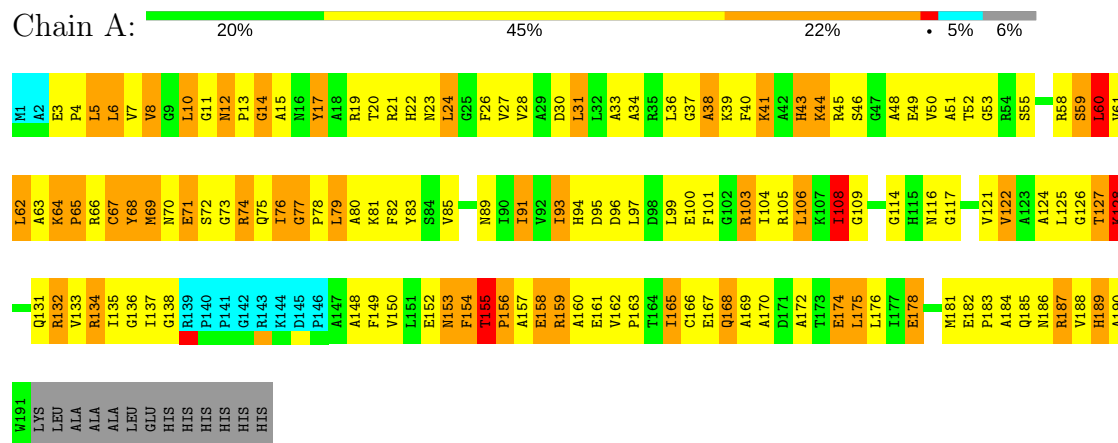
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



M186
 R187
 V188
 H189
 A190
 V191
 LYS
 LEU
 ALA
 ALA
 ALA
 LEU
 GLU
 HIS
 HIS
 HIS
 HIS
 HIS
 HIS

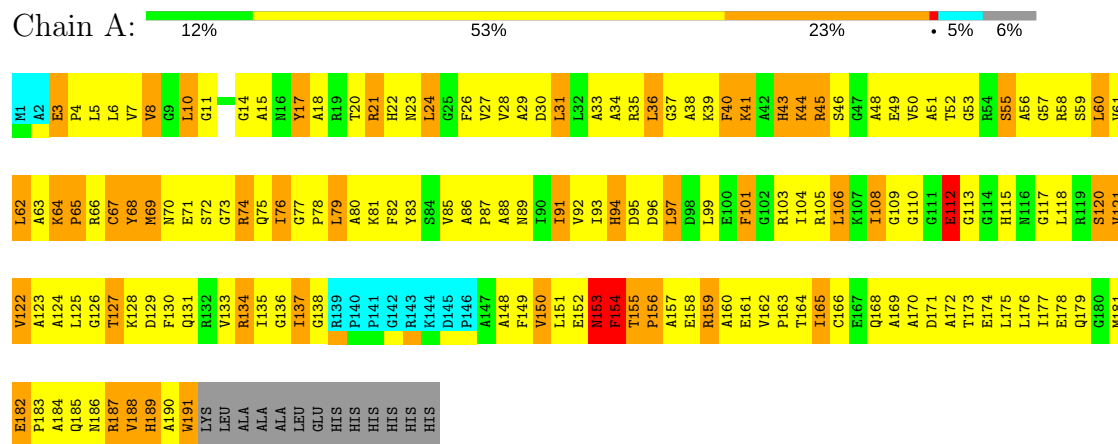
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



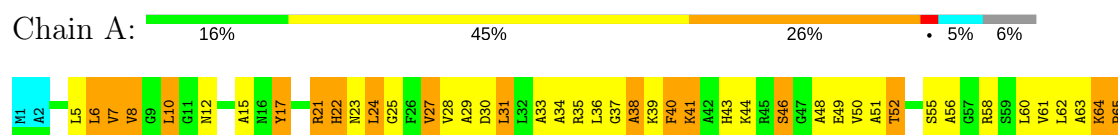
4.2.3 Score per residue for model 3

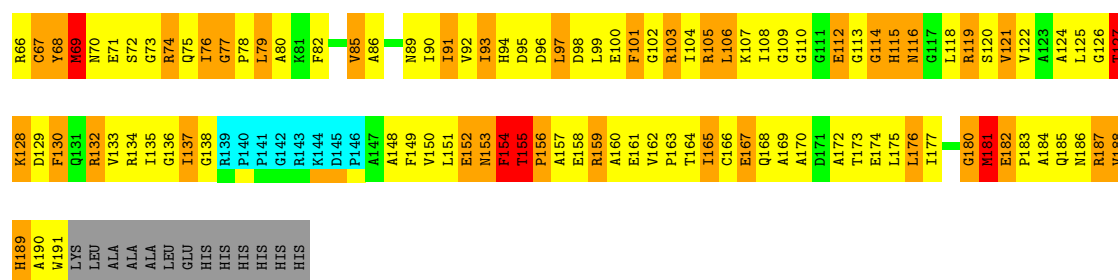
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

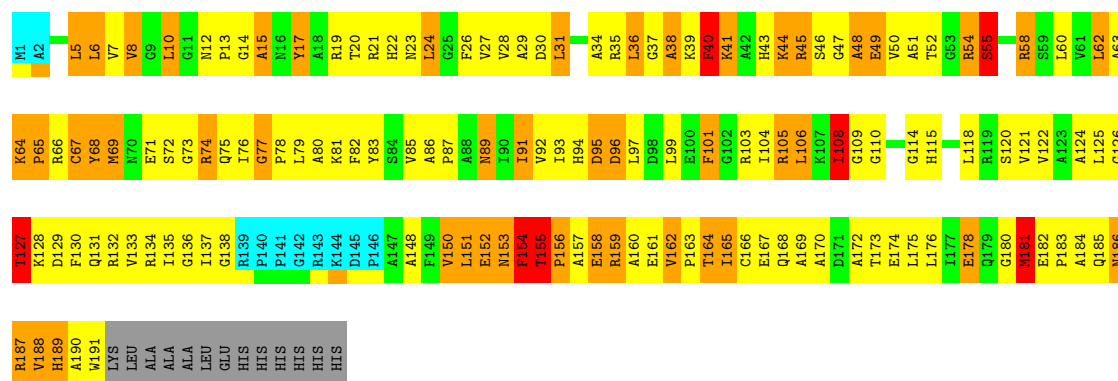




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

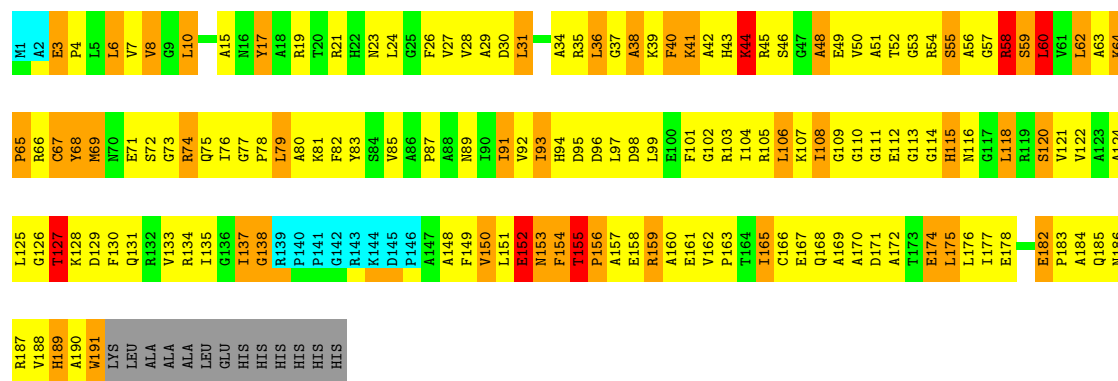
Chain A: 17% 45% 23% 5% 6%



4.2.6 Score per residue for model 6

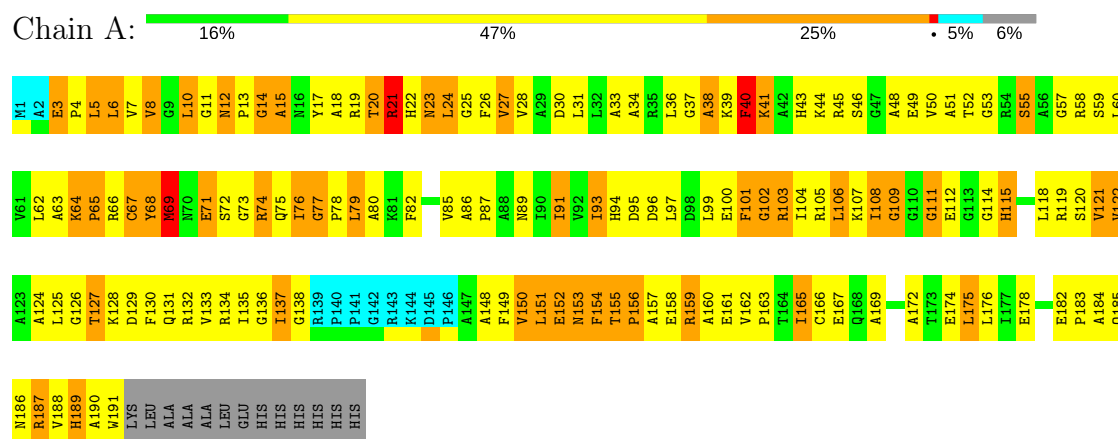
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 16% 50% 20% 5% 6%



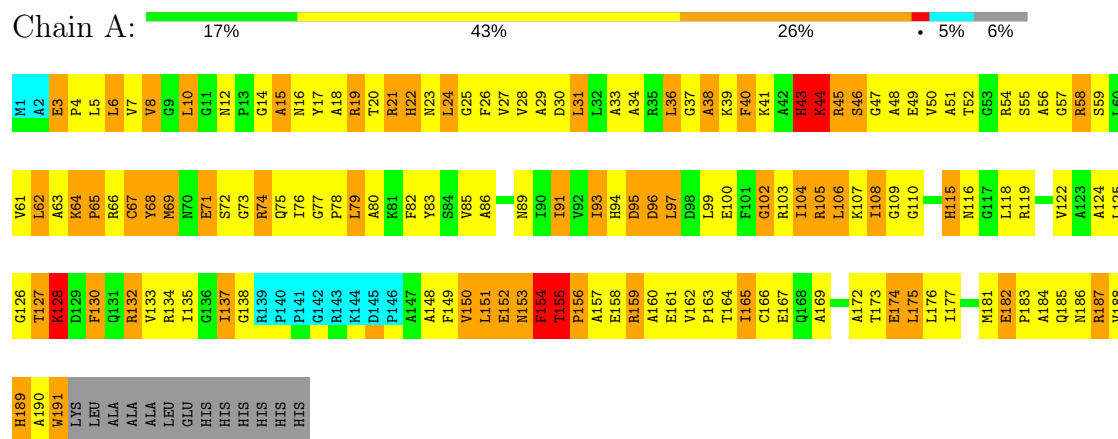
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



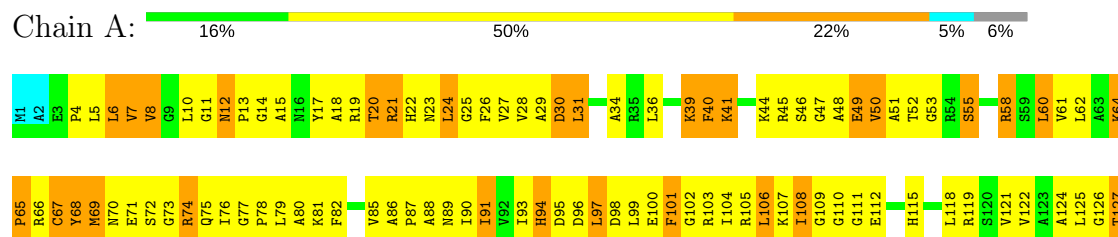
4.2.8 Score per residue for model 8

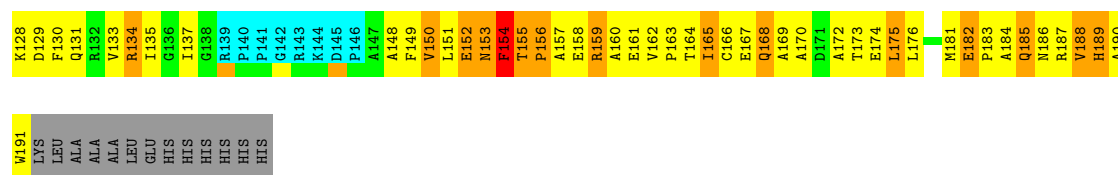
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.9 Score per residue for model 9

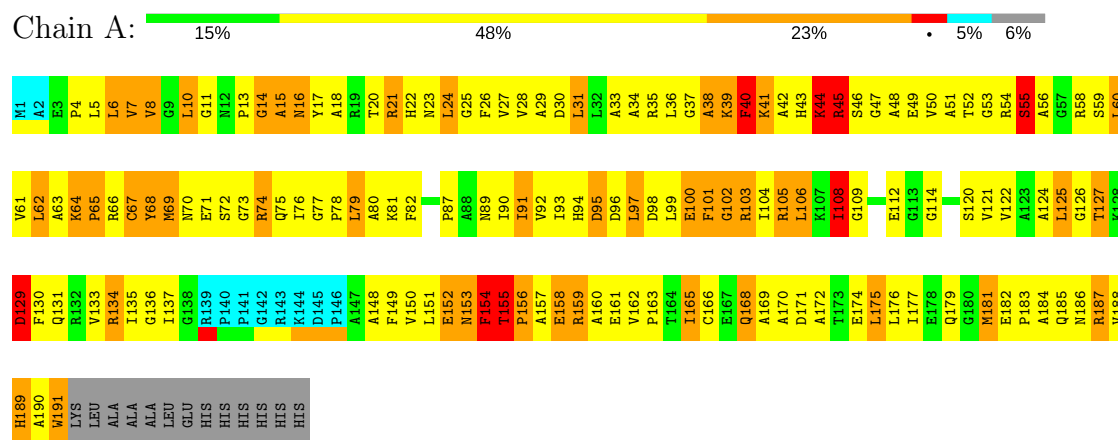
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





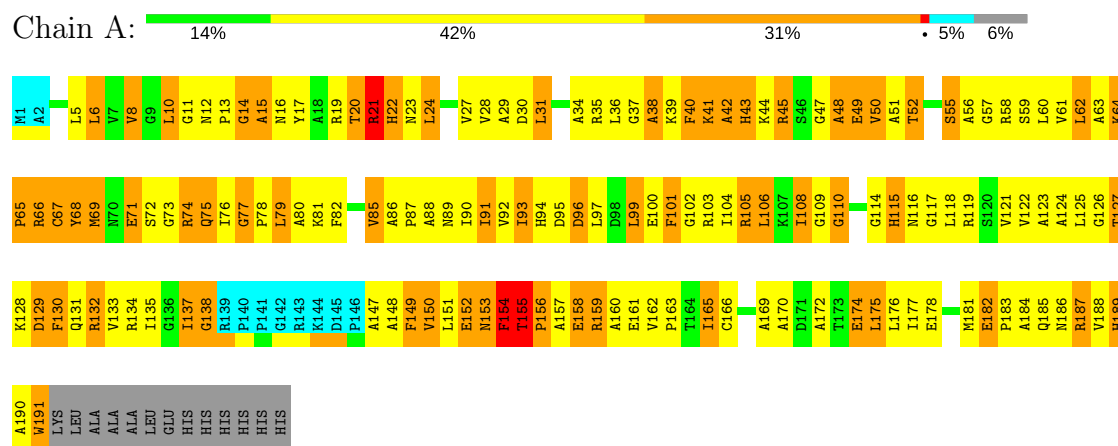
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



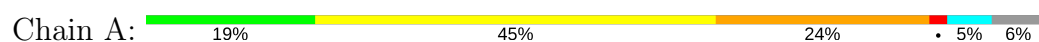
4.2.11 Score per residue for model 11

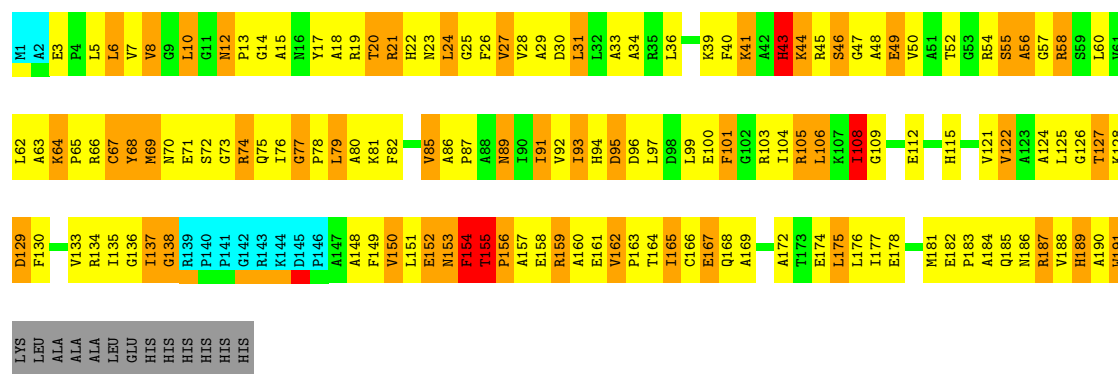
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

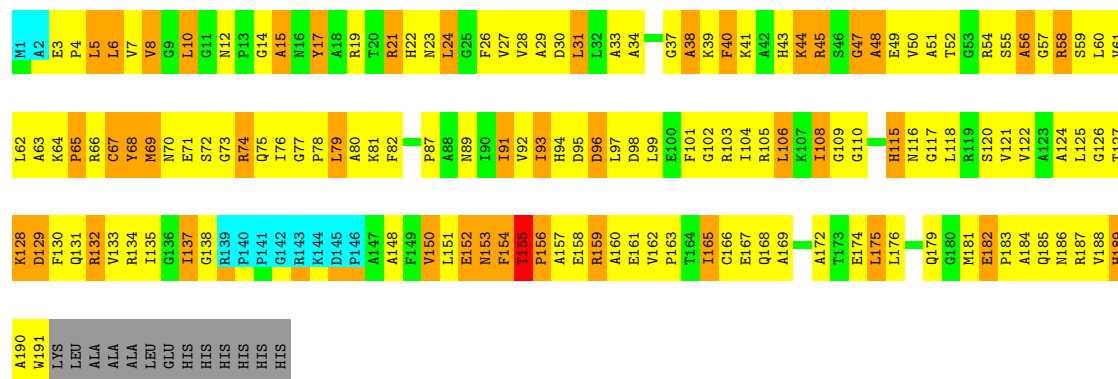




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

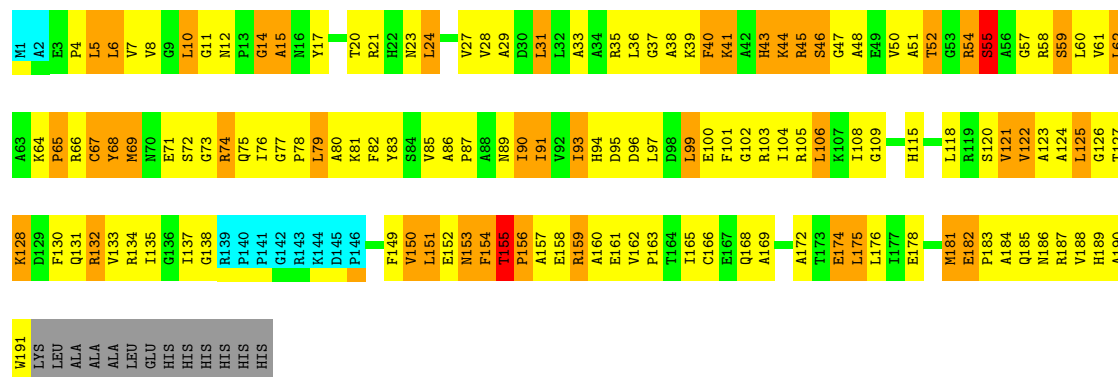
Chain A: 18% 49% 21% 5% 6%



4.2.14 Score per residue for model 14

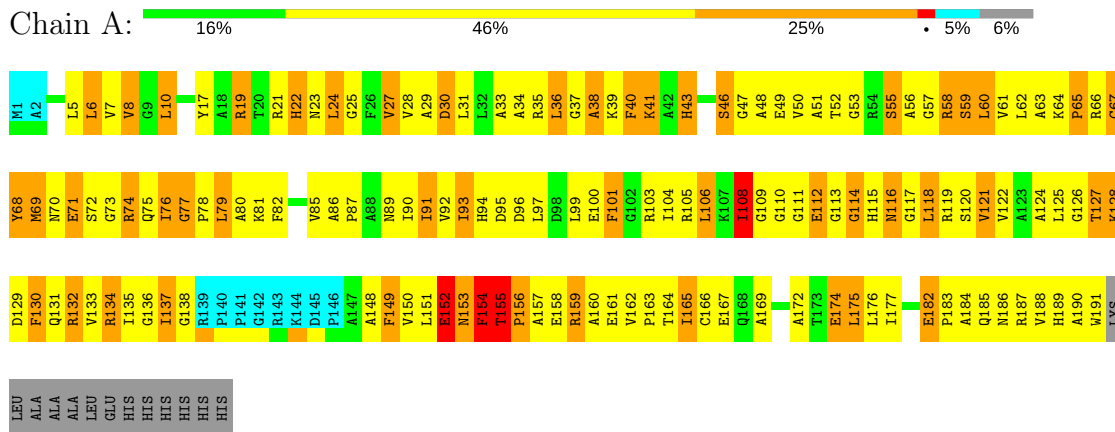
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 21% 46% 21% 5% 6%



