



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 15, 2026 – 11:24 AM UTC

PDB ID : 1AH2 / pdb_00001ah2
Title : SERINE PROTEASE PB92 FROM BACILLUS ALCALOPHILUS, NMR, 18
STRUCTURES
Authors : Boelens, R.; Schipper, D.; Martin, J.R.; Karimi-Nejad, Y.; Mulder, F.; Zwan,
J.V.D.; Mariani, M.
Deposited on : 1997-04-11

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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

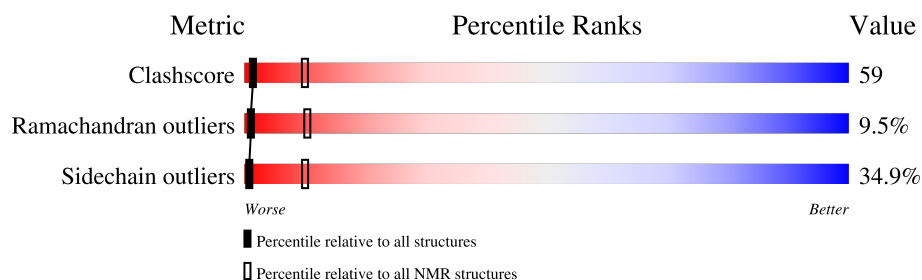
1 Overall quality at a glance

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	269	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 18 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:51, A:55-A:96, A:100-A:251, A:256-A:269 (257)	1.22	9

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 3 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3721 atoms, of which 1839 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SERINE PROTEASE PB92.

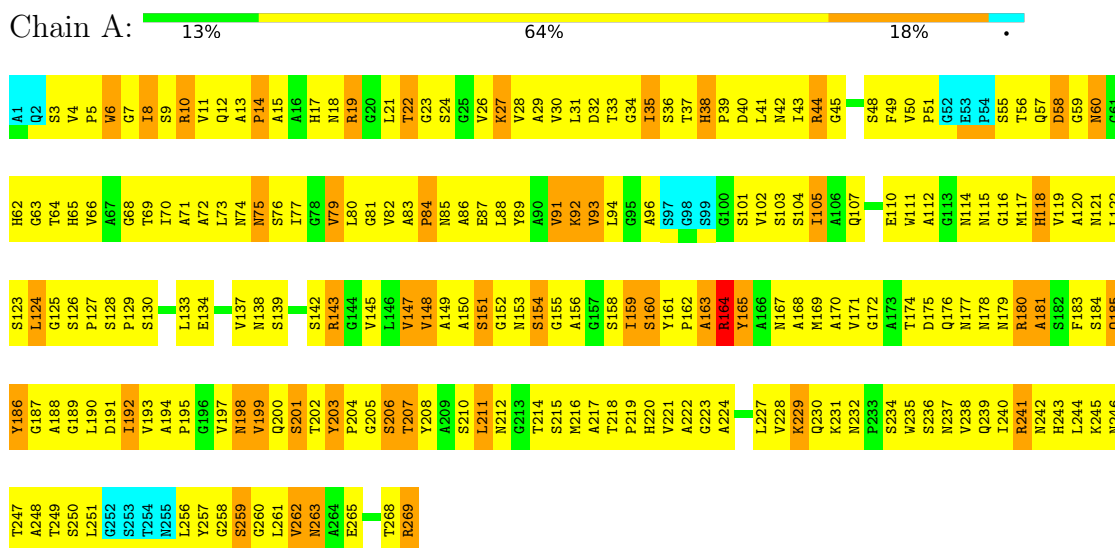
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	269	Total	C	H	N	O	S	0
			3721	1151	1839	348	380	3	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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: SERINE PROTEASE PB92

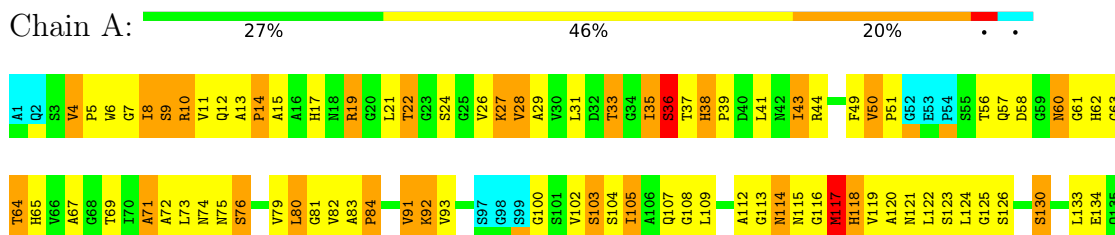


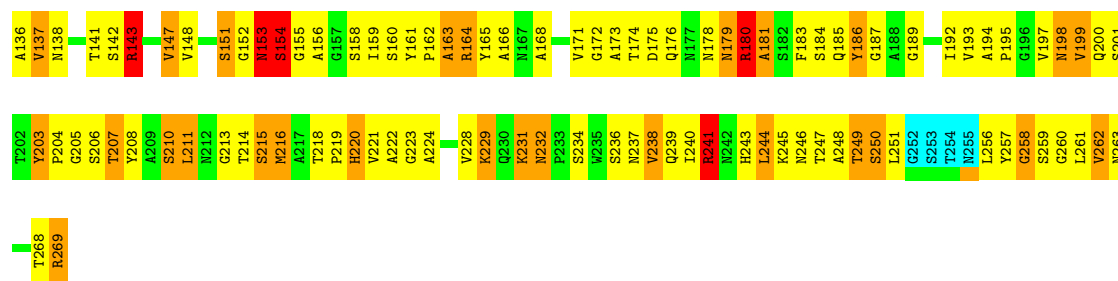
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

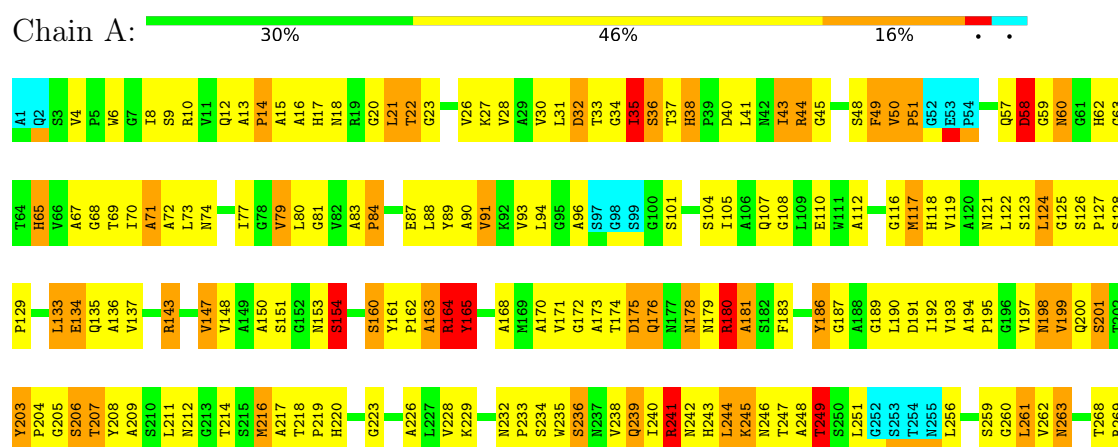
• Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92





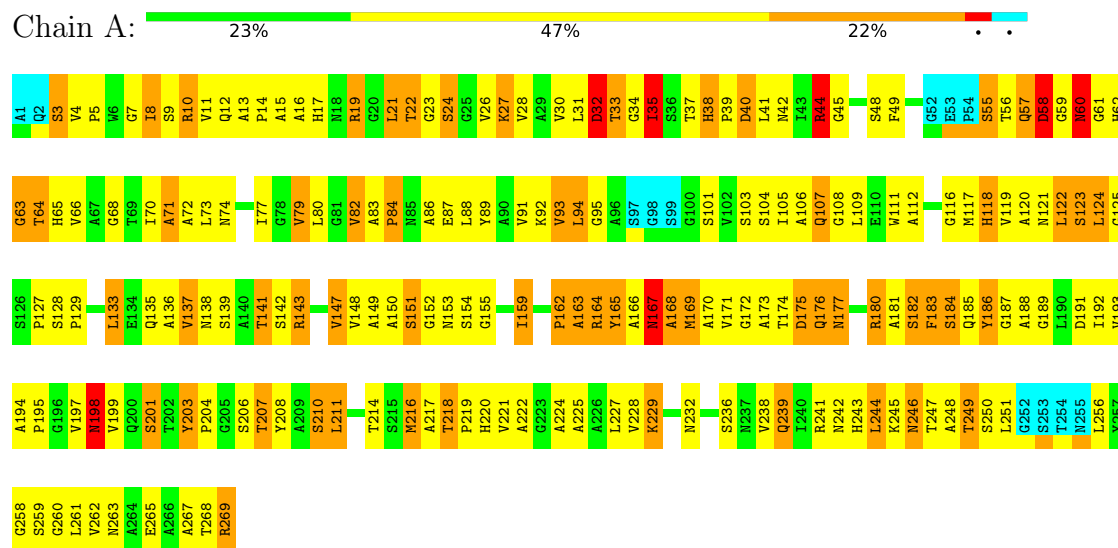
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



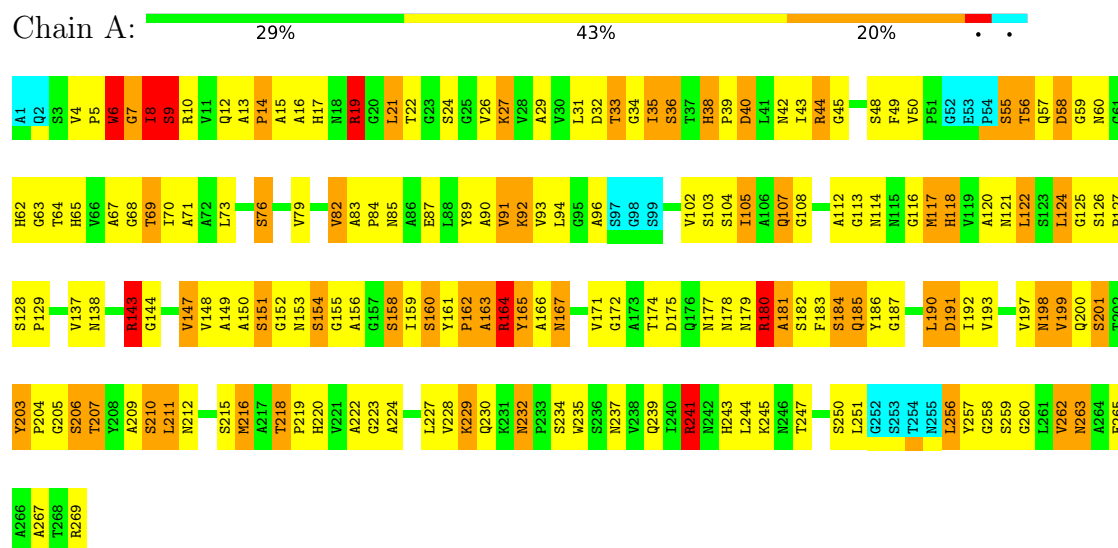
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



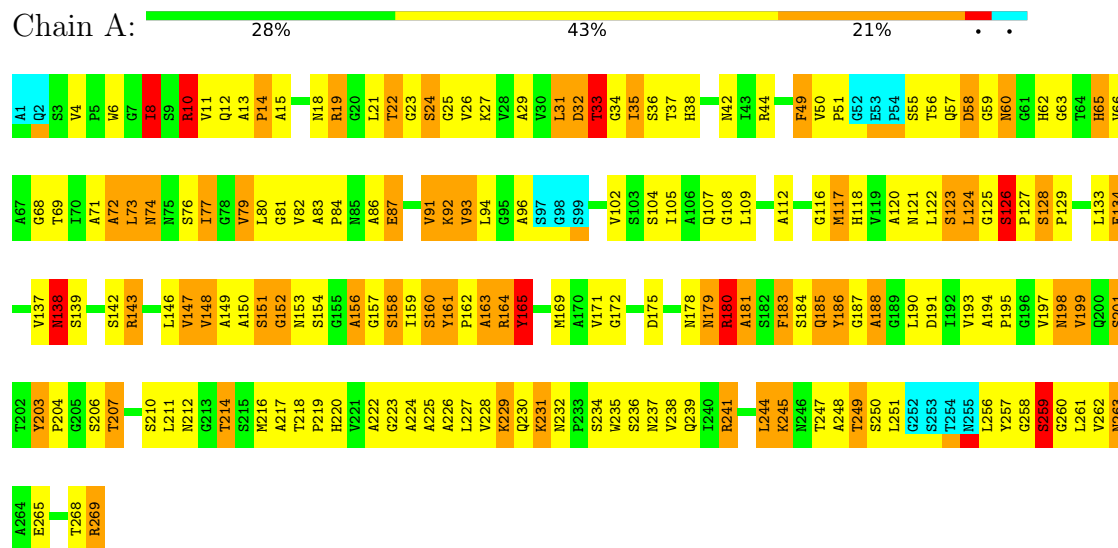
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.5 Score per residue for model 5

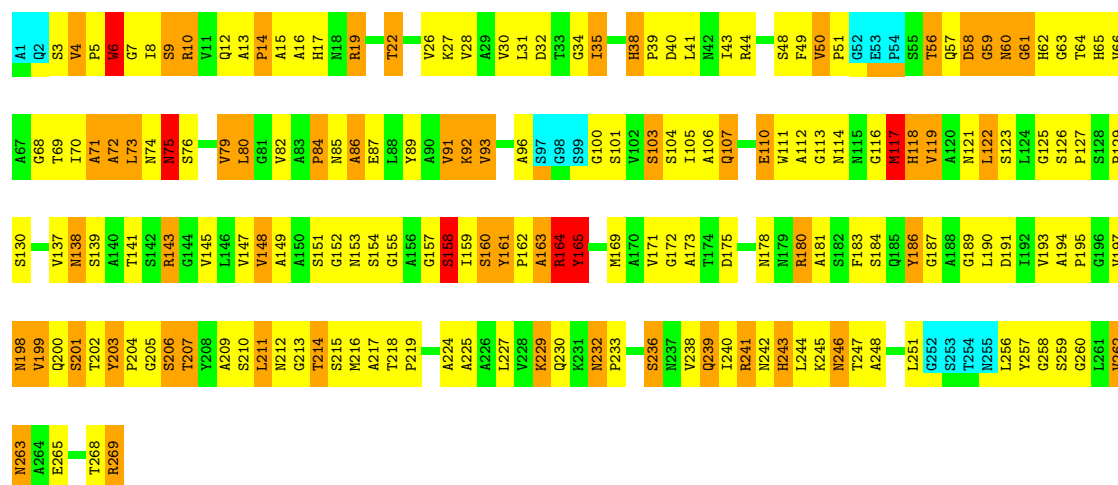
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

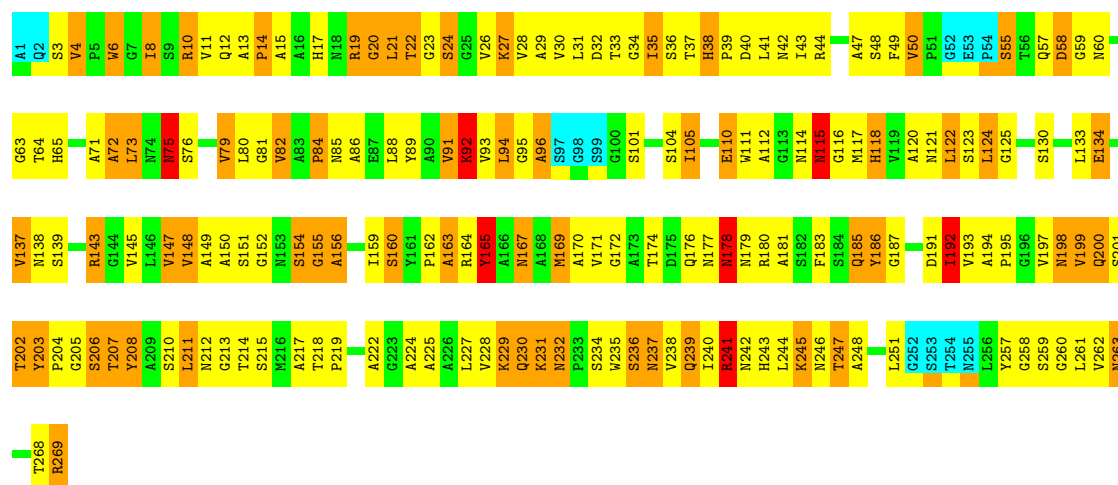




4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

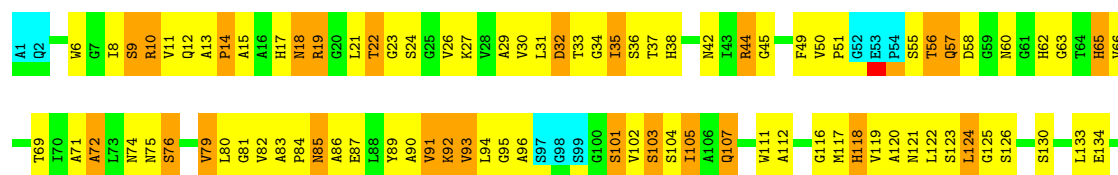
Chain A: 27% 42% 23%

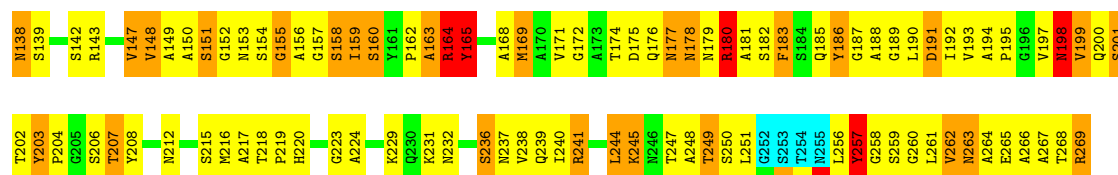


4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

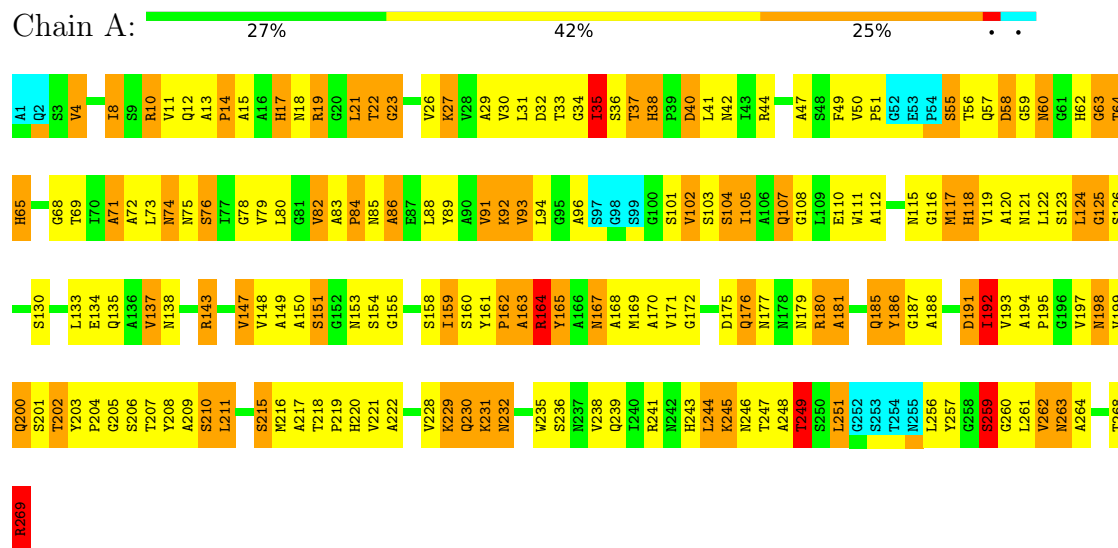
Chain A: 27% 48% 19%





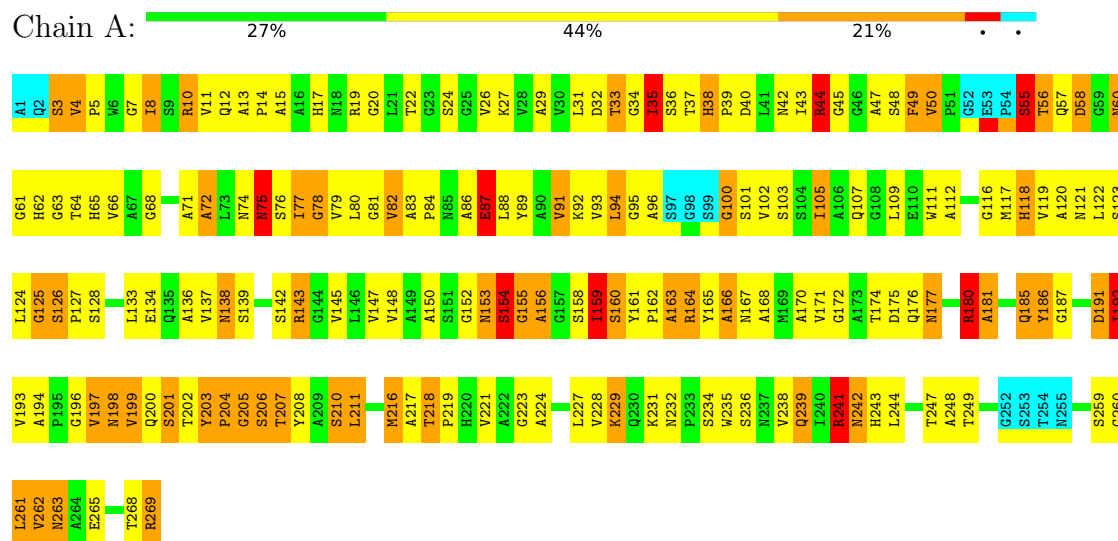
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



