



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 08:56 AM UTC

PDB ID : 1CJ5 / pdb_00001cj5
Title