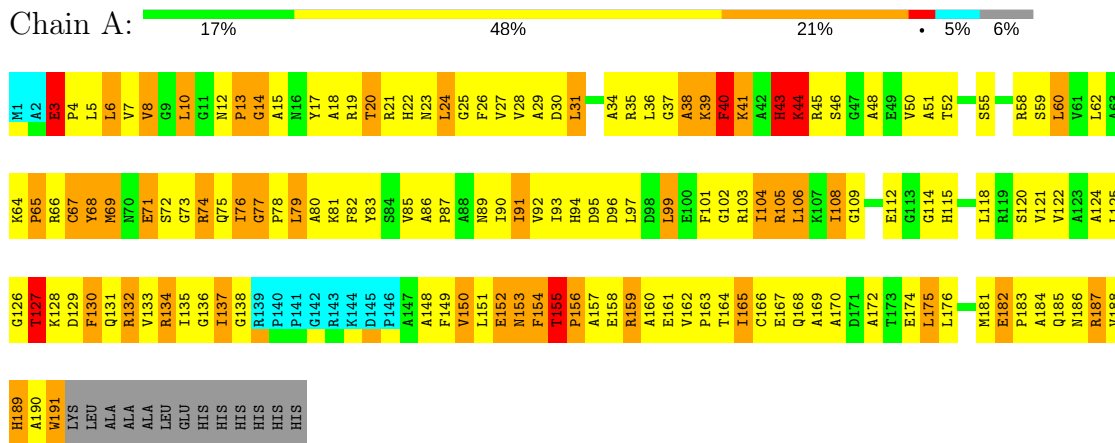
4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



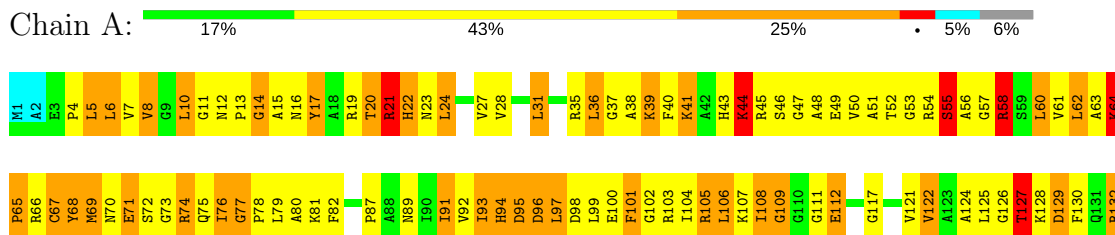
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.17 Score per residue for model 17

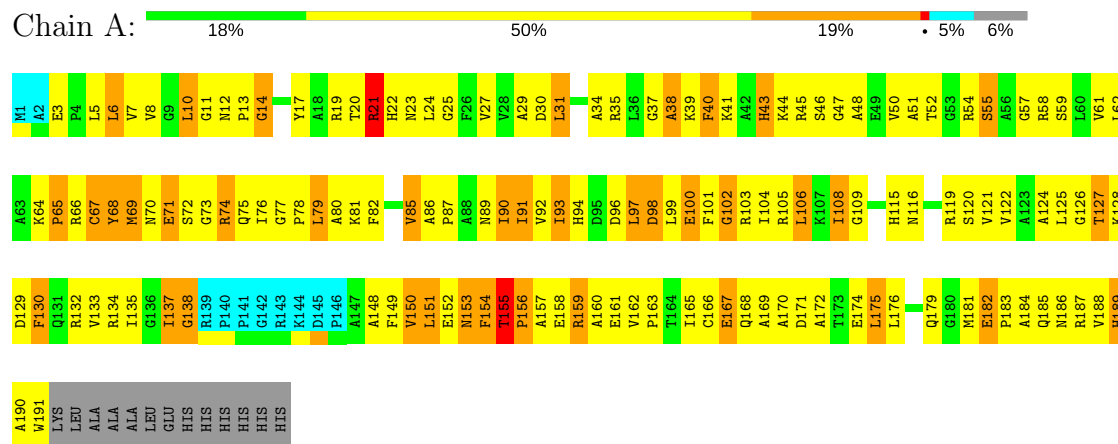
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





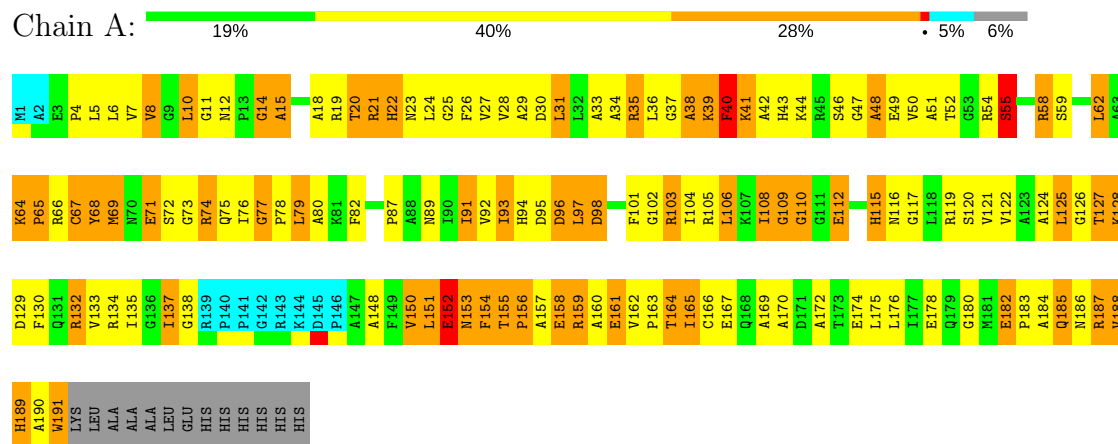
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



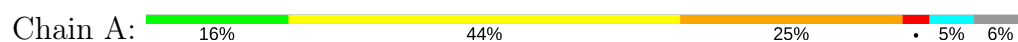
4.2.19 Score per residue for model 19

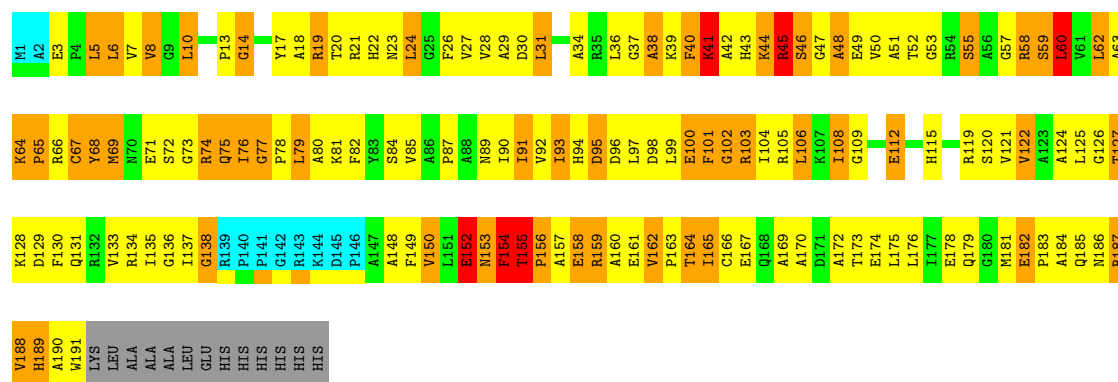
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

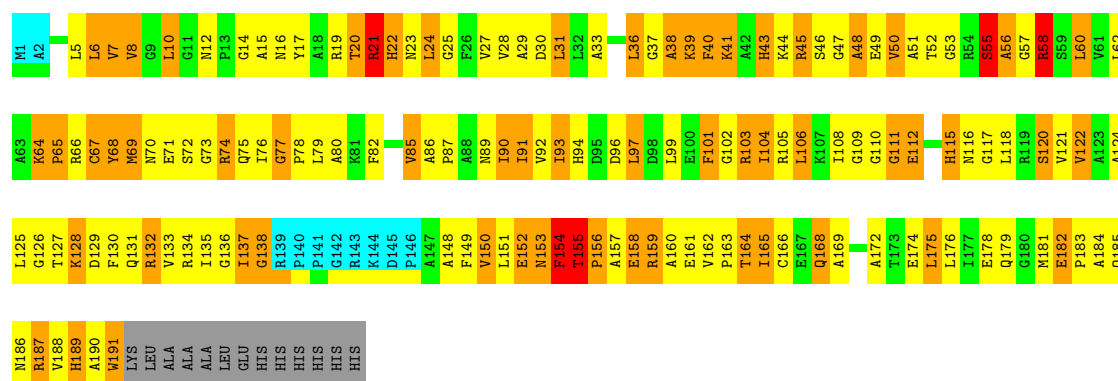




4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

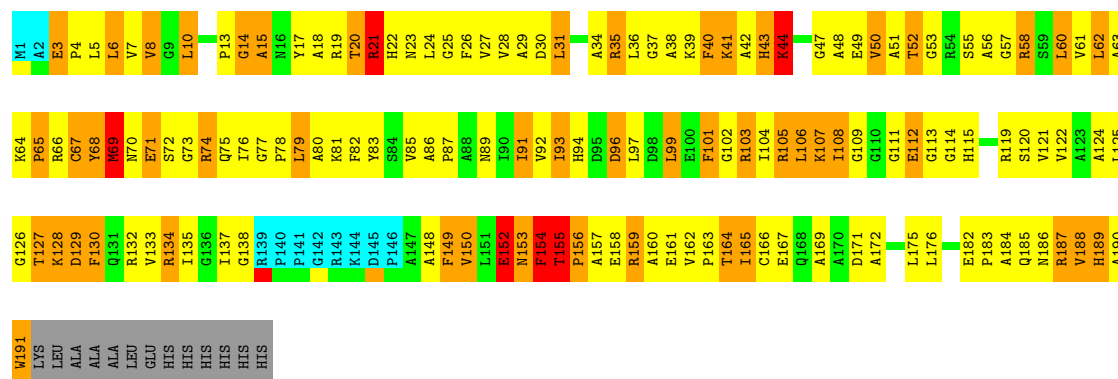
Chain A: 17% 41% 28% 5% 6%



4.2.22 Score per residue for model 22

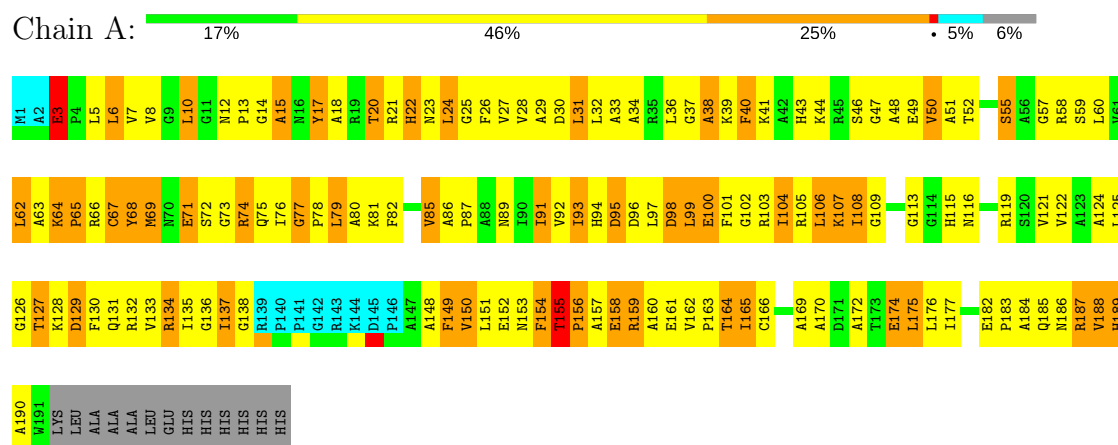
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 17% 45% 25% 5% 6%



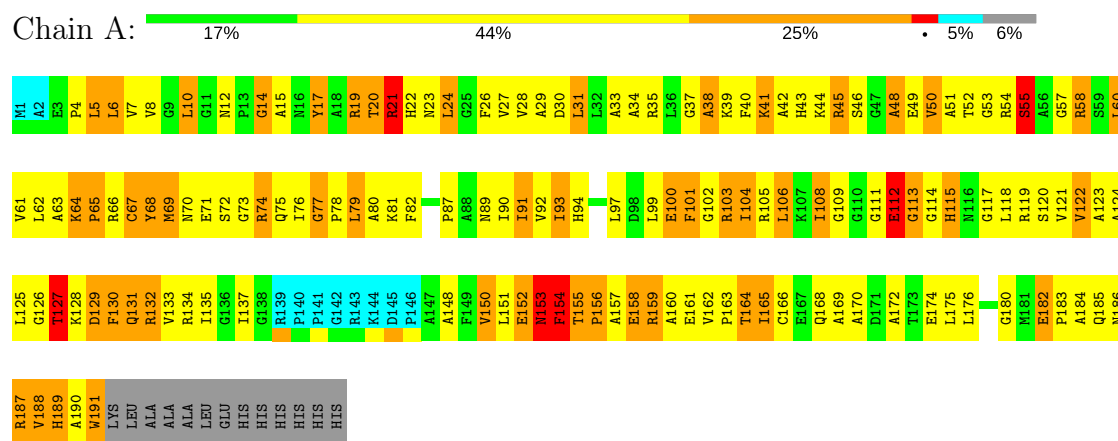
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



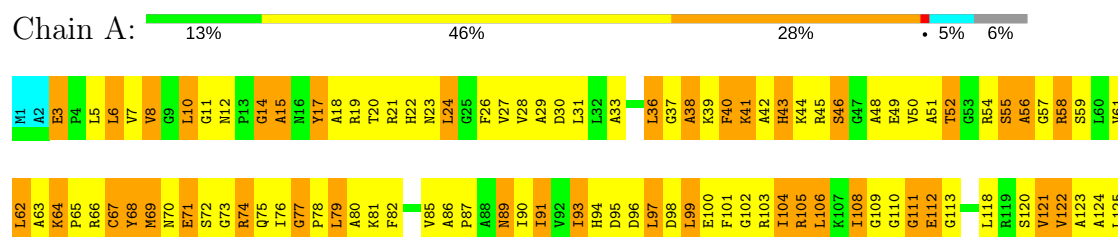
4.2.24 Score per residue for model 24

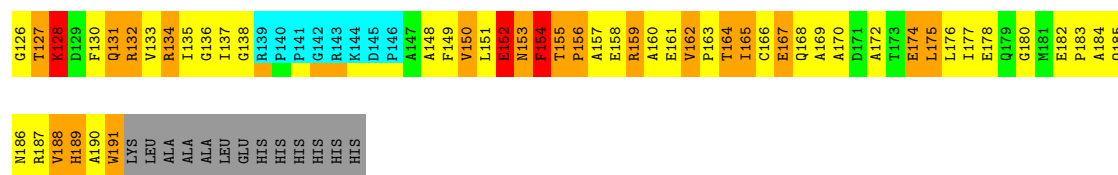
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.25 Score per residue for model 25

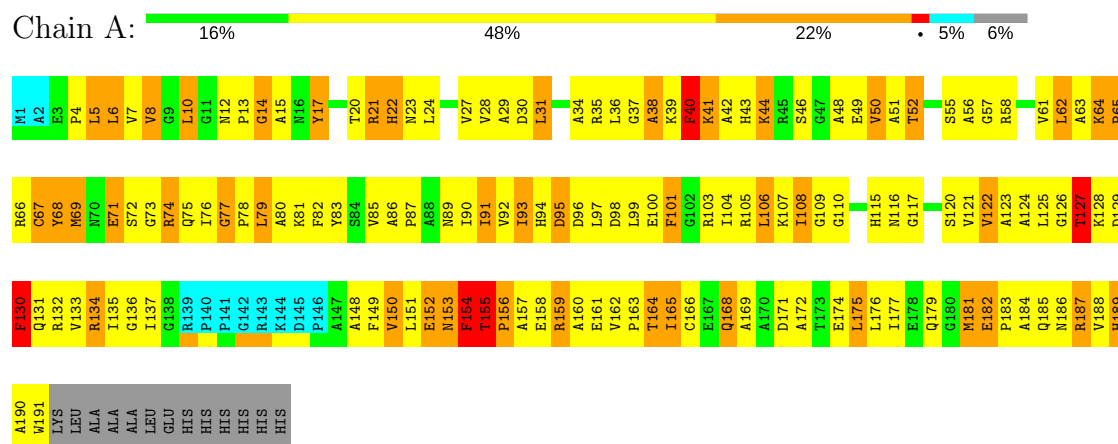
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





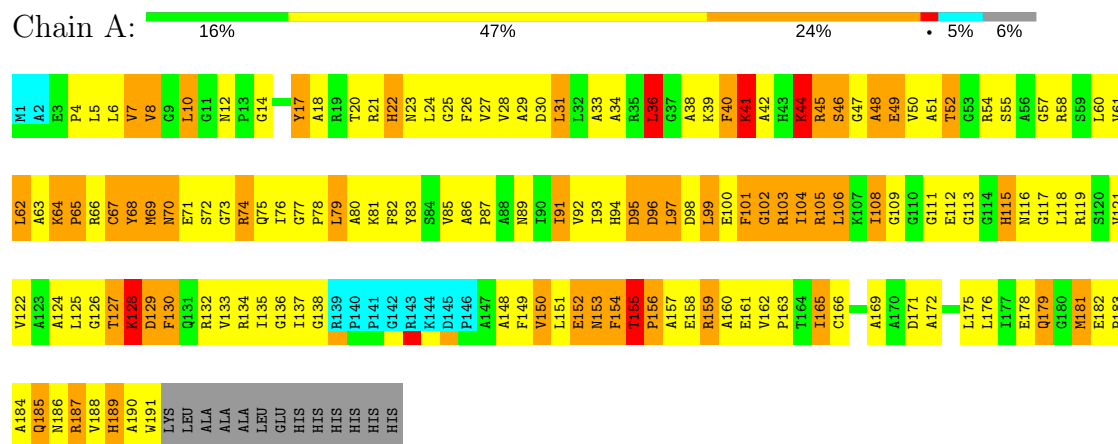
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



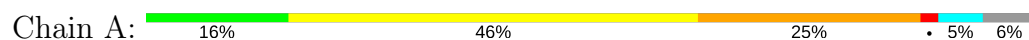
4.2.27 Score per residue for model 27

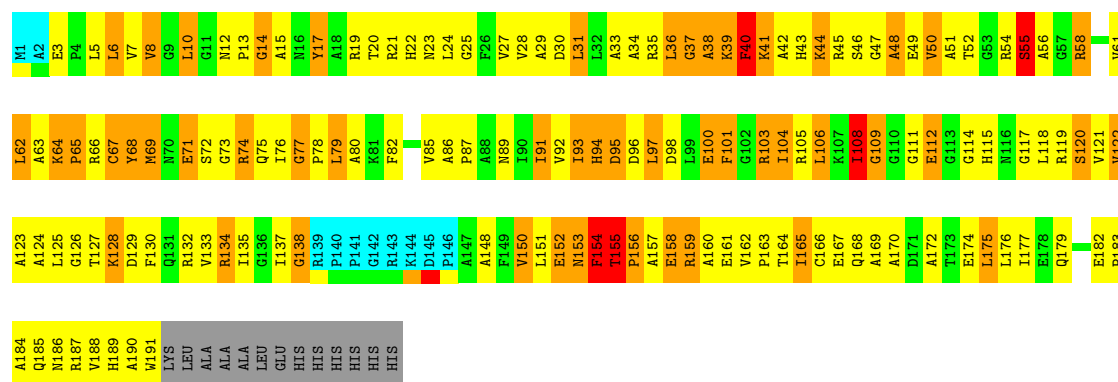
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