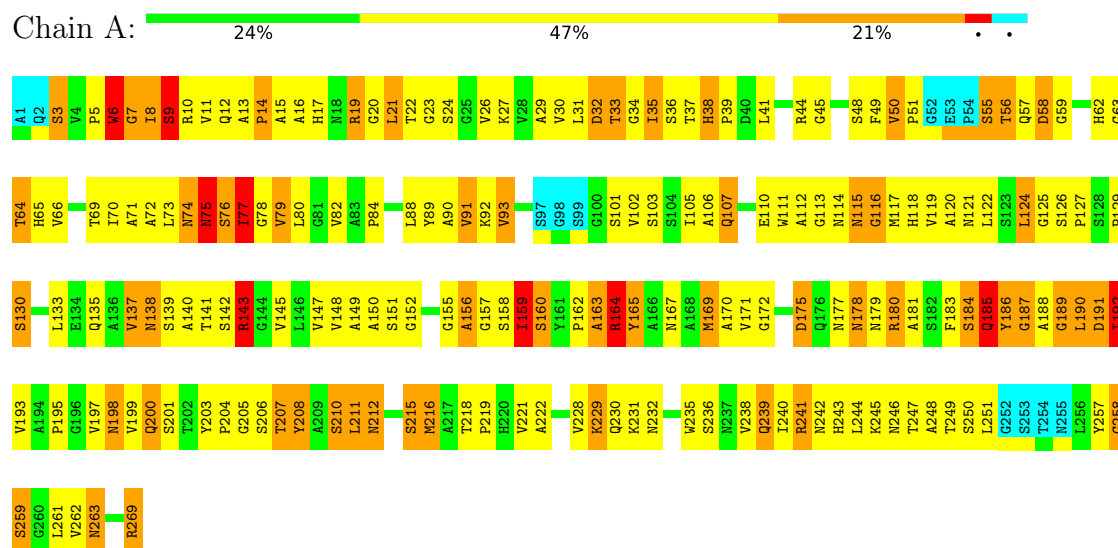
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



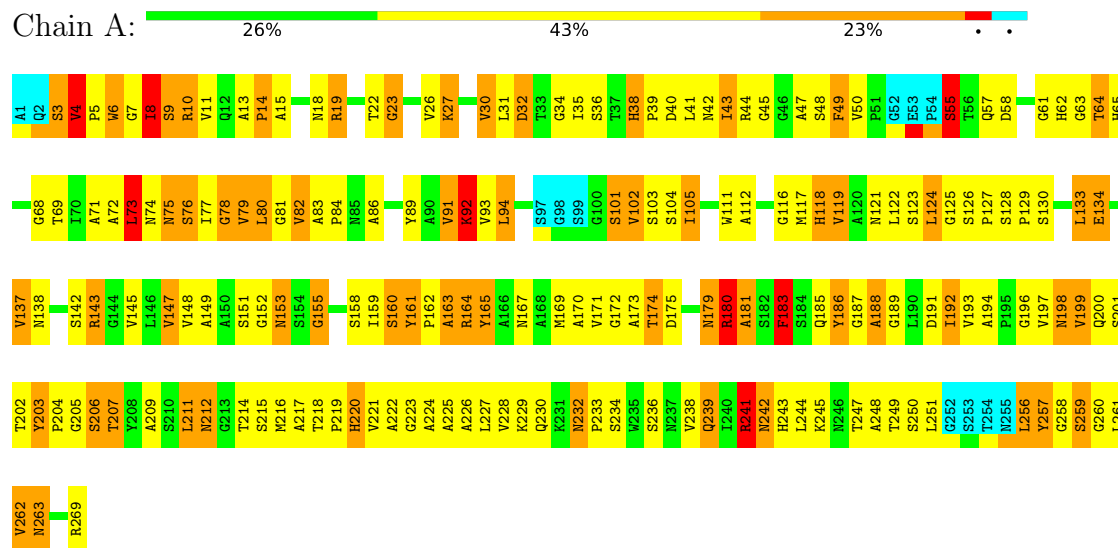
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.12 Score per residue for model 12

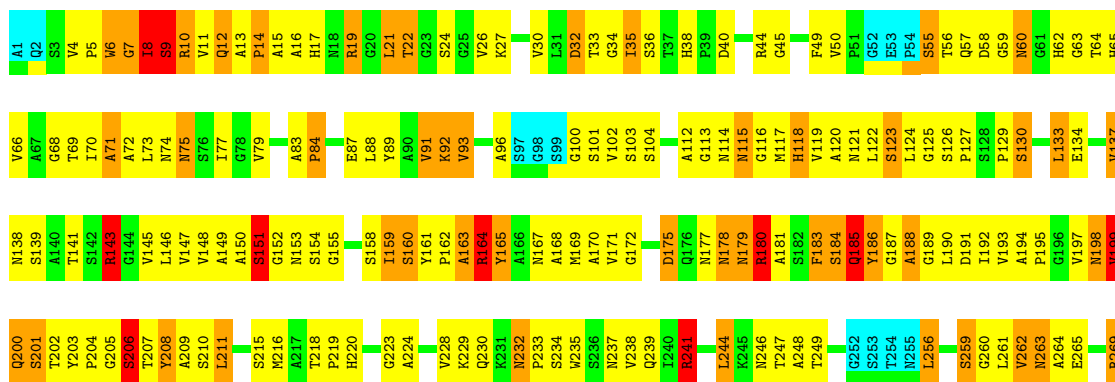
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

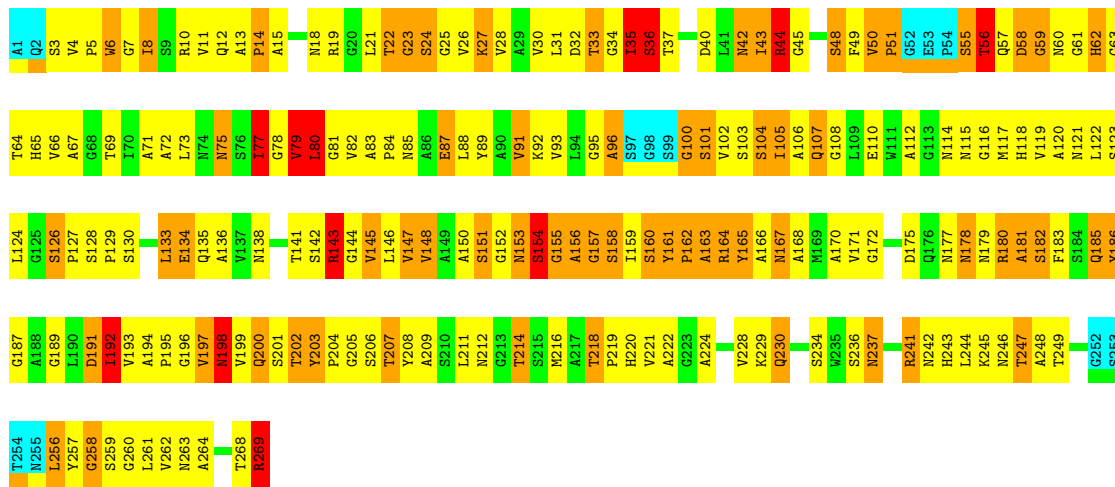




4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

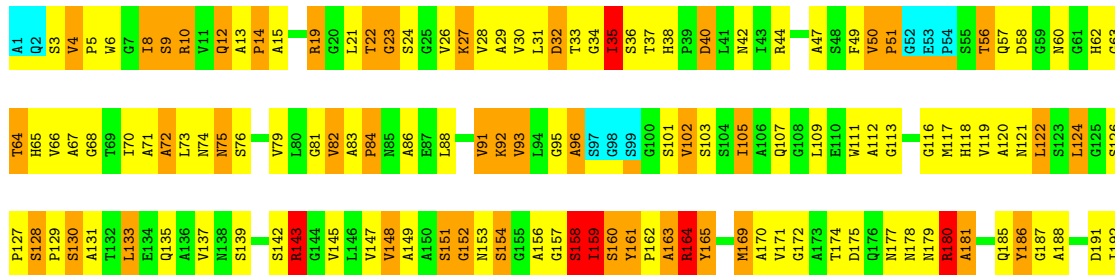
Chain A: 20% 47% 24%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

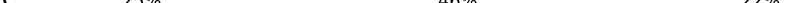
Chain A: 31% 42% 20%

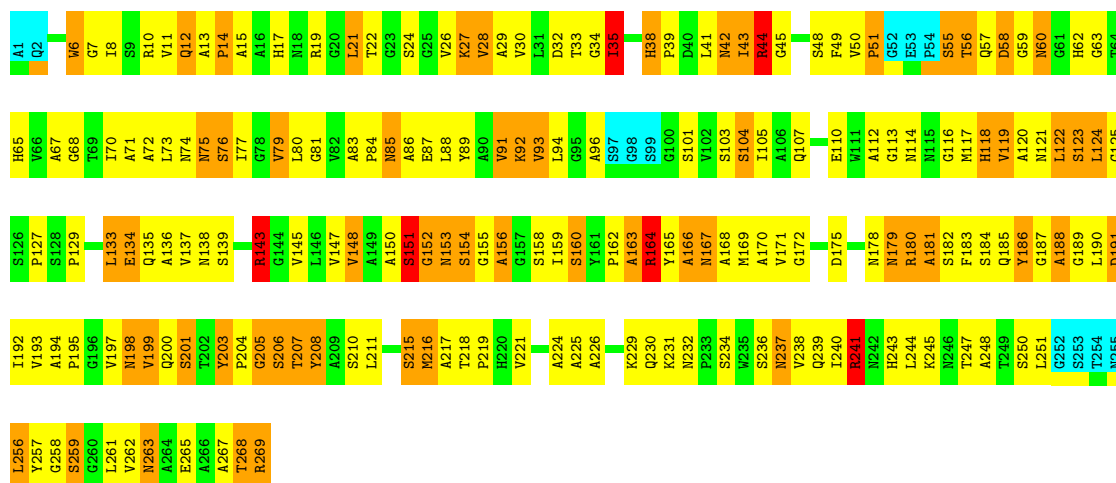




4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

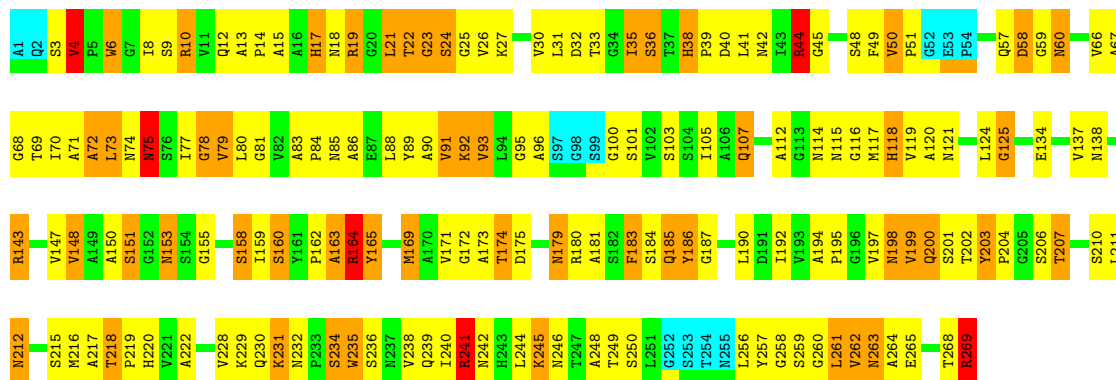
Chain A:  25% 46% 22% . .



4.2.17 Score per residue for model 17

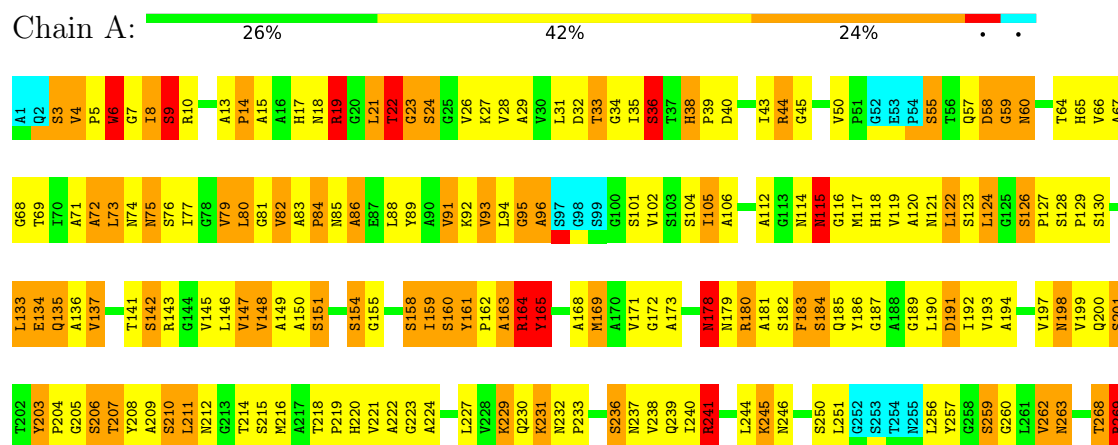
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

Chain A: 32% 42% 19% . .



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DGSA*.

Of the 20 calculated structures, 18 were deposited, based on the following criterion: *NO NOE AND H-BOND VIOLATIONS* > 0.5 Å.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
X-PLOR	structure solution	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.49±0.01	0±0/1840 (0.0± 0.0%)	1.27±0.01	1±1/2514 (0.1± 0.0%)
All	All	1.49	4/33120 (0.0%)	1.27	26/45252 (0.1%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	7.4±0.9
All	All	0	133

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	100	GLY	N-CA	5.73	1.49	1.44	13	3
1	A	95	GLY	N-CA	5.20	1.49	1.44	3	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	138	ASN	N-CA-C	-6.35	104.36	111.28	16	13
1	A	23	GLY	N-CA-C	-5.67	108.11	115.59	11	8
1	A	96	ALA	N-CA-C	-5.45	107.01	113.38	18	1
1	A	157	GLY	N-CA-C	-5.40	107.53	115.30	14	1
1	A	161	TYR	N-CA-C	-5.25	103.46	110.07	6	1
1	A	189	GLY	N-CA-C	-5.20	108.89	115.08	11	1
1	A	102	VAL	N-CA-C	-5.01	106.48	113.00	5	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	10	ARG	Sidechain	17
1	A	19	ARG	Sidechain	17
1	A	143	ARG	Sidechain	17
1	A	164	ARG	Sidechain	17
1	A	269	ARG	Sidechain	17
1	A	44	ARG	Sidechain	16
1	A	180	ARG	Sidechain	16
1	A	241	ARG	Sidechain	16

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	1807	1774	1774	211±21
All	All	32526	31932	31932	3795

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 59.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:HG21	1.01	1.28	3	10
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:N	0.99	1.70	7	12
1:A:20:GLY:C	1:A:21:LEU:HD13	0.99	1.83	7	1
1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:HD13	0.98	1.82	7	4
1:A:186:TYR:CD2	1:A:190:LEU:HD22	0.97	1.94	5	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:HB1	0.96	1.34	1	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:HG22	0.94	1.62	18	3
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HD22	0.94	1.35	5	5
1:A:256:LEU:HD13	1:A:257:TYR:N	0.93	1.78	12	3
1:A:194:ALA:HB3	1:A:217:ALA:HB1	0.91	1.38	7	10
1:A:210:SER:O	1:A:211:LEU:HD23	0.91	1.65	7	4
1:A:121:ASN:O	1:A:122:LEU:HD12	0.90	1.66	18	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HE2	0.90	1.92	8	7
1:A:137:VAL:HG23	1:A:167:ASN:HA	0.90	1.40	3	1
1:A:160:SER:O	1:A:163:ALA:HB3	0.89	1.67	16	15
1:A:179:ASN:ND2	1:A:193:VAL:HG21	0.89	1.83	4	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:HD21	0.89	2.03	13	2
1:A:221:VAL:HG22	1:A:262:VAL:HG21	0.89	1.42	1	4
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HE2	0.89	1.67	3	9
1:A:194:ALA:HB1	1:A:195:PRO:HD2	0.88	1.45	16	13
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HG23	0.88	1.68	16	1
1:A:210:SER:C	1:A:211:LEU:HD23	0.88	1.94	4	8
1:A:236:SER:O	1:A:240:ILE:HD12	0.88	1.69	6	3
1:A:102:VAL:HG21	1:A:130:SER:OG	0.87	1.69	12	5
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CE1	0.87	2.03	12	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:88:LEU:HD21	0.85	1.47	13	4
1:A:198:ASN:O	1:A:199:VAL:HG13	0.85	1.70	13	14
1:A:109:LEU:HD22	1:A:167:ASN:ND2	0.85	1.86	3	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:HG23	0.85	1.70	14	4
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:CB	0.85	2.01	2	3
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:CG2	0.84	2.02	13	3
1:A:118:HIS:ND1	1:A:119:VAL:HG23	0.84	1.87	18	3
1:A:120:ALA:HB3	1:A:147:VAL:HG13	0.84	1.49	9	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:167:ASN:CG	0.83	1.99	3	1
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:OD1	0.83	1.72	4	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:64:THR:HG22	0.83	1.72	12	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:91:VAL:HG12	0.82	2.09	8	7
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:OD1	0.82	1.74	12	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:HA	0.82	1.50	16	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:91:VAL:HG12	0.81	2.10	11	6
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:HG23	0.81	2.09	1	8
1:A:94:LEU:CD1	1:A:124:LEU:HD22	0.81	2.06	16	2
1:A:94:LEU:HD21	1:A:124:LEU:HD13	0.81	1.50	10	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:HG13	0.81	1.73	7	3
1:A:32:ASP:HA	1:A:94:LEU:HD11	0.81	1.53	3	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CZ	0.80	2.10	12	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:122:LEU:N	0.80	1.92	15	3
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:O	0.80	1.75	12	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:OD2	0.80	1.75	13	1
1:A:73:LEU:HD23	1:A:84:PRO:O	0.79	1.78	9	2
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:HB3	0.79	1.55	14	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:HD11	0.79	1.53	18	3
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:HG23	0.79	1.78	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:HD22	1:A:122:LEU:H	0.78	1.36	6	4
1:A:251:LEU:HD22	1:A:257:TYR:CD2	0.78	2.14	16	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:HD12	0.78	1.54	15	4
1:A:21:LEU:CD1	1:A:268:THR:HG21	0.78	2.09	2	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:93:VAL:O	0.78	1.79	10	2
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:O	0.77	1.80	3	9
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD12	0.77	1.54	6	1
1:A:181:ALA:HB1	1:A:183:PHE:CE1	0.77	2.14	18	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:202:THR:HG21	0.77	1.56	7	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:190:LEU:HD13	0.76	1.53	13	1
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:HG22	0.76	1.80	13	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:N	0.76	1.96	7	2
1:A:162:PRO:O	1:A:164:ARG:N	0.76	2.19	17	18
1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:HD12	0.76	2.05	12	10
1:A:216:MET:HE3	1:A:216:MET:N	0.76	1.96	16	1
1:A:194:ALA:HB1	1:A:195:PRO:CD	0.76	2.11	16	11
1:A:124:LEU:N	1:A:124:LEU:HD23	0.75	1.97	3	1
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:HB3	0.75	1.57	8	5
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD13	0.75	1.57	3	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:N	0.75	1.96	3	4
1:A:121:ASN:HD22	1:A:148:VAL:HG13	0.75	1.39	18	4
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:C	0.75	2.06	6	4
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:HD22	0.75	1.40	7	1
1:A:251:LEU:HD22	1:A:257:TYR:CE2	0.75	2.16	16	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:83:ALA:HB3	0.75	1.58	9	3
1:A:93:VAL:HG22	1:A:104:SER:O	0.74	1.82	16	2
1:A:211:LEU:HD12	1:A:216:MET:HE3	0.74	1.55	18	3
1:A:8:ILE:HG22	1:A:9:SER:N	0.74	1.94	12	1
1:A:159:ILE:HG23	1:A:186:TYR:O	0.74	1.81	18	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:CE1	0.74	2.17	9	5
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:CG	0.74	2.08	14	3
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:N	0.74	1.97	7	1
1:A:207:THR:HG23	1:A:208:TYR:N	0.73	1.97	16	5
1:A:251:LEU:HD12	1:A:251:LEU:N	0.73	1.98	8	4
1:A:21:LEU:HD23	1:A:227:LEU:HD22	0.73	1.59	18	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:95:GLY:CA	0.73	2.13	10	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PRO:HD2	0.73	1.61	5	5
1:A:3:SER:C	1:A:4:VAL:HG22	0.73	2.08	17	3
1:A:30:VAL:HG11	1:A:35:ILE:HD11	0.73	1.61	6	3
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:ND2	0.73	1.99	14	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:HA3	0.73	1.61	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:CD1	0.73	2.12	18	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:N	0.73	1.99	10	4
1:A:105:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD11	0.73	1.59	12	1
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:C	0.73	2.09	12	1
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:N	0.72	1.99	7	1
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HG	0.72	2.01	8	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:HB2	0.72	1.60	6	2
1:A:94:LEU:HD13	1:A:124:LEU:HD22	0.72	1.60	16	1
1:A:74:ASN:CG	1:A:80:LEU:HD22	0.72	2.10	17	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:33:THR:O	0.72	1.83	17	1
1:A:192:ILE:HD11	1:A:262:VAL:HG22	0.71	1.61	15	3
1:A:13:ALA:N	1:A:14:PRO:CD	0.71	2.53	1	18
1:A:199:VAL:HG21	1:A:216:MET:HB3	0.71	1.62	4	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:CG2	0.71	2.16	7	7
1:A:248:ALA:HB1	1:A:261:LEU:O	0.71	1.86	3	3
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:HG23	0.71	2.11	5	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:219:PRO:HG2	0.71	1.61	2	4
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:CG2	0.70	2.10	3	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:51:PRO:HD2	0.70	1.62	1	1
1:A:15:ALA:HB1	1:A:265:GLU:OE2	0.70	1.86	3	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:CG1	0.70	2.16	12	1
1:A:178:ASN:C	1:A:251:LEU:HD23	0.70	2.11	8	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:CD1	0.70	2.16	17	2
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:HG13	0.70	1.87	6	5
1:A:33:THR:HG23	1:A:95:GLY:HA2	0.70	1.63	10	1
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:CA	0.70	2.17	14	2
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:OE1	0.70	1.86	14	1
1:A:167:ASN:O	1:A:168:ALA:HB2	0.70	1.86	3	1
1:A:40:ASP:O	1:A:41:LEU:HD23	0.70	1.86	7	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:CG1	0.70	2.17	1	4
1:A:35:ILE:HD12	1:A:90:ALA:HB2	0.70	1.64	17	2
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:HD11	0.69	2.22	7	2
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:CB	0.69	2.40	2	4
1:A:33:THR:HG21	1:A:59:GLY:O	0.69	1.86	14	1
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:HD13	0.69	2.02	15	1
1:A:199:VAL:HG13	1:A:212:ASN:ND2	0.69	2.03	14	2
1:A:65:HIS:NE2	1:A:211:LEU:HD21	0.69	2.03	13	1
1:A:93:VAL:HG11	1:A:105:ILE:HG23	0.69	1.64	8	2
1:A:190:LEU:HD23	1:A:257:TYR:O	0.69	1.88	6	2
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:HE3	0.69	2.03	11	3
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:HG13	0.69	1.87	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:LEU:HD13	1:A:167:ASN:OD1	0.69	1.87	3	1
1:A:118:HIS:N	1:A:118:HIS:CD2	0.69	2.61	7	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:169:MET:O	0.69	1.87	8	1
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:CD	0.68	2.13	14	1
1:A:169:MET:HE3	1:A:241:ARG:NH2	0.68	2.03	17	1
1:A:165:TYR:O	1:A:166:ALA:HB3	0.68	1.88	1	4
1:A:123:SER:C	1:A:124:LEU:HD23	0.68	2.13	3	4
1:A:21:LEU:HD23	1:A:231:LYS:HG3	0.68	1.64	11	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:CG2	0.68	2.77	10	11
1:A:33:THR:HG22	1:A:95:GLY:C	0.68	2.14	15	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:91:VAL:CG2	0.67	2.19	16	9
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HG13	0.67	2.04	1	2
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:HD13	0.67	2.04	9	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:118:HIS:NE2	0.67	2.04	12	2
1:A:181:ALA:HB3	1:A:184:SER:CB	0.67	2.19	6	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:HB3	0.67	1.88	10	3
1:A:218:THR:N	1:A:219:PRO:CD	0.67	2.58	8	18
1:A:41:LEU:HD11	1:A:64:THR:HG23	0.67	1.67	9	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:CA	0.67	2.20	16	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:93:VAL:O	0.67	1.88	18	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HE3	0.67	2.13	2	2
1:A:33:THR:HG21	1:A:60:ASN:HB2	0.67	1.65	3	2
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:HD21	0.67	1.67	11	2
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:CB	0.67	2.43	15	17
1:A:27:LYS:HZ3	1:A:117:MET:HG3	0.67	1.49	16	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:HG12	0.67	1.66	12	2
1:A:199:VAL:HG22	1:A:211:LEU:O	0.67	1.89	1	2
1:A:49:PHE:HE2	1:A:91:VAL:HG12	0.66	1.49	14	4
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HE3	0.66	1.90	9	2
1:A:181:ALA:HB3	1:A:184:SER:HB3	0.66	1.66	6	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:129:PRO:HA	0.66	1.66	14	1
1:A:38:HIS:HB2	1:A:41:LEU:HD12	0.66	1.67	9	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD12	0.66	1.66	15	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:HG22	0.66	2.05	6	6
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:HG11	0.66	1.68	18	3
1:A:13:ALA:N	1:A:14:PRO:HD2	0.66	2.06	10	18
1:A:124:LEU:C	1:A:124:LEU:HD12	0.66	2.15	1	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:H	0.66	1.49	1	6
1:A:186:TYR:CG	1:A:187:GLY:N	0.66	2.64	7	15
1:A:187:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD13	0.66	2.21	13	1
1:A:4:VAL:N	1:A:5:PRO:HD3	0.65	2.05	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:HB2	0.65	1.90	15	2
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CE	0.65	2.79	8	1
1:A:174:THR:CA	1:A:181:ALA:HB2	0.65	2.21	12	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CD	0.65	2.80	11	3
1:A:225:ALA:HB2	1:A:244:LEU:HD12	0.65	1.68	3	2
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:CG	0.65	2.17	12	1
1:A:68:GLY:CA	1:A:72:ALA:HB2	0.65	2.22	3	7
1:A:10:ARG:HB3	1:A:261:LEU:HD21	0.65	1.67	8	2
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:HA3	0.65	1.67	8	14
1:A:41:LEU:O	1:A:73:LEU:HD12	0.65	1.92	6	1
1:A:89:TYR:CE2	1:A:117:MET:HE3	0.65	2.26	10	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:HA	0.65	1.67	7	3
1:A:257:TYR:CG	1:A:257:TYR:O	0.65	2.50	8	1
1:A:60:ASN:HB2	1:A:96:ALA:HB1	0.65	1.69	18	1
1:A:79:VAL:HG21	1:A:201:SER:HA	0.65	1.69	1	2
1:A:122:LEU:CD1	1:A:147:VAL:HG12	0.65	2.22	12	2
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:O	0.65	2.15	17	14
1:A:186:TYR:CG	1:A:256:LEU:CD2	0.65	2.80	2	1
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:HB3	0.65	1.92	13	4
1:A:33:THR:HG23	1:A:60:ASN:CG	0.64	2.17	1	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:118:HIS:NE2	0.64	2.08	14	3
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:HD22	0.64	1.69	14	1
1:A:8:ILE:O	1:A:11:VAL:HG22	0.64	1.93	12	3
1:A:32:ASP:CA	1:A:94:LEU:HD11	0.64	2.21	3	1
1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LEU:HD21	0.64	1.67	4	1
1:A:71:ALA:O	1:A:72:ALA:C	0.64	2.40	17	17
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:HB2	0.64	1.92	15	5
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:CB	0.64	2.45	2	9
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:HD2	0.64	2.07	5	2
1:A:149:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HA	0.64	1.70	8	1
1:A:117:MET:HE3	1:A:117:MET:H	0.64	1.51	11	3
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:CG2	0.64	2.42	18	1
1:A:49:PHE:HZ	1:A:91:VAL:HG12	0.64	1.52	5	2
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.23	4	3
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.81	6	3
1:A:27:LYS:O	1:A:118:HIS:CD2	0.63	2.51	18	2
1:A:148:VAL:HG13	1:A:148:VAL:O	0.63	1.93	1	2
1:A:178:ASN:CG	1:A:251:LEU:HD23	0.63	2.18	11	1
1:A:3:SER:HB2	1:A:80:LEU:N	0.63	2.09	6	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.24	7	13
1:A:150:ALA:HB2	1:A:218:THR:OG1	0.63	1.94	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:ILE:CG2	1:A:88:LEU:HD21	0.63	2.23	13	3
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:O	0.63	1.93	5	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:256:LEU:CD2	0.63	2.81	6	1
1:A:162:PRO:O	1:A:163:ALA:C	0.63	2.42	10	17
1:A:83:ALA:HB1	1:A:86:ALA:HB2	0.63	1.71	17	8
1:A:33:THR:HG23	1:A:60:ASN:ND2	0.62	2.09	1	1
1:A:162:PRO:CG	1:A:165:TYR:CZ	0.62	2.82	18	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:216:MET:O	0.62	1.94	1	1
1:A:183:PHE:C	1:A:183:PHE:CD1	0.62	2.77	5	4
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:CA	0.62	2.24	10	4
1:A:8:ILE:HG22	1:A:8:ILE:O	0.62	1.94	13	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:256:LEU:CD2	0.62	2.82	2	1
1:A:35:ILE:HG13	1:A:90:ALA:HB2	0.62	1.70	4	2
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:CB	0.62	2.46	12	2
1:A:196:GLY:O	1:A:197:VAL:C	0.62	2.42	10	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:118:HIS:CE1	0.62	2.83	11	2
1:A:199:VAL:CG2	1:A:212:ASN:ND2	0.62	2.63	14	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:91:VAL:HG21	0.62	1.70	16	11
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD22	0.62	2.09	3	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:CG2	0.62	2.63	8	4
1:A:4:VAL:N	1:A:5:PRO:CD	0.62	2.62	10	4
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:CB	0.62	2.48	10	3
1:A:47:ALA:HB3	1:A:49:PHE:CZ	0.62	2.29	15	4
1:A:50:VAL:N	1:A:51:PRO:CD	0.62	2.62	2	3
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HG12	0.62	1.95	3	1
1:A:149:ALA:HB2	1:A:162:PRO:HG2	0.62	1.71	7	5
1:A:154:SER:O	1:A:156:ALA:N	0.62	2.33	7	2
1:A:218:THR:N	1:A:219:PRO:HD2	0.62	2.09	17	18
1:A:224:ALA:HA	1:A:227:LEU:HD12	0.62	1.72	10	1
1:A:190:LEU:HD21	1:A:192:ILE:O	0.61	1.94	4	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:ILE:C	0.61	2.42	11	1
1:A:192:ILE:CD1	1:A:262:VAL:HG22	0.61	2.25	15	3
1:A:232:ASN:CG	1:A:232:ASN:O	0.61	2.42	9	1
1:A:30:VAL:O	1:A:30:VAL:HG12	0.61	1.95	9	2
1:A:68:GLY:HA2	1:A:72:ALA:HB2	0.61	1.70	3	3
1:A:183:PHE:CD1	1:A:183:PHE:N	0.61	2.65	3	4
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD12	0.61	2.25	12	1
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:HG22	0.61	1.94	15	5
1:A:6:TRP:CE2	1:A:197:VAL:O	0.61	2.53	12	1
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CE1	0.61	2.83	18	1
1:A:179:ASN:ND2	1:A:257:TYR:CD1	0.61	2.69	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:GLY:O	1:A:62:HIS:C	0.61	2.43	14	4
1:A:112:ALA:CA	1:A:116:GLY:CA	0.61	2.78	4	4
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:CD	0.61	2.62	5	4
1:A:229:LYS:HE3	1:A:240:ILE:HD11	0.61	1.71	16	1
1:A:161:TYR:C	1:A:161:TYR:CD1	0.61	2.78	18	1
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:CD2	0.61	2.24	9	2
1:A:64:THR:HG22	1:A:202:THR:OG1	0.61	1.94	14	2
1:A:111:TRP:CE2	1:A:115:ASN:O	0.61	2.54	11	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:88:LEU:HD12	0.61	2.25	16	2
1:A:154:SER:O	1:A:155:GLY:C	0.61	2.43	7	2
1:A:72:ALA:CB	1:A:79:VAL:HG12	0.61	2.25	12	1
1:A:256:LEU:HD13	1:A:257:TYR:CA	0.61	2.25	12	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:HG21	0.61	1.72	6	5
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HG12	0.61	2.10	12	4
1:A:30:VAL:CG2	1:A:88:LEU:HD22	0.60	2.26	15	3
1:A:93:VAL:HG22	1:A:105:ILE:HA	0.60	1.71	5	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:CA	0.60	2.25	7	1
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:HD12	0.60	1.96	14	3
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD22	0.60	2.26	17	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:HB2	0.60	1.94	7	2
1:A:159:ILE:HD11	1:A:188:ALA:O	0.60	1.96	9	1
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:HG22	0.60	1.71	12	3
1:A:111:TRP:CE3	1:A:116:GLY:HA3	0.60	2.32	7	3
1:A:256:LEU:O	1:A:258:GLY:N	0.60	2.34	8	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:124:LEU:HD11	0.60	2.25	18	1
1:A:64:THR:O	1:A:67:ALA:HB3	0.60	1.96	14	3
1:A:126:SER:CB	1:A:127:PRO:CD	0.60	2.79	5	3
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:CB	0.60	2.25	7	2
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:C	0.60	2.44	11	4
1:A:6:TRP:CG	1:A:198:ASN:O	0.60	2.55	18	3
1:A:192:ILE:HG22	1:A:259:SER:OG	0.60	1.96	11	1
1:A:192:ILE:HD13	1:A:262:VAL:HG13	0.60	1.72	17	2
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CZ3	0.60	2.68	13	1
1:A:192:ILE:HD11	1:A:261:LEU:O	0.60	1.97	2	2
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CB	0.60	2.49	6	8
1:A:245:LYS:HG3	1:A:246:ASN:N	0.60	2.12	3	2
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:HG3	0.60	1.73	11	1
1:A:27:LYS:HE3	1:A:89:TYR:CD1	0.60	2.30	16	1
1:A:89:TYR:CG	1:A:117:MET:SD	0.60	2.95	7	3
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:CD1	0.60	2.84	7	1
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD22	0.60	1.73	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:VAL:HG12	1:A:227:LEU:HD11	0.60	1.74	4	7
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:CB	0.60	2.50	16	3
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD22	0.60	1.74	17	1
1:A:148:VAL:HG11	1:A:222:ALA:HB2	0.60	1.74	1	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:HB2	0.60	1.97	17	2
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:HA2	0.60	2.30	6	4
1:A:174:THR:HG1	1:A:194:ALA:C	0.60	2.04	12	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.59	2.50	9	3
1:A:153:ASN:O	1:A:154:SER:CB	0.59	2.49	4	6
1:A:178:ASN:OD1	1:A:251:LEU:HD23	0.59	1.96	11	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:CB	0.59	2.50	15	7
1:A:3:SER:C	1:A:4:VAL:CG2	0.59	2.75	6	3
1:A:50:VAL:HG21	1:A:94:LEU:O	0.59	1.96	8	2
1:A:12:GLN:NE2	1:A:16:ALA:N	0.59	2.50	13	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:N	0.59	2.65	15	1
1:A:203:TYR:CG	1:A:204:PRO:HD2	0.59	2.33	10	18
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:CB	0.59	2.27	7	3
1:A:193:VAL:CG2	1:A:257:TYR:CZ	0.59	2.84	12	1
1:A:70:ILE:HB	1:A:88:LEU:HD11	0.59	1.72	16	1
1:A:38:HIS:CE1	1:A:203:TYR:O	0.59	2.55	4	2
1:A:26:VAL:CG1	1:A:118:HIS:NE2	0.59	2.66	11	4
1:A:72:ALA:CB	1:A:79:VAL:CG1	0.59	2.81	12	1
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:CG2	0.59	2.50	13	1
1:A:112:ALA:O	1:A:145:VAL:HG21	0.59	1.97	15	1
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:CB	0.59	2.28	5	1
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:O	0.59	1.97	7	2
1:A:178:ASN:O	1:A:251:LEU:HD23	0.59	1.97	8	1
1:A:257:TYR:N	1:A:257:TYR:CD1	0.59	2.68	15	1
1:A:165:TYR:O	1:A:166:ALA:CB	0.59	2.50	3	4
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:CA	0.59	2.86	2	2
1:A:137:VAL:HG21	1:A:165:TYR:CZ	0.59	2.33	18	1
1:A:148:VAL:O	1:A:148:VAL:HG12	0.59	1.95	17	2
1:A:21:LEU:CD2	1:A:21:LEU:N	0.59	2.66	13	1
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:CB	0.59	2.81	2	3
1:A:8:ILE:CG2	1:A:8:ILE:O	0.59	2.51	5	2
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:CB	0.59	2.51	15	3
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CG	0.59	2.56	9	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CG1	0.59	2.51	11	12
1:A:245:LYS:CG	1:A:246:ASN:N	0.58	2.66	3	2
1:A:111:TRP:O	1:A:111:TRP:CE3	0.58	2.56	12	3
1:A:118:HIS:NE2	1:A:229:LYS:CD	0.58	2.66	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CZ	0.58	2.86	18	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:OE1	0.58	2.55	1	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:HB2	0.58	2.13	5	2
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:C	0.58	2.46	14	4
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:ILE:HD11	0.58	1.72	6	3
1:A:199:VAL:CG1	1:A:212:ASN:ND2	0.58	2.67	14	2
1:A:105:ILE:HD13	1:A:124:LEU:HD11	0.58	1.75	10	1
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:OE1	0.58	2.56	1	1
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:SD	0.58	2.76	9	3
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CD2	0.58	2.33	11	2
1:A:79:VAL:HG11	1:A:201:SER:HA	0.58	1.75	2	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:187:GLY:N	0.58	2.71	4	6
1:A:236:SER:O	1:A:237:ASN:C	0.58	2.47	7	2
1:A:87:GLU:OE1	1:A:87:GLU:O	0.58	2.20	14	1
1:A:173:ALA:HB3	1:A:184:SER:HB2	0.58	1.76	17	2
1:A:35:ILE:CD1	1:A:67:ALA:HB2	0.58	2.29	2	2
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CE1	0.58	2.57	1	3
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:HG23	0.58	1.97	5	2
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:HB3	0.58	2.14	13	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:187:GLY:N	0.58	2.72	15	6
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CE3	0.58	2.70	9	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CD1	0.58	2.67	10	1
1:A:42:ASN:OD1	1:A:73:LEU:HD11	0.58	1.98	14	2
1:A:161:TYR:N	1:A:161:TYR:CD1	0.58	2.70	15	1
1:A:171:VAL:CG1	1:A:172:GLY:N	0.58	2.67	7	18
1:A:89:TYR:CD2	1:A:117:MET:SD	0.58	2.97	11	3
1:A:146:LEU:HD12	1:A:237:ASN:OD1	0.58	1.97	5	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:HB2	0.58	1.99	14	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:244:LEU:HD23	0.58	1.75	13	2
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:HD3	0.58	2.14	18	2
1:A:173:ALA:HB2	1:A:214:THR:HG23	0.58	1.74	3	1
1:A:118:HIS:C	1:A:118:HIS:CD2	0.58	2.80	8	2
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:CD1	0.58	2.87	14	1
1:A:38:HIS:CG	1:A:39:PRO:HD2	0.57	2.34	12	10
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:HB3	0.57	1.98	9	9
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:CB	0.57	2.86	9	5
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:HB2	0.57	1.75	16	2
1:A:137:VAL:HG13	1:A:167:ASN:CG	0.57	2.23	9	2
1:A:33:THR:CG2	1:A:95:GLY:C	0.57	2.77	15	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:94:LEU:N	0.57	2.14	3	2
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:CG	0.57	2.24	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:GLU:CG	1:A:165:TYR:CE2	0.57	2.87	12	1
1:A:203:TYR:N	1:A:207:THR:O	0.57	2.37	13	1
1:A:119:VAL:HG12	1:A:120:ALA:N	0.57	2.14	1	6
1:A:198:ASN:O	1:A:199:VAL:CG1	0.57	2.52	16	14
1:A:258:GLY:O	1:A:259:SER:CB	0.57	2.52	3	3
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:OE1	0.57	2.23	14	1
1:A:20:GLY:C	1:A:21:LEU:HD23	0.57	2.25	2	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CE2	0.57	2.34	2	1
1:A:74:ASN:HD22	1:A:80:LEU:HD11	0.57	1.57	5	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:148:VAL:O	0.57	1.98	5	3
1:A:66:VAL:HG22	1:A:219:PRO:HG3	0.57	1.75	8	2
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:CD2	0.57	2.67	12	2
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:HB2	0.57	1.99	11	2
1:A:192:ILE:HD12	1:A:259:SER:HB2	0.57	1.75	8	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:OD1	0.57	1.98	12	1
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:ND2	0.57	2.52	17	1
1:A:8:ILE:CD1	1:A:220:HIS:NE2	0.57	2.67	3	3
1:A:64:THR:CG2	1:A:65:HIS:N	0.57	2.68	11	4
1:A:49:PHE:CZ	1:A:108:GLY:HA2	0.57	2.35	5	2
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:C	0.57	2.47	12	2
1:A:40:ASP:HB3	1:A:77:ILE:HD11	0.57	1.74	12	1
1:A:102:VAL:HG11	1:A:130:SER:CB	0.57	2.29	1	2
1:A:151:SER:CB	1:A:171:VAL:O	0.57	2.53	3	9
1:A:215:SER:O	1:A:219:PRO:CD	0.57	2.52	1	2
1:A:137:VAL:HG23	1:A:167:ASN:CA	0.57	2.23	3	1
1:A:17:HIS:CD2	1:A:17:HIS:N	0.57	2.73	9	3
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:HA	0.57	1.77	15	1
1:A:8:ILE:CG1	1:A:220:HIS:NE2	0.57	2.68	17	1
1:A:223:GLY:O	1:A:226:ALA:HB3	0.57	2.00	5	3
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HD3	0.57	2.34	18	5
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HE3	0.57	2.33	8	1
1:A:221:VAL:HG22	1:A:262:VAL:HG11	0.57	1.75	11	2
1:A:127:PRO:C	1:A:129:PRO:HD3	0.57	2.24	3	3
1:A:30:VAL:HG12	1:A:30:VAL:O	0.57	1.98	6	2
1:A:159:ILE:HD11	1:A:190:LEU:N	0.57	2.15	8	1
1:A:109:LEU:HB3	1:A:136:ALA:HB1	0.57	1.77	10	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:256:LEU:O	0.57	2.00	16	2
1:A:124:LEU:HD12	1:A:125:GLY:N	0.57	2.14	1	1
1:A:161:TYR:CE1	1:A:164:ARG:CB	0.57	2.88	6	2
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:OG	0.57	2.58	8	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:188:ALA:HB2	0.57	2.35	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLY:O	1:A:9:SER:N	0.57	2.38	18	3
1:A:27:LYS:CA	1:A:27:LYS:HE2	0.57	2.30	16	1
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:HB3	0.56	2.30	6	9
1:A:117:MET:SD	1:A:117:MET:N	0.56	2.78	5	4
1:A:183:PHE:CG	1:A:183:PHE:O	0.56	2.58	17	2
1:A:125:GLY:CA	1:A:161:TYR:O	0.56	2.53	10	1
1:A:6:TRP:C	1:A:6:TRP:CD1	0.56	2.82	13	1
1:A:5:PRO:HD2	1:A:8:ILE:HB	0.56	1.75	18	1
1:A:17:HIS:ND1	1:A:80:LEU:HD21	0.56	2.15	1	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:94:LEU:H	0.56	1.58	3	1
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:N	0.56	2.37	15	2
1:A:41:LEU:O	1:A:42:ASN:C	0.56	2.48	12	1
1:A:44:ARG:O	1:A:89:TYR:CE1	0.56	2.57	4	1
1:A:23:GLY:O	1:A:25:GLY:N	0.56	2.39	17	3
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:CB	0.56	2.83	7	2
1:A:8:ILE:CG2	1:A:9:SER:N	0.56	2.68	15	2
1:A:102:VAL:CG2	1:A:130:SER:OG	0.56	2.54	18	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:90:ALA:HB2	0.56	2.30	2	2
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:CG2	0.56	2.54	14	2
1:A:257:TYR:O	1:A:257:TYR:CD1	0.56	2.59	8	2
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HB2	0.56	2.35	7	12
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:O	0.56	2.39	1	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:256:LEU:HD22	0.56	2.35	6	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:HB2	0.56	1.78	12	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:93:VAL:HG21	0.56	2.19	3	3
1:A:89:TYR:CE1	1:A:117:MET:SD	0.56	2.99	13	3
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:CD1	0.56	2.67	8	2
1:A:27:LYS:HD2	1:A:89:TYR:CE1	0.56	2.36	16	1
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CG	0.56	2.35	17	2
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:CG1	0.56	2.31	1	2
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:CG	0.56	2.53	17	6
1:A:112:ALA:CA	1:A:116:GLY:HA3	0.56	2.30	1	10
1:A:257:TYR:CD1	1:A:257:TYR:C	0.56	2.83	8	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:149:ALA:HB2	0.56	1.78	15	1