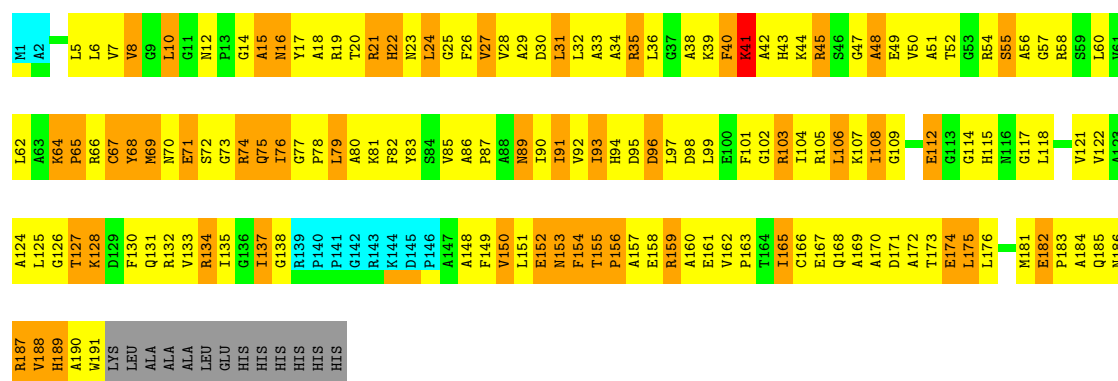




4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

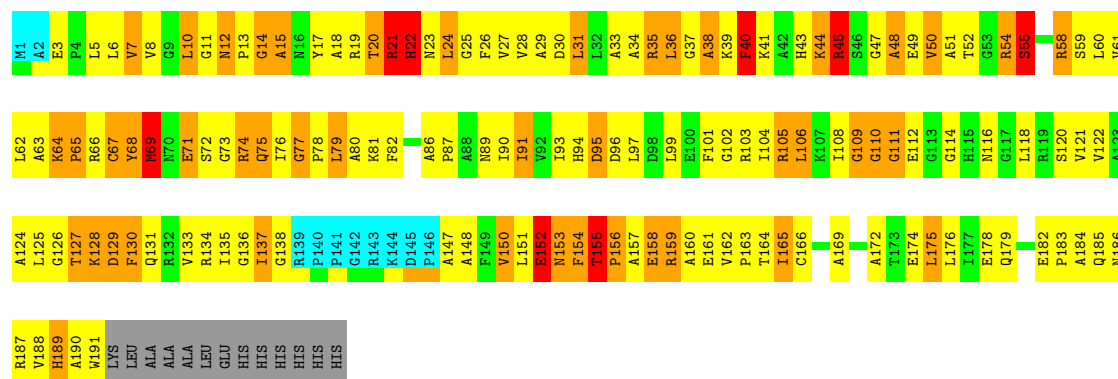
Chain A: 14% 50% 25% 5% 6%



4.2.30 Score per residue for model 30

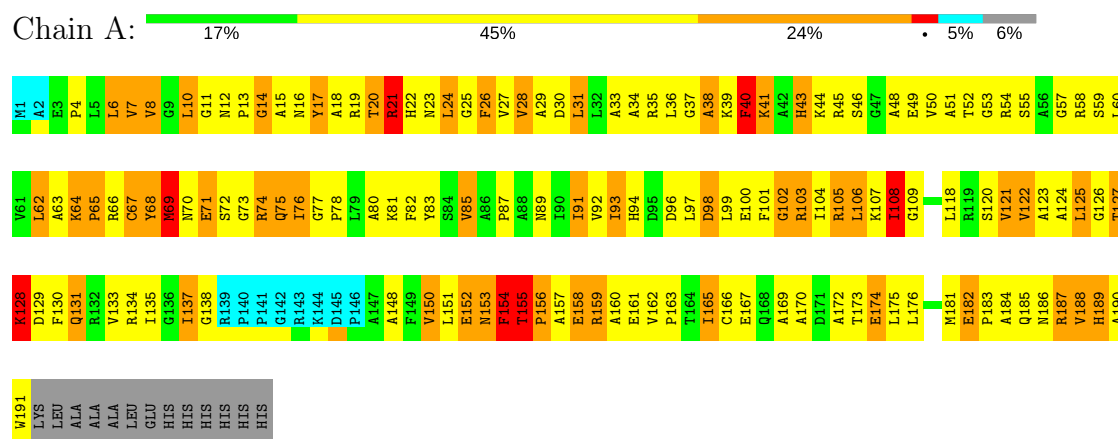
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 16% 46% 23% 5% 6%



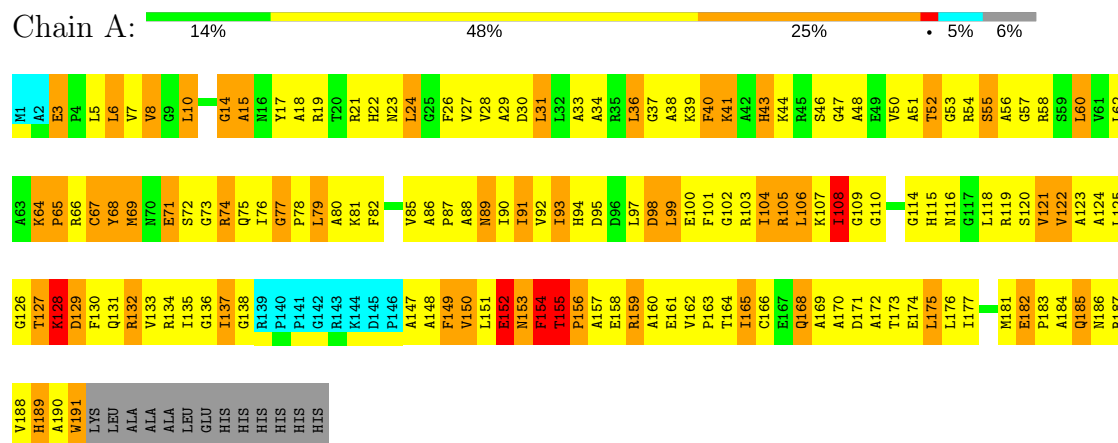
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



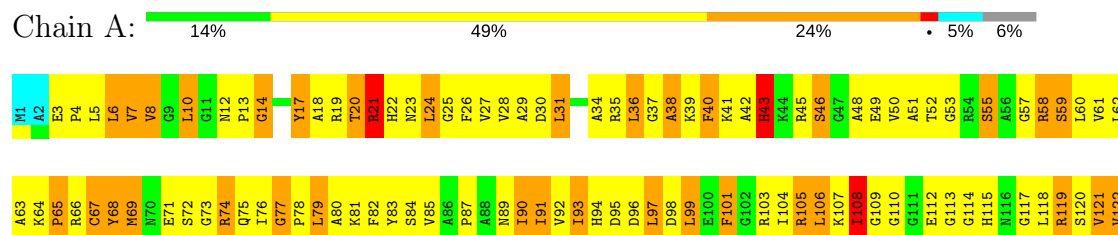
4.2.32 Score per residue for model 32

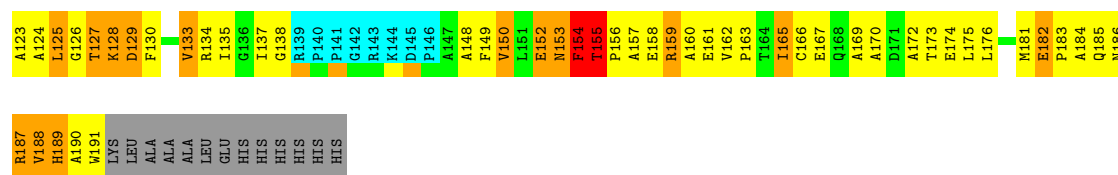
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.33 Score per residue for model 33

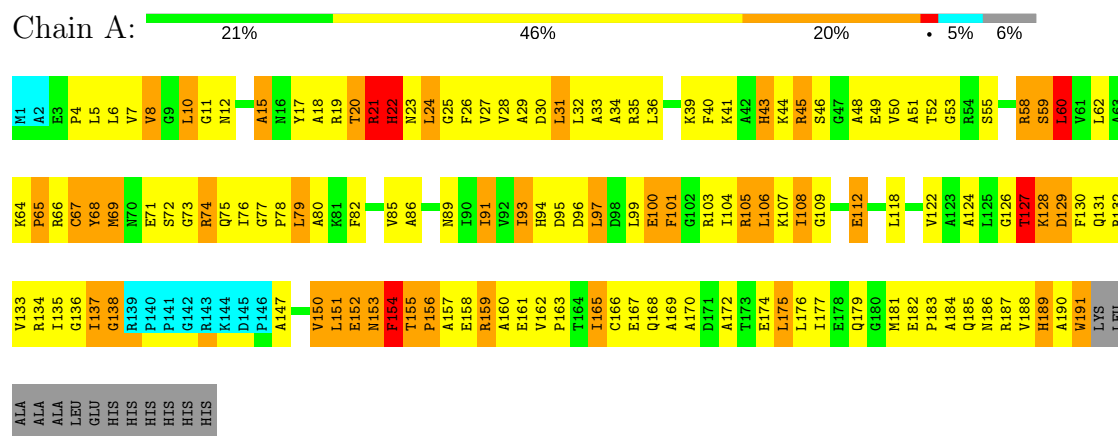
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





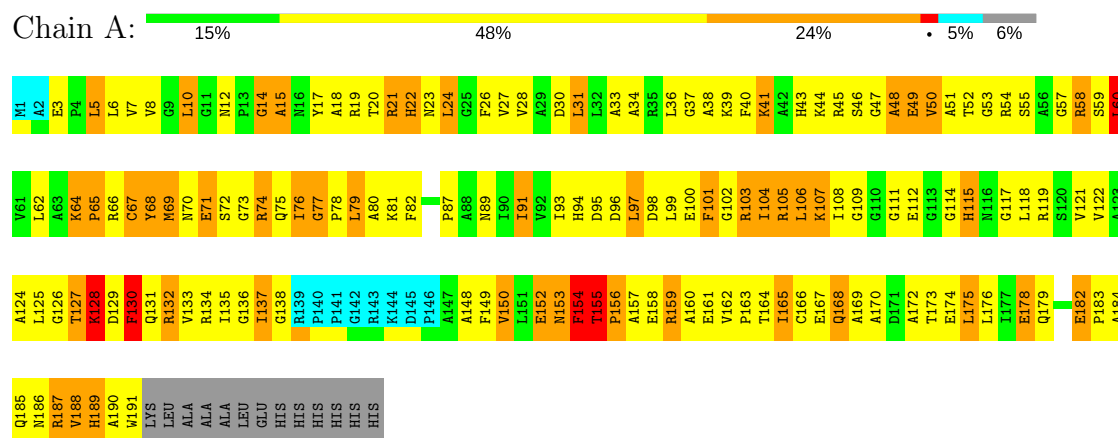
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



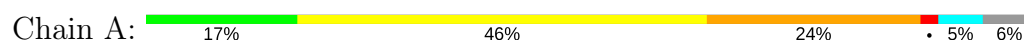
4.2.35 Score per residue for model 35

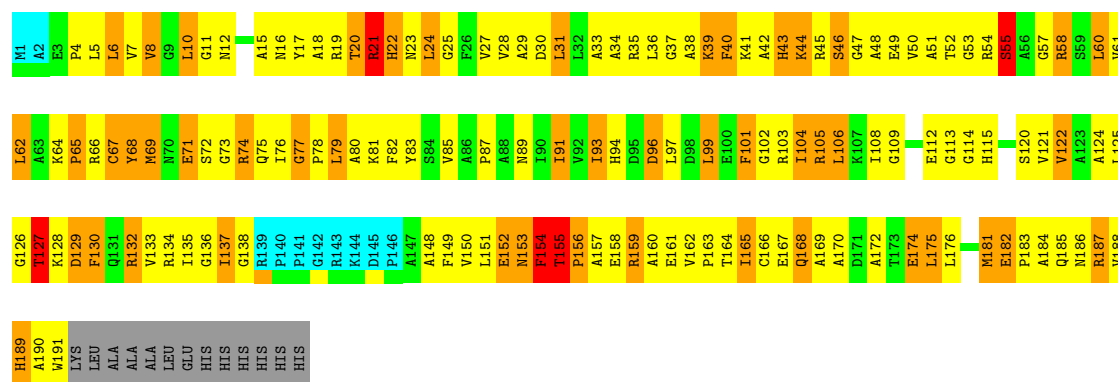
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

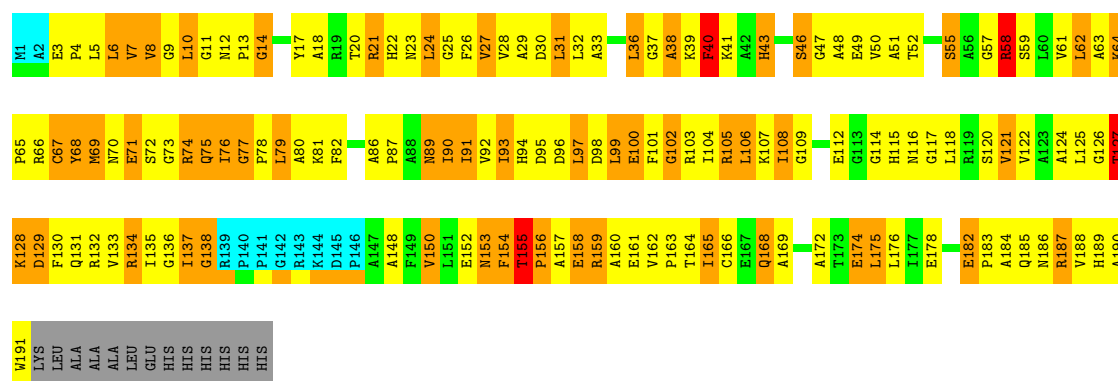




4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

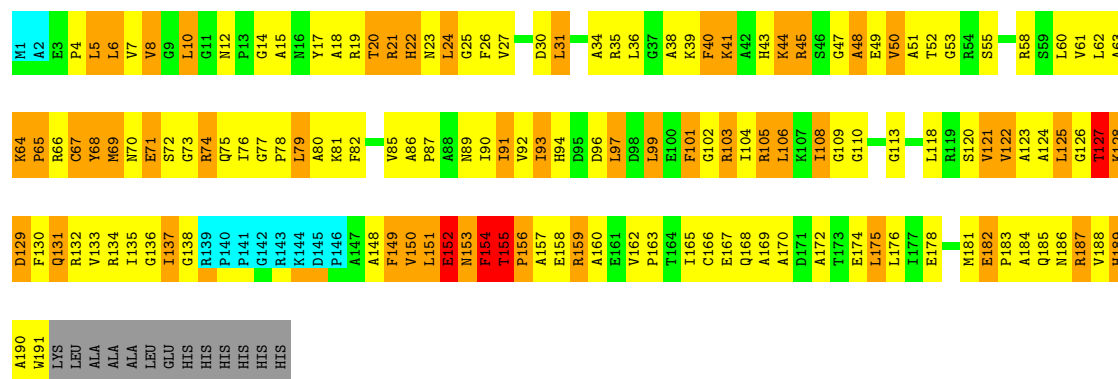
Chain A: 16% 45% 26% 5% 6%



4.2.38 Score per residue for model 38

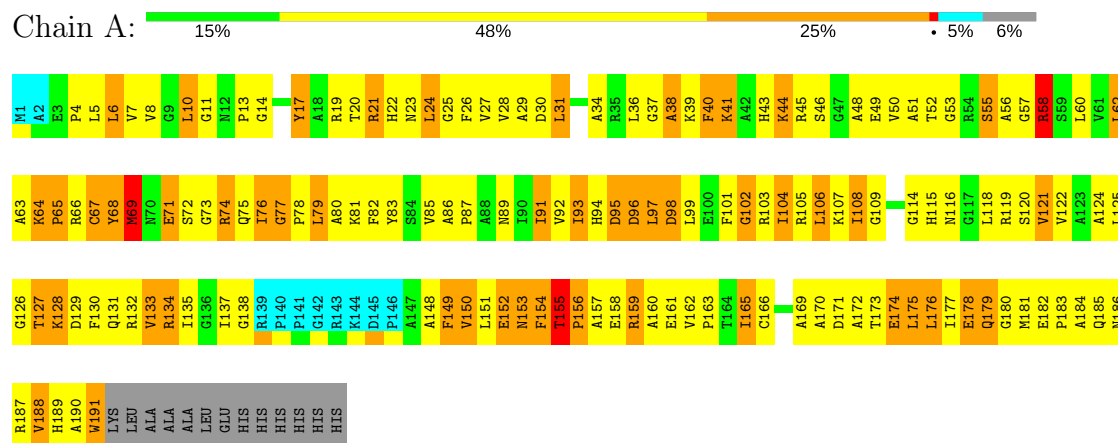
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 19% 44% 24% 5% 6%



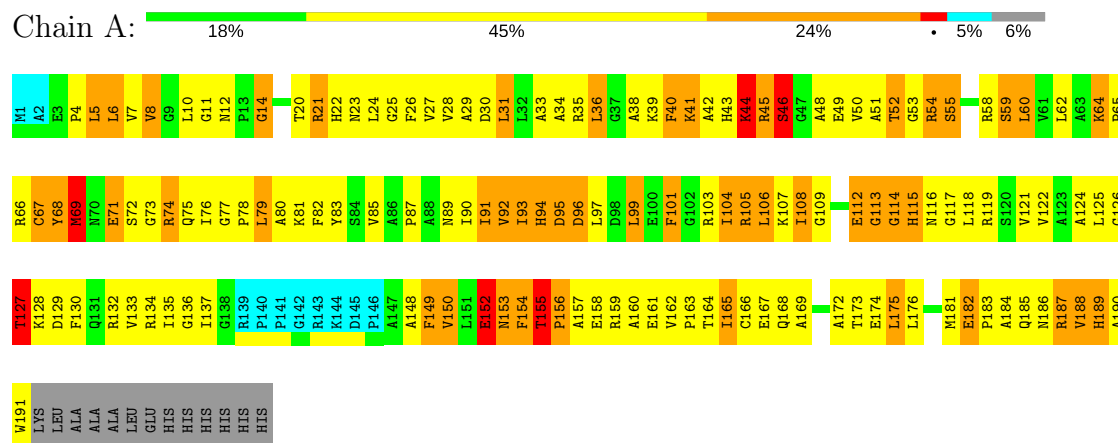
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 135 calculated structures, 40 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	1.0.5

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

6.1 Standard geometry

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

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	1363	1182	1383	247±15
All	All	54520	47280	55320	9875