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CD2	0.56	2.59	7	6
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:CA	0.56	2.84	4	3
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:O	0.56	2.24	4	3
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:CG	0.56	2.54	9	2
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:HB2	0.56	2.36	6	4
1:A:36:SER:O	1:A:37:THR:C	0.56	2.47	9	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:43:ILE:O	0.56	1.99	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:HG22	0.56	2.36	16	2
1:A:49:PHE:N	1:A:49:PHE:CD1	0.56	2.74	7	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:67:ALA:HB2	0.55	1.78	2	1
1:A:229:LYS:O	1:A:233:PRO:N	0.55	2.39	6	5
1:A:199:VAL:CG2	1:A:212:ASN:CG	0.55	2.79	14	2
1:A:33:THR:CG2	1:A:59:GLY:O	0.55	2.55	14	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:CB	0.55	2.53	3	1
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:C	0.55	2.26	3	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:9:SER:OG	0.55	2.02	6	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:183:PHE:CD2	0.55	2.59	6	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:268:THR:HG21	0.55	2.32	16	1
1:A:162:PRO:HG3	1:A:165:TYR:CZ	0.55	2.37	18	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LYS:N	0.55	2.16	6	15
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HB	0.55	2.16	8	6
1:A:8:ILE:HG23	1:A:8:ILE:O	0.55	2.01	14	1
1:A:148:VAL:O	1:A:148:VAL:CG1	0.55	2.54	5	3
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:C	0.55	2.49	7	9
1:A:8:ILE:HD13	1:A:8:ILE:N	0.55	2.16	4	1
1:A:179:ASN:CG	1:A:257:TYR:CD1	0.55	2.84	4	1
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:CG1	0.55	2.54	13	4
1:A:125:GLY:O	1:A:126:SER:CB	0.55	2.54	10	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:SD	0.55	2.42	12	2
1:A:167:ASN:C	1:A:167:ASN:ND2	0.55	2.65	14	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:HD23	0.55	2.36	18	1
1:A:91:VAL:O	1:A:93:VAL:N	0.55	2.39	1	6
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:HA3	0.55	2.30	1	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:193:VAL:HG23	0.55	2.31	8	1
1:A:64:THR:HG23	1:A:65:HIS:H	0.55	1.61	12	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:104:SER:HB3	0.55	2.30	14	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:7:GLY:N	0.55	2.75	16	3
1:A:203:TYR:CB	1:A:207:THR:O	0.55	2.55	17	10
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:N	0.55	2.15	2	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:SER:CB	0.55	2.55	11	5
1:A:263:ASN:N	1:A:263:ASN:OD1	0.55	2.38	9	2
1:A:193:VAL:CG2	1:A:257:TYR:OH	0.55	2.55	12	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:268:THR:HG21	0.55	1.79	16	1
1:A:127:PRO:C	1:A:129:PRO:CD	0.55	2.80	3	2
1:A:225:ALA:HB2	1:A:244:LEU:CD1	0.55	2.32	3	2
1:A:12:GLN:HE21	1:A:15:ALA:HB3	0.55	1.61	13	1
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:HA2	0.55	1.79	14	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:CB	0.55	2.54	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:TYR:O	1:A:258:GLY:C	0.55	2.49	11	3
1:A:247:THR:O	1:A:248:ALA:C	0.55	2.50	16	11
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CG	0.55	2.90	3	1
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASN:CB	0.55	2.53	4	2
1:A:43:ILE:CG2	1:A:44:ARG:N	0.55	2.70	18	2
1:A:194:ALA:CB	1:A:195:PRO:CD	0.55	2.81	16	10
1:A:63:GLY:O	1:A:64:THR:C	0.55	2.50	12	9
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:CE	0.55	2.55	16	6
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:CB	0.55	2.55	10	3
1:A:122:LEU:CD1	1:A:147:VAL:CG1	0.55	2.84	1	1
1:A:199:VAL:HG23	1:A:199:VAL:O	0.55	2.01	9	8
1:A:8:ILE:O	1:A:8:ILE:HG23	0.55	2.01	5	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:133:LEU:HD12	0.55	1.78	13	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:120:ALA:N	0.54	2.70	18	4
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:CG	0.54	2.56	7	5
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:CG	0.54	2.55	13	2
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:HB3	0.54	2.02	5	2
1:A:249:THR:OG1	1:A:263:ASN:ND2	0.54	2.40	9	3
1:A:251:LEU:HD22	1:A:251:LEU:H	0.54	1.61	9	1
1:A:187:GLY:O	1:A:190:LEU:N	0.54	2.40	13	1
1:A:129:PRO:HB2	1:A:161:TYR:CE1	0.54	2.37	18	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:HB3	0.54	2.37	6	9
1:A:28:VAL:HG22	1:A:119:VAL:HB	0.54	1.78	2	3
1:A:159:ILE:HD12	1:A:170:ALA:CB	0.54	2.31	3	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:C	0.54	2.51	7	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:245:LYS:CE	0.54	2.55	7	1
1:A:116:GLY:CA	1:A:117:MET:HE2	0.54	2.32	12	3
1:A:203:TYR:CD1	1:A:209:ALA:HB3	0.54	2.37	9	1
1:A:62:HIS:CE1	1:A:215:SER:OG	0.54	2.61	11	1
1:A:35:ILE:HG23	1:A:35:ILE:O	0.54	2.02	1	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:51:PRO:HD3	0.54	2.32	6	3
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:CE	0.54	2.80	9	4
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:CG	0.54	2.81	13	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:179:ASN:CG	0.54	2.80	12	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:OD1	0.54	2.40	12	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:VAL:CG2	0.54	2.80	14	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:O	0.54	2.25	1	4
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:C	0.54	2.50	13	4
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:C	0.54	2.27	7	1
1:A:203:TYR:CB	1:A:204:PRO:HD2	0.54	2.33	10	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CB	0.54	2.56	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ALA:O	1:A:73:LEU:C	0.54	2.51	12	9
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:CG2	0.54	2.56	6	4
1:A:38:HIS:CD2	1:A:39:PRO:HD2	0.54	2.38	3	1
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:CG1	0.54	2.55	6	2
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:O	0.54	2.55	11	2
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:HB3	0.54	2.00	8	2
1:A:257:TYR:CE2	1:A:260:GLY:HA2	0.54	2.38	8	1
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:CD	0.54	2.55	11	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:HD11	0.54	1.78	17	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:104:SER:CB	0.54	2.85	14	3
1:A:30:VAL:HG23	1:A:89:TYR:O	0.54	2.03	3	1
1:A:256:LEU:C	1:A:256:LEU:HD12	0.54	2.28	8	1
1:A:36:SER:O	1:A:38:HIS:N	0.54	2.41	9	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:208:TYR:CE2	0.54	2.91	14	1
1:A:118:HIS:HD1	1:A:119:VAL:HG23	0.54	1.62	18	1
1:A:22:THR:C	1:A:24:SER:N	0.54	2.65	5	9
1:A:30:VAL:CG2	1:A:89:TYR:O	0.54	2.56	3	1
1:A:32:ASP:C	1:A:94:LEU:CD1	0.54	2.81	3	1
1:A:187:GLY:O	1:A:189:GLY:N	0.54	2.41	13	4
1:A:23:GLY:O	1:A:24:SER:C	0.54	2.51	17	3
1:A:37:THR:O	1:A:37:THR:HG23	0.54	2.01	9	1
1:A:200:GLN:CG	1:A:210:SER:OG	0.54	2.55	10	1
1:A:94:LEU:O	1:A:95:GLY:O	0.54	2.25	18	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:83:ALA:O	0.54	2.56	4	3
1:A:251:LEU:HD22	1:A:260:GLY:HA2	0.54	1.79	9	1
1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:OE1	0.54	2.54	14	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:218:THR:HG23	0.54	1.78	14	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:HA	0.54	2.33	15	1
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CG	0.54	2.90	17	1
1:A:207:THR:OG1	1:A:208:TYR:N	0.54	2.40	2	3
1:A:248:ALA:HB3	1:A:259:SER:CB	0.54	2.33	14	1
1:A:150:ALA:CB	1:A:218:THR:OG1	0.54	2.55	17	3
1:A:121:ASN:OD1	1:A:222:ALA:CB	0.54	2.56	15	5
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:HB3	0.54	2.33	6	1
1:A:192:ILE:CB	1:A:259:SER:OG	0.54	2.56	11	1
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD12	0.54	1.79	12	1
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:NE2	0.53	2.55	1	1
1:A:87:GLU:O	1:A:87:GLU:CG	0.53	2.56	8	2
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:C	0.53	2.28	17	2
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:CG1	0.53	2.55	17	3
1:A:30:VAL:CG1	1:A:32:ASP:OD2	0.53	2.56	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:GLY:O	1:A:65:HIS:N	0.53	2.41	9	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:OH	0.53	2.02	12	1
1:A:105:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD12	0.53	1.79	14	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:HG11	0.53	1.79	18	2
1:A:70:ILE:O	1:A:83:ALA:HB3	0.53	2.03	15	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:197:VAL:HB	0.53	2.37	11	2
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:N	0.53	2.41	4	2
1:A:41:LEU:O	1:A:43:ILE:CD1	0.53	2.56	12	1
1:A:17:HIS:NE2	1:A:82:VAL:O	0.53	2.39	1	7
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:CG	0.53	2.56	14	4
1:A:6:TRP:CB	1:A:198:ASN:O	0.53	2.56	4	1
1:A:126:SER:CB	1:A:127:PRO:HD2	0.53	2.33	5	3
1:A:191:ASP:C	1:A:192:ILE:CG2	0.53	2.82	7	4
1:A:204:PRO:O	1:A:205:GLY:C	0.53	2.50	16	4
1:A:8:ILE:HD12	1:A:8:ILE:H	0.53	1.64	11	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:61:GLY:CA	0.53	2.56	12	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:CG	0.53	2.56	1	2
1:A:197:VAL:N	1:A:212:ASN:OD1	0.53	2.42	12	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:ASN:CB	0.53	2.57	13	1
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:GLY:N	0.53	2.18	6	18
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:176:GLN:O	0.53	2.61	2	1
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:CB	0.53	2.56	3	4
1:A:5:PRO:O	1:A:6:TRP:C	0.53	2.50	12	5
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:CB	0.53	2.72	5	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:CB	0.53	2.57	10	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:ND2	0.53	2.72	12	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:THR:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:CB	0.53	2.34	2	3
1:A:256:LEU:C	1:A:256:LEU:HD13	0.53	2.28	2	1
1:A:91:VAL:O	1:A:92:LYS:C	0.53	2.51	13	15
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:N	0.53	2.18	7	1
1:A:269:ARG:OXT	1:A:269:ARG:CG	0.53	2.56	9	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:SD	0.53	2.91	11	5
1:A:192:ILE:HD12	1:A:248:ALA:HB1	0.53	1.80	2	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:CA	0.53	2.56	14	3
1:A:172:GLY:HA3	1:A:193:VAL:HG12	0.53	1.80	16	3
1:A:179:ASN:OD1	1:A:257:TYR:CE1	0.53	2.61	12	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:CG1	0.53	2.56	18	2
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CD1	0.53	2.62	4	1
1:A:256:LEU:C	1:A:256:LEU:CD1	0.53	2.80	12	2
1:A:180:ARG:O	1:A:180:ARG:CG	0.53	2.56	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:CD1	0.53	2.57	11	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:HB2	0.53	2.03	12	1
1:A:160:SER:O	1:A:163:ALA:CB	0.53	2.55	15	4
1:A:248:ALA:CB	1:A:261:LEU:O	0.53	2.55	3	1
1:A:38:HIS:NE2	1:A:203:TYR:O	0.53	2.42	12	2
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CD1	0.53	2.39	4	3
1:A:146:LEU:CD1	1:A:237:ASN:OD1	0.53	2.57	5	1
1:A:24:SER:OG	1:A:85:ASN:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CZ2	0.53	2.62	17	1
1:A:107:GLN:OE1	1:A:107:GLN:C	0.53	2.52	1	1
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:HB2	0.53	2.04	6	7
1:A:124:LEU:N	1:A:124:LEU:CD2	0.53	2.69	3	1
1:A:48:SER:HB2	1:A:92:LYS:CE	0.53	2.34	11	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:HG22	0.53	2.04	14	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:250:SER:N	0.52	2.19	11	4
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CE2	0.52	2.39	8	7
1:A:237:ASN:OD1	1:A:238:VAL:HG23	0.52	2.03	8	1
1:A:8:ILE:O	1:A:8:ILE:CG2	0.52	2.57	14	2
1:A:27:LYS:CE	1:A:89:TYR:CD1	0.52	2.91	16	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:C	0.52	2.52	4	2
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:HA3	0.52	2.40	5	2
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:CB	0.52	2.57	4	5
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CD1	0.52	2.57	4	3
1:A:249:THR:CG2	1:A:250:SER:N	0.52	2.72	17	4
1:A:212:ASN:CG	1:A:213:GLY:N	0.52	2.68	7	1
1:A:180:ARG:CD	1:A:257:TYR:HB2	0.52	2.34	8	1
1:A:183:PHE:O	1:A:184:SER:O	0.52	2.28	13	1
1:A:228:VAL:CG2	1:A:244:LEU:HD23	0.52	2.33	13	1
1:A:42:ASN:O	1:A:44:ARG:N	0.52	2.42	16	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:83:ALA:HB3	0.52	2.34	1	3
1:A:59:GLY:C	1:A:60:ASN:ND2	0.52	2.68	2	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:167:ASN:CG	0.52	2.79	3	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:CB	0.52	2.57	17	4
1:A:125:GLY:O	1:A:129:PRO:CD	0.52	2.57	5	1
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:N	0.52	2.72	6	2
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG12	0.52	2.04	10	3
1:A:122:LEU:CB	1:A:124:LEU:HD21	0.52	2.34	15	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:HG21	0.52	2.34	7	4
1:A:175:ASP:OD1	1:A:178:ASN:N	0.52	2.42	2	2
1:A:199:VAL:HG21	1:A:216:MET:CB	0.52	2.34	11	2
1:A:111:TRP:O	1:A:115:ASN:C	0.52	2.52	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:CG	0.52	2.52	15	3
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:CA	0.52	2.34	15	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:67:ALA:C	0.52	2.29	17	1
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD1	0.52	2.68	7	1
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLY:N	0.52	2.42	7	1
1:A:201:SER:O	1:A:208:TYR:CD2	0.52	2.63	8	1
1:A:170:ALA:HB3	1:A:190:LEU:HA	0.52	1.79	11	1
1:A:186:TYR:HE2	1:A:188:ALA:HB2	0.52	1.64	11	1
1:A:154:SER:N	1:A:185:GLN:OE1	0.52	2.43	18	2
1:A:27:LYS:HG3	1:A:87:GLU:OE2	0.52	2.05	14	1
1:A:61:GLY:O	1:A:63:GLY:N	0.52	2.43	14	1
1:A:17:HIS:N	1:A:17:HIS:CD2	0.52	2.76	18	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:CG1	0.52	2.57	3	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:104:SER:O	0.52	2.57	16	2
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD2	0.52	2.66	6	3
1:A:161:TYR:CE1	1:A:164:ARG:HB3	0.52	2.40	6	1
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:NZ	0.52	2.42	11	1
1:A:38:HIS:CB	1:A:39:PRO:CD	0.52	2.88	17	3
1:A:237:ASN:N	1:A:237:ASN:ND2	0.52	2.56	16	1
1:A:50:VAL:N	1:A:51:PRO:HD2	0.52	2.19	6	3
1:A:241:ARG:O	1:A:242:ASN:C	0.52	2.53	14	6
1:A:256:LEU:O	1:A:257:TYR:C	0.52	2.53	8	3
1:A:207:THR:CG2	1:A:208:TYR:N	0.52	2.67	9	2
1:A:32:ASP:OD1	1:A:33:THR:N	0.52	2.43	17	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:CB	0.52	2.58	18	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:CD	0.52	2.58	2	4
1:A:121:ASN:OD1	1:A:218:THR:CG2	0.52	2.58	10	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HG12	0.52	1.80	12	1
1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:OE1	0.52	2.43	12	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:CG	0.52	2.28	13	2
1:A:187:GLY:HA3	1:A:190:LEU:HD22	0.52	1.82	13	1
1:A:152:GLY:O	1:A:154:SER:N	0.52	2.43	16	2
1:A:119:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HB3	0.52	1.82	18	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HG2	0.52	2.05	8	3
1:A:71:ALA:O	1:A:73:LEU:N	0.52	2.43	18	2
1:A:72:ALA:HB3	1:A:80:LEU:C	0.52	2.29	7	2
1:A:194:ALA:CB	1:A:217:ALA:HB1	0.52	2.25	7	1
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CG	0.52	2.63	8	1
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:HG2	0.52	2.19	10	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HB	0.52	1.81	14	1
1:A:151:SER:CB	1:A:214:THR:HG21	0.52	2.34	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:VAL:HG13	1:A:105:ILE:HA	0.52	1.82	9	2
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:HB2	0.52	2.35	2	4
1:A:262:VAL:C	1:A:263:ASN:CG	0.52	2.78	11	9
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:HB2	0.52	2.40	4	2
1:A:35:ILE:HG12	1:A:67:ALA:HB2	0.52	1.79	14	1
1:A:55:SER:O	1:A:57:GLN:N	0.52	2.43	14	1
1:A:75:ASN:O	1:A:77:ILE:N	0.52	2.43	16	2
1:A:35:ILE:HG12	1:A:90:ALA:CB	0.51	2.35	2	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:202:THR:HG21	0.51	2.04	9	2
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:HB	0.51	1.81	1	1
1:A:183:PHE:O	1:A:184:SER:C	0.51	2.53	13	5
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:HG23	0.51	2.04	18	2
1:A:7:GLY:O	1:A:8:ILE:C	0.51	2.51	18	4
1:A:56:THR:CG2	1:A:56:THR:O	0.51	2.58	6	1
1:A:176:GLN:O	1:A:177:ASN:CG	0.51	2.53	10	1
1:A:185:GLN:N	1:A:185:GLN:OE1	0.51	2.43	10	1
1:A:204:PRO:O	1:A:206:SER:N	0.51	2.42	10	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:211:LEU:O	0.51	2.05	11	1
1:A:33:THR:OG1	1:A:96:ALA:N	0.51	2.43	13	1
1:A:213:GLY:N	1:A:216:MET:SD	0.51	2.83	1	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HG12	0.51	2.04	4	4
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:C	0.51	2.53	12	8
1:A:148:VAL:CG1	1:A:149:ALA:N	0.51	2.72	4	3
1:A:60:ASN:CG	1:A:61:GLY:N	0.51	2.68	6	1
1:A:148:VAL:CG2	1:A:169:MET:SD	0.51	2.99	12	1
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:CD1	0.51	2.73	15	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:67:ALA:HB2	0.51	2.35	1	1
1:A:89:TYR:CZ	1:A:117:MET:HE1	0.51	2.40	6	1
1:A:203:TYR:CG	1:A:209:ALA:HB2	0.51	2.40	6	2
1:A:256:LEU:CD1	1:A:257:TYR:N	0.51	2.64	12	2
1:A:231:LYS:C	1:A:232:ASN:CG	0.51	2.79	7	2
1:A:45:GLY:O	1:A:89:TYR:CD2	0.51	2.63	12	1
1:A:37:THR:HG23	1:A:37:THR:O	0.51	2.04	14	1
1:A:21:LEU:C	1:A:22:THR:HG22	0.51	2.30	17	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:93:VAL:O	0.51	2.58	7	2
1:A:171:VAL:CG2	1:A:221:VAL:HG21	0.51	2.36	10	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:C	0.51	2.52	11	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.51	2.44	14	3
1:A:79:VAL:HG22	1:A:208:TYR:CE2	0.51	2.40	14	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:N	0.51	2.44	2	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HD13	0.51	2.06	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:CG2	0.51	2.87	7	2
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:N	0.51	2.43	11	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:CA	0.51	2.89	15	1
1:A:212:ASN:OD1	1:A:212:ASN:N	0.51	2.43	17	2
1:A:8:ILE:HG13	1:A:220:HIS:NE2	0.51	2.20	17	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:168:ALA:HB3	0.51	1.82	18	1
1:A:151:SER:OG	1:A:152:GLY:N	0.51	2.43	1	3
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:OG1	0.51	2.28	3	1
1:A:27:LYS:HG2	1:A:89:TYR:CZ	0.51	2.41	4	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HG2	0.51	2.06	4	2
1:A:134:GLU:OE1	1:A:165:TYR:CE1	0.51	2.64	5	1
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:N	0.51	2.44	6	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:CE1	0.51	2.94	14	3
1:A:74:ASN:O	1:A:74:ASN:ND2	0.51	2.44	10	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HD2	0.51	2.41	13	2
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:HB2	0.51	2.03	4	2
1:A:179:ASN:HB3	1:A:257:TYR:CE1	0.51	2.40	4	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:O	0.51	2.29	5	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:260:GLY:O	0.51	2.59	5	4
1:A:180:ARG:N	1:A:257:TYR:OH	0.51	2.44	9	2
1:A:38:HIS:NE2	1:A:204:PRO:O	0.51	2.43	10	1
1:A:162:PRO:O	1:A:165:TYR:N	0.51	2.44	8	5
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:HB3	0.51	2.35	4	3
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:CG2	0.51	2.84	14	2
1:A:232:ASN:HB3	1:A:235:TRP:CD2	0.51	2.40	5	2
1:A:74:ASN:CG	1:A:75:ASN:N	0.51	2.69	6	1
1:A:208:TYR:N	1:A:208:TYR:CD1	0.51	2.73	10	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:CG	0.51	2.31	11	2
1:A:41:LEU:O	1:A:43:ILE:HD12	0.51	2.06	12	1
1:A:174:THR:HA	1:A:181:ALA:HB2	0.51	1.81	12	1
1:A:45:GLY:C	1:A:89:TYR:CD2	0.51	2.89	13	1
1:A:38:HIS:CB	1:A:39:PRO:HD2	0.51	2.36	17	2
1:A:137:VAL:HG21	1:A:165:TYR:CE1	0.51	2.41	18	1
1:A:104:SER:O	1:A:107:GLN:NE2	0.51	2.44	1	2
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:CG	0.51	2.54	3	3
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HG23	0.51	2.35	8	2
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:C	0.51	2.89	9	3
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:HB2	0.51	1.83	7	1
1:A:154:SER:C	1:A:185:GLN:HG2	0.51	2.31	7	1
1:A:159:ILE:HD11	1:A:189:GLY:C	0.51	2.30	8	1
1:A:171:VAL:HG22	1:A:221:VAL:HG21	0.51	1.82	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:CG1	0.51	2.36	12	1
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:CD1	0.51	2.59	14	1
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:CG	0.51	2.54	17	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:CG2	0.51	2.57	18	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:ARG:C	0.50	2.55	18	8
1:A:183:PHE:CE2	1:A:214:THR:OG1	0.50	2.63	2	1
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:CB	0.50	2.59	5	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:124:LEU:HD21	0.50	1.82	12	2
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASN:HB2	0.50	2.06	14	4
1:A:192:ILE:HG13	1:A:262:VAL:HG22	0.50	1.82	10	1
1:A:185:GLN:O	1:A:186:TYR:O	0.50	2.29	11	2
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:CD	0.50	2.54	14	1
1:A:174:THR:OG1	1:A:194:ALA:C	0.50	2.55	12	2
1:A:44:ARG:CD	1:A:87:GLU:OE1	0.50	2.59	2	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD1	0.50	2.66	3	4
1:A:153:ASN:CG	1:A:153:ASN:O	0.50	2.54	12	4
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:OE2	0.50	2.29	14	1
1:A:156:ALA:O	1:A:185:GLN:CD	0.50	2.55	16	2
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:HD12	0.50	2.21	17	1
1:A:162:PRO:CA	1:A:165:TYR:CD1	0.50	2.95	17	1
1:A:62:HIS:O	1:A:63:GLY:C	0.50	2.54	1	6
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:O	0.50	2.30	9	8
1:A:79:VAL:HG23	1:A:80:LEU:N	0.50	2.21	18	4
1:A:48:SER:OG	1:A:51:PRO:CG	0.50	2.59	6	1
1:A:76:SER:O	1:A:78:GLY:N	0.50	2.44	11	1
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD23	0.50	2.21	12	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:N	0.50	2.20	15	1
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CZ	0.50	2.41	17	1
1:A:215:SER:O	1:A:219:PRO:HD3	0.50	2.07	1	7
1:A:248:ALA:O	1:A:249:THR:C	0.50	2.55	3	6
1:A:192:ILE:CD1	1:A:248:ALA:HB1	0.50	2.36	2	1
1:A:32:ASP:O	1:A:33:THR:C	0.50	2.55	4	6
1:A:27:LYS:CE	1:A:87:GLU:HG3	0.50	2.37	6	1
1:A:151:SER:O	1:A:160:SER:OG	0.50	2.29	17	4
1:A:192:ILE:CG1	1:A:193:VAL:N	0.50	2.75	11	3
1:A:12:GLN:OE1	1:A:264:ALA:C	0.50	2.54	13	1
1:A:204:PRO:O	1:A:206:SER:OG	0.50	2.30	13	1
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CE2	0.50	2.42	17	1
1:A:34:GLY:O	1:A:64:THR:N	0.50	2.45	18	1
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:HA3	0.50	2.06	1	3
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:HB	0.50	1.83	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:248:ALA:CA	1:A:261:LEU:O	0.50	2.59	3	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:NE2	0.50	2.20	5	1
1:A:169:MET:HE2	1:A:191:ASP:OD2	0.50	2.07	5	1
1:A:261:LEU:HG	1:A:262:VAL:N	0.50	2.22	12	4
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:ND2	0.50	2.21	11	2
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:CB	0.50	2.60	12	1
1:A:174:THR:CG2	1:A:179:ASN:OD1	0.50	2.59	12	1
1:A:21:LEU:CD1	1:A:268:THR:CG2	0.50	2.86	2	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:HB2	0.50	2.42	8	3
1:A:189:GLY:O	1:A:190:LEU:C	0.50	2.54	18	4
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:ND2	0.50	2.56	10	2
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:HD3	0.50	2.06	11	1
1:A:258:GLY:C	1:A:259:SER:OG	0.50	2.55	5	2
1:A:48:SER:OG	1:A:51:PRO:CD	0.50	2.60	6	1
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CE	0.50	2.74	11	2
1:A:74:ASN:CG	1:A:74:ASN:O	0.50	2.54	9	1
1:A:14:PRO:O	1:A:15:ALA:C	0.50	2.55	4	17
1:A:49:PHE:O	1:A:50:VAL:C	0.50	2.55	17	11
1:A:49:PHE:HB3	1:A:107:GLN:NE2	0.50	2.22	2	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:N	0.50	2.45	2	2
1:A:154:SER:O	1:A:185:GLN:HG2	0.50	2.07	7	1
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:HD12	0.50	2.07	11	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:197:VAL:O	0.50	2.65	12	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:GLN:C	0.49	2.54	1	9
1:A:229:LYS:O	1:A:232:ASN:C	0.49	2.55	1	7
1:A:238:VAL:O	1:A:239:GLN:C	0.49	2.55	5	15
1:A:193:VAL:CG1	1:A:257:TYR:O	0.49	2.60	12	1
1:A:198:ASN:C	1:A:199:VAL:HG22	0.49	2.31	13	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:PRO:HD2	0.49	2.36	1	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HB2	0.49	1.84	4	1
1:A:126:SER:OG	1:A:127:PRO:CD	0.49	2.60	5	1
1:A:157:GLY:C	1:A:186:TYR:O	0.49	2.55	5	1
1:A:161:TYR:CD1	1:A:161:TYR:N	0.49	2.80	5	1
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:CG	0.49	2.55	11	3
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HB	0.49	2.08	6	4
1:A:74:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.49	2.45	6	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HD11	0.49	2.37	12	1
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CD1	0.49	2.95	17	1
1:A:243:HIS:O	1:A:246:ASN:ND2	0.49	2.45	3	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:HA	0.49	1.84	4	2
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:OG1	0.49	2.54	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:SER:OG	1:A:105:ILE:N	0.49	2.44	4	1
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLU:CD	0.49	2.55	6	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:NE2	0.49	2.45	9	1
1:A:83:ALA:CB	1:A:86:ALA:HB2	0.49	2.38	10	2
1:A:35:ILE:HG22	1:A:36:SER:N	0.49	2.22	13	1
1:A:101:SER:CB	1:A:104:SER:OG	0.49	2.60	14	1
1:A:8:ILE:HG23	1:A:9:SER:N	0.49	2.22	15	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:204:PRO:CB	0.49	2.61	16	1
1:A:59:GLY:C	1:A:60:ASN:CG	0.49	2.80	17	1
1:A:169:MET:HE3	1:A:241:ARG:HH22	0.49	1.68	17	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:CB	0.49	2.59	18	1
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:HG3	0.49	2.07	6	5
1:A:173:ALA:HA	1:A:194:ALA:O	0.49	2.07	18	2
1:A:35:ILE:HG23	1:A:64:THR:HA	0.49	1.83	13	2
1:A:203:TYR:CB	1:A:204:PRO:CD	0.49	2.90	10	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:GLN:O	0.49	2.30	13	1
1:A:7:GLY:O	1:A:220:HIS:NE2	0.49	2.46	14	1
1:A:224:ALA:HB1	1:A:264:ALA:HB2	0.49	1.83	14	1
1:A:145:VAL:O	1:A:147:VAL:CG2	0.49	2.61	18	1
1:A:263:ASN:OD1	1:A:263:ASN:N	0.49	2.46	18	1
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:HG2	0.49	2.42	2	2
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:HE3	0.49	2.37	2	1
1:A:22:THR:O	1:A:24:SER:N	0.49	2.46	5	5
1:A:241:ARG:O	1:A:243:HIS:N	0.49	2.45	12	3
1:A:47:ALA:HB3	1:A:49:PHE:CE1	0.49	2.42	7	2
1:A:72:ALA:O	1:A:80:LEU:HD12	0.49	2.07	17	2
1:A:211:LEU:CD1	1:A:216:MET:SD	0.49	3.00	11	1
1:A:134:GLU:OE1	1:A:134:GLU:CA	0.49	2.60	12	1
1:A:4:VAL:HG11	1:A:8:ILE:HG21	0.49	1.84	9	2
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:HB2	0.49	2.23	6	4
1:A:62:HIS:C	1:A:62:HIS:CD2	0.49	2.91	12	2
1:A:43:ILE:CD1	1:A:43:ILE:N	0.49	2.76	12	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:198:ASN:O	0.49	2.65	18	3
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CA	0.49	2.60	15	1
1:A:193:VAL:O	1:A:260:GLY:O	0.49	2.31	1	2
1:A:112:ALA:C	1:A:116:GLY:HA3	0.49	2.33	16	4
1:A:58:ASP:CG	1:A:59:GLY:N	0.49	2.70	6	3
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:CB	0.49	2.36	7	1
1:A:159:ILE:CD1	1:A:190:LEU:N	0.49	2.75	8	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:118:HIS:CE1	0.49	2.42	11	4
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CB	0.49	2.61	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:ASN:C	1:A:115:ASN:CG	0.49	2.80	11	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:219:PRO:CG	0.49	2.91	13	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:93:VAL:HG23	0.49	2.42	16	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:13:ALA:HB2	0.49	1.84	1	2
1:A:175:ASP:O	1:A:176:GLN:C	0.49	2.54	1	3
1:A:228:VAL:O	1:A:229:LYS:C	0.49	2.56	1	12
1:A:244:LEU:HA	1:A:247:THR:OG1	0.49	2.08	9	7
1:A:62:HIS:NE2	1:A:216:MET:CE	0.49	2.76	2	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:CB	0.49	2.96	6	4
1:A:94:LEU:HD21	1:A:124:LEU:HD22	0.49	1.83	12	2
1:A:212:ASN:O	1:A:212:ASN:ND2	0.49	2.46	6	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:15:ALA:HB3	0.49	2.08	8	1
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLY:C	0.49	2.56	10	1
1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:VAL:N	0.49	2.23	11	2
1:A:38:HIS:CG	1:A:39:PRO:CD	0.49	2.95	12	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HG11	0.49	1.82	12	1
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CD1	0.49	2.42	18	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:5:PRO:HD2	0.49	1.84	1	1
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:HG2	0.49	2.08	15	4
1:A:173:ALA:O	1:A:174:THR:HG23	0.49	2.08	3	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:CB	0.49	2.38	4	2
1:A:35:ILE:CG1	1:A:90:ALA:CB	0.49	2.91	4	1
1:A:56:THR:O	1:A:56:THR:CG2	0.49	2.60	15	2
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:HG23	0.49	1.84	13	1
1:A:241:ARG:CZ	1:A:241:ARG:CB	0.49	2.90	13	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:268:THR:HG21	0.49	1.82	2	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:HA2	0.49	2.43	14	2
1:A:179:ASN:HD21	1:A:193:VAL:HG21	0.49	1.58	4	1
1:A:3:SER:OG	1:A:80:LEU:HB3	0.49	2.07	6	1
1:A:190:LEU:CD2	1:A:257:TYR:HA	0.49	2.38	8	1
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD13	0.49	2.38	11	1
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:C	0.49	2.71	13	1
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:HG12	0.49	1.85	18	1
1:A:190:LEU:O	1:A:191:ASP:C	0.48	2.56	2	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:O	0.48	2.30	14	6
1:A:170:ALA:HB3	1:A:189:GLY:O	0.48	2.08	3	1
1:A:158:SER:C	1:A:186:TYR:O	0.48	2.56	17	3
1:A:232:ASN:HB3	1:A:235:TRP:CG	0.48	2.43	5	1
1:A:111:TRP:CD2	1:A:111:TRP:O	0.48	2.66	10	2
1:A:251:LEU:HD11	1:A:261:LEU:CB	0.48	2.38	9	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:HD2	0.48	2.23	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:ILE:CG2	1:A:259:SER:OG	0.48	2.60	11	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HG2	0.48	2.32	1	5
1:A:151:SER:HB2	1:A:171:VAL:O	0.48	2.09	1	6
1:A:71:ALA:HB1	1:A:83:ALA:O	0.48	2.08	3	2
1:A:32:ASP:OD1	1:A:32:ASP:C	0.48	2.56	17	2
1:A:49:PHE:CE1	1:A:108:GLY:HA2	0.48	2.42	4	1
1:A:6:TRP:CH2	1:A:195:PRO:HB3	0.48	2.42	7	2
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD2	0.48	2.69	7	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:OG	0.48	2.43	8	1
1:A:150:ALA:HB1	1:A:215:SER:HA	0.48	1.84	8	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:OD1	0.48	2.31	16	1
1:A:251:LEU:CD2	1:A:257:TYR:CE2	0.48	2.95	16	1
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:OD1	0.48	2.31	1	1
1:A:133:LEU:O	1:A:136:ALA:HB3	0.48	2.07	14	4
1:A:118:HIS:CB	1:A:229:LYS:CD	0.48	2.91	5	1
1:A:126:SER:OG	1:A:127:PRO:HD2	0.48	2.07	5	2
1:A:237:ASN:OD1	1:A:237:ASN:C	0.48	2.56	5	1
1:A:85:ASN:O	1:A:86:ALA:O	0.48	2.32	9	3
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:ARG:N	0.48	2.22	7	2
1:A:11:VAL:HG11	1:A:220:HIS:HB3	0.48	1.84	13	1
1:A:153:ASN:C	1:A:153:ASN:OD1	0.48	2.56	16	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ASN:OD1	0.48	2.31	17	1
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:HB2	0.48	2.08	15	9
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:C	0.48	2.54	5	5
1:A:134:GLU:O	1:A:135:GLN:C	0.48	2.53	2	3
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:CG	0.48	2.56	3	1
1:A:251:LEU:HD13	1:A:260:GLY:HA2	0.48	1.86	3	1
1:A:262:VAL:C	1:A:263:ASN:OD1	0.48	2.56	7	3
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HE2	0.48	2.43	8	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:GLN:C	0.48	2.57	17	2
1:A:240:ILE:O	1:A:241:ARG:C	0.48	2.56	17	3
1:A:43:ILE:HD13	1:A:43:ILE:N	0.48	2.22	1	1
1:A:223:GLY:O	1:A:224:ALA:C	0.48	2.56	8	6
1:A:127:PRO:O	1:A:129:PRO:HD3	0.48	2.08	11	6
1:A:21:LEU:HD13	1:A:268:THR:HG21	0.48	1.84	3	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:108:GLY:CA	0.48	2.96	5	1
1:A:74:ASN:C	1:A:75:ASN:CG	0.48	2.79	6	1
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:HB2	0.48	2.08	9	4
1:A:6:TRP:O	1:A:7:GLY:C	0.48	2.57	11	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:HD11	0.48	2.43	14	1
1:A:249:THR:N	1:A:261:LEU:O	0.48	2.46	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:HB3	0.48	2.09	9	2
1:A:155:GLY:O	1:A:185:GLN:OE1	0.48	2.32	7	1
1:A:8:ILE:HA	1:A:11:VAL:HG22	0.48	1.84	10	1
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:HE3	0.48	2.39	11	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:214:THR:OG1	0.48	2.57	14	1
1:A:200:GLN:CD	1:A:200:GLN:O	0.48	2.55	14	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:C	0.48	2.56	4	4
1:A:174:THR:HG23	1:A:193:VAL:HB	0.48	1.85	4	1
1:A:186:TYR:HD2	1:A:190:LEU:HD22	0.48	1.55	5	1
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:HA3	0.48	2.44	6	2
1:A:31:LEU:C	1:A:32:ASP:OD1	0.48	2.57	11	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:CG	0.48	2.62	11	1
1:A:191:ASP:CG	1:A:192:ILE:HG23	0.48	2.34	11	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:263:ASN:CB	0.48	2.62	16	1
1:A:247:THR:OG1	1:A:248:ALA:N	0.48	2.47	16	1
1:A:162:PRO:HA	1:A:165:TYR:CD1	0.48	2.44	17	1
1:A:74:ASN:C	1:A:75:ASN:OD1	0.48	2.57	18	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:VAL:N	0.48	2.81	18	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:68:GLY:HA2	0.48	1.84	16	2
1:A:118:HIS:O	1:A:118:HIS:CD2	0.48	2.67	3	1
1:A:221:VAL:O	1:A:222:ALA:C	0.48	2.56	9	5
1:A:125:GLY:HA2	1:A:160:SER:CB	0.48	2.38	4	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:HB3	0.48	1.85	7	2
1:A:264:ALA:O	1:A:268:THR:HG23	0.48	2.08	8	2
1:A:120:ALA:CB	1:A:147:VAL:HG13	0.48	2.32	9	1
1:A:192:ILE:HG12	1:A:193:VAL:N	0.48	2.23	10	2
1:A:31:LEU:C	1:A:32:ASP:CG	0.48	2.81	11	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:80:LEU:HD11	0.48	2.08	16	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:200:GLN:C	0.48	2.57	17	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:219:PRO:HG2	0.48	2.38	5	6
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:OE1	0.48	2.47	8	2
1:A:10:ARG:HB3	1:A:261:LEU:CD2	0.48	2.39	5	1
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:OG1	0.48	2.29	5	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:177:ASN:OD1	0.48	2.57	8	1
1:A:178:ASN:CG	1:A:178:ASN:O	0.48	2.57	16	2
1:A:35:ILE:CG2	1:A:43:ILE:HD11	0.48	2.39	16	1
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:N	0.48	2.46	6	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:CB	0.48	2.92	7	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:245:LYS:HE2	0.48	2.09	7	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:ND2	0.48	2.23	12	1
1:A:192:ILE:HD11	1:A:248:ALA:CB	0.48	2.39	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:GLY:C	1:A:212:ASN:OD1	0.48	2.56	12	1
1:A:176:GLN:HG2	1:A:177:ASN:ND2	0.47	2.24	3	1
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:127:PRO:O	1:A:128:SER:C	0.47	2.55	15	2
1:A:152:GLY:CA	1:A:185:GLN:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:15:ALA:CB	0.47	2.62	8	1
1:A:150:ALA:N	1:A:218:THR:HG21	0.47	2.24	11	2
1:A:158:SER:O	1:A:159:ILE:O	0.47	2.32	15	3
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:CG	0.47	2.37	11	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:CB	0.47	2.61	17	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:219:PRO:CB	0.47	2.92	17	1
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:HG3	0.47	2.09	4	3
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:HG11	0.47	2.08	3	1
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:C	0.47	2.56	8	4
1:A:50:VAL:HG23	1:A:93:VAL:O	0.47	2.09	7	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:O	0.47	2.09	11	2
1:A:180:ARG:HD3	1:A:257:TYR:HB2	0.47	1.86	8	1
1:A:32:ASP:C	1:A:32:ASP:OD1	0.47	2.56	9	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:CB	0.47	2.62	10	1
1:A:204:PRO:C	1:A:206:SER:N	0.47	2.72	10	1
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:NZ	0.47	2.77	12	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:OH	0.47	2.09	12	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:27:LYS:N	0.47	2.24	14	1
1:A:134:GLU:HG3	1:A:165:TYR:CZ	0.47	2.44	14	1
1:A:32:ASP:O	1:A:92:LYS:HA	0.47	2.09	15	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ILE:HG12	0.47	2.24	17	1
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:HB3	0.47	1.84	18	1
1:A:93:VAL:HG23	1:A:104:SER:O	0.47	2.09	1	1
1:A:147:VAL:O	1:A:169:MET:CG	0.47	2.62	3	1
1:A:204:PRO:O	1:A:207:THR:OG1	0.47	2.32	3	3
1:A:6:TRP:HB2	1:A:198:ASN:O	0.47	2.09	4	2
1:A:258:GLY:O	1:A:259:SER:C	0.47	2.58	17	4
1:A:28:VAL:HG12	1:A:29:ALA:N	0.47	2.24	7	1
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:CB	0.47	2.58	13	3
1:A:71:ALA:HB3	1:A:88:LEU:HD11	0.47	1.85	11	1
1:A:149:ALA:C	1:A:218:THR:HG21	0.47	2.34	11	1
1:A:193:VAL:O	1:A:262:VAL:HG23	0.47	2.09	11	1
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:HG22	0.47	2.34	14	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:214:THR:CG2	0.47	2.61	14	1
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:CG2	0.47	2.62	15	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:200:GLN:O	0.47	2.32	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:OG	0.47	2.33	18	1
1:A:186:TYR:CE1	1:A:187:GLY:O	0.47	2.67	2	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:CG2	0.47	2.98	8	2
1:A:59:GLY:O	1:A:96:ALA:HB2	0.47	2.09	5	2
1:A:159:ILE:HG23	1:A:186:TYR:HA	0.47	1.86	5	1
1:A:178:ASN:O	1:A:179:ASN:O	0.47	2.32	5	1
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:OG1	0.47	2.31	6	2
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:O	0.47	2.33	17	2
1:A:200:GLN:HG2	1:A:210:SER:OG	0.47	2.10	10	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:192:ILE:HG23	0.47	2.09	11	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:HD2	0.47	2.40	12	1
1:A:38:HIS:NE2	1:A:206:SER:HA	0.47	2.25	1	2
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:HB3	0.47	2.10	18	2
1:A:147:VAL:O	1:A:169:MET:HG3	0.47	2.09	3	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:OD1	0.47	2.32	3	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:21:LEU:H	0.47	1.68	5	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:HD3	0.47	2.24	5	2
1:A:212:ASN:OD1	1:A:216:MET:HB3	0.47	2.09	5	2
1:A:180:ARG:HD3	1:A:257:TYR:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:LEU:HD13	0.47	1.86	9	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:O	0.47	2.67	9	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:216:MET:SD	0.47	2.48	10	1
1:A:111:TRP:O	1:A:115:ASN:O	0.47	2.32	11	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:SER:OG	0.47	2.56	14	1
1:A:257:TYR:O	1:A:258:GLY:O	0.47	2.33	14	2
1:A:50:VAL:HB	1:A:51:PRO:HD3	0.47	1.85	6	3
1:A:147:VAL:O	1:A:168:ALA:HA	0.47	2.09	13	5
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:87:GLU:HB2	0.47	2.40	8	1
1:A:134:GLU:HA	1:A:165:TYR:OH	0.47	2.09	8	1
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:CD	0.47	2.62	15	2
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:HA	0.47	2.10	12	4
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:SD	0.47	2.73	17	4
1:A:3:SER:OG	1:A:78:GLY:O	0.47	2.32	17	1
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:HD11	0.47	2.25	17	1
1:A:102:VAL:HG11	1:A:130:SER:HB3	0.47	1.85	1	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:83:ALA:O	0.47	2.10	4	2
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:CG	0.47	2.58	16	3
1:A:22:THR:O	1:A:23:GLY:C	0.47	2.57	5	2
1:A:72:ALA:O	1:A:73:LEU:O	0.47	2.33	7	5
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:N	0.47	2.25	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:GLY:O	1:A:129:PRO:HD3	0.47	2.09	5	1
1:A:149:ALA:CB	1:A:162:PRO:HG2	0.47	2.40	5	3
1:A:111:TRP:CH2	1:A:116:GLY:HA2	0.47	2.45	6	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:CB	0.47	2.63	7	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:O	0.47	2.33	16	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:193:VAL:CG2	0.47	2.92	8	1
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLN:N	0.47	2.69	14	3
1:A:251:LEU:CD2	1:A:260:GLY:HA2	0.47	2.39	9	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:229:LYS:HD3	0.47	2.24	10	2
1:A:261:LEU:HD13	1:A:262:VAL:N	0.47	2.25	10	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:HB	0.47	2.09	12	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:133:LEU:CD1	0.47	2.40	15	1
1:A:27:LYS:HE3	1:A:87:GLU:O	0.47	2.09	16	1
1:A:27:LYS:CD	1:A:89:TYR:CE1	0.47	2.97	16	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:NZ	0.47	2.25	16	1
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:HG3	0.47	2.10	9	2
1:A:248:ALA:O	1:A:249:THR:O	0.47	2.31	9	3
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:256:LEU:HD12	1:A:257:TYR:CD1	0.47	2.44	5	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:251:LEU:HD21	0.47	2.25	7	1
1:A:236:SER:O	1:A:238:VAL:N	0.47	2.47	7	1
1:A:12:GLN:CD	1:A:265:GLU:OE1	0.47	2.58	8	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:CE	0.47	2.40	12	2
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:O	0.47	2.33	12	1
1:A:45:GLY:CA	1:A:89:TYR:CD1	0.47	2.98	14	1
1:A:144:GLY:O	1:A:237:ASN:CB	0.47	2.63	14	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CD2	0.47	2.45	16	1
1:A:150:ALA:CA	1:A:218:THR:OG1	0.47	2.63	17	1
1:A:166:ALA:C	1:A:168:ALA:N	0.47	2.72	16	4
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:CE	0.47	2.92	2	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:OE1	0.47	2.33	3	3
1:A:180:ARG:HG2	1:A:256:LEU:CD1	0.47	2.40	5	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:32:ASP:N	0.47	2.48	7	4
1:A:155:GLY:CA	1:A:185:GLN:NE2	0.47	2.78	7	1
1:A:111:TRP:O	1:A:111:TRP:CD2	0.47	2.68	12	2
1:A:153:ASN:ND2	1:A:183:PHE:CE2	0.47	2.83	12	1
1:A:42:ASN:O	1:A:43:ILE:C	0.47	2.56	14	2
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:HG3	0.47	1.87	14	1
1:A:101:SER:OG	1:A:104:SER:OG	0.47	2.33	14	1
1:A:143:ARG:HA	1:A:143:ARG:NE	0.47	2.25	14	1
1:A:196:GLY:HA2	1:A:212:ASN:CG	0.47	2.35	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:ASP:CG	1:A:179:ASN:O	0.47	2.58	15	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:195:PRO:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:THR:HB	0.47	2.10	17	1
1:A:162:PRO:CG	1:A:165:TYR:CE2	0.47	2.98	18	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:CG	0.47	2.40	2	1
1:A:203:TYR:HB2	1:A:207:THR:O	0.47	2.10	13	4
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:CB	0.47	2.93	6	1
1:A:238:VAL:O	1:A:240:ILE:N	0.47	2.49	7	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:HB3	0.47	2.09	18	1
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CE1	0.47	2.44	18	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:HG13	0.46	2.09	1	2
1:A:31:LEU:HG	1:A:93:VAL:CG1	0.46	2.40	1	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:167:ASN:HA	0.46	2.28	3	1
1:A:89:TYR:CD1	1:A:89:TYR:N	0.46	2.81	4	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:CB	0.46	2.40	6	2
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:H	0.46	2.28	12	2
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLY:O	0.46	2.33	10	2
1:A:40:ASP:OD1	1:A:40:ASP:N	0.46	2.48	3	1
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLU:OE1	0.46	2.33	11	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:HE3	0.46	1.87	12	1
1:A:250:SER:HA	1:A:260:GLY:CA	0.46	2.40	12	1
1:A:35:ILE:O	1:A:64:THR:OG1	0.46	2.32	13	1
1:A:33:THR:CB	1:A:95:GLY:O	0.46	2.63	17	1
1:A:134:GLU:C	1:A:136:ALA:N	0.46	2.72	2	4
1:A:66:VAL:CG1	1:A:70:ILE:HD11	0.46	2.39	3	2
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:HA2	0.46	1.87	4	1
1:A:5:PRO:O	1:A:7:GLY:N	0.46	2.48	6	1
1:A:148:VAL:HG23	1:A:169:MET:SD	0.46	2.50	7	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:257:TYR:OH	0.46	2.31	7	1
1:A:101:SER:O	1:A:104:SER:OG	0.46	2.33	8	2
1:A:180:ARG:O	1:A:180:ARG:HG2	0.46	2.10	8	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:HB2	0.46	2.10	9	1
1:A:165:TYR:CD2	1:A:166:ALA:N	0.46	2.84	10	1
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:CE	0.46	2.94	11	1
1:A:66:VAL:HA	1:A:69:THR:CG2	0.46	2.41	13	1
1:A:208:TYR:O	1:A:209:ALA:HB2	0.46	2.10	18	1
1:A:151:SER:OG	1:A:171:VAL:O	0.46	2.31	4	3
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASP:O	0.46	2.32	3	1
1:A:224:ALA:O	1:A:225:ALA:C	0.46	2.57	16	6
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:HG1	0.46	2.19	4	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HA	0.46	2.09	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG21	1:A:94:LEU:C	0.46	2.35	7	2
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:C	0.46	2.57	10	2
1:A:178:ASN:OD1	1:A:178:ASN:O	0.46	2.33	11	1
1:A:35:ILE:HG12	1:A:67:ALA:CB	0.46	2.41	15	1
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:O	0.46	2.33	1	1
1:A:33:THR:HB	1:A:60:ASN:CG	0.46	2.36	2	1
1:A:200:GLN:O	1:A:200:GLN:HG3	0.46	2.11	8	1
1:A:125:GLY:O	1:A:126:SER:HB2	0.46	2.10	10	1
1:A:27:LYS:CG	1:A:87:GLU:OE1	0.46	2.64	13	1
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:CD	0.46	2.59	16	1
1:A:150:ALA:O	1:A:151:SER:C	0.46	2.58	16	1
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:ALA:HB1	0.46	1.87	1	1
1:A:251:LEU:HD11	1:A:261:LEU:HB2	0.46	1.88	5	1
1:A:265:GLU:OE2	1:A:265:GLU:O	0.46	2.34	5	2
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HB2	0.46	2.10	7	2
1:A:49:PHE:CD2	1:A:92:LYS:O	0.46	2.69	11	1
1:A:27:LYS:HE2	1:A:28:VAL:N	0.46	2.25	16	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:LEU:CD1	0.46	2.40	16	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:CB	0.46	2.40	16	1
1:A:190:LEU:CD2	1:A:256:LEU:O	0.46	2.64	16	1
1:A:62:HIS:CE1	1:A:215:SER:HB3	0.46	2.46	1	1
1:A:31:LEU:O	1:A:32:ASP:CG	0.46	2.59	2	1
1:A:232:ASN:CG	1:A:235:TRP:CD2	0.46	2.94	9	1
1:A:64:THR:O	1:A:65:HIS:C	0.46	2.57	12	1
1:A:93:VAL:HG11	1:A:105:ILE:HA	0.46	1.88	16	2
1:A:5:PRO:HB3	1:A:200:GLN:NE2	0.46	2.26	14	1
1:A:44:ARG:CB	1:A:87:GLU:HB2	0.46	2.40	14	1
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ILE:N	0.46	2.73	16	2
1:A:179:ASN:C	1:A:257:TYR:OH	0.46	2.59	16	1
1:A:158:SER:O	1:A:186:TYR:O	0.46	2.33	17	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:CG	0.46	2.88	6	2
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PRO:CD	0.46	2.40	2	2
1:A:175:ASP:OD1	1:A:178:ASN:CA	0.46	2.64	2	1
1:A:186:TYR:CE1	1:A:256:LEU:HD22	0.46	2.45	5	1
1:A:225:ALA:O	1:A:229:LYS:HG3	0.46	2.11	6	1
1:A:199:VAL:HG23	1:A:211:LEU:O	0.46	2.11	12	1
1:A:262:VAL:O	1:A:263:ASN:OD1	0.46	2.32	13	1
1:A:44:ARG:NE	1:A:44:ARG:HA	0.46	2.26	17	2
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:OXT	0.46	2.33	16	1
1:A:66:VAL:O	1:A:69:THR:HG22	0.46	2.10	17	1
1:A:49:PHE:HB2	1:A:107:GLN:CD	0.46	2.36	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:HG23	0.46	2.24	1	1
1:A:198:ASN:C	1:A:199:VAL:HG13	0.46	2.35	8	7
1:A:38:HIS:CD2	1:A:39:PRO:CD	0.46	2.99	3	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:8:ILE:HG21	0.46	1.87	5	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:229:LYS:HD3	0.46	2.46	5	1
1:A:226:ALA:O	1:A:227:LEU:C	0.46	2.58	5	2
1:A:134:GLU:C	1:A:134:GLU:OE1	0.46	2.59	7	1
1:A:118:HIS:C	1:A:145:VAL:HG13	0.46	2.36	10	2
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:CB	0.46	2.64	15	1
1:A:33:THR:O	1:A:33:THR:CG2	0.46	2.55	17	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:OD1	0.46	2.33	17	2
1:A:3:SER:C	1:A:5:PRO:HD3	0.46	2.34	18	1
1:A:5:PRO:CD	1:A:8:ILE:HB	0.46	2.40	18	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HB3	0.46	1.88	1	5
1:A:115:ASN:O	1:A:117:MET:SD	0.46	2.74	1	1
1:A:49:PHE:CD1	1:A:49:PHE:N	0.46	2.84	2	2
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:HB2	0.46	2.11	8	2
1:A:134:GLU:OE1	1:A:165:TYR:OH	0.46	2.32	9	1
1:A:154:SER:OG	1:A:155:GLY:N	0.46	2.48	9	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:259:SER:CB	0.46	2.41	10	1
1:A:110:GLU:HG2	1:A:139:SER:OG	0.46	2.11	11	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:HG3	0.46	2.10	11	1
1:A:198:ASN:HA	1:A:212:ASN:OD1	0.46	2.11	11	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:HB3	0.46	2.40	14	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:80:LEU:CD1	0.46	2.64	16	1
1:A:194:ALA:CB	1:A:195:PRO:HD2	0.46	2.30	16	1
1:A:173:ALA:O	1:A:174:THR:CG2	0.45	2.64	3	1
1:A:126:SER:O	1:A:129:PRO:HD2	0.45	2.11	14	2
1:A:30:VAL:HG21	1:A:88:LEU:HD22	0.45	1.88	13	1
1:A:234:SER:O	1:A:235:TRP:O	0.45	2.34	17	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:OD2	0.45	2.35	5	2
1:A:150:ALA:HA	1:A:218:THR:OG1	0.45	2.11	5	11
1:A:149:ALA:HB2	1:A:168:ALA:CB	0.45	2.40	3	1
1:A:152:GLY:N	1:A:185:GLN:HB2	0.45	2.27	4	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:218:THR:HG23	0.45	2.41	14	2
1:A:3:SER:HB2	1:A:80:LEU:HB3	0.45	1.86	6	1
1:A:111:TRP:CD2	1:A:115:ASN:O	0.45	2.69	11	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:229:LYS:CD	0.45	2.99	16	1
1:A:159:ILE:HD13	1:A:190:LEU:CD1	0.45	2.41	18	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:HD2	0.45	2.10	6	6
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:HB3	0.45	2.11	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLN:C	1:A:107:GLN:CD	0.45	2.83	1	1
1:A:153:ASN:O	1:A:154:SER:HB2	0.45	2.11	1	3
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PRO:N	0.45	2.26	6	3
1:A:121:ASN:OD1	1:A:222:ALA:HB1	0.45	2.11	3	2
1:A:210:SER:C	1:A:211:LEU:CD2	0.45	2.81	4	2
1:A:87:GLU:OE2	1:A:117:MET:SD	0.45	2.74	8	1
1:A:78:GLY:HA3	1:A:208:TYR:OH	0.45	2.12	9	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:HB	0.45	2.12	10	1
1:A:249:THR:OG1	1:A:263:ASN:OD1	0.45	2.33	10	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:HG13	0.45	2.12	16	2
1:A:69:THR:HG21	1:A:219:PRO:CG	0.45	2.41	13	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:268:THR:CG2	0.45	2.42	2	1
1:A:134:GLU:O	1:A:136:ALA:N	0.45	2.49	2	2
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:CB	0.45	2.79	16	4
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:PRO:HD2	0.45	2.37	5	2
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:HG2	0.45	2.11	6	3
1:A:173:ALA:HB2	1:A:214:THR:HA	0.45	1.88	6	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:147:VAL:HG12	0.45	1.89	7	1
1:A:174:THR:HA	1:A:179:ASN:O	0.45	2.11	8	2
1:A:241:ARG:O	1:A:241:ARG:HG2	0.45	2.10	7	1
1:A:200:GLN:O	1:A:200:GLN:CG	0.45	2.64	8	1
1:A:263:ASN:N	1:A:263:ASN:ND2	0.45	2.63	11	1
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:CB	0.45	2.41	15	2
1:A:122:LEU:N	1:A:148:VAL:O	0.45	2.50	16	1
1:A:178:ASN:O	1:A:178:ASN:ND2	0.45	2.49	16	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:232:ASN:O	0.45	2.34	16	1
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:HB3	0.45	2.12	18	1
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CE1	0.45	2.47	18	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:83:ALA:O	0.45	2.11	15	5
1:A:124:LEU:C	1:A:124:LEU:CD1	0.45	2.85	1	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:ILE:CD1	0.45	2.41	6	2
1:A:104:SER:O	1:A:105:ILE:C	0.45	2.58	3	2
1:A:203:TYR:CD2	1:A:204:PRO:HD2	0.45	2.47	4	2
1:A:263:ASN:ND2	1:A:263:ASN:N	0.45	2.64	4	1
1:A:157:GLY:HA2	1:A:186:TYR:CE1	0.45	2.46	8	1
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:HA3	0.45	2.12	8	1
1:A:192:ILE:HD12	1:A:262:VAL:HG13	0.45	1.89	9	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:81:GLY:N	0.45	2.64	16	2
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:OD1	0.45	2.34	13	1
1:A:23:GLY:CA	1:A:230:GLN:HG3	0.45	2.42	14	1
1:A:3:SER:CB	1:A:79:VAL:C	0.45	2.90	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:216:MET:O	1:A:219:PRO:HD2	0.45	2.11	1	3
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HG12	0.45	2.41	4	2
1:A:119:VAL:HG23	1:A:229:LYS:HE3	0.45	1.88	2	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:OG	0.45	2.34	2	3
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HD2	0.45	2.11	3	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:HA2	0.45	2.12	8	2
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:216:MET:HE3	1:A:216:MET:HA	0.45	1.89	6	1
1:A:256:LEU:CD1	1:A:257:TYR:CD1	0.45	2.99	6	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HG3	0.45	1.88	7	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:93:VAL:C	0.45	2.37	9	2
1:A:48:SER:CB	1:A:55:SER:O	0.45	2.64	10	1
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:ALA:HB1	0.45	2.41	10	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:198:ASN:HB3	0.45	2.47	18	2
1:A:87:GLU:OE1	1:A:87:GLU:N	0.45	2.49	14	1
1:A:45:GLY:O	1:A:89:TYR:HA	0.45	2.12	2	1
1:A:167:ASN:O	1:A:168:ALA:CB	0.45	2.54	3	1
1:A:192:ILE:CD1	1:A:262:VAL:HG13	0.45	2.40	15	3
1:A:178:ASN:OD1	1:A:178:ASN:C	0.45	2.60	6	1
1:A:12:GLN:O	1:A:264:ALA:HB3	0.45	2.12	9	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:O	0.45	2.35	10	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:149:ALA:N	0.45	2.26	11	1
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:N	0.45	2.49	11	1
1:A:170:ALA:N	1:A:191:ASP:HB2	0.45	2.26	16	2
1:A:74:ASN:ND2	1:A:78:GLY:O	0.45	2.50	12	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:CG2	0.45	2.65	14	1
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:HA	0.45	2.12	1	4
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:CA	0.45	2.64	2	1
1:A:123:SER:O	1:A:123:SER:OG	0.45	2.34	2	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:179:ASN:HB2	0.45	2.37	2	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:HB3	0.45	2.12	14	3
1:A:68:GLY:O	1:A:69:THR:C	0.45	2.59	4	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:NE2	0.45	2.80	8	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:HB2	0.45	2.11	16	2
1:A:232:ASN:O	1:A:232:ASN:OD1	0.45	2.34	9	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:N	0.45	2.50	13	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:HD21	0.45	2.47	13	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:195:PRO:CB	0.45	2.99	16	2
1:A:15:ALA:HB1	1:A:265:GLU:HG3	0.45	1.88	16	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:77:ILE:HD11	0.45	2.12	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:HIS:NE2	1:A:215:SER:HB3	0.45	2.26	1	1
1:A:118:HIS:CB	1:A:229:LYS:HD2	0.45	2.42	4	1
1:A:43:ILE:O	1:A:43:ILE:HG22	0.45	2.12	6	1
1:A:217:ALA:C	1:A:219:PRO:HD2	0.45	2.37	6	2
1:A:207:THR:HG23	1:A:208:TYR:H	0.45	1.72	16	3
1:A:21:LEU:CD2	1:A:227:LEU:HD22	0.45	2.36	18	1
1:A:229:LYS:CG	1:A:240:ILE:HD11	0.45	2.42	1	1
1:A:243:HIS:HA	1:A:246:ASN:OD1	0.45	2.12	2	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:8:ILE:CG2	0.45	2.42	4	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:27:LYS:N	0.45	2.79	4	4
1:A:35:ILE:HG13	1:A:90:ALA:CB	0.45	2.41	4	2
1:A:200:GLN:HA	1:A:210:SER:HA	0.45	1.88	18	2
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:HA	0.45	1.87	6	1
1:A:110:GLU:O	1:A:110:GLU:HG3	0.45	2.10	7	1
1:A:153:ASN:C	1:A:154:SER:OG	0.45	2.57	10	1
1:A:76:SER:C	1:A:77:ILE:HG13	0.45	2.37	11	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:231:LYS:HE3	0.45	1.88	18	1
1:A:159:ILE:HG12	1:A:187:GLY:CA	0.45	2.42	18	1
1:A:178:ASN:CB	1:A:251:LEU:HD21	0.45	2.42	18	1
1:A:65:HIS:CG	1:A:211:LEU:HD11	0.44	2.47	1	1
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:HB2	0.44	2.12	13	2
1:A:256:LEU:HD12	1:A:257:TYR:CE1	0.44	2.47	5	1
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:HB2	0.44	1.88	6	1
1:A:8:ILE:HG22	1:A:9:SER:H	0.44	1.65	12	1
1:A:173:ALA:C	1:A:181:ALA:HB2	0.44	2.37	12	1
1:A:24:SER:CB	1:A:85:ASN:HB3	0.44	2.42	16	1
1:A:32:ASP:C	1:A:94:LEU:HD11	0.44	2.36	3	1
1:A:175:ASP:OD2	1:A:177:ASN:OD1	0.44	2.35	3	1
1:A:77:ILE:HG23	1:A:78:GLY:N	0.44	2.27	10	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:90:ALA:HB2	0.44	2.42	11	1
1:A:55:SER:OG	1:A:56:THR:N	0.44	2.50	11	1