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 90.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CD	1.12	1.95	18	40
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD11	1.11	1.19	3	27
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HD13	1.10	1.23	19	4
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG21	1.07	1.22	27	22
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HB2	1.06	1.79	6	16
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG22	1.06	1.20	32	1
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CD	1.04	2.05	38	40
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG13	1.04	1.52	40	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG21	1.04	1.08	8	2
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE2	1.01	1.90	18	9
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD11	1.01	1.91	23	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:HD13	1.00	1.32	40	2
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG12	1.00	1.30	3	1
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:HG22	1.00	1.29	11	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE1	0.99	1.92	27	9
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HD3	0.99	1.58	19	40
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG23	0.99	1.35	13	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB2	0.98	1.93	31	18
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD11	0.97	1.94	27	2
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HD11	0.96	1.32	22	31
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG21	0.96	1.89	4	2
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG22	0.96	1.61	15	38
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD2	0.96	1.59	24	40
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB3	0.95	1.60	33	15
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CG2	0.94	1.92	27	26
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD21	0.94	1.61	21	1
1:A:52:THR:CG2	1:A:61:VAL:HG22	0.94	1.91	11	5
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD13	0.94	1.38	5	2
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:HD12	0.94	1.62	13	38
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:HD13	0.94	1.36	35	3
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB2	0.94	1.63	9	25
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HB2	0.93	1.37	6	12
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:O	0.93	1.62	6	3
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:O	0.93	1.64	9	5
1:A:93:ILE:N	1:A:93:ILE:HD13	0.93	1.76	1	2
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG22	0.92	1.64	10	8
1:A:154:PHE:CG	1:A:157:ALA:HB3	0.92	1.98	37	33
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG23	0.92	1.93	5	12
1:A:106:LEU:HD12	1:A:107:LYS:N	0.92	1.80	22	2
1:A:87:PRO:O	1:A:90:ILE:HG22	0.92	1.65	32	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CG1	0.91	1.95	39	17
1:A:12:ASN:OD1	1:A:18:ALA:HB2	0.91	1.64	35	4
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD2	0.91	1.99	9	5
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:HG23	0.91	1.66	21	13
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:CD1	0.91	1.96	3	14
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG23	0.91	1.39	39	8
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:HD13	0.91	1.40	17	8
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG21	0.90	1.96	21	25
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD11	0.90	2.02	5	1
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:N	0.90	2.03	12	40
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD11	0.90	1.95	2	18
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD21	0.90	1.95	10	34
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD11	0.90	1.97	26	16
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:N	0.90	1.82	30	34
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD3	0.90	1.66	18	40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:HD12	0.89	1.67	32	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:HB3	0.89	1.41	21	1
1:A:108:ILE:HD11	1:A:129:ASP:O	0.89	1.66	23	14
1:A:43:HIS:HE2	1:A:48:ALA:HB3	0.89	1.25	19	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CG1	0.88	1.97	12	21
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:HD21	0.88	1.40	2	18
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CG1	0.88	1.98	10	18
1:A:106:LEU:HB3	1:A:133:VAL:HG22	0.88	1.43	35	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:HD13	0.88	1.69	34	2
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:PRO:HD3	0.88	1.45	40	1
1:A:19:ARG:O	1:A:21:ARG:N	0.87	2.06	9	17
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HD11	0.87	1.43	22	10
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG1	0.87	1.98	21	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD11	0.87	1.98	31	11
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:HB3	0.87	1.85	19	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:NE2	0.87	1.84	16	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:27:VAL:HG21	0.86	1.85	29	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE2	0.86	2.04	34	4
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:OD1	0.86	1.71	39	3
1:A:121:VAL:HG13	1:A:125:LEU:HD12	0.86	1.48	12	12
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CB	0.86	2.01	16	9
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG23	0.86	1.70	9	38
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG22	0.85	1.47	26	15
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:N	0.85	2.08	33	37
1:A:5:LEU:HD12	1:A:89:ASN:O	0.85	1.72	40	5
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:HD2	0.85	1.91	40	40
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:HG23	0.85	1.46	12	8
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD11	0.85	1.69	9	2
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE1	0.85	1.69	10	5
1:A:36:LEU:O	1:A:36:LEU:HD12	0.85	1.71	8	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB2	0.85	1.48	16	6
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB3	0.85	2.06	35	5
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD22	0.84	1.92	32	15
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:HD13	0.84	1.49	24	16
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CG	0.84	1.93	9	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CZ	0.84	2.06	40	7
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	3	7
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD21	0.84	2.06	16	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG13	0.84	1.49	39	8
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.84	2.07	31	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HD13	0.84	2.02	26	3
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:N	0.84	2.11	32	40
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:HB	0.83	1.47	3	17
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.48	27	24
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.47	21	1
1:A:106:LEU:HB2	1:A:133:VAL:HG22	0.83	1.49	34	25
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:O	0.83	1.74	29	6
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.83	2.04	5	3
1:A:40:PHE:HB2	1:A:50:VAL:O	0.82	1.73	16	26
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:CG2	0.82	2.04	30	4
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG12	0.82	1.51	21	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:ND2	0.82	1.90	23	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG12	0.81	1.52	34	15
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:CG2	0.81	2.02	8	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:HB3	0.81	2.10	35	38
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD22	0.81	1.52	29	7
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG22	0.81	2.05	5	18
1:A:97:LEU:HB2	1:A:150:VAL:HG22	0.81	1.50	25	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:HD12	0.81	1.51	26	4
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:HD22	0.81	1.75	13	15
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG22	0.81	1.53	22	16
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:CD1	0.81	2.04	19	4
1:A:20:THR:HG22	1:A:153:ASN:OD1	0.81	1.75	18	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB3	0.80	1.74	11	13
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:HD11	0.80	2.06	11	30
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HB2	0.80	1.51	6	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	26	2
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:HD12	0.80	1.76	8	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:27:VAL:HG23	0.80	1.75	16	3
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HG3	0.80	1.77	40	31
1:A:92:VAL:C	1:A:93:ILE:HD13	0.80	1.96	1	2
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG22	0.80	1.52	38	9
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:HD23	0.80	1.75	9	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	35	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:C	0.80	1.97	40	20
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:N	0.79	2.15	26	40
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD22	0.79	2.11	36	5
1:A:6:LEU:N	1:A:89:ASN:O	0.79	2.14	25	37
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HA	0.79	1.55	23	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG21	0.79	1.78	20	4
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD11	0.79	1.53	8	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:LEU:O	1:A:122:VAL:HG23	0.79	1.76	11	11
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HA	0.79	1.54	38	9
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG12	0.79	1.52	16	15
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CG	0.78	2.31	38	40
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CD1	0.78	2.08	23	25
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG21	0.78	1.55	1	6
1:A:17:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD13	0.78	1.78	36	1
1:A:76:ILE:HG23	1:A:125:LEU:HD21	0.78	1.52	37	2
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CE1	0.78	2.37	11	40
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG13	0.78	1.78	3	1
1:A:24:LEU:CG	1:A:135:ILE:HD13	0.78	2.09	5	18
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:N	0.78	2.16	35	40
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.78	2.13	27	1
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.54	19	2
1:A:14:GLY:O	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.78	9	3
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:CD	0.77	2.47	40	40
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CA	0.77	2.09	38	19
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD22	0.77	2.14	31	3
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD22	0.77	1.56	19	7
1:A:28:VAL:HG22	1:A:166:CYS:SG	0.77	2.18	16	4
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:O	0.77	1.79	25	4
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG13	0.77	1.57	35	13
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD23	0.77	1.53	12	1
1:A:172:ALA:HB1	1:A:184:ALA:HB1	0.77	1.56	28	12
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD11	0.77	2.14	5	2
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG23	0.77	1.78	2	2
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:N	0.76	1.96	35	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CB	0.76	2.68	35	12
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD12	0.76	2.01	13	18
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:HD11	0.76	1.57	37	11
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HA	0.76	1.57	6	28
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:N	0.76	2.18	37	37
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.76	2.01	26	16
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG2	0.76	2.07	32	3
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HB	0.76	1.55	1	2
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:N	0.76	2.18	14	35
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE2	0.76	2.16	33	2
1:A:168:GLN:HG2	1:A:188:VAL:HG13	0.76	1.57	13	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG21	0.76	1.80	17	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:HG23	0.76	2.11	32	11
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HA	0.76	1.56	18	23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:O	1:A:31:LEU:HD12	0.76	1.81	16	7
1:A:80:ALA:HB1	1:A:125:LEU:HD21	0.76	1.56	10	6
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:OD1	0.76	1.81	26	4
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:O	0.75	1.80	28	19
1:A:24:LEU:CD1	1:A:135:ILE:HD13	0.75	2.10	19	9
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG23	0.75	1.59	15	13
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:N	0.75	1.96	29	5
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:HD2	0.75	2.03	26	40
1:A:40:PHE:HD2	1:A:51:ALA:HB2	0.75	1.41	31	3
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:O	0.75	1.82	38	8
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CD1	0.74	2.12	22	7
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:HD13	0.74	1.59	14	7
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG2	0.74	2.35	32	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD21	0.74	1.59	25	5
1:A:21:ARG:CZ	1:A:24:LEU:HD21	0.74	2.12	20	2
1:A:93:ILE:CD1	1:A:93:ILE:N	0.74	2.50	1	1
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:HD13	0.74	1.59	10	3
1:A:175:LEU:HD21	1:A:183:PRO:HG2	0.74	1.59	39	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG21	0.73	1.97	25	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD21	0.73	1.97	8	2
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:HD12	0.73	2.02	8	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD12	0.73	2.19	21	2
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD11	0.73	1.59	36	2
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:N	0.73	2.20	13	30
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD2	0.73	2.18	10	3
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.73	1.61	35	1
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:C	0.73	2.04	30	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG22	0.73	1.99	18	2
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD11	0.73	1.59	23	12
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.73	2.13	19	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:O	0.73	1.84	2	20
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:CE1	0.73	2.19	9	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:HG21	0.73	1.83	16	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CB	0.73	2.36	27	33
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:C	0.72	2.04	31	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG13	0.72	1.61	30	11
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CB	0.72	2.37	18	16
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:C	0.72	2.05	26	8
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD13	0.72	1.85	35	7
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:CD	0.72	2.52	27	40
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CB	0.72	2.38	36	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG22	0.72	2.14	32	2
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD12	0.72	1.84	24	4
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:HB2	0.72	1.59	35	6
1:A:31:LEU:C	1:A:31:LEU:HD12	0.72	2.05	16	5
1:A:20:THR:HG22	1:A:152:GLU:O	0.72	1.84	34	4
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:HD23	0.72	1.85	38	3
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HG3	0.71	1.86	39	6
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:CD1	0.71	2.15	1	4
1:A:165:ILE:C	1:A:165:ILE:HD13	0.71	2.05	17	15
1:A:158:GLU:HG2	1:A:162:VAL:HG23	0.71	1.59	34	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HE3	0.71	1.60	31	2
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE3	0.71	2.44	11	7
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:CB	0.71	2.38	27	40
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:CG2	0.71	2.13	11	2
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:CD2	0.71	2.16	29	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG13	0.71	1.62	3	7
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CD1	0.71	2.15	37	9
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:NZ	0.71	2.01	39	4
1:A:176:LEU:O	1:A:176:LEU:HD23	0.70	1.85	11	16
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CE2	0.70	2.74	5	6
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:HB3	0.70	1.61	27	1
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD22	0.70	2.16	29	2
1:A:17:TYR:CG	1:A:151:LEU:HD11	0.70	2.21	27	2
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:C	0.70	2.05	37	4
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG22	0.70	1.63	32	1
1:A:106:LEU:CB	1:A:133:VAL:HG22	0.70	2.16	38	8
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:CG2	0.70	2.17	12	5
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CZ	0.70	2.22	38	5
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:HB3	0.70	1.86	29	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:92:VAL:HG13	0.70	2.16	40	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:76:ILE:HD11	0.70	2.16	22	2
1:A:165:ILE:HD13	1:A:165:ILE:C	0.70	2.07	36	15
1:A:118:LEU:O	1:A:121:VAL:HG12	0.70	1.87	15	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG22	0.69	2.02	14	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD1	0.69	2.21	27	5
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:CD1	0.69	2.16	17	5
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE2	0.69	2.75	18	3
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:CB	0.69	2.18	16	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:90:ILE:HD11	0.69	2.17	20	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:CB	0.69	2.16	16	16
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CE1	0.69	2.60	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLU:CD	1:A:122:VAL:HG21	0.69	2.08	15	3
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:H	0.69	1.84	23	1
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:HB2	0.69	1.88	39	15
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:CB	0.69	2.40	24	39
1:A:133:VAL:HG12	1:A:133:VAL:O	0.69	1.87	27	15
1:A:91:ILE:C	1:A:91:ILE:HD12	0.69	2.07	6	6
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:CD	0.69	2.40	38	14
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:HB2	0.69	1.87	13	3
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG2	0.69	2.18	24	2
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:HD11	0.69	1.65	1	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.64	27	4
1:A:33:ALA:CB	1:A:40:PHE:CE1	0.69	2.75	24	5
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD21	0.69	2.18	37	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:CB	0.68	2.18	25	9
1:A:191:TRP:C	1:A:191:TRP:CE3	0.68	2.67	10	3
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CE1	0.68	2.23	32	7
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HD12	0.68	1.88	14	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HD13	0.68	1.87	38	3
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:CB	0.68	2.77	25	37
1:A:74:ARG:HG2	1:A:75:GLN:N	0.68	2.02	3	17
1:A:154:PHE:O	1:A:155:THR:C	0.68	2.32	37	40
1:A:98:ASP:HB3	1:A:99:LEU:HD12	0.68	1.63	20	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:C	0.68	2.65	6	11
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB1	0.68	1.66	24	5
1:A:191:TRP:CE3	1:A:191:TRP:C	0.68	2.67	8	4
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:O	0.68	1.89	13	5
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:N	0.68	2.26	19	23
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD22	0.68	2.23	13	2
1:A:17:TYR:C	1:A:17:TYR:CD1	0.68	2.66	33	5
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:HD3	0.68	2.18	40	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:HB2	0.68	1.89	36	7
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HD13	0.68	1.64	17	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD1	0.68	2.62	22	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.68	2.24	24	4
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:HD22	0.68	1.66	21	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:CA	0.67	2.43	34	4
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:CD	0.67	2.08	40	2
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG21	0.67	1.65	32	3
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:C	0.67	2.10	3	3
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD13	0.67	2.19	23	4
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.75	27	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:HD12	1:A:62:LEU:HD23	0.67	1.67	17	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD1	0.67	2.62	37	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:HE2	0.67	1.49	35	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CH2	0.67	2.47	39	2
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HG21	0.67	1.89	32	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE2	0.67	2.24	16	5
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG22	0.67	1.66	24	5
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:N	0.67	2.23	14	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CG	0.67	2.42	29	2
1:A:137:ILE:HG23	1:A:137:ILE:O	0.67	1.89	37	2
1:A:137:ILE:HG12	1:A:137:ILE:O	0.67	1.89	3	10
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG23	0.67	1.90	36	23
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.25	1	2
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG23	0.67	1.67	5	2
1:A:155:THR:HG23	1:A:156:PRO:HD3	0.67	1.65	26	1
1:A:103:ARG:O	1:A:136:GLY:N	0.66	2.23	2	19
1:A:26:PHE:CD1	1:A:68:TYR:OH	0.66	2.47	20	10
1:A:176:LEU:HD22	1:A:184:ALA:HB1	0.66	1.67	39	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CZ	0.66	2.25	16	10
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CB	0.66	2.19	8	23
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:CB	0.66	2.19	6	5
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:O	0.66	1.90	10	2
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:HB3	0.66	1.66	16	2
1:A:176:LEU:HD12	1:A:180:GLY:O	0.66	1.90	39	1
1:A:96:ASP:N	1:A:135:ILE:O	0.66	2.29	34	29
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB2	0.66	1.66	15	9
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:HD21	0.66	1.48	18	5
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:HG12	0.66	1.89	9	19
1:A:137:ILE:CD1	1:A:137:ILE:O	0.66	2.44	35	10
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG1	0.66	2.15	3	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CZ2	0.66	2.49	7	4
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HD13	0.66	1.90	37	2
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:CE	0.66	2.20	31	2
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:HD23	0.65	2.11	8	18
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG12	0.65	1.92	19	7
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:C	0.65	2.34	4	21
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CD1	0.65	2.21	3	8
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD11	0.65	1.67	39	12
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD23	0.65	1.49	27	4
1:A:73:GLY:CA	1:A:121:VAL:HG22	0.65	2.21	26	7
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:HD21	0.65	1.92	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:HG22	0.65	2.21	1	8
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:NZ	0.65	2.64	7	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:HD3	0.65	1.67	8	2
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.65	2.26	12	8
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CD2	0.65	2.50	17	17
1:A:10:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.65	2.49	32	10
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CD1	0.65	2.80	22	3
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CD	0.65	2.70	7	3
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HA	0.65	2.22	33	19
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB3	0.65	2.27	34	5
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD12	0.65	1.69	23	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE2	0.65	2.50	10	3
1:A:85:VAL:HG11	1:A:90:ILE:HD11	0.65	1.69	40	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HD13	0.65	1.91	3	11
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HG22	0.65	1.92	24	9
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NH2	0.65	2.65	24	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD22	0.65	1.67	4	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB2	0.65	1.92	35	14
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CB	0.65	2.44	22	18
1:A:76:ILE:HG22	1:A:80:ALA:HB2	0.65	1.66	5	11
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:HG23	0.65	1.67	39	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:CD1	0.65	2.21	33	2
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE1	0.65	2.27	29	1
1:A:172:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG21	0.64	2.21	21	15
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:HB2	0.64	1.92	19	6
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:CE1	0.64	2.65	17	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD12	0.64	1.67	32	2
1:A:85:VAL:HG12	1:A:89:ASN:OD1	0.64	1.92	5	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CG	0.64	2.65	22	3
1:A:130:PHE:N	1:A:130:PHE:CD1	0.64	2.65	4	2
1:A:6:LEU:HD13	1:A:90:ILE:HG12	0.64	1.68	30	1
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:CD	0.64	2.66	40	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:CD2	0.64	2.76	37	13
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB3	0.64	2.12	39	3
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CD1	0.64	2.46	13	8
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD1	0.64	2.27	9	4
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CD2	0.64	2.28	16	4
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:C	0.64	2.13	29	17
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:HG22	0.64	1.68	17	4
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD1	0.64	2.81	5	1
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:HB3	0.64	1.93	9	39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:CG2	0.64	2.76	9	14
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB2	0.64	1.92	7	9
1:A:21:ARG:CZ	1:A:22:HIS:CE1	0.64	2.81	9	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:HB2	0.64	1.70	26	4
1:A:137:ILE:CG1	1:A:137:ILE:O	0.64	2.46	3	7
1:A:99:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CD1	0.64	2.27	32	2
1:A:100:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE2	0.63	2.51	25	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG1	0.63	2.46	36	10
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:H	0.63	1.53	14	7
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD23	0.63	1.68	39	5
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HB1	0.63	1.93	30	10
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CG	0.63	2.46	18	3
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ALA:HB3	0.63	1.69	25	4
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:CA	0.63	2.47	36	22
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:HD21	0.63	2.23	1	4
1:A:7:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HA	0.63	1.69	36	1
1:A:105:ARG:N	1:A:134:ARG:O	0.63	2.31	22	39
1:A:172:ALA:CB	1:A:184:ALA:HB1	0.63	2.23	28	7
1:A:40:PHE:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.63	2.67	21	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD13	0.63	1.70	21	1
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:C	0.63	2.37	20	2
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE1	0.63	2.82	1	1
1:A:56:ALA:HA	1:A:177:ILE:HG23	0.63	1.71	1	2
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:CD1	0.62	2.67	25	5
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.62	2.29	30	11
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:CB	0.62	2.24	40	2
1:A:93:ILE:HD12	1:A:135:ILE:HD11	0.62	1.71	39	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE1	0.62	2.29	37	5
1:A:26:PHE:CE2	1:A:30:ASP:OD2	0.62	2.51	37	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:CG2	0.62	2.82	22	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:93:ILE:C	0.62	2.13	23	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD22	0.62	1.93	39	2
1:A:56:ALA:CA	1:A:177:ILE:HG23	0.62	2.24	1	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:CB	0.62	2.23	21	1
1:A:19:ARG:HG3	1:A:155:THR:HG23	0.62	1.70	1	1
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:HD2	0.62	2.09	40	29
1:A:87:PRO:HG3	1:A:127:THR:HG21	0.62	1.69	28	2
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:N	0.62	2.32	2	40
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.62	2.73	26	2
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CG	0.62	2.82	21	2
1:A:36:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB3	0.62	2.23	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:O	0.62	2.18	10	25
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG3	0.62	1.70	6	5
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CE2	0.62	2.48	35	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB3	0.62	1.95	24	3
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CG	0.62	2.83	5	1
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:N	0.62	2.32	6	34
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CG	0.62	2.68	7	3
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.61	2.53	17	2
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD1	0.61	2.78	31	4
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:O	0.61	1.94	30	1
1:A:115:HIS:HB2	1:A:118:LEU:HD12	0.61	1.69	15	1
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG22	0.61	2.11	32	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:153:ASN:O	0.61	2.37	6	22
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:N	0.61	2.10	23	11
1:A:13:PRO:HG3	1:A:66:ARG:C	0.61	2.15	17	3
1:A:137:ILE:CG2	1:A:137:ILE:O	0.61	2.48	37	1
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:N	0.61	2.62	25	3
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CB	0.61	2.48	39	32
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HB3	0.61	2.29	26	4
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CG2	0.61	2.48	34	24
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:CD2	0.61	2.26	21	5
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB2	0.61	1.95	33	8
1:A:121:VAL:CG1	1:A:125:LEU:HD12	0.61	2.23	24	3
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CD1	0.61	2.54	10	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB1	0.61	2.25	32	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.53	8	3
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CG	0.61	2.49	4	17
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:C	0.61	2.38	17	19
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.30	5	8
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:CG1	0.61	2.83	18	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.54	27	2
1:A:85:VAL:HG13	1:A:90:ILE:HD11	0.61	1.73	20	1
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CD1	0.61	2.54	27	26
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:C	0.61	2.39	34	17
1:A:93:ILE:HD11	1:A:135:ILE:HD11	0.61	1.73	10	3
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG23	0.61	1.70	4	2
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD2	0.61	2.84	37	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CG2	0.61	2.45	17	37
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.31	35	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:OD1	0.61	1.95	33	2
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:O	0.61	1.96	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:CB	0.60	2.49	33	14
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:CG	0.60	2.38	16	12
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HD22	0.60	1.55	7	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:118:LEU:HD21	0.60	1.70	1	2
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:O	0.60	2.49	6	9
1:A:22:HIS:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.60	2.31	13	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:92:VAL:HG22	0.60	1.72	40	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CG	0.60	2.25	30	4
1:A:168:GLN:CG	1:A:191:TRP:CH2	0.60	2.84	38	4
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:OE2	0.60	2.54	5	5
1:A:186:ASN:HD22	1:A:186:ASN:N	0.60	1.92	5	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD11	0.60	1.95	2	3
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD12	0.60	2.12	40	1
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG21	0.60	1.96	34	2
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD21	0.60	1.74	5	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CE2	0.60	2.69	37	1
1:A:112:GLU:OE2	1:A:122:VAL:HG21	0.60	1.97	15	1
1:A:12:ASN:N	1:A:22:HIS:O	0.60	2.35	8	18
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CD2	0.60	2.54	28	4
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB2	0.60	2.24	16	5
1:A:50:VAL:HA	1:A:62:LEU:O	0.60	1.97	9	16
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD21	0.60	2.27	5	8
1:A:24:LEU:CB	1:A:135:ILE:HD13	0.60	2.27	14	6
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CG	0.60	2.80	37	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.60	2.27	39	8
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CB	0.60	2.50	26	18
1:A:59:SER:C	1:A:60:LEU:HD23	0.60	2.17	15	4
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:CB	0.60	2.50	40	10
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD1	0.60	2.85	18	2
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:N	0.60	2.64	18	3
1:A:5:LEU:HD12	1:A:59:SER:O	0.60	1.97	30	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:CD1	0.59	2.27	8	3
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HG12	0.59	1.73	38	6
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.59	2.85	16	4
1:A:98:ASP:N	1:A:138:GLY:O	0.59	2.35	27	7
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.59	2.76	26	1
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:H	0.59	2.00	8	20
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:N	0.59	2.35	31	39
1:A:93:ILE:HA	1:A:133:VAL:O	0.59	1.98	32	38
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:HB2	0.59	2.27	13	27
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG23	0.59	1.74	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.55	33	4
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB3	0.59	1.96	35	6
1:A:40:PHE:CZ	1:A:62:LEU:HD12	0.59	2.31	12	2
1:A:172:ALA:HA	1:A:184:ALA:HB1	0.59	1.75	34	7
1:A:10:LEU:CD1	1:A:94:HIS:CD2	0.59	2.84	16	6
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:CD2	0.59	2.80	1	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:N	0.59	2.71	3	4
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:N	0.59	2.11	11	2
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD2	0.59	2.70	15	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HD13	0.59	1.96	20	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG22	0.59	1.97	28	5
1:A:154:PHE:O	1:A:157:ALA:N	0.59	2.35	33	1
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE1	0.59	2.32	14	2
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:CD	0.59	2.70	26	40
1:A:6:LEU:O	1:A:89:ASN:O	0.59	2.21	23	15
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CG	0.59	2.51	13	10
1:A:24:LEU:HD23	1:A:28:VAL:HG23	0.59	1.74	29	2
1:A:191:TRP:CD1	1:A:191:TRP:C	0.59	2.75	25	2
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG21	0.59	1.98	7	1
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:C	0.59	2.17	13	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE1	0.59	2.55	8	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:ALA:N	0.59	2.11	31	5
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:CD2	0.59	2.80	24	1
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:HG23	0.59	1.73	3	8
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CG	0.59	2.50	27	5
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:O	0.59	2.21	13	17
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:HG21	0.59	1.75	23	1
1:A:152:GLU:CD	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.76	27	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:N	0.59	2.13	26	8
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:CB	0.59	2.51	27	15
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CG	0.59	2.51	17	4
1:A:95:ASP:O	1:A:115:HIS:CE1	0.58	2.56	23	2
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:H	0.58	1.57	24	21
1:A:20:THR:CG2	1:A:21:ARG:N	0.58	2.65	9	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:61:VAL:HG11	0.58	1.74	38	14
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD1	0.58	2.78	23	2
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CD2	0.58	2.56	22	5
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:N	0.58	2.71	15	1
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:N	0.58	2.33	15	32
1:A:188:VAL:CG1	1:A:189:HIS:N	0.58	2.66	33	15
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HD12	0.58	1.97	36	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CB	0.58	2.49	22	3
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:CB	0.58	2.50	11	6
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:O	0.58	1.97	38	4
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:CB	0.58	2.51	39	16
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:C	0.58	2.41	33	13
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:CG	0.58	2.18	33	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:CA	0.58	2.28	25	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD23	0.58	1.74	25	1
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:CB	0.58	2.51	2	19
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HB2	0.58	1.98	12	20
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:CG2	0.58	2.82	35	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:OE2	0.58	2.56	26	5
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	0.58	2.75	5	7
1:A:75:GLN:HG3	1:A:76:ILE:N	0.58	2.13	37	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:180:GLY:O	0.58	2.51	39	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.58	2.67	13	7
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CE1	0.58	2.34	18	3
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG23	0.58	1.97	29	11
1:A:76:ILE:HD12	1:A:90:ILE:HD13	0.58	1.74	29	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:SG	0.58	2.62	25	36
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:CB	0.58	2.27	39	2
1:A:106:LEU:CD2	1:A:106:LEU:C	0.58	2.72	40	20
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD2	0.58	1.98	31	14
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:CG2	0.58	2.82	26	3
1:A:17:TYR:O	1:A:17:TYR:CD1	0.58	2.57	34	3
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:HG23	0.58	1.75	39	1
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:LEU:HD13	0.58	1.76	34	4
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.58	2.33	20	5
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE2	0.58	2.56	31	3
1:A:101:PHE:CD2	1:A:138:GLY:O	0.58	2.57	38	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:32:LEU:HD12	0.58	1.76	34	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:CB	0.58	2.52	40	2
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:CD	0.58	2.67	25	39
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CB	0.58	2.51	27	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:HD23	0.58	1.76	17	2
1:A:74:ARG:CG	1:A:75:GLN:N	0.57	2.66	3	24
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CG	0.57	2.57	40	7
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:NE2	0.57	2.14	25	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE2	0.57	2.33	7	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:HD2	0.57	1.57	26	1
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:CB	0.57	2.53	31	34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CD2	0.57	2.34	16	25
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD1	0.57	2.33	18	8
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:ND1	0.57	2.14	16	10
1:A:43:HIS:CD2	1:A:50:VAL:HG21	0.57	2.33	4	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CG2	0.57	2.52	32	1
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:C	0.57	2.77	2	4
1:A:51:ALA:N	1:A:62:LEU:O	0.57	2.37	31	23
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:HD2	0.57	2.14	27	36
1:A:21:ARG:HH11	1:A:27:VAL:HG21	0.57	1.59	29	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:HB3	0.57	1.76	36	12
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG13	0.57	2.29	3	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CB	0.57	2.53	32	16
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	5
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:HG23	0.57	2.29	6	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HZ3	0.57	1.60	12	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CD2	0.57	2.57	37	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CB	0.57	2.88	24	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HD12	0.57	1.77	26	3
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:HB2	0.57	1.99	16	1
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:N	0.57	2.68	7	16
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:HE2	0.57	2.02	18	2
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:HD23	0.57	1.98	40	5
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:HB3	0.57	1.99	32	4
1:A:28:VAL:HG13	1:A:32:LEU:HD12	0.57	1.74	37	2
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:CB	0.57	2.53	16	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD23	0.57	1.76	10	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HB2	0.57	2.00	9	25
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:HB2	0.57	2.00	40	3
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD2	0.57	2.83	37	1
1:A:22:HIS:CE1	1:A:94:HIS:NE2	0.57	2.72	37	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:CG2	0.57	2.30	39	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:HB2	0.57	1.99	11	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.34	9	4
1:A:174:GLU:HG3	1:A:175:LEU:N	0.57	2.13	2	5
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:OG1	0.57	1.99	35	2
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:GLY:N	0.56	2.67	9	12
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:C	0.56	2.74	36	13
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:CD1	0.56	2.29	37	2
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CZ	0.56	2.35	26	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HG	0.56	2.00	22	25
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:N	0.56	2.14	32	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CB	0.56	2.53	32	1
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:H	0.56	2.04	35	37
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CG	0.56	2.53	38	29
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:ND2	0.56	2.38	37	14
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:HD11	0.56	2.15	6	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:129:ASP:O	0.56	2.52	18	11
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD23	0.56	2.15	4	4
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:HB1	0.56	2.30	19	3
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	16	6
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD23	0.56	2.15	29	6
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:HA	0.56	1.75	9	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:H	0.56	1.60	35	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.56	1.73	5	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:HB2	0.56	1.77	37	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB3	0.56	2.01	38	34
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:O	0.56	2.24	34	24
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:CZ	0.56	2.54	3	3
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HE2	0.56	1.77	28	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:CB	0.56	2.84	14	2
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CB	0.56	2.54	40	2
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CB	0.56	2.84	38	16
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:CB	0.56	2.31	6	6
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:CB	0.56	2.53	12	6
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CD1	0.56	2.53	38	3
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:CE	0.56	2.89	7	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:CB	0.56	2.54	34	29
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:CG	0.56	2.44	18	14
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:CG2	0.56	2.30	29	5
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:OD1	0.56	2.00	12	2
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG23	0.56	1.76	32	1
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:CB	0.56	2.54	26	38
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:N	0.56	2.16	39	10
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	38	2
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:OG1	0.56	2.54	17	4
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD2	0.56	2.87	10	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CG1	0.56	2.81	23	2
1:A:10:LEU:HD21	1:A:72:SER:HB3	0.56	1.76	9	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CD1	0.56	2.84	31	5
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:CD2	0.56	2.54	25	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CE2	0.56	2.89	37	2
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG21	0.56	2.16	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ASP:CB	1:A:135:ILE:O	0.56	2.53	34	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG22	0.55	2.02	3	1
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:CD	0.55	2.54	35	21
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:CG	0.55	2.64	24	2
1:A:93:ILE:CD1	1:A:135:ILE:HD11	0.55	2.31	12	4
1:A:128:LYS:N	1:A:130:PHE:CE2	0.55	2.74	12	7
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:HB3	0.55	1.77	21	3
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:HB3	0.55	1.77	14	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CG	0.55	2.59	21	2
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:HG3	0.55	2.36	13	2
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD22	0.55	2.31	4	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG12	0.55	1.77	21	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CB	0.55	2.55	23	36
1:A:92:VAL:O	1:A:133:VAL:N	0.55	2.39	27	16
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD12	0.55	2.22	17	1
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CZ3	0.55	2.75	7	1
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:CB	0.55	2.54	21	2
1:A:103:ARG:CZ	1:A:188:VAL:O	0.55	2.54	22	3
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD11	0.55	2.36	16	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:152:GLU:OE2	0.55	2.59	40	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:92:VAL:HG13	0.55	1.78	40	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:30:ASP:OD2	0.55	2.59	37	3
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD13	0.55	2.24	27	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CZ	0.55	2.36	34	1
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:O	0.55	2.39	32	1
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:H	0.55	2.05	30	40
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:CG2	0.55	2.54	23	6
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:CB	0.55	2.32	14	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:95:ASP:OD1	0.55	2.54	7	2
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:CG	0.55	2.54	38	1
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:HD21	0.55	2.17	13	1
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CB	0.55	2.55	5	19
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:N	0.55	2.40	35	26
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:N	0.55	2.59	16	12
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:HG23	0.55	2.31	14	2
1:A:36:LEU:HD23	1:A:37:GLY:N	0.55	2.16	21	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:N	0.55	2.32	9	14
1:A:99:LEU:HB2	1:A:101:PHE:CE1	0.55	2.36	25	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:68:TYR:OH	0.55	2.57	32	2
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:CB	0.55	2.55	16	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB3	0.55	1.77	28	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ALA:O	1:A:161:GLU:CG	0.55	2.55	39	16
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:CD2	0.55	2.95	3	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:C	0.55	2.45	10	4
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:ND1	0.55	2.40	37	1
1:A:42:ALA:HA	1:A:48:ALA:O	0.54	2.01	24	4
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:O	0.54	2.55	9	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:176:LEU:C	0.54	2.75	4	14
1:A:164:THR:HG22	1:A:165:ILE:N	0.54	2.18	25	8
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HB	0.54	2.37	21	15
1:A:42:ALA:HA	1:A:49:GLU:HA	0.54	1.78	40	2
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CZ	0.54	2.75	24	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.60	26	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CB	0.54	2.55	2	23
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HD11	0.54	1.78	3	4
1:A:165:ILE:O	1:A:169:ALA:N	0.54	2.24	32	8
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:N	0.54	2.39	22	15
1:A:8:VAL:HG23	1:A:91:ILE:O	0.54	2.02	9	5
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:CB	0.54	2.29	27	1
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB3	0.54	1.78	14	4
1:A:21:ARG:HH21	1:A:27:VAL:HG21	0.54	1.62	33	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:HB3	0.54	1.78	39	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.54	2.86	32	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:65:PRO:HA	0.54	2.32	7	28
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:O	0.54	2.25	21	34
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:H	0.54	2.05	23	2
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HD23	0.54	2.29	12	1
1:A:103:ARG:HG3	1:A:104:ILE:N	0.54	2.17	40	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HG12	0.54	2.37	18	2
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.54	2.17	8	2
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:N	0.54	2.61	30	36
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:C	0.54	2.46	6	24
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG23	0.54	1.80	25	5
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD13	0.54	2.37	1	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CG	0.54	2.90	20	3
1:A:38:ALA:CB	1:A:52:THR:O	0.54	2.55	40	2
1:A:161:GLU:C	1:A:163:PRO:HD2	0.54	2.22	40	1
1:A:76:ILE:O	1:A:77:GLY:C	0.54	2.46	17	40
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HD13	0.54	1.78	4	2
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:CG2	0.54	2.55	37	36
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:N	0.54	2.17	13	4
1:A:101:PHE:CE2	1:A:152:GLU:OE1	0.54	2.61	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ARG:O	1:A:47:GLY:N	0.54	2.40	20	6
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CZ	0.54	2.55	18	2
1:A:161:GLU:N	1:A:163:PRO:HD2	0.54	2.17	40	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	8	4
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:N	0.54	2.60	38	40
1:A:103:ARG:CD	1:A:104:ILE:O	0.54	2.56	23	8
1:A:11:GLY:C	1:A:68:TYR:CD2	0.54	2.81	31	11
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	37	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:CD2	0.54	2.85	4	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:PHE:O	0.54	2.24	36	4
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:CG1	0.54	2.33	23	14
1:A:15:ALA:O	1:A:17:TYR:N	0.54	2.40	1	4
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CG2	0.54	2.30	25	21
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD1	0.54	2.91	18	2
1:A:94:HIS:C	1:A:135:ILE:HD12	0.54	2.23	5	7
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:CD2	0.54	2.70	13	2
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB2	0.54	2.01	2	37
1:A:93:ILE:CD1	1:A:93:ILE:C	0.54	2.76	31	2
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:HB2	0.54	2.03	33	10
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:CB	0.54	2.55	40	5
1:A:8:VAL:HG21	1:A:92:VAL:HG22	0.54	1.78	12	7
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:ALA:N	0.54	2.71	35	5
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CD2	0.54	2.37	37	1
1:A:59:SER:O	1:A:60:LEU:HD23	0.54	2.03	20	2
1:A:67:CYS:O	1:A:68:TYR:HB2	0.54	2.02	7	40
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CB	0.54	2.56	34	22
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.37	35	3
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CD	0.54	2.56	37	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:93:ILE:HD11	0.54	2.31	36	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CG	0.53	2.56	24	9
1:A:94:HIS:CE1	1:A:115:HIS:CE1	0.53	2.96	35	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:61:VAL:O	0.53	2.03	30	2
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:CD	0.53	2.77	24	2
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:CG	0.53	2.82	16	3
1:A:19:ARG:HG2	1:A:155:THR:HG23	0.53	1.80	11	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:HZ	0.53	1.63	34	1
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG22	0.53	1.63	8	2
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD22	0.53	1.63	3	2
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.92	5	3
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:O	0.53	2.02	20	4
1:A:21:ARG:NE	1:A:22:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:NE2	0.53	2.41	31	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG3	0.53	2.38	21	2
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:HD3	0.53	2.24	13	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:181:MET:HA	0.53	1.79	40	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CG	0.53	2.38	23	28
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CB	0.53	2.56	27	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.57	12	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD11	0.53	2.32	31	1
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:CB	0.53	2.26	21	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:52:THR:O	0.53	2.04	40	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:CD2	0.53	2.77	35	21
1:A:174:GLU:CG	1:A:175:LEU:N	0.53	2.72	37	32
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CD1	0.53	2.57	7	13
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:N	0.53	2.36	29	12
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HG12	0.53	1.81	27	7
1:A:26:PHE:CG	1:A:68:TYR:OH	0.53	2.58	32	5
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.26	29	12
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.77	7	1
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CG	0.53	2.56	26	6
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:C	0.53	2.46	32	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CA	0.53	2.32	23	1
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CG1	0.53	2.86	27	3
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:HB2	0.53	1.80	15	3
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:CD2	0.53	2.33	21	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG11	0.53	1.79	40	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD2	0.53	2.77	15	12
1:A:53:GLY:N	1:A:60:LEU:O	0.53	2.41	40	7
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:O	0.53	2.27	23	2
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CG2	0.53	2.33	40	2
1:A:100:GLU:O	1:A:138:GLY:N	0.53	2.41	4	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD11	0.53	1.80	33	1
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:CB	0.53	2.56	30	7
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:O	0.53	2.57	28	2
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG11	0.53	2.04	1	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD13	0.53	2.17	18	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:HD21	0.53	1.80	38	1
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:CD1	0.53	2.78	21	2
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HB	0.53	2.04	23	20
1:A:41:LYS:N	1:A:50:VAL:O	0.53	2.42	9	1
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB2	0.53	1.79	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CG1	0.53	2.57	28	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.39	21	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:N	0.53	2.72	40	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.39	37	4
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CG	0.53	2.62	1	11
1:A:154:PHE:C	1:A:158:GLU:HB2	0.53	2.24	37	5
1:A:168:GLN:HG3	1:A:169:ALA:N	0.53	2.17	12	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:CB	0.53	2.34	17	2
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ARG:N	0.53	2.41	11	2
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:CD	0.53	2.77	28	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD2	0.53	2.57	30	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:188:VAL:HG13	0.53	2.34	6	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:CG	0.53	2.78	17	1
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:CB	0.53	2.57	11	2
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD11	0.53	1.80	38	4
1:A:29:ALA:HB1	1:A:64:LYS:HE3	0.53	1.80	21	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:O	0.52	2.57	27	5
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD1	0.52	2.76	21	13
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:OE1	0.52	2.04	10	7
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:C	0.52	2.83	21	3
1:A:172:ALA:CA	1:A:184:ALA:HB1	0.52	2.34	34	7
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CB	0.52	2.57	39	13
1:A:20:THR:OG1	1:A:20:THR:O	0.52	2.27	23	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.52	2.19	19	4
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:OE1	0.52	2.04	21	3
1:A:21:ARG:CB	1:A:95:ASP:OD2	0.52	2.57	14	1
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HA	0.52	1.80	13	10
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:HG22	0.52	2.05	9	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HG11	0.52	2.34	38	6
1:A:108:ILE:CD1	1:A:130:PHE:O	0.52	2.58	28	6
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HE2	0.52	1.65	18	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:149:PHE:O	0.52	2.62	17	5
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:HB2	0.52	2.04	14	9
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:CE1	0.52	2.83	5	3
1:A:122:VAL:HG23	1:A:127:THR:O	0.52	2.04	28	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:CD1	0.52	2.34	8	3
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:HB3	0.52	2.05	11	8
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE1	0.52	2.62	33	2
1:A:72:SER:O	1:A:76:ILE:HD12	0.52	2.04	5	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:HG23	0.52	2.33	5	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:94:HIS:CD2	0.52	2.93	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:CG	0.52	2.83	21	2
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CD	0.52	2.78	2	4
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CG1	0.52	2.34	22	6
1:A:101:PHE:CE2	1:A:158:GLU:OE2	0.52	2.62	36	2
1:A:188:VAL:CG2	1:A:189:HIS:N	0.52	2.72	3	1
1:A:7:VAL:N	1:A:61:VAL:O	0.52	2.36	3	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:NZ	0.52	2.20	6	2
1:A:159:ARG:NE	1:A:160:ALA:HB2	0.52	2.19	33	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CZ	0.52	2.58	14	2
1:A:176:LEU:CD2	1:A:180:GLY:O	0.52	2.58	4	1
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:HG22	0.52	2.05	26	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:HG23	0.52	2.35	29	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:HB2	0.52	2.05	40	33
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CE	0.52	2.79	25	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:174:GLU:O	0.52	2.58	29	1
1:A:181:MET:O	1:A:185:GLN:N	0.52	2.27	32	16
1:A:184:ALA:C	1:A:188:VAL:HG13	0.52	2.25	3	1
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.52	2.35	21	3
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.52	2.92	1	3
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HG21	0.52	2.05	7	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:138:GLY:HA3	0.52	2.39	19	2
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD3	0.52	2.04	22	14
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB3	0.52	2.05	37	13
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:CB	0.52	2.88	6	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HD2	0.52	2.04	40	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:NE2	0.52	2.58	17	2
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG11	0.52	1.78	21	1
1:A:108:ILE:O	1:A:130:PHE:O	0.51	2.28	39	5
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLU:C	0.51	2.48	23	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HG	0.51	2.41	5	3
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CB	0.51	2.58	5	2
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:HD12	0.51	2.04	14	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CB	0.51	2.36	24	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD12	0.51	1.81	31	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HG2	0.51	2.05	40	1
1:A:158:GLU:C	1:A:162:VAL:HG13	0.51	2.24	40	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CD1	0.51	2.58	24	3
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:N	0.51	2.34	24	5
1:A:80:ALA:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.51	1.83	37	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HB	0.51	1.80	26	2
1:A:100:GLU:O	1:A:137:ILE:HA	0.51	2.06	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:CZ	1:A:137:ILE:HG12	0.51	2.41	18	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CD	0.51	2.59	6	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.93	27	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:CG	0.51	2.93	35	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:NZ	0.51	2.19	29	3
1:A:20:THR:O	1:A:158:GLU:CD	0.51	2.49	33	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CE1	0.51	2.78	5	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	18	4
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD1	0.51	2.58	30	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	16	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:137:ILE:HB	0.51	2.41	30	12
1:A:40:PHE:HB3	1:A:50:VAL:O	0.51	2.06	22	4
1:A:105:ARG:C	1:A:106:LEU:HD13	0.51	2.26	35	1
1:A:167:GLU:CG	1:A:168:GLN:N	0.51	2.73	36	4
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD3	0.51	2.05	38	9
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HB2	0.51	2.35	14	3
1:A:12:ASN:O	1:A:18:ALA:HB1	0.51	2.05	33	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HG	0.51	1.81	37	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:HB3	0.51	2.06	40	1
1:A:138:GLY:HA3	1:A:149:PHE:CE2	0.51	2.41	20	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:CB	0.51	2.59	11	9
1:A:26:PHE:CD1	1:A:64:LYS:HE3	0.51	2.41	9	2
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:CD	0.51	2.78	32	3
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:O	0.51	2.29	25	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:HB3	0.51	1.82	19	1
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:CD1	0.51	2.57	8	1
1:A:43:HIS:N	1:A:48:ALA:O	0.51	2.44	34	13
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CG	0.51	2.49	26	18
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:OD2	0.51	2.03	9	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.40	34	3
1:A:76:ILE:CG2	1:A:80:ALA:HB2	0.51	2.35	12	12
1:A:85:VAL:CG1	1:A:89:ASN:OD1	0.51	2.59	5	4
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG1	0.51	2.59	1	4
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.51	2.40	30	2
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:O	0.51	2.64	36	3
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:CD1	0.51	2.33	36	3
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.51	2.84	8	21
1:A:48:ALA:CB	1:A:75:GLN:OE1	0.51	2.58	12	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:ND1	0.51	2.59	28	2
1:A:15:ALA:HB1	1:A:17:TYR:CD2	0.51	2.39	2	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:CB	0.51	2.88	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:C	1:A:82:PHE:CD1	0.51	2.84	31	19
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:O	0.51	2.06	35	5
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:CB	0.51	2.58	34	4
1:A:175:LEU:HD23	1:A:183:PRO:HB2	0.51	1.82	33	3
1:A:165:ILE:HG23	1:A:166:CYS:N	0.51	2.20	18	3
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:CB	0.51	2.59	30	4
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.94	1	1
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HB2	0.51	2.06	29	1
1:A:43:HIS:O	1:A:48:ALA:N	0.51	2.44	38	6
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE2	0.51	2.41	21	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:HB2	0.51	1.83	40	1
1:A:99:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.51	2.59	32	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:29:ALA:N	0.51	2.73	31	2
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HZ1	0.51	1.65	12	2
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HA	0.51	1.83	37	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:CG2	0.51	2.89	22	3
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:SG	0.51	2.99	29	1
1:A:67:CYS:O	1:A:69:MET:N	0.51	2.44	8	32
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:CB	0.51	2.31	3	5
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:N	0.51	2.74	26	4
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:NE2	0.51	2.59	9	1
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CD1	0.51	2.40	18	3
1:A:95:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.51	2.44	10	2
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HB	0.51	2.05	34	12
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CH2	0.51	2.41	25	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:O	0.51	2.06	25	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:HH21	0.51	1.64	39	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD2	0.50	2.74	8	1
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CB	0.50	2.32	6	1
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.40	17	3
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG12	0.50	2.07	19	9
1:A:40:PHE:CG	1:A:41:LYS:N	0.50	2.77	40	12
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:O	0.50	2.28	28	5
1:A:65:PRO:HG3	1:A:72:SER:HA	0.50	1.83	6	18
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HB	0.50	2.07	23	29
1:A:97:LEU:CG	1:A:150:VAL:HG23	0.50	2.36	6	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:HA	0.50	2.06	21	5
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG2	0.50	2.59	29	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:64:LYS:HE3	0.50	2.41	17	1
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:CD1	0.50	2.36	25	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:ARG:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.64	31	2
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CG	0.50	2.59	13	2
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CG	0.50	2.59	22	2
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:H	0.50	2.10	12	10
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB2	0.50	2.36	3	6
1:A:36:LEU:O	1:A:38:ALA:N	0.50	2.44	28	6
1:A:12:ASN:CG	1:A:17:TYR:CD1	0.50	2.85	9	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:149:PHE:CZ	0.50	2.99	14	1
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD22	0.50	2.27	31	2
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:OG1	0.50	2.59	34	1
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG23	0.50	2.37	32	1
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:CG2	0.50	2.36	39	9
1:A:44:LYS:O	1:A:46:SER:N	0.50	2.44	17	3
1:A:152:GLU:CD	1:A:153:ASN:N	0.50	2.65	9	1
1:A:14:GLY:C	1:A:18:ALA:HB2	0.50	2.27	12	1
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HB	0.50	1.82	34	1
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.41	40	6
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB3	0.50	1.82	6	3
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CZ2	0.50	2.41	34	7
1:A:8:VAL:CG2	1:A:91:ILE:O	0.50	2.60	10	5
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:CD	0.50	2.58	37	5
1:A:164:THR:CG2	1:A:165:ILE:N	0.50	2.74	25	3
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:H	0.50	1.67	13	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:O	0.50	2.30	8	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CG	0.50	2.64	27	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:HB3	0.50	2.37	26	3
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:SER:N	0.50	2.73	24	2
1:A:98:ASP:CG	1:A:99:LEU:HD12	0.50	2.26	4	1
1:A:5:LEU:CD2	1:A:89:ASN:OD1	0.50	2.58	26	1
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	10	4
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:C	0.50	2.26	22	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD1	0.50	2.75	18	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:CD	0.50	2.59	38	1
1:A:114:GLY:N	1:A:118:LEU:CD1	0.50	2.75	40	1
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CD	0.50	2.36	22	13
1:A:108:ILE:HD12	1:A:131:GLN:CG	0.50	2.36	7	2
1:A:100:GLU:O	1:A:136:GLY:O	0.50	2.30	34	6
1:A:75:GLN:OE1	1:A:79:LEU:CD1	0.50	2.60	5	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HG	0.50	2.36	37	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:32:LEU:HD12	0.50	2.36	29	2
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG2	0.50	2.59	34	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:HD12	0.50	1.82	31	4
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HA	0.50	1.82	36	1
1:A:147:ALA:O	1:A:151:LEU:HD12	0.50	2.06	11	1
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:CG1	0.50	2.59	9	2
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG2	0.50	2.60	29	3
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:O	0.50	2.28	22	14
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:H	0.50	1.67	30	1
1:A:112:GLU:CG	1:A:112:GLU:O	0.50	2.59	16	1
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:CD1	0.50	2.60	8	2
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:ND2	0.50	2.45	39	10
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:HG21	0.50	2.36	23	2
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:CG	0.50	2.60	17	3
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:CB	0.50	2.59	36	2
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:HD2	0.50	2.27	28	3
1:A:130:PHE:CZ	1:A:132:ARG:NH2	0.50	2.80	24	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:CB	0.50	2.89	24	4
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.42	10	2
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.41	8	1
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CD1	0.49	2.60	38	5
1:A:28:VAL:CG1	1:A:93:ILE:HD13	0.49	2.37	35	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:N	0.49	2.75	17	2
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CE2	0.49	2.42	33	2
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:C	0.49	2.79	37	1
1:A:170:ALA:O	1:A:173:THR:HG22	0.49	2.05	39	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:107:LYS:N	0.49	2.22	34	2
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD22	0.49	2.27	23	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	31	3
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:O	0.49	2.07	38	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HB3	0.49	2.42	38	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CA	0.49	2.36	21	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:109:GLY:N	0.49	2.22	36	26
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:CG	0.49	2.37	39	3
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CD	0.49	2.60	31	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD1	0.49	2.60	30	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:CD	0.49	2.76	32	1
1:A:191:TRP:CD2	1:A:191:TRP:C	0.49	2.84	8	4
1:A:180:GLY:C	1:A:181:MET:CG	0.49	2.78	5	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ2	0.49	1.66	5	1
1:A:100:GLU:HB2	1:A:138:GLY:C	0.49	2.28	25	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HA	0.49	2.42	33	7
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:HB3	0.49	2.08	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ILE:HG23	1:A:80:ALA:HB2	0.49	1.83	21	6
1:A:155:THR:CG2	1:A:156:PRO:HD3	0.49	2.37	26	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE2	0.49	2.08	40	2
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:N	0.49	2.45	1	32
1:A:113:GLY:CA	1:A:134:ARG:NH2	0.49	2.75	6	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.42	35	4
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:NE	0.49	2.46	19	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:HD11	0.49	1.84	24	1
1:A:21:ARG:HH12	1:A:27:VAL:HG21	0.49	1.68	13	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD23	0.49	2.37	10	1
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD2	0.49	2.07	35	10
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:CB	0.49	2.96	4	6
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	35	2
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.49	2.91	28	2
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.49	2.61	17	4
1:A:31:LEU:HD11	1:A:35:ARG:NH1	0.49	2.23	19	1
1:A:31:LEU:O	1:A:35:ARG:N	0.49	2.46	22	2
1:A:36:LEU:CD1	1:A:36:LEU:C	0.49	2.77	30	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:VAL:N	0.49	2.46	21	7
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD13	0.49	1.67	26	3
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HA	0.49	2.38	36	1
1:A:105:ARG:CB	1:A:134:ARG:O	0.49	2.61	32	2
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:HB3	0.49	2.08	21	22
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.49	2.43	3	2
1:A:165:ILE:C	1:A:165:ILE:CD1	0.49	2.80	10	8
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG22	0.49	2.07	28	2
1:A:108:ILE:CD1	1:A:108:ILE:C	0.49	2.78	19	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:188:VAL:O	0.49	2.46	22	5
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:CB	0.49	2.38	24	2
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG21	0.49	2.28	11	1
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:CB	0.49	2.37	15	20
1:A:3:GLU:CG	1:A:3:GLU:O	0.49	2.61	33	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG23	0.49	2.22	15	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:151:LEU:CD1	0.49	2.91	34	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:CB	0.48	2.61	25	4
1:A:100:GLU:OE1	1:A:102:GLY:N	0.48	2.46	9	1
1:A:98:ASP:OD2	1:A:99:LEU:HD13	0.48	2.08	17	1
1:A:11:GLY:CA	1:A:23:ASN:HA	0.48	2.38	25	5
1:A:56:ALA:HB2	1:A:174:GLU:O	0.48	2.08	29	1
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG23	0.48	1.85	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:OG1	0.48	2.28	30	4
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HB	0.48	1.86	6	1
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CZ3	0.48	2.43	5	1
1:A:154:PHE:HB3	1:A:158:GLU:N	0.48	2.23	37	3
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CB	0.48	2.61	37	2
1:A:6:LEU:O	1:A:91:ILE:HG23	0.48	2.08	15	5
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.08	22	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:CD2	0.48	2.66	18	1
1:A:119:ARG:O	1:A:123:ALA:N	0.48	2.46	11	1
1:A:45:ARG:NH2	1:A:83:TYR:CE2	0.48	2.82	40	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB2	0.48	2.07	28	6
1:A:101:PHE:N	1:A:101:PHE:CD1	0.48	2.81	32	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:HB2	0.48	2.43	37	1
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:N	0.48	2.46	37	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:150:VAL:O	0.48	2.31	39	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CD2	0.48	2.43	18	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:170:ALA:HB1	0.48	1.85	23	1
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:N	0.48	2.47	25	9
1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CD1	0.48	2.67	35	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.42	24	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:NH1	0.48	2.46	15	2
1:A:128:LYS:CE	1:A:128:LYS:HA	0.48	2.38	34	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.48	2.90	34	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CG1	0.48	2.56	3	2
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:O	0.48	2.09	23	2
1:A:127:THR:CG2	1:A:127:THR:O	0.48	2.60	9	1
1:A:36:LEU:CD1	1:A:54:ARG:O	0.48	2.61	27	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:C	0.48	2.67	31	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:CB	0.48	2.91	35	1
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:HA	0.48	2.38	29	4
1:A:161:GLU:OE1	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.09	26	2
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HG12	0.48	1.85	1	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:CG	0.48	2.82	30	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE2	0.48	2.67	8	1
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:N	0.48	2.67	1	18
1:A:24:LEU:O	1:A:25:GLY:C	0.48	2.52	12	10
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HD13	0.48	2.29	3	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:68:TYR:C	0.48	2.82	9	1
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.44	27	1
1:A:11:GLY:C	1:A:22:HIS:O	0.48	2.52	37	3
1:A:92:VAL:HG12	1:A:132:ARG:CG	0.48	2.38	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:CB	0.48	2.62	4	1
1:A:127:THR:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.96	27	2
1:A:23:ASN:O	1:A:24:LEU:C	0.48	2.52	37	7
1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:OE1	0.48	2.61	28	2
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG23	0.48	2.08	20	2
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:CA	0.48	2.38	1	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:184:ALA:CB	0.48	2.92	40	1
1:A:36:LEU:HD12	1:A:54:ARG:N	0.48	2.23	40	1
1:A:91:ILE:C	1:A:91:ILE:CD1	0.48	2.77	6	6
1:A:99:LEU:O	1:A:101:PHE:N	0.48	2.45	23	1
1:A:50:VAL:CA	1:A:62:LEU:O	0.48	2.61	9	1
1:A:7:VAL:O	1:A:62:LEU:HA	0.48	2.09	9	4
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:OG	0.48	2.32	27	3
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:OD1	0.48	2.61	40	3
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA3	0.48	2.09	36	3
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CE1	0.48	3.02	14	1
1:A:159:ARG:O	1:A:162:VAL:HG22	0.48	2.09	40	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:N	0.48	2.47	3	18
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:N	0.48	2.81	23	1
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:C	0.48	2.53	16	5
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:N	0.48	2.44	35	2
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:O	0.48	2.09	17	4
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HB	0.48	2.08	26	4
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ1	0.48	1.68	25	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE2	0.48	2.67	37	1
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD21	0.48	1.84	28	3
1:A:95:ASP:C	1:A:95:ASP:OD1	0.48	2.52	20	3
1:A:161:GLU:HA	1:A:164:THR:HB	0.48	1.84	20	16
1:A:94:HIS:O	1:A:134:ARG:HA	0.48	2.08	37	3
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:C	0.48	2.29	12	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HG22	0.48	1.86	37	2
1:A:62:LEU:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.48	2.77	5	2
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:C	0.48	2.29	25	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG21	0.48	2.38	25	1
1:A:4:PRO:HB3	1:A:59:SER:CB	0.48	2.39	14	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	30	5
1:A:155:THR:OG1	1:A:156:PRO:HD3	0.48	2.09	26	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:137:ILE:HG22	0.47	2.24	8	1
1:A:96:ASP:O	1:A:135:ILE:O	0.47	2.32	36	13
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:NE	0.47	2.46	33	3
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:NE2	0.47	2.67	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:SER:O	1:A:57:GLY:N	0.47	2.46	12	10
1:A:111:GLY:N	1:A:132:ARG:HH12	0.47	2.05	35	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:14:GLY:N	0.47	2.47	25	3
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG22	0.47	2.38	14	1
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:CB	0.47	2.62	28	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:HG3	0.47	2.08	38	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:C	0.47	2.28	38	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:HG23	0.47	2.08	21	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG12	0.47	1.84	20	1
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:HA3	0.47	2.39	32	1
1:A:18:ALA:O	1:A:21:ARG:N	0.47	2.47	8	4
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG13	0.47	1.85	3	1
1:A:98:ASP:C	1:A:138:GLY:O	0.47	2.53	32	4
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:O	0.47	2.32	40	4
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CB	0.47	2.62	27	7
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB3	0.47	2.09	27	4
1:A:50:VAL:HG22	1:A:51:ALA:N	0.47	2.24	1	4
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:CG1	0.47	2.92	38	5
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HG	0.47	2.43	7	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:138:GLY:N	0.47	2.82	19	2
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.44	31	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG23	0.47	2.09	11	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CA	0.47	2.98	3	6
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD21	0.47	1.67	27	1
1:A:55:SER:HB3	1:A:177:ILE:HD13	0.47	1.86	25	1
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.43	24	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HA	0.47	1.85	21	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:151:LEU:CD2	0.47	2.92	11	1
1:A:191:TRP:C	1:A:191:TRP:CD2	0.47	2.88	10	3
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.47	2.62	23	13
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD13	0.47	1.85	23	1
1:A:45:ARG:C	1:A:47:GLY:N	0.47	2.67	27	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG13	0.47	2.39	21	2
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:OG1	0.47	2.09	17	1
1:A:16:ASN:CG	1:A:17:TYR:N	0.47	2.67	17	1
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:HB2	0.47	2.09	37	2
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:CG2	0.47	2.92	14	2
1:A:175:LEU:HA	1:A:178:GLU:HB2	0.47	1.86	39	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CZ	0.47	2.63	22	1
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:CB	0.47	2.40	29	1
1:A:91:ILE:CG1	1:A:91:ILE:O	0.47	2.63	40	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ILE:HD12	1:A:80:ALA:HB2	0.47	1.86	2	4
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CE2	0.47	2.44	37	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:ND1	0.47	2.47	11	2
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NH2	0.47	2.68	40	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HA	0.47	1.85	20	1
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:N	0.47	2.46	36	17
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB2	0.47	2.10	24	18
1:A:159:ARG:HE	1:A:160:ALA:HB2	0.47	1.69	33	1
1:A:14:GLY:CA	1:A:18:ALA:HB2	0.47	2.39	33	1
1:A:55:SER:CB	1:A:177:ILE:HD13	0.47	2.40	25	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB2	0.47	2.09	22	3
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.97	18	1
1:A:133:VAL:CG1	1:A:133:VAL:O	0.47	2.58	27	3
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:CB	0.47	2.93	15	14
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:CD1	0.47	2.62	12	3
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD23	0.47	1.87	27	1
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:O	0.47	2.33	38	8
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:O	0.47	2.62	35	6
1:A:155:THR:CB	1:A:156:PRO:HD3	0.47	2.39	37	7
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:H	0.47	2.13	16	2
1:A:45:ARG:HG2	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.44	17	1
1:A:75:GLN:CD	1:A:75:GLN:C	0.47	2.74	37	1
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:CG	0.47	2.83	14	1
1:A:21:ARG:O	1:A:23:ASN:N	0.47	2.48	21	7
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD1	0.47	2.48	30	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:N	0.47	2.46	21	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:CB	0.47	2.40	21	1
1:A:4:PRO:CB	1:A:59:SER:OG	0.47	2.62	40	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:NE1	0.47	2.63	32	1
1:A:55:SER:OG	1:A:60:LEU:CD2	0.47	2.63	27	2
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:O	0.47	2.32	29	3
1:A:91:ILE:CD1	1:A:93:ILE:HG22	0.47	2.40	14	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:150:VAL:O	0.47	2.48	24	2
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HG	0.47	2.08	24	7
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:CD	0.47	2.30	24	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD2	0.47	2.82	22	1
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB2	0.47	2.30	34	5
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:CD1	0.47	2.62	35	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:HB	0.47	2.10	25	2
1:A:176:LEU:HA	1:A:180:GLY:O	0.47	2.08	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:CG2	0.47	2.63	22	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:133:VAL:O	0.47	2.63	1	1
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CD1	0.47	2.63	1	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH1	0.47	2.47	18	1
1:A:79:LEU:CD2	1:A:79:LEU:N	0.47	2.78	30	1
1:A:109:GLY:O	1:A:111:GLY:N	0.47	2.47	15	1
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:HB3	0.47	2.40	13	18
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLY:N	0.47	2.67	12	28
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NE	0.47	2.48	23	4
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:O	0.47	2.33	22	3
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.45	5	3
1:A:15:ALA:CA	1:A:18:ALA:HB3	0.47	2.40	31	1
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NH2	0.47	2.48	40	3
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD11	0.46	1.87	8	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:123:ALA:N	0.46	2.77	31	11
1:A:28:VAL:HG13	1:A:29:ALA:N	0.46	2.25	23	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:CA	0.46	2.39	9	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.40	31	7
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.48	12	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.62	22	2
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD21	0.46	1.87	29	2
1:A:28:VAL:HG23	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	10	1
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:CB	0.46	2.63	40	5
1:A:7:VAL:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.46	1.88	17	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.83	26	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:63:ALA:HB2	0.46	2.39	38	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:CG2	0.46	2.64	21	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.99	8	1
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:CD1	0.46	2.80	8	1
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:HG22	0.46	2.39	35	3
1:A:112:GLU:O	1:A:115:HIS:ND1	0.46	2.48	22	2
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CG	0.46	2.63	27	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:O	0.46	2.63	38	6
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:NE2	0.46	2.25	4	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:152:GLU:HG3	0.46	2.45	15	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	0.46	2.30	16	1
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.49	21	1
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:HB2	0.46	2.41	6	1
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:N	0.46	2.49	35	9
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	29	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.41	36	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:OE2	0.46	2.64	20	2
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.26	12	5
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HB3	0.46	2.10	17	9
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:HD21	0.46	1.70	12	2
1:A:104:ILE:CG1	1:A:169:ALA:HB2	0.46	2.41	38	2
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:N	0.46	2.48	22	1
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:N	0.46	2.49	11	1
1:A:128:LYS:HD3	1:A:128:LYS:N	0.46	2.26	27	3
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:C	0.46	2.54	27	13
1:A:175:LEU:CD2	1:A:183:PRO:HB2	0.46	2.41	19	4
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CG2	0.46	2.63	11	5
1:A:105:ARG:O	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.49	17	1
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.41	37	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:64:LYS:NZ	0.46	2.70	7	1
1:A:129:ASP:CG	1:A:130:PHE:N	0.46	2.66	22	1
1:A:21:ARG:HH12	1:A:150:VAL:HG22	0.46	1.71	30	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.64	21	2
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:C	0.46	2.53	21	2
1:A:111:GLY:O	1:A:113:GLY:N	0.46	2.49	27	4
1:A:176:LEU:HG	1:A:184:ALA:CB	0.46	2.40	32	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:CG2	0.46	2.93	29	1
1:A:83:TYR:O	1:A:85:VAL:HG23	0.46	2.10	29	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:109:GLY:N	0.46	2.77	8	8
1:A:53:GLY:HA3	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.41	9	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	0.46	1.67	29	2
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CB	0.46	2.41	25	3
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:H	0.46	1.70	14	4
1:A:105:ARG:CA	1:A:134:ARG:O	0.46	2.63	34	6
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:OE1	0.46	2.34	29	1
1:A:106:LEU:H	1:A:106:LEU:HD13	0.46	1.71	36	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:101:PHE:CE1	0.46	2.99	20	1
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CB	0.46	2.41	13	16
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB3	0.46	2.40	28	4
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:CG2	0.46	2.64	23	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:188:VAL:HG13	0.46	1.86	14	1
1:A:23:ASN:HB3	1:A:27:VAL:HG23	0.46	1.87	10	5
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:HB1	0.46	1.88	38	2
1:A:122:VAL:HG22	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.26	16	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CD	0.46	2.54	21	2
1:A:94:HIS:ND1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.62	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:HA2	0.46	2.11	8	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH2	0.46	2.49	33	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CD	0.46	2.64	19	1
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	0.46	2.26	4	1
1:A:128:LYS:HE2	1:A:130:PHE:CE1	0.46	2.45	29	1
1:A:74:ARG:NH1	1:A:74:ARG:HB2	0.46	2.27	18	1
1:A:130:PHE:C	1:A:130:PHE:CD1	0.46	2.89	11	1
1:A:64:LYS:HG2	1:A:64:LYS:O	0.45	2.11	12	4
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:CD1	0.45	2.84	18	2
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HA	0.45	2.42	23	1
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:H	0.45	2.14	38	9
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:O	0.45	2.34	9	6
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:CD	0.45	2.41	27	2
1:A:97:LEU:HA	1:A:137:ILE:HD13	0.45	1.88	35	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:NE	0.45	2.48	24	2
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:O	0.45	2.10	31	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.60	18	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HD22	0.45	1.86	36	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:CB	0.45	2.40	21	1
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NE	0.45	2.84	11	1
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CG1	0.45	2.64	11	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	40	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.91	40	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HA	0.45	1.88	40	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:151:LEU:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:N	0.45	2.48	4	7
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:HA2	0.45	2.11	12	6
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.57	9	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:O	0.45	2.49	9	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CG	0.45	2.54	38	6
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG3	0.45	2.41	13	8
1:A:36:LEU:C	1:A:38:ALA:N	0.45	2.69	28	2
1:A:48:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HB3	0.45	1.87	31	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.94	39	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG2	0.45	1.87	30	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:118:LEU:HD21	0.45	1.89	38	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:CD2	0.45	2.42	38	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CZ2	0.45	2.46	21	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:21:ARG:N	0.45	2.26	11	1
1:A:95:ASP:HB2	1:A:137:ILE:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE3	0.45	2.41	31	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:GLU:O	1:A:64:LYS:N	0.45	2.48	6	2
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD11	0.45	2.12	34	2
1:A:125:LEU:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.46	10	2
1:A:69:MET:HE1	1:A:70:ASN:HB2	0.45	1.89	35	1
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:HB2	0.45	1.88	28	4
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:HD2	0.45	2.26	25	4
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE1	0.45	3.00	19	1
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:115:HIS:N	1:A:118:LEU:HD12	0.45	2.26	40	1
1:A:25:GLY:CA	1:A:93:ILE:HD11	0.45	2.42	23	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG13	0.45	2.11	9	3
1:A:102:GLY:N	1:A:136:GLY:O	0.45	2.45	25	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:N	0.45	2.49	10	4
1:A:92:VAL:CG1	1:A:132:ARG:HG2	0.45	2.42	24	1
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:HD12	0.45	2.27	18	1
1:A:151:LEU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.34	18	1
1:A:47:GLY:O	1:A:75:GLN:NE2	0.45	2.50	18	2
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD22	0.45	2.46	36	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	16	1
1:A:23:ASN:O	1:A:26:PHE:N	0.45	2.49	40	1
1:A:102:GLY:HA3	1:A:161:GLU:CG	0.45	2.42	24	3
1:A:55:SER:O	1:A:56:ALA:C	0.45	2.54	25	5
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NE	0.45	2.49	33	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD2	0.45	3.00	5	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:115:HIS:NE2	0.45	2.49	16	2
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:HB	0.45	2.12	39	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:95:ASP:OD2	0.45	2.50	30	1
1:A:76:ILE:HD13	1:A:76:ILE:N	0.45	2.26	13	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:45:ARG:N	0.45	2.84	34	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:135:ILE:HD11	0.45	1.88	40	2
1:A:137:ILE:HG12	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.41	3	2
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.48	23	3
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:ND2	0.45	2.27	12	2
1:A:21:ARG:HH11	1:A:22:HIS:N	0.45	2.10	17	1
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:CD2	0.45	2.69	5	1
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:CB	0.45	2.42	5	2
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CA	0.45	2.42	25	4
1:A:75:GLN:CG	1:A:76:ILE:N	0.45	2.79	37	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.41	24	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:CG2	0.45	2.38	39	1
1:A:138:GLY:CA	1:A:149:PHE:CE2	0.45	3.00	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:HA3	0.45	1.87	32	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:O	0.45	2.34	8	4
1:A:69:MET:HG2	1:A:117:GLY:CA	0.45	2.42	3	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.36	6	3
1:A:44:LYS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.49	10	5
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:CG2	0.45	2.42	27	3
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.93	27	2
1:A:50:VAL:HB	1:A:63:ALA:CB	0.45	2.42	12	2
1:A:12:ASN:CG	1:A:18:ALA:HB2	0.45	2.32	25	1
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:OE1	0.45	2.65	37	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:89:ASN:O	0.45	2.61	14	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:TYR:CD1	0.45	3.05	14	1
1:A:87:PRO:O	1:A:130:PHE:HA	0.45	2.12	29	4
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.42	34	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:CE	0.45	2.42	39	3
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:CB	0.45	2.65	11	1
1:A:103:ARG:CG	1:A:104:ILE:N	0.45	2.80	40	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG1	0.45	2.65	8	2
1:A:10:LEU:HG	1:A:92:VAL:CG1	0.45	2.42	17	3
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HD22	0.45	2.42	27	1
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD23	0.45	2.27	17	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:18:ALA:HB2	0.45	1.88	33	1
1:A:12:ASN:N	1:A:23:ASN:HA	0.45	2.26	25	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CD1	0.45	2.41	40	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:62:LEU:C	0.45	2.33	20	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CD	0.45	2.54	13	5
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:C	0.45	2.55	27	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:CG	0.45	2.85	7	3
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:CG1	0.45	2.41	37	2
1:A:64:LYS:NZ	1:A:68:TYR:OH	0.45	2.48	4	1
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.45	2.47	31	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HG2	0.45	2.41	39	1
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD13	0.45	2.11	22	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:NE2	0.45	2.50	28	1
1:A:110:GLY:O	1:A:111:GLY:C	0.45	2.55	30	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:135:ILE:HG12	0.45	2.41	38	1
1:A:109:GLY:O	1:A:132:ARG:NH1	0.45	2.50	13	1
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:OG	0.45	2.35	8	1
1:A:159:ARG:HG3	1:A:160:ALA:N	0.45	2.27	17	2
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:HB2	0.45	2.13	10	5
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:HG2	0.45	1.89	36	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CD2	0.45	3.05	33	1
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:CB	0.45	2.72	19	1
1:A:91:ILE:CD1	1:A:91:ILE:C	0.45	2.81	22	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.45	2.42	1	1
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HB	0.45	1.88	29	1
1:A:87:PRO:CA	1:A:130:PHE:CD1	0.45	3.00	18	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:N	0.45	2.46	34	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:N	0.45	2.80	11	1
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:CA	0.44	2.65	8	1
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:N	0.44	2.70	23	1
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.42	26	5
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:H	0.44	2.25	7	8
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG23	0.44	2.32	29	3
1:A:156:PRO:C	1:A:158:GLU:N	0.44	2.70	14	6
1:A:69:MET:CG	1:A:117:GLY:HA3	0.44	2.42	37	3
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.44	2.42	7	3
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CZ	0.44	2.42	1	2
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD21	0.44	2.42	29	2
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:O	0.44	2.35	30	2
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CG	0.44	3.00	15	1
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:N	0.44	2.70	35	10
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CD	0.44	2.56	23	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:HD23	0.44	2.42	24	1
1:A:100:GLU:OE2	1:A:101:PHE:N	0.44	2.50	10	3
1:A:15:ALA:O	1:A:16:ASN:C	0.44	2.55	10	4
1:A:103:ARG:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.44	2.48	1	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD13	0.44	2.31	34	1
1:A:58:ARG:HB3	1:A:177:ILE:CG2	0.44	2.42	34	1
1:A:33:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	0.44	1.88	8	2
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:HB2	0.44	2.11	8	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:49:GLU:OE1	0.44	2.70	27	1
1:A:64:LYS:CD	1:A:64:LYS:N	0.44	2.80	27	1
1:A:66:ARG:HB2	1:A:71:GLU:OE2	0.44	2.12	27	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:CB	0.44	2.38	35	2
1:A:191:TRP:HA	1:A:191:TRP:CE3	0.44	2.47	19	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:64:LYS:NZ	0.44	2.27	19	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:71:GLU:O	0.44	2.35	26	2
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:CA	0.44	2.41	30	4
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:N	0.44	2.49	21	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:HB3	0.44	1.90	13	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:68:TYR:OH	0.44	2.35	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HA	0.44	2.12	33	5
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HG12	0.44	1.90	12	1
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:NE1	0.44	2.81	22	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CA	0.44	2.43	19	4
1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:CE	0.44	2.41	4	1
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:NE2	0.44	2.80	4	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CB	0.44	2.43	31	1
1:A:174:GLU:CD	1:A:178:GLU:OE1	0.44	2.56	2	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:ALA:O	0.44	2.13	13	2
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:HB2	0.44	2.42	21	1
1:A:188:VAL:O	1:A:190:ALA:N	0.44	2.51	8	5
1:A:49:GLU:HG3	1:A:50:VAL:N	0.44	2.27	3	10
1:A:63:ALA:O	1:A:64:LYS:HB3	0.44	2.12	17	7
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.44	2.48	18	3
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:HB2	0.44	2.13	35	4
1:A:165:ILE:O	1:A:168:GLN:N	0.44	2.51	16	2
1:A:99:LEU:HD13	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.27	30	1
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CB	0.44	3.01	30	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:10:LEU:O	0.44	2.13	38	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:CB	0.44	2.65	40	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CE2	0.44	3.05	3	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CG1	0.44	2.43	10	2
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HG2	0.44	2.12	24	16
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:NE2	0.44	2.80	25	1
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:ND1	0.44	2.71	4	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:N	0.44	2.27	28	1
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG2	0.44	2.42	29	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:158:GLU:OE1	0.44	2.50	16	2
1:A:100:GLU:CA	1:A:138:GLY:N	0.44	2.80	23	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:O	0.44	2.13	23	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:C	0.44	2.33	20	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:165:ILE:C	0.44	2.83	34	3
1:A:46:SER:O	1:A:75:GLN:NE2	0.44	2.47	17	1
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.96	26	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HG3	0.44	2.13	22	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:62:LEU:C	0.44	2.85	36	1
1:A:51:ALA:O	1:A:62:LEU:N	0.44	2.48	32	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HB	0.44	2.48	27	2
1:A:7:VAL:CB	1:A:62:LEU:HD22	0.44	2.43	27	1
1:A:112:GLU:O	1:A:113:GLY:C	0.44	2.56	24	4
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:CG2	0.44	2.42	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:TRP:HE3	1:A:191:TRP:N	0.44	2.11	1	3
1:A:100:GLU:OE2	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.50	15	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HB	0.44	2.42	4	5
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.44	2.48	5	3
1:A:98:ASP:C	1:A:98:ASP:OD1	0.44	2.56	9	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:HB3	0.44	2.43	35	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG2	0.44	2.33	24	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HG23	0.44	2.47	22	1
1:A:19:ARG:CG	1:A:155:THR:HG23	0.44	2.43	11	1
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	8	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CG1	0.43	2.42	8	2
1:A:164:THR:O	1:A:168:GLN:NE2	0.43	2.51	17	1
1:A:100:GLU:CB	1:A:137:ILE:C	0.43	2.86	25	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:O	0.43	2.12	37	2
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:HB3	0.43	2.13	37	2
1:A:132:ARG:O	1:A:133:VAL:HG23	0.43	2.13	39	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:135:ILE:HD11	0.43	2.42	10	2
1:A:31:LEU:C	1:A:31:LEU:CD1	0.43	2.79	16	1
1:A:158:GLU:CD	1:A:162:VAL:HG23	0.43	2.33	21	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CG	0.43	2.66	21	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD23	0.43	2.43	32	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:95:ASP:H	0.43	2.31	25	8
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.43	9	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:N	0.43	2.27	9	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:CB	0.43	2.96	34	3
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:CB	0.43	2.66	25	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:154:PHE:N	0.43	2.51	14	1
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD13	0.43	1.90	26	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:H	0.43	2.26	26	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:94:HIS:CG	0.43	3.01	39	2
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NH1	0.43	2.51	30	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CD	0.43	2.91	21	2
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:CD	0.43	2.94	40	1
1:A:160:ALA:HA	1:A:163:PRO:CG	0.43	2.43	40	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:HB2	0.43	2.14	37	3
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:HB3	0.43	2.43	17	13
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB3	0.43	2.13	23	2
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:ND2	0.43	2.74	23	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:94:HIS:N	0.43	2.28	23	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG12	0.43	2.42	31	5
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:CG	0.43	2.96	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:PRO:HG3	1:A:75:GLN:HB2	0.43	1.90	31	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:ND1	0.43	2.29	9	1
1:A:69:MET:SD	1:A:70:ASN:OD1	0.43	2.77	9	1
1:A:97:LEU:C	1:A:138:GLY:O	0.43	2.56	27	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HB	0.43	2.49	27	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:129:ASP:C	0.43	2.34	31	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:O	0.43	2.14	1	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:17:TYR:OH	0.43	2.51	2	1
1:A:112:GLU:N	1:A:112:GLU:CD	0.43	2.71	20	1
1:A:74:ARG:O	1:A:77:GLY:N	0.43	2.51	27	2
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CE1	0.43	3.02	27	1
1:A:66:ARG:CB	1:A:71:GLU:OE2	0.43	2.66	20	2
1:A:168:GLN:HB2	1:A:191:TRP:CH2	0.43	2.48	24	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CG	0.43	2.56	18	2
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:HD2	0.43	2.29	31	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:104:ILE:O	0.43	2.14	26	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:O	0.43	2.13	38	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:CG2	0.43	2.63	16	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:92:VAL:CG2	0.43	2.43	21	1
1:A:110:GLY:C	1:A:132:ARG:NH1	0.43	2.72	32	1
1:A:65:PRO:CG	1:A:72:SER:HA	0.43	2.44	6	2
1:A:152:GLU:HG2	1:A:153:ASN:N	0.43	2.29	27	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CE1	0.43	2.49	35	1
1:A:156:PRO:O	1:A:158:GLU:N	0.43	2.52	31	3
1:A:168:GLN:CG	1:A:169:ALA:N	0.43	2.82	12	1
1:A:59:SER:OG	1:A:60:LEU:N	0.43	2.52	33	1
1:A:185:GLN:O	1:A:190:ALA:N	0.43	2.52	37	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD13	0.43	2.44	37	1
1:A:9:GLY:O	1:A:64:LYS:CB	0.43	2.67	37	1
1:A:153:ASN:N	1:A:153:ASN:OD1	0.43	2.52	24	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD21	0.43	2.43	38	1
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:HB3	0.43	2.14	11	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG23	0.43	2.44	40	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:C	0.43	2.57	6	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA2	0.43	2.14	31	2
1:A:102:GLY:CA	1:A:161:GLU:HG3	0.43	2.44	35	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD23	0.43	1.91	12	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HG3	0.43	2.14	25	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CD	0.43	2.66	7	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:119:ARG:NH2	0.43	2.52	4	1
1:A:111:GLY:C	1:A:113:GLY:N	0.43	2.71	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:HG3	0.43	2.43	30	1
1:A:128:LYS:CG	1:A:128:LYS:O	0.43	2.67	8	2
1:A:41:LYS:C	1:A:49:GLU:OE2	0.43	2.57	19	3
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:NE2	0.43	2.51	11	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HA	0.43	2.43	39	3
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD13	0.43	2.28	15	2
1:A:91:ILE:CB	1:A:131:GLN:HG2	0.43	2.44	24	2
1:A:17:TYR:HB3	1:A:151:LEU:HD11	0.43	1.89	29	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:O	0.43	2.67	18	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CD1	0.43	2.48	30	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:CZ	0.43	2.87	36	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:118:LEU:CD1	0.43	3.02	21	1
1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:OE1	0.43	2.67	21	1
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:HG2	0.43	2.14	23	2
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.43	2.46	5	3
1:A:152:GLU:OE1	1:A:153:ASN:N	0.43	2.50	9	1
1:A:19:ARG:O	1:A:158:GLU:OE1	0.43	2.37	35	1
1:A:154:PHE:HB2	1:A:158:GLU:CD	0.43	2.34	33	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NE	0.43	2.73	33	1
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	25	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.44	4	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	0.43	2.13	30	1
1:A:36:LEU:CD1	1:A:36:LEU:O	0.43	2.55	30	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:NH2	0.43	2.72	36	1
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:N	0.43	2.48	10	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:70:ASN:N	0.43	2.29	3	5
1:A:99:LEU:HG	1:A:101:PHE:CE1	0.43	2.49	23	1
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB2	0.43	2.14	9	3
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG12	0.43	2.35	9	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:125:LEU:HD22	0.43	1.89	24	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HG23	0.43	2.46	22	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG12	0.43	2.14	28	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CE2	0.43	2.49	32	1
1:A:106:LEU:HD21	1:A:181:MET:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.42	3.00	18	1
1:A:87:PRO:C	1:A:129:ASP:O	0.42	2.57	38	3
1:A:92:VAL:O	1:A:132:ARG:HA	0.42	2.14	21	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:CG2	0.42	2.64	11	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE2	0.42	2.38	13	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD11	0.42	2.29	34	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:24:LEU:CD2	0.42	2.96	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:HB2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.44	32	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:113:GLY:N	0.42	2.52	24	2
1:A:87:PRO:CG	1:A:129:ASP:HB2	0.42	2.43	27	1
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.44	27	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:HA	0.42	1.91	25	1
1:A:99:LEU:CB	1:A:101:PHE:CE1	0.42	3.02	25	1
1:A:152:GLU:CG	1:A:153:ASN:N	0.42	2.82	37	3
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:O	0.42	2.37	24	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:11:GLY:N	0.42	2.30	1	2
1:A:128:LYS:HD2	1:A:128:LYS:N	0.42	2.28	2	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE3	0.42	2.50	30	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:CD1	0.42	2.44	40	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:101:PHE:CE1	0.42	2.48	20	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:132:ARG:NH2	0.42	2.82	15	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:C	0.42	2.57	3	5
1:A:10:LEU:CD2	1:A:92:VAL:HG13	0.42	2.44	17	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:69:MET:HA	0.42	2.45	9	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:63:ALA:CB	0.42	2.44	27	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:HD3	0.42	2.30	27	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.45	10	3
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:O	0.42	2.37	37	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:ND2	0.42	2.28	7	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:166:CYS:N	0.42	2.29	20	1
1:A:102:GLY:HA2	1:A:165:ILE:HG21	0.42	1.92	10	1
1:A:91:ILE:CG1	1:A:93:ILE:HD11	0.42	2.44	37	1
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:HD1	0.42	2.12	7	1
1:A:46:SER:OG	1:A:75:GLN:NE2	0.42	2.51	26	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:CYS:C	0.42	2.58	16	2
1:A:12:ASN:H	1:A:23:ASN:HA	0.42	1.74	34	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.68	9	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:166:CYS:HB3	0.42	2.45	17	5
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CD1	0.42	2.49	17	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HD13	0.42	1.87	37	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:158:GLU:OE2	0.42	2.38	14	1
1:A:64:LYS:HB2	1:A:68:TYR:CE1	0.42	2.49	24	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:158:GLU:HG2	0.42	2.29	31	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB2	0.42	2.45	28	1
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:CD1	0.42	2.78	1	1
1:A:3:GLU:CB	1:A:4:PRO:HD3	0.42	2.44	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:O	1:A:60:LEU:HD12	0.42	2.15	16	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:CD1	0.42	2.41	21	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG1	0.42	2.45	40	1
1:A:60:LEU:C	1:A:60:LEU:HD12	0.42	2.35	32	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:61:VAL:HB	0.42	1.92	8	3
1:A:12:ASN:OD1	1:A:12:ASN:C	0.42	2.57	25	1
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:HB2	0.42	2.15	14	2
1:A:36:LEU:O	1:A:37:GLY:C	0.42	2.58	28	1
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:C	0.42	2.86	29	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HB	0.42	2.45	18	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:H	0.42	2.27	18	2
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG21	0.42	1.73	13	2
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:CD1	0.42	2.83	6	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:CB	0.42	2.45	35	2
1:A:21:ARG:NH1	1:A:158:GLU:OE1	0.42	2.53	12	1
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HB2	0.42	1.92	24	1
1:A:96:ASP:N	1:A:137:ILE:HD11	0.42	2.30	4	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE1	0.42	2.37	21	1
1:A:96:ASP:O	1:A:136:GLY:HA2	0.42	2.15	27	1
1:A:119:ARG:O	1:A:122:VAL:HG12	0.42	2.15	33	5
1:A:18:ALA:O	1:A:19:ARG:C	0.42	2.58	7	1
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CG	0.42	2.50	28	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD1	0.42	2.88	30	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:VAL:HB	0.42	1.91	38	1
1:A:6:LEU:O	1:A:90:ILE:HA	0.42	2.15	16	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.30	11	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:165:ILE:HG21	0.42	2.45	20	1
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HB2	0.42	2.14	23	2
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:HB3	0.42	2.45	6	1
1:A:18:ALA:C	1:A:20:THR:N	0.42	2.73	20	2
1:A:49:GLU:OE2	1:A:65:PRO:O	0.42	2.37	35	1
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG3	0.42	2.35	24	2
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CZ	0.42	2.50	33	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.42	2.88	5	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CG	0.42	2.58	25	1
1:A:33:ALA:O	1:A:37:GLY:N	0.42	2.53	25	2
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:CG	0.42	3.02	7	1
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CG	0.42	2.88	4	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:26:PHE:CB	0.42	2.68	31	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:188:VAL:CG1	0.42	2.68	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.53	34	1
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:HE1	0.42	1.72	3	2
1:A:20:THR:OG1	1:A:152:GLU:N	0.42	2.53	10	2
1:A:127:THR:O	1:A:127:THR:CG2	0.42	2.67	23	2
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:C	0.42	2.58	17	3
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:OE2	0.42	2.38	35	1
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CE3	0.42	2.49	5	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE1	0.42	2.50	36	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG3	0.42	2.12	31	2
1:A:132:ARG:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.42	2.45	39	1
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HG13	0.42	2.36	39	1
1:A:132:ARG:NH2	1:A:134:ARG:NE	0.42	2.68	2	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:C	0.42	2.34	36	1
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG2	0.42	2.35	16	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:CG1	0.42	2.44	11	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:58:ARG:NE	0.42	2.83	13	1
1:A:138:GLY:C	1:A:149:PHE:CE2	0.42	2.93	20	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:CZ	0.41	2.88	33	2
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CA	0.41	2.68	32	3
1:A:131:GLN:HG3	1:A:132:ARG:N	0.41	2.30	25	1
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CD2	0.41	2.50	25	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:HB3	0.41	1.91	25	1
1:A:112:GLU:N	1:A:132:ARG:HH22	0.41	2.13	19	1
1:A:91:ILE:HB	1:A:131:GLN:HG2	0.41	1.91	24	1
1:A:171:ASP:O	1:A:174:GLU:HG2	0.41	2.15	39	1
1:A:3:GLU:N	1:A:4:PRO:CD	0.41	2.82	16	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:152:GLU:O	0.41	2.64	34	1
1:A:52:THR:HA	1:A:60:LEU:O	0.41	2.15	32	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG12	0.41	2.15	10	1
1:A:44:LYS:C	1:A:46:SER:N	0.41	2.72	10	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE2	0.41	2.39	25	5
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:HB2	0.41	2.15	23	1
1:A:152:GLU:OE2	1:A:154:PHE:CE1	0.41	2.74	27	1
1:A:117:GLY:O	1:A:120:SER:N	0.41	2.53	33	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HB	0.41	2.15	37	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:CB	0.41	2.45	29	2
1:A:93:ILE:HG12	1:A:133:VAL:O	0.41	2.14	31	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:CB	0.41	2.45	39	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:NH2	0.41	2.30	39	1
1:A:8:VAL:O	1:A:92:VAL:HA	0.41	2.15	21	2
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:O	0.41	2.58	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:8:VAL:N	1:A:91:ILE:O	0.41	2.48	15	1
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.38	8	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD2	0.41	2.60	13	3
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG3	0.41	2.35	17	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:118:LEU:HD21	0.41	1.76	37	1
1:A:40:PHE:HD2	1:A:50:VAL:C	0.41	2.18	29	1
1:A:167:GLU:HG3	1:A:168:GLN:N	0.41	2.30	40	2
1:A:96:ASP:OD1	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.15	20	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE2	0.41	2.93	34	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:HG13	0.41	2.14	8	1
1:A:137:ILE:O	1:A:152:GLU:OE2	0.41	2.38	23	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:HB3	0.41	2.16	27	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG2	0.41	2.50	35	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:40:PHE:N	0.41	2.30	17	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD23	0.41	2.46	25	1
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:HD3	0.41	1.93	29	3
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:CG2	0.41	2.69	14	2
1:A:49:GLU:HB3	1:A:64:LYS:CE	0.41	2.45	4	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:138:GLY:HA3	0.41	2.50	31	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:181:MET:CB	0.41	2.46	31	2
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HD12	0.41	2.15	20	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	15	1
1:A:64:LYS:HD3	1:A:64:LYS:N	0.41	2.30	32	1
1:A:41:LYS:O	1:A:50:VAL:O	0.41	2.38	25	2
1:A:168:GLN:HG3	1:A:188:VAL:HG13	0.41	1.91	6	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:NZ	0.41	2.83	12	2
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:O	0.41	2.38	5	1
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	5	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:CG1	0.41	2.46	14	1
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	31	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:HB3	0.41	2.45	26	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:188:VAL:HG13	0.41	2.36	26	1
1:A:37:GLY:C	1:A:38:ALA:O	0.41	2.57	26	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:HB3	0.41	2.46	36	1
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:CD2	0.41	2.82	11	1
1:A:99:LEU:O	1:A:137:ILE:HA	0.41	2.16	23	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:75:GLN:HE22	0.41	1.76	9	1
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CZ	0.41	2.72	35	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.31	35	1
1:A:40:PHE:CA	1:A:51:ALA:HB2	0.41	2.37	35	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLU:HG3	1:A:138:GLY:N	0.41	2.30	25	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:18:ALA:HB1	0.41	1.92	19	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	2.51	19	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:HG23	0.41	2.16	28	1
1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:HIS:CB	0.41	2.45	29	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:17:TYR:OH	0.41	2.36	2	1
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:CD	0.41	2.83	40	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.41	2.44	34	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HA	0.41	1.92	23	2
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:HD3	0.41	2.45	17	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CA	0.41	2.69	17	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD12	0.41	2.15	17	2
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD21	0.41	2.15	5	1
1:A:105:ARG:C	1:A:134:ARG:O	0.41	2.59	24	1
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.59	24	1
1:A:113:GLY:O	1:A:114:GLY:O	0.41	2.39	4	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG23	0.41	1.93	4	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:137:ILE:HG21	0.41	1.91	22	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:39:LYS:HA	0.41	1.92	28	1
1:A:76:ILE:CD1	1:A:90:ILE:HD13	0.41	2.45	29	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HA	0.41	2.51	18	1
1:A:112:GLU:C	1:A:112:GLU:OE1	0.41	2.59	30	1
1:A:168:GLN:HA	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.14	21	1
1:A:21:ARG:HH21	1:A:151:LEU:HD11	0.41	1.76	21	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:O	0.41	2.59	34	1
1:A:99:LEU:N	1:A:138:GLY:O	0.41	2.53	32	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:16:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:128:LYS:CG	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	12	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.46	12	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CZ	0.41	3.08	14	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:CB	0.41	2.99	19	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD12	0.41	1.91	24	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:72:SER:N	0.41	2.31	31	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:O	0.41	2.15	1	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:O	0.41	2.38	20	1
1:A:104:ILE:HA	1:A:135:ILE:HA	0.41	1.93	8	1
1:A:58:ARG:HB2	1:A:177:ILE:CG2	0.41	2.46	23	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	1.92	6	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:C	0.41	2.35	27	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:VAL:N	0.41	2.84	33	2
1:A:178:GLU:O	1:A:178:GLU:OE1	0.41	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HB3	0.41	2.44	14	1
1:A:107:LYS:O	1:A:132:ARG:O	0.41	2.38	4	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:OD2	0.41	2.39	4	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	26	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CB	0.41	2.68	39	1
1:A:69:MET:CE	1:A:70:ASN:HB2	0.41	2.45	22	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:44:LYS:N	0.41	2.88	22	1
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.46	28	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:C	0.41	2.59	29	1
1:A:19:ARG:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	2	1
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:CD	0.41	2.60	2	1
1:A:69:MET:CG	1:A:70:ASN:N	0.41	2.82	18	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.84	30	1
1:A:112:GLU:OE2	1:A:132:ARG:NH1	0.41	2.54	36	1
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:N	0.41	2.73	16	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:O	0.41	2.39	13	1
1:A:5:LEU:HD11	1:A:58:ARG:NE	0.41	2.31	13	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	3	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:35:ARG:HD3	0.41	2.45	29	1
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.41	2.50	30	1
1:A:181:MET:O	1:A:182:GLU:C	0.41	2.60	38	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:62:LEU:C	0.41	2.36	36	1
1:A:164:THR:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	40	2
1:A:17:TYR:HB2	1:A:151:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:CD1	0.40	2.46	3	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:64:LYS:O	0.40	2.39	5	2
1:A:112:GLU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.40	2.16	25	1
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:OG1	0.40	2.33	37	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:HG12	0.40	1.93	37	2
1:A:172:ALA:O	1:A:176:LEU:HB2	0.40	2.16	21	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG23	0.40	1.92	40	1
1:A:25:GLY:O	1:A:28:VAL:HG12	0.40	2.15	10	1
1:A:45:ARG:CB	1:A:50:VAL:HG21	0.40	2.47	8	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD13	0.40	1.91	8	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:CG2	0.40	2.89	27	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:162:VAL:HG21	0.40	2.31	12	1
1:A:13:PRO:HG3	1:A:67:CYS:N	0.40	2.30	17	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE1	0.40	2.40	26	2
1:A:191:TRP:CG	1:A:191:TRP:O	0.40	2.74	14	1
1:A:5:LEU:HB2	1:A:89:ASN:CB	0.40	2.46	14	1
1:A:100:GLU:C	1:A:138:GLY:N	0.40	2.75	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:LYS:CA	1:A:128:LYS:HE3	0.40	2.46	34	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:75:GLN:NE2	0.40	2.54	3	1
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:N	0.40	2.63	23	1
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG21	0.40	1.92	9	1
1:A:107:LYS:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.40	2.47	17	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:CD2	0.40	2.69	33	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HG2	0.40	2.16	31	1
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:H	0.40	1.77	39	1
1:A:17:TYR:C	1:A:19:ARG:N	0.40	2.74	29	1
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:SG	0.40	2.57	2	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:HB	0.40	1.93	30	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:166:CYS:N	0.40	2.73	36	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:151:LEU:HD13	0.40	2.17	21	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB3	0.40	2.47	11	1
1:A:87:PRO:CD	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.46	11	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:H	0.40	1.76	32	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CD1	0.40	2.85	10	1
1:A:45:ARG:HB2	1:A:50:VAL:HG21	0.40	1.93	8	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG13	0.40	2.37	8	1
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:OE1	0.40	2.39	3	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:135:ILE:HB	0.40	2.17	23	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.16	27	1
1:A:156:PRO:O	1:A:157:ALA:C	0.40	2.60	35	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:64:LYS:NZ	0.40	2.78	17	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:CD1	0.40	2.46	5	1
1:A:4:PRO:HA	1:A:58:ARG:CD	0.40	2.47	37	1
1:A:176:LEU:O	1:A:176:LEU:CD2	0.40	2.69	4	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HZ	0.40	1.75	39	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:CG	0.40	3.00	39	1
1:A:71:GLU:O	1:A:71:GLU:OE1	0.40	2.39	11	2
1:A:21:ARG:HD3	1:A:24:LEU:HD22	0.40	1.94	13	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG21	0.40	1.93	40	1
1:A:96:ASP:HB2	1:A:135:ILE:O	0.40	2.16	34	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:CG2	0.40	2.69	15	1
1:A:67:CYS:HB3	1:A:71:GLU:HB2	0.40	1.93	32	1
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	8	1
1:A:46:SER:C	1:A:79:LEU:HD11	0.40	2.36	6	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:OD2	0.40	2.40	9	1
1:A:74:ARG:O	1:A:75:GLN:C	0.40	2.60	27	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:23:ASN:O	0.40	2.40	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD23	1:A:137:ILE:O	0.40	2.16	7	1
1:A:67:CYS:HB2	1:A:71:GLU:CG	0.40	2.46	18	1
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	0.40	2.16	30	2
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:N	0.40	2.54	30	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:131:GLN:O	0.40	2.17	38	1
1:A:104:ILE:HG13	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	16	1
1:A:49:GLU:HG2	1:A:64:LYS:HZ2	0.40	1.77	21	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:CG2	0.40	2.47	40	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HE2	0.40	1.92	20	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	180/204 (88%)	130±3 (72±2%)	31±4 (17±2%)	19±4 (10±2%)	1	9
All	All	7200/8160 (88%)	5206 (72%)	1251 (17%)	743 (10%)	1	9

All 58 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	69	MET	40
1	A	68	TYR	40
1	A	156	PRO	39
1	A	153	ASN	39
1	A	65	PRO	36
1	A	152	GLU	34
1	A	155	THR	32
1	A	154	PHE	27
1	A	38	ALA	26
1	A	77	GLY	25
1	A	14	GLY	25
1	A	15	ALA	23
1	A	102	GLY	22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	ARG	18
1	A	128	LYS	18
1	A	40	PHE	17
1	A	127	THR	17
1	A	129	ASP	16
1	A	189	HIS	16
1	A	20	THR	16
1	A	48	ALA	14
1	A	55	SER	14
1	A	108	ILE	14
1	A	114	GLY	13
1	A	110	GLY	12
1	A	112	GLU	11
1	A	45	ARG	11
1	A	43	HIS	11
1	A	44	LYS	10
1	A	130	PHE	9
1	A	138	GLY	9
1	A	3	GLU	7
1	A	113	GLY	6
1	A	111	GLY	6
1	A	58	ARG	6
1	A	115	HIS	6
1	A	16	ASN	5
1	A	109	GLY	5
1	A	60	LEU	5
1	A	36	LEU	4
1	A	46	SER	4
1	A	56	ALA	4
1	A	22	HIS	4
1	A	41	LYS	3
1	A	13	PRO	3
1	A	47	GLY	3
1	A	181	MET	2
1	A	133	VAL	2
1	A	116	ASN	2
1	A	179	GLN	2
1	A	64	LYS	2
1	A	37	GLY	2
1	A	180	GLY	1
1	A	137	ILE	1
1	A	42	ALA	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	67	CYS	1
1	A	50	VAL	1
1	A	100	GLU	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	135/153 (88%)	82±4 (61±3%)	53±4 (39±3%)	0 5
All	All	5400/6120 (88%)	3278 (61%)	2122 (39%)	0 5

All 116 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	74	ARG	40
1	A	150	VAL	40
1	A	106	LEU	40
1	A	31	LEU	40
1	A	39	LYS	40
1	A	52	THR	40
1	A	67	CYS	40
1	A	155	THR	40
1	A	8	VAL	40
1	A	159	ARG	39
1	A	91	ILE	39
1	A	64	LYS	39
1	A	154	PHE	38
1	A	41	LYS	38
1	A	10	LEU	38
1	A	165	ILE	37
1	A	127	THR	37
1	A	79	LEU	36
1	A	36	LEU	36
1	A	5	LEU	35
1	A	175	LEU	33
1	A	6	LEU	33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	81	LYS	33
1	A	44	LYS	33
1	A	93	ILE	32
1	A	24	LEU	32
1	A	108	ILE	29
1	A	58	ARG	29
1	A	132	ARG	29
1	A	182	GLU	27
1	A	55	SER	27
1	A	187	ARG	27
1	A	40	PHE	26
1	A	97	LEU	26
1	A	101	PHE	25
1	A	35	ARG	25
1	A	71	GLU	24
1	A	59	SER	23
1	A	17	TYR	23
1	A	22	HIS	23
1	A	60	LEU	23
1	A	43	HIS	22
1	A	62	LEU	22
1	A	137	ILE	22
1	A	21	ARG	21
1	A	105	ARG	21
1	A	95	ASP	21
1	A	99	LEU	20
1	A	45	ARG	19
1	A	191	TRP	19
1	A	149	PHE	18
1	A	122	VAL	18
1	A	178	GLU	18
1	A	189	HIS	18
1	A	54	ARG	17
1	A	3	GLU	16
1	A	134	ARG	16
1	A	188	VAL	16
1	A	103	ARG	16
1	A	115	HIS	14
1	A	104	ILE	14
1	A	174	GLU	14
1	A	179	GLN	14
1	A	158	GLU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	128	LYS	14
1	A	76	ILE	13
1	A	121	VAL	13
1	A	107	LYS	13
1	A	181	MET	13
1	A	168	GLN	13
1	A	100	GLU	13
1	A	98	ASP	12
1	A	46	SER	12
1	A	96	ASP	12
1	A	112	GLU	11
1	A	119	ARG	11
1	A	164	THR	10
1	A	152	GLU	10
1	A	50	VAL	10
1	A	171	ASP	9
1	A	7	VAL	9
1	A	85	VAL	9
1	A	151	LEU	8
1	A	19	ARG	8
1	A	131	GLN	8
1	A	75	GLN	7
1	A	130	PHE	7
1	A	120	SER	7
1	A	125	LEU	7
1	A	49	GLU	7
1	A	12	ASN	7
1	A	69	MET	7
1	A	167	GLU	7
1	A	116	ASN	7
1	A	129	ASP	6
1	A	27	VAL	6
1	A	89	ASN	6
1	A	94	HIS	5
1	A	162	VAL	5
1	A	90	ILE	5
1	A	28	VAL	4
1	A	185	GLN	4
1	A	118	LEU	4
1	A	30	ASP	3
1	A	176	LEU	2
1	A	70	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	153	ASN	2
1	A	84	SER	2
1	A	92	VAL	1
1	A	20	THR	1
1	A	26	PHE	1
1	A	186	ASN	1
1	A	66	ARG	1
1	A	23	ASN	1
1	A	16	ASN	1
1	A	161	GLU	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