1:A:165:TYR:CD1	1:A:165:TYR:C	0.44	2.96	16	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CH2	0.44	2.70	17	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:216:MET:CE	0.44	2.35	18	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:60:ASN:N	0.44	2.65	2	1
1:A:14:PRO:O	1:A:17:HIS:N	0.44	2.50	10	3
1:A:152:GLY:HA3	1:A:185:GLN:NE2	0.44	2.26	4	1
1:A:27:LYS:CD	1:A:118:HIS:HE2	0.44	2.25	7	1
1:A:191:ASP:C	1:A:192:ILE:HG23	0.44	2.36	7	1
1:A:138:ASN:O	1:A:142:SER:HB2	0.44	2.12	11	1
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:CB	0.44	2.65	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:ILE:HG12	1:A:220:HIS:CD2	0.44	2.48	17	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:N	0.44	2.50	17	1
1:A:216:MET:C	1:A:219:PRO:HD2	0.44	2.38	12	9
1:A:104:SER:C	1:A:106:ALA:N	0.44	2.73	3	2
1:A:109:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HD21	0.44	1.88	5	1
1:A:191:ASP:CG	1:A:245:LYS:HE2	0.44	2.37	7	1
1:A:66:VAL:HA	1:A:69:THR:HG22	0.44	1.88	13	1
1:A:259:SER:O	1:A:260:GLY:C	0.44	2.60	14	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:CD	0.44	2.80	18	1
1:A:165:TYR:CB	1:A:168:ALA:HB3	0.44	2.42	18	1
1:A:213:GLY:O	1:A:216:MET:HG2	0.44	2.13	1	1
1:A:200:GLN:HA	1:A:209:ALA:O	0.44	2.13	14	4
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HG13	0.44	2.13	14	5
1:A:121:ASN:ND2	1:A:218:THR:HG23	0.44	2.28	10	2
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:CD2	0.44	2.47	5	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:HB3	0.44	1.89	10	2
1:A:201:SER:O	1:A:208:TYR:HB3	0.44	2.13	7	1
1:A:249:THR:HG23	1:A:263:ASN:ND2	0.44	2.28	9	1
1:A:166:ALA:O	1:A:168:ALA:N	0.44	2.50	14	2
1:A:87:GLU:CD	1:A:87:GLU:H	0.44	2.20	14	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:251:LEU:HD11	0.44	2.28	18	1
1:A:27:LYS:HG3	1:A:117:MET:HB3	0.44	1.90	3	1
1:A:89:TYR:CZ	1:A:117:MET:CE	0.44	3.00	6	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:104:SER:C	0.44	2.91	6	1
1:A:196:GLY:O	1:A:198:ASN:O	0.44	2.35	10	1
1:A:232:ASN:HB2	1:A:235:TRP:CD2	0.44	2.47	11	1
1:A:162:PRO:HA	1:A:165:TYR:CE1	0.44	2.47	17	1
1:A:8:ILE:HG12	1:A:220:HIS:NE2	0.44	2.28	18	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:74:ASN:C	0.44	2.61	1	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:74:ASN:O	0.44	2.36	8	2
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	0.44	1.70	3	2
1:A:3:SER:OG	1:A:80:LEU:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:HA3	0.44	2.13	16	2
1:A:78:GLY:CA	1:A:208:TYR:OH	0.44	2.66	9	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HB3	0.44	2.13	10	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:CG	0.44	2.61	12	1
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:CG1	0.44	2.80	12	1
1:A:134:GLU:HG2	1:A:165:TYR:CE2	0.44	2.47	12	1
1:A:246:ASN:O	1:A:246:ASN:ND2	0.44	2.50	14	1
1:A:22:THR:HA	1:A:84:PRO:CG	0.44	2.43	18	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:HG2	0.44	2.12	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLN:CD	1:A:108:GLY:N	0.44	2.76	1	1
1:A:218:THR:HB	1:A:219:PRO:HD3	0.44	1.89	1	3
1:A:32:ASP:CG	1:A:123:SER:OG	0.44	2.60	2	1
1:A:79:VAL:HG11	1:A:201:SER:CA	0.44	2.43	2	1
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:CD1	0.44	2.76	3	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:149:ALA:HB2	0.44	2.43	3	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:183:PHE:CG	0.44	2.71	3	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:HA	0.44	1.89	11	4
1:A:69:THR:HG21	1:A:220:HIS:CE1	0.44	2.48	8	1
1:A:187:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD22	0.44	2.42	11	1
1:A:34:GLY:HA3	1:A:59:GLY:N	0.44	2.28	13	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CG	0.44	2.66	15	1
1:A:22:THR:C	1:A:24:SER:H	0.44	2.20	1	7
1:A:151:SER:HB3	1:A:171:VAL:O	0.44	2.13	3	1
1:A:5:PRO:C	1:A:7:GLY:N	0.44	2.76	6	1
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:HB3	0.44	1.90	8	3
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:HG3	0.44	2.37	13	1
1:A:21:LEU:HG	1:A:268:THR:HG21	0.44	1.90	15	1
1:A:192:ILE:CG1	1:A:259:SER:HB3	0.44	2.43	16	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:N	0.44	2.86	17	1
1:A:180:ARG:HB2	1:A:257:TYR:CE2	0.44	2.48	17	1
1:A:60:ASN:CG	1:A:96:ALA:HB2	0.43	2.38	2	1
1:A:134:GLU:OE2	1:A:165:TYR:CD1	0.43	2.71	5	2
1:A:30:VAL:CG1	1:A:35:ILE:HD11	0.43	2.39	6	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:51:PRO:CD	0.43	2.96	6	2
1:A:183:PHE:CD1	1:A:184:SER:N	0.43	2.87	6	2
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:HG2	0.43	2.13	10	1
1:A:77:ILE:HB	1:A:208:TYR:OH	0.43	2.13	14	1
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:N	0.43	2.28	18	1
1:A:250:SER:O	1:A:251:LEU:C	0.43	2.61	1	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LYS:H	0.43	1.74	2	1
1:A:262:VAL:O	1:A:263:ASN:ND2	0.43	2.51	2	2
1:A:125:GLY:HA3	1:A:161:TYR:O	0.43	2.12	5	1
1:A:176:GLN:O	1:A:177:ASN:CB	0.43	2.65	10	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:HA	0.43	2.13	13	2
1:A:105:ILE:CG2	1:A:133:LEU:CD1	0.43	2.96	18	1
1:A:162:PRO:HB2	1:A:166:ALA:HB3	0.43	1.89	1	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:C	0.43	2.62	2	1
1:A:186:TYR:CG	1:A:256:LEU:HD23	0.43	2.47	2	1
1:A:133:LEU:O	1:A:167:ASN:OD1	0.43	2.37	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:ILE:O	1:A:83:ALA:O	0.43	2.37	4	1
1:A:200:GLN:HB2	1:A:209:ALA:O	0.43	2.13	4	2
1:A:153:ASN:HB2	1:A:214:THR:HG22	0.43	1.89	6	1
1:A:23:GLY:HA2	1:A:230:GLN:CB	0.43	2.43	12	2
1:A:30:VAL:O	1:A:30:VAL:CG1	0.43	2.66	9	1
1:A:200:GLN:O	1:A:201:SER:OG	0.43	2.34	11	2
1:A:34:GLY:HA3	1:A:57:GLN:C	0.43	2.39	12	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:74:ASN:O	1:A:74:ASN:OD1	0.43	2.36	15	1
1:A:129:PRO:CB	1:A:161:TYR:CD1	0.43	3.01	18	1
1:A:150:ALA:CA	1:A:218:THR:HG21	0.43	2.43	2	1
1:A:162:PRO:C	1:A:164:ARG:N	0.43	2.77	11	6
1:A:192:ILE:HG13	1:A:260:GLY:O	0.43	2.13	2	1
1:A:242:ASN:O	1:A:246:ASN:OD1	0.43	2.35	2	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:C	0.43	2.61	16	2
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:HG2	0.43	2.13	9	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HD3	0.43	2.13	11	1
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:HG13	0.43	1.90	12	1
1:A:269:ARG:C	1:A:269:ARG:CD	0.43	2.91	3	1
1:A:12:GLN:C	1:A:14:PRO:HD2	0.43	2.38	4	4
1:A:87:GLU:OE1	1:A:89:TYR:OH	0.43	2.34	4	1
1:A:190:LEU:HG	1:A:191:ASP:N	0.43	2.29	4	1
1:A:93:VAL:HG21	1:A:105:ILE:HA	0.43	1.89	6	1
1:A:178:ASN:HB2	1:A:251:LEU:CD2	0.43	2.42	6	1
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ASN:OD1	0.43	2.14	8	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:218:THR:HG22	0.43	2.44	9	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:32:ASP:OD1	0.43	2.65	11	1
1:A:154:SER:HA	1:A:185:GLN:NE2	0.43	2.28	15	1
1:A:239:GLN:HA	1:A:239:GLN:OE1	0.43	2.14	15	1
1:A:175:ASP:HB2	1:A:179:ASN:HB3	0.43	1.91	16	1
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:ND2	0.43	2.51	17	1
1:A:21:LEU:HD22	1:A:268:THR:HG21	0.43	1.91	18	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:105:ILE:HA	0.43	2.43	6	2
1:A:32:ASP:OD2	1:A:123:SER:OG	0.43	2.36	2	1
1:A:68:GLY:C	1:A:70:ILE:N	0.43	2.73	4	1
1:A:127:PRO:C	1:A:129:PRO:HD2	0.43	2.38	5	2
1:A:183:PHE:CE2	1:A:213:GLY:HA2	0.43	2.49	6	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:ASN:CG	0.43	2.61	8	1
1:A:123:SER:OG	1:A:215:SER:CB	0.43	2.67	9	1
1:A:192:ILE:HA	1:A:259:SER:OG	0.43	2.12	11	1
1:A:174:THR:N	1:A:181:ALA:HB2	0.43	2.28	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:248:ALA:HB1	1:A:259:SER:O	0.43	2.13	14	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:80:LEU:HD13	0.43	2.27	18	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:HG23	0.43	2.48	12	2
1:A:32:ASP:OD1	1:A:123:SER:OG	0.43	2.34	2	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:HG22	0.43	2.48	3	2
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:CD1	0.43	2.66	5	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:258:GLY:C	1:A:260:GLY:N	0.43	2.75	17	2
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ARG:HB2	0.43	2.14	8	1
1:A:58:ASP:CG	1:A:64:THR:HG1	0.43	2.21	10	1
1:A:5:PRO:CG	1:A:8:ILE:HG13	0.43	2.44	12	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD11	0.43	1.91	14	1
1:A:249:THR:HB	1:A:261:LEU:HB3	0.43	1.90	14	1
1:A:175:ASP:CA	1:A:181:ALA:HA	0.43	2.44	15	1
1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:HG2	0.43	2.38	16	1
1:A:22:THR:HA	1:A:84:PRO:HG3	0.43	1.90	18	1
1:A:31:LEU:CG	1:A:93:VAL:HG11	0.43	2.43	1	1
1:A:14:PRO:C	1:A:16:ALA:N	0.43	2.75	13	5
1:A:36:SER:CB	1:A:204:PRO:HB3	0.43	2.43	4	1
1:A:161:TYR:HA	1:A:162:PRO:C	0.43	2.37	9	4
1:A:89:TYR:CD1	1:A:117:MET:SD	0.43	3.11	6	1
1:A:200:GLN:HG2	1:A:210:SER:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:238:VAL:C	1:A:240:ILE:N	0.43	2.75	7	2
1:A:49:PHE:CD1	1:A:107:GLN:OE1	0.43	2.71	11	1
1:A:251:LEU:CD1	1:A:261:LEU:N	0.43	2.82	11	1
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HB3	0.43	1.90	12	1
1:A:153:ASN:N	1:A:185:GLN:HG2	0.43	2.28	14	1
1:A:234:SER:O	1:A:235:TRP:C	0.43	2.61	17	1
1:A:169:MET:HB3	1:A:191:ASP:OD2	0.43	2.14	18	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:HB2	0.43	2.13	13	2
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:CA	0.43	2.67	8	1
1:A:256:LEU:C	1:A:258:GLY:N	0.43	2.76	8	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HB	0.43	2.13	10	1
1:A:203:TYR:CG	1:A:204:PRO:CD	0.43	3.01	10	1
1:A:170:ALA:HB3	1:A:190:LEU:CA	0.43	2.44	11	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:229:LYS:HD2	0.43	1.91	12	1
1:A:250:SER:CB	1:A:260:GLY:HA3	0.43	2.42	12	1
1:A:12:GLN:HG3	1:A:265:GLU:N	0.43	2.29	13	1
1:A:183:PHE:CD1	1:A:183:PHE:C	0.43	2.96	17	4
1:A:33:THR:HG21	1:A:60:ASN:CB	0.43	2.44	2	2
1:A:42:ASN:CB	1:A:84:PRO:O	0.43	2.67	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:CG	0.43	2.92	10	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:35:ILE:HD11	0.43	1.89	12	1
1:A:144:GLY:O	1:A:237:ASN:HB2	0.43	2.14	14	1
1:A:191:ASP:OD2	1:A:192:ILE:HG22	0.43	2.14	15	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:268:THR:CG2	0.43	2.42	16	1
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:HB2	0.43	2.13	16	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:229:LYS:HD3	0.43	2.49	16	1
1:A:156:ALA:O	1:A:185:GLN:OE1	0.43	2.37	16	1
1:A:10:ARG:O	1:A:10:ARG:HG2	0.42	2.13	1	1
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:HB3	0.42	2.14	2	4
1:A:31:LEU:O	1:A:32:ASP:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:VAL:HG23	0.42	2.49	3	1
1:A:199:VAL:CG2	1:A:216:MET:HG2	0.42	2.44	4	2
1:A:200:GLN:CB	1:A:209:ALA:O	0.42	2.67	4	1
1:A:218:THR:HG22	1:A:219:PRO:N	0.42	2.29	4	1
1:A:230:GLN:C	1:A:232:ASN:N	0.42	2.76	6	2
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HD12	0.42	2.14	9	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:THR:OG1	0.42	2.34	9	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:230:GLN:HB2	0.42	2.44	11	1
1:A:36:SER:CB	1:A:58:ASP:HB2	0.42	2.43	11	1
1:A:180:ARG:HA	1:A:257:TYR:OH	0.42	2.14	11	1
1:A:250:SER:HA	1:A:259:SER:O	0.42	2.14	11	1
1:A:42:ASN:O	1:A:42:ASN:CG	0.42	2.61	12	1
1:A:7:GLY:HA3	1:A:199:VAL:CG1	0.42	2.44	13	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:CD2	0.42	3.02	13	1
1:A:87:GLU:CD	1:A:87:GLU:N	0.42	2.77	14	1
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:NE2	0.42	2.52	16	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:67:ALA:O	0.42	2.13	17	1
1:A:6:TRP:NE1	1:A:198:ASN:HB3	0.42	2.29	18	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:133:LEU:HD11	0.42	1.90	18	1
1:A:12:GLN:CD	1:A:265:GLU:CB	0.42	2.92	3	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:89:TYR:O	0.42	2.67	3	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:CD	0.42	2.66	3	1
1:A:125:GLY:HA2	1:A:160:SER:HB3	0.42	1.91	4	1
1:A:23:GLY:C	1:A:25:GLY:N	0.42	2.78	5	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:260:GLY:O	0.42	2.14	5	1
1:A:23:GLY:HA2	1:A:230:GLN:NE2	0.42	2.29	7	1
1:A:169:MET:HB3	1:A:191:ASP:CG	0.42	2.39	15	3
1:A:63:GLY:C	1:A:65:HIS:N	0.42	2.76	9	1
1:A:229:LYS:O	1:A:232:ASN:O	0.42	2.38	9	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:214:THR:HG1	0.42	2.20	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:SER:HB3	1:A:64:THR:OG1	0.42	2.14	1	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:ARG:H	0.42	1.73	2	1
1:A:269:ARG:C	1:A:269:ARG:HD3	0.42	2.38	3	1
1:A:22:THR:HG23	1:A:24:SER:HB3	0.42	1.91	4	1
1:A:232:ASN:CG	1:A:235:TRP:CE2	0.42	2.97	4	1
1:A:184:SER:OG	1:A:214:THR:CG2	0.42	2.66	5	1
1:A:191:ASP:O	1:A:192:ILE:HG22	0.42	2.14	10	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:76:SER:N	0.42	2.52	8	1
1:A:183:PHE:O	1:A:183:PHE:CG	0.42	2.71	8	1
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:HB	0.42	2.14	10	1
1:A:230:GLN:CD	1:A:230:GLN:C	0.42	2.85	12	1
1:A:249:THR:O	1:A:249:THR:HG22	0.42	2.14	12	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:238:VAL:N	0.42	2.52	13	1
1:A:64:THR:CG2	1:A:202:THR:OG1	0.42	2.66	14	1
1:A:224:ALA:O	1:A:228:VAL:HG23	0.42	2.13	14	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:N	0.42	2.53	17	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:123:SER:O	0.42	2.68	18	1
1:A:104:SER:HA	1:A:107:GLN:CG	0.42	2.44	1	1
1:A:27:LYS:HD2	1:A:118:HIS:NE2	0.42	2.28	7	1
1:A:48:SER:OG	1:A:55:SER:O	0.42	2.31	10	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:HA	0.42	2.13	10	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:231:LYS:CG	0.42	2.41	11	1
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD13	0.42	1.89	11	2
1:A:30:VAL:HB	1:A:89:TYR:O	0.42	2.14	3	1
1:A:198:ASN:H	1:A:212:ASN:CB	0.42	2.28	12	2
1:A:16:ALA:HB1	1:A:227:LEU:HD13	0.42	1.91	6	1
1:A:159:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB1	0.42	1.91	7	1
1:A:89:TYR:CE2	1:A:117:MET:HE2	0.42	2.48	9	1
1:A:151:SER:C	1:A:160:SER:OG	0.42	2.63	9	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:49:PHE:CE1	0.42	3.02	12	1
1:A:174:THR:HA	1:A:181:ALA:N	0.42	2.30	12	1
1:A:250:SER:OG	1:A:260:GLY:CA	0.42	2.66	12	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:SD	0.42	2.55	14	2
1:A:35:ILE:O	1:A:58:ASP:HA	0.42	2.13	13	1
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:HE2	0.42	2.15	13	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:N	0.42	2.68	13	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:HA3	0.42	1.91	15	1
1:A:269:ARG:OXT	1:A:269:ARG:HG3	0.42	2.15	17	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:133:LEU:CD1	0.42	2.45	18	1
1:A:154:SER:OG	1:A:185:GLN:HG2	0.42	2.15	18	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:93:VAL:HG11	0.42	1.92	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:SER:HB3	1:A:64:THR:CB	0.42	2.45	1	1
1:A:178:ASN:O	1:A:179:ASN:C	0.42	2.59	1	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:88:LEU:CD1	0.42	2.44	14	3
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:NZ	0.42	2.48	3	1
1:A:44:ARG:CB	1:A:87:GLU:HG3	0.42	2.44	10	2
1:A:182:SER:O	1:A:182:SER:OG	0.42	2.36	3	2
1:A:245:LYS:HD2	1:A:245:LYS:N	0.42	2.28	7	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:108:GLY:HA3	0.42	2.44	9	1
1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CD	0.42	2.76	14	1
1:A:149:ALA:CB	1:A:163:ALA:HA	0.42	2.44	18	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ASN:N	0.42	2.30	3	1
1:A:26:VAL:C	1:A:27:LYS:HG2	0.42	2.39	5	1
1:A:85:ASN:O	1:A:86:ALA:C	0.42	2.61	7	1
1:A:74:ASN:CA	1:A:80:LEU:HD13	0.42	2.45	11	1
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:HE3	0.42	2.14	12	1
1:A:57:GLN:HA	1:A:57:GLN:OE1	0.42	2.13	14	1
1:A:169:MET:HB3	1:A:191:ASP:CB	0.42	2.45	15	1
1:A:67:ALA:O	1:A:88:LEU:CD1	0.42	2.67	16	1
1:A:6:TRP:HA	1:A:9:SER:OG	0.42	2.15	1	1
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:HG	0.42	2.15	17	3
1:A:181:ALA:O	1:A:183:PHE:CD2	0.42	2.72	7	1
1:A:149:ALA:HB3	1:A:163:ALA:CA	0.42	2.42	8	1
1:A:101:SER:OG	1:A:102:VAL:N	0.42	2.53	10	2
1:A:64:THR:HG23	1:A:65:HIS:N	0.42	2.29	11	1
1:A:48:SER:HB2	1:A:92:LYS:NZ	0.42	2.30	12	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:HB2	0.42	2.15	13	1
1:A:206:SER:C	1:A:207:THR:HG22	0.42	2.39	13	1
1:A:196:GLY:HA2	1:A:212:ASN:ND2	0.42	2.30	14	1
1:A:56:THR:O	1:A:56:THR:HG22	0.42	2.14	15	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:OE1	0.42	2.37	1	1
1:A:144:GLY:C	1:A:237:ASN:HB2	0.42	2.40	4	1
1:A:212:ASN:OD1	1:A:212:ASN:O	0.42	2.38	4	1
1:A:218:THR:CB	1:A:219:PRO:HD3	0.42	2.44	4	1
1:A:118:HIS:HB3	1:A:229:LYS:NZ	0.42	2.30	5	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:186:TYR:C	0.42	2.97	7	1
1:A:57:GLN:C	1:A:58:ASP:O	0.42	2.63	14	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:117:MET:SD	0.42	2.55	16	1
1:A:33:THR:HB	1:A:95:GLY:O	0.42	2.14	18	1
1:A:145:VAL:O	1:A:147:VAL:HG22	0.42	2.14	18	1
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:CA	0.42	2.68	4	2
1:A:137:VAL:CG1	1:A:138:ASN:N	0.42	2.82	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLN:HA	1:A:107:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:258:GLY:O	0.42	2.15	7	1
1:A:196:GLY:O	1:A:198:ASN:N	0.42	2.52	10	1
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CZ2	0.42	2.88	10	1
1:A:232:ASN:CB	1:A:235:TRP:CD2	0.42	3.03	11	1
1:A:32:ASP:CB	1:A:63:GLY:HA3	0.42	2.45	13	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:ASN:HB2	0.42	2.14	13	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:68:GLY:CA	0.41	2.44	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:230:GLN:OE1	0.41	2.15	7	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:HB3	0.41	2.14	8	1
1:A:123:SER:OG	1:A:215:SER:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:HD3	0.41	2.14	11	3
1:A:30:VAL:HG22	1:A:70:ILE:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:49:PHE:HB3	1:A:107:GLN:OE1	0.41	2.14	11	1
1:A:73:LEU:O	1:A:79:VAL:O	0.41	2.38	11	1
1:A:229:LYS:O	1:A:233:PRO:CD	0.41	2.68	12	1
1:A:261:LEU:CG	1:A:262:VAL:N	0.41	2.83	12	1
1:A:249:THR:O	1:A:259:SER:HA	0.41	2.15	14	1
1:A:113:GLY:HA3	1:A:143:ARG:NH1	0.41	2.30	16	1
1:A:12:GLN:CG	1:A:265:GLU:HB2	0.41	2.45	17	1
1:A:49:PHE:HB2	1:A:107:GLN:NE2	0.41	2.29	1	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:256:LEU:HD22	0.41	2.49	2	1
1:A:205:GLY:C	1:A:206:SER:OG	0.41	2.63	13	2
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:HB	0.41	2.45	7	1
1:A:42:ASN:N	1:A:73:LEU:HG	0.41	2.29	7	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:262:VAL:CG1	0.41	2.45	8	1
1:A:55:SER:HA	1:A:92:LYS:HE3	0.41	1.92	10	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:C	0.41	2.61	11	1
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLN:H	0.41	2.22	14	2
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:CD2	0.41	2.44	14	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:HD13	0.41	2.50	14	1
1:A:49:PHE:C	1:A:51:PRO:HD2	0.41	2.40	2	2
1:A:91:VAL:O	1:A:93:VAL:HG23	0.41	2.15	4	2
1:A:191:ASP:OD2	1:A:245:LYS:HE2	0.41	2.15	7	1
1:A:242:ASN:OD1	1:A:243:HIS:N	0.41	2.53	7	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:177:ASN:OD1	0.41	2.53	9	1
1:A:248:ALA:HB3	1:A:259:SER:OG	0.41	2.15	14	1
1:A:268:THR:C	1:A:269:ARG:OXT	0.41	2.62	16	1
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:CD1	0.41	2.42	17	1
1:A:18:ASN:O	1:A:19:ARG:C	0.41	2.62	18	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:73:LEU:HB2	0.41	2.15	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.41	1.93	3	1
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:192:ILE:HA	1:A:258:GLY:O	0.41	2.15	3	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:218:THR:HG21	0.41	2.16	4	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:237:ASN:O	0.41	2.38	5	1
1:A:191:ASP:OD2	1:A:245:LYS:CE	0.41	2.68	7	1
1:A:12:GLN:HB3	1:A:265:GLU:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:192:ILE:CG1	1:A:262:VAL:HG22	0.41	2.46	10	1
1:A:140:ALA:O	1:A:145:VAL:HB	0.41	2.16	11	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:64:THR:CG2	0.41	2.57	12	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.46	15	1
1:A:5:PRO:HD2	1:A:8:ILE:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:126:SER:O	1:A:161:TYR:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:185:GLN:N	1:A:185:GLN:CD	0.41	2.78	3	1
1:A:200:GLN:CA	1:A:209:ALA:O	0.41	2.68	4	1
1:A:123:SER:O	1:A:124:LEU:HB3	0.41	2.15	5	1
1:A:150:ALA:CB	1:A:215:SER:OG	0.41	2.69	8	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:258:GLY:N	0.41	2.30	8	1
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:195:PRO:C	0.41	2.99	11	1
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HG22	0.41	2.15	11	1
1:A:92:LYS:O	1:A:92:LYS:HD3	0.41	2.15	13	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:VAL:C	0.41	2.63	14	1
1:A:131:ALA:O	1:A:135:GLN:HB2	0.41	2.15	15	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:HB3	0.41	2.30	18	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:12:GLN:HA	0.41	2.16	4	2
1:A:70:ILE:O	1:A:71:ALA:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:24:SER:N	1:A:230:GLN:HG3	0.41	2.29	4	1
1:A:134:GLU:CD	1:A:165:TYR:CE1	0.41	2.99	5	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:229:LYS:HD2	0.41	1.92	7	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:210:SER:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HB2	0.41	2.16	11	1
1:A:195:PRO:HD3	1:A:261:LEU:CD1	0.41	2.46	11	1
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HB	0.41	2.16	14	1
1:A:202:THR:HA	1:A:208:TYR:CD1	0.41	2.51	14	1
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:HA	0.41	1.92	15	1
1:A:242:ASN:O	1:A:245:LYS:HG2	0.41	2.16	17	1
1:A:141:THR:O	1:A:142:SER:C	0.41	2.63	18	1
1:A:190:LEU:HB3	1:A:256:LEU:O	0.41	2.16	18	1
1:A:114:ASN:OD1	1:A:114:ASN:N	0.41	2.54	1	1
1:A:174:THR:HB	1:A:178:ASN:O	0.41	2.15	4	1
1:A:180:ARG:NH2	1:A:193:VAL:HG11	0.41	2.30	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HA	0.41	2.46	9	1
1:A:200:GLN:CG	1:A:210:SER:HB3	0.41	2.45	11	1
1:A:200:GLN:HG3	1:A:201:SER:N	0.41	2.29	12	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:VAL:HG23	0.41	2.41	14	1
1:A:107:GLN:O	1:A:110:GLU:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:5:PRO:O	1:A:9:SER:OG	0.41	2.38	1	1
1:A:128:SER:O	1:A:161:TYR:CE1	0.41	2.74	2	1
1:A:7:GLY:HA3	1:A:220:HIS:NE2	0.41	2.30	4	1
1:A:121:ASN:HD21	1:A:218:THR:HG23	0.41	1.76	4	1
1:A:12:GLN:HG2	1:A:265:GLU:CB	0.41	2.46	6	2
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:175:ASP:HB2	1:A:180:ARG:C	0.41	2.41	10	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:HB3	0.41	2.15	13	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:59:GLY:N	0.41	2.54	18	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:124:LEU:HD11	0.41	2.45	18	1
1:A:104:SER:O	1:A:107:GLN:HG3	0.41	2.15	1	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:CG1	0.41	2.67	3	1
1:A:8:ILE:C	1:A:11:VAL:HG22	0.41	2.41	5	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:HB2	0.41	1.93	5	1
1:A:156:ALA:C	1:A:158:SER:N	0.41	2.76	5	1
1:A:62:HIS:NE2	1:A:123:SER:CB	0.41	2.84	6	1
1:A:230:GLN:C	1:A:230:GLN:CD	0.41	2.89	6	1
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:HG2	0.41	1.92	8	1
1:A:247:THR:HG22	1:A:266:ALA:O	0.41	2.16	8	1
1:A:41:LEU:CD1	1:A:64:THR:HG23	0.41	2.43	9	1
1:A:42:ASN:O	1:A:88:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:HG3	0.41	2.51	10	1
1:A:261:LEU:HD13	1:A:262:VAL:H	0.41	1.76	10	1
1:A:265:GLU:OE2	1:A:269:ARG:CD	0.41	2.69	10	1
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:195:PRO:HB2	0.41	2.51	11	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:229:LYS:CD	0.41	2.46	12	1
1:A:199:VAL:CG2	1:A:211:LEU:O	0.41	2.69	12	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:GLN:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:123:SER:OG	1:A:215:SER:OG	0.41	2.35	13	1
1:A:163:ALA:O	1:A:170:ALA:HB2	0.41	2.15	13	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:263:ASN:HB3	0.41	2.16	16	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:90:ALA:CB	0.41	2.40	17	1
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:HB3	0.41	2.16	17	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:O	0.41	2.39	6	1
1:A:42:ASN:HB3	1:A:84:PRO:O	0.41	2.15	7	1
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HB3	0.41	2.51	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:GLY:HA3	1:A:202:THR:HG22	0.41	1.93	10	1
1:A:111:TRP:O	1:A:111:TRP:CG	0.41	2.74	10	1
1:A:198:ASN:CA	1:A:212:ASN:OD1	0.41	2.69	11	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:HB2	0.41	2.16	12	1
1:A:107:GLN:OE1	1:A:107:GLN:HA	0.41	2.16	14	1
1:A:42:ASN:OD1	1:A:73:LEU:CD1	0.41	2.69	16	1
1:A:151:SER:OG	1:A:185:GLN:O	0.41	2.38	17	1
1:A:235:TRP:N	1:A:235:TRP:CD1	0.41	2.86	17	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:183:PHE:CD2	0.40	2.89	3	1
1:A:159:ILE:HD11	1:A:189:GLY:HA3	0.40	1.93	3	1
1:A:172:GLY:N	1:A:192:ILE:O	0.40	2.54	3	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:OD1	0.40	2.39	12	1
1:A:8:ILE:HD12	1:A:220:HIS:NE2	0.40	2.32	13	1
1:A:12:GLN:HG3	1:A:265:GLU:HB2	0.40	1.91	13	1
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:HB2	0.40	2.16	13	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HG3	0.40	2.16	16	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:HG2	0.40	2.16	1	1
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:HB2	0.40	2.17	5	1
1:A:147:VAL:O	1:A:168:ALA:HB1	0.40	2.15	8	1
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:C	0.40	2.64	14	1
1:A:196:GLY:O	1:A:212:ASN:HB3	0.40	2.16	14	1
1:A:21:LEU:HB3	1:A:227:LEU:HD22	0.40	1.92	15	1
1:A:129:PRO:O	1:A:130:SER:OG	0.40	2.33	15	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:SER:HB2	0.40	2.15	15	1
1:A:225:ALA:O	1:A:226:ALA:C	0.40	2.64	16	1
1:A:73:LEU:HG	1:A:84:PRO:O	0.40	2.15	18	1
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:ND2	0.40	2.54	18	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HA	0.40	1.75	1	1
1:A:231:LYS:HG3	1:A:232:ASN:N	0.40	2.30	1	1
1:A:173:ALA:C	1:A:174:THR:HG23	0.40	2.40	3	1
1:A:155:GLY:HA2	1:A:185:GLN:NE2	0.40	2.31	7	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:ND1	0.40	2.84	9	1
1:A:200:GLN:CA	1:A:210:SER:HB3	0.40	2.47	9	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:CA	0.40	2.70	10	1
1:A:55:SER:O	1:A:92:LYS:HE2	0.40	2.16	11	1
1:A:155:GLY:HA2	1:A:185:GLN:CD	0.40	2.42	12	1
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:CB	0.40	2.84	13	1
1:A:125:GLY:C	1:A:160:SER:CB	0.40	2.95	13	1
1:A:77:ILE:HG13	1:A:208:TYR:OH	0.40	2.17	14	1
1:A:162:PRO:HG3	1:A:165:TYR:OH	0.40	2.16	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:GLN:CD	1:A:265:GLU:HB2	0.40	2.41	3	1
1:A:219:PRO:HA	1:A:222:ALA:HB3	0.40	1.92	4	1
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CH2	0.40	2.89	5	1
1:A:112:ALA:O	1:A:117:MET:O	0.40	2.40	6	1
1:A:24:SER:HA	1:A:85:ASN:CB	0.40	2.47	8	1
1:A:149:ALA:O	1:A:170:ALA:HA	0.40	2.16	12	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:211:LEU:HG	0.40	2.32	15	1
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:HB	0.40	1.91	18	1
1:A:8:ILE:HD11	1:A:220:HIS:NE2	0.40	2.31	1	1
1:A:49:PHE:CB	1:A:107:GLN:CD	0.40	2.95	1	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD2	0.40	2.51	2	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:244:LEU:CD2	0.40	2.46	2	1
1:A:239:GLN:OE1	1:A:239:GLN:HA	0.40	2.16	3	1
1:A:134:GLU:CD	1:A:165:TYR:CD1	0.40	2.99	5	1
1:A:138:ASN:O	1:A:142:SER:OG	0.40	2.38	5	1
1:A:156:ALA:N	1:A:185:GLN:HG2	0.40	2.32	5	1
1:A:227:LEU:HD23	1:A:227:LEU:HA	0.40	1.79	6	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:86:ALA:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:60:ASN:CB	1:A:96:ALA:HB1	0.40	2.45	18	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	256/269 (95%)	180±6 (71±2%)	51±4 (20±2%)	24±4 (9±2%)	1	10
All	All	4608/4842 (95%)	3249 (71%)	923 (20%)	436 (9%)	1	10

All 98 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	84	PRO	18
1	A	163	ALA	18
1	A	198	ASN	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	14	PRO	15
1	A	79	VAL	15
1	A	35	ILE	14
1	A	165	TYR	14
1	A	199	VAL	13
1	A	181	ALA	12
1	A	58	ASP	10
1	A	155	GLY	10
1	A	75	ASN	10
1	A	60	ASN	9
1	A	92	LYS	8
1	A	154	SER	8
1	A	55	SER	8
1	A	72	ALA	8
1	A	8	ILE	7
1	A	206	SER	7
1	A	188	ALA	7
1	A	9	SER	7
1	A	71	ALA	6
1	A	59	GLY	6
1	A	73	LEU	6
1	A	156	ALA	6
1	A	178	ASN	6
1	A	36	SER	5
1	A	76	SER	5
1	A	153	ASN	5
1	A	259	SER	5
1	A	125	GLY	5
1	A	6	TRP	5
1	A	158	SER	5
1	A	192	ILE	5
1	A	159	ILE	5
1	A	249	THR	4
1	A	32	ASP	4
1	A	51	PRO	4
1	A	162	PRO	4
1	A	24	SER	4
1	A	151	SER	4
1	A	100	GLY	3
1	A	117	MET	3
1	A	179	ASN	3
1	A	189	GLY	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	258	GLY	3
1	A	175	ASP	3
1	A	180	ARG	3
1	A	7	GLY	3
1	A	152	GLY	3
1	A	86	ALA	3
1	A	20	GLY	3
1	A	96	ALA	3
1	A	115	ASN	3
1	A	78	GLY	3
1	A	207	THR	3
1	A	4	VAL	3
1	A	37	THR	2
1	A	63	GLY	2
1	A	184	SER	2
1	A	33	THR	2
1	A	235	TRP	2
1	A	166	ALA	2
1	A	205	GLY	2
1	A	77	ILE	2
1	A	185	GLN	2
1	A	186	TYR	2
1	A	80	LEU	2
1	A	43	ILE	2
1	A	22	THR	2
1	A	167	ASN	1
1	A	168	ALA	1
1	A	126	SER	1
1	A	61	GLY	1
1	A	237	ASN	1
1	A	164	ARG	1
1	A	257	TYR	1
1	A	64	THR	1
1	A	47	ALA	1
1	A	87	GLU	1
1	A	177	ASN	1
1	A	197	VAL	1
1	A	204	PRO	1
1	A	50	VAL	1
1	A	116	GLY	1
1	A	187	GLY	1
1	A	191	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	183	PHE	1
1	A	232	ASN	1
1	A	241	ARG	1
1	A	242	ASN	1
1	A	56	THR	1
1	A	62	HIS	1
1	A	145	VAL	1
1	A	130	SER	1
1	A	23	GLY	1
1	A	3	SER	1
1	A	95	GLY	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	186/194 (96%)	121±5 (65±3%)	65±5 (35±3%)	1	10
All	All	3348/3492 (96%)	2180 (65%)	1168 (35%)	1	10

All 157 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	91	VAL	18
1	A	263	ASN	18
1	A	38	HIS	17
1	A	143	ARG	16
1	A	147	VAL	16
1	A	160	SER	16
1	A	211	LEU	16
1	A	236	SER	16
1	A	244	LEU	16
1	A	22	THR	15
1	A	137	VAL	15
1	A	203	TYR	15
1	A	124	LEU	15
1	A	151	SER	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	159	ILE	14
1	A	186	TYR	14
1	A	133	LEU	14
1	A	21	LEU	13
1	A	118	HIS	13
1	A	207	THR	13
1	A	262	VAL	13
1	A	101	SER	13
1	A	126	SER	13
1	A	8	ILE	12
1	A	19	ARG	12
1	A	105	ILE	12
1	A	210	SER	12
1	A	234	SER	12
1	A	245	LYS	12
1	A	93	VAL	12
1	A	6	TRP	12
1	A	56	THR	11
1	A	10	ARG	11
1	A	82	VAL	11
1	A	169	MET	11
1	A	4	VAL	10
1	A	27	LYS	10
1	A	134	GLU	10
1	A	216	MET	10
1	A	229	LYS	10
1	A	231	LYS	10
1	A	164	ARG	10
1	A	201	SER	10
1	A	148	VAL	10
1	A	9	SER	9
1	A	35	ILE	9
1	A	154	SER	9
1	A	232	ASN	9
1	A	241	ARG	9
1	A	239	GLN	9
1	A	42	ASN	9
1	A	139	SER	9
1	A	191	ASP	9
1	A	185	GLN	9
1	A	230	GLN	9
1	A	33	THR	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	36	SER	8
1	A	37	THR	8
1	A	50	VAL	8
1	A	60	ASN	8
1	A	103	SER	8
1	A	123	SER	8
1	A	142	SER	8
1	A	200	GLN	8
1	A	32	ASP	8
1	A	107	GLN	8
1	A	158	SER	8
1	A	175	ASP	8
1	A	92	LYS	7
1	A	180	ARG	7
1	A	214	THR	7
1	A	215	SER	7
1	A	256	LEU	7
1	A	77	ILE	7
1	A	165	TYR	7
1	A	122	LEU	7
1	A	177	ASN	7
1	A	183	PHE	7
1	A	246	ASN	7
1	A	76	SER	7
1	A	206	SER	7
1	A	269	ARG	7
1	A	202	THR	7
1	A	130	SER	6
1	A	141	THR	6
1	A	208	TYR	6
1	A	250	SER	6
1	A	18	ASN	6
1	A	44	ARG	6
1	A	167	ASN	6
1	A	182	SER	6
1	A	55	SER	6
1	A	104	SER	6
1	A	75	ASN	6
1	A	192	ILE	6
1	A	43	ILE	5
1	A	64	THR	5
1	A	80	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	114	ASN	5
1	A	117	MET	5
1	A	138	ASN	5
1	A	261	LEU	5
1	A	48	SER	5
1	A	58	ASP	5
1	A	110	GLU	5
1	A	176	GLN	5
1	A	178	ASN	5
1	A	212	ASN	5
1	A	249	THR	5
1	A	40	ASP	5
1	A	135	GLN	5
1	A	218	THR	5
1	A	161	TYR	5
1	A	259	SER	5
1	A	115	ASN	5
1	A	179	ASN	5
1	A	12	GLN	4
1	A	49	PHE	4
1	A	65	HIS	4
1	A	174	THR	4
1	A	3	SER	4
1	A	24	SER	4
1	A	94	LEU	4
1	A	198	ASN	4
1	A	85	ASN	4
1	A	102	VAL	4
1	A	243	HIS	4
1	A	128	SER	4
1	A	268	THR	4
1	A	28	VAL	3
1	A	153	ASN	3
1	A	237	ASN	3
1	A	17	HIS	3
1	A	57	GLN	3
1	A	184	SER	3
1	A	74	ASN	3
1	A	87	GLU	3
1	A	119	VAL	3
1	A	62	HIS	3
1	A	41	LEU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	220	HIS	2
1	A	251	LEU	2
1	A	79	VAL	2
1	A	190	LEU	2
1	A	265	GLU	2
1	A	247	THR	2
1	A	257	TYR	2
1	A	30	VAL	2
1	A	146	LEU	2
1	A	238	VAL	1
1	A	235	TRP	1
1	A	69	THR	1
1	A	31	LEU	1
1	A	242	ASN	1
1	A	73	LEU	1
1	A	199	VAL	1
1	A	197	VAL	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 oligosaccharides 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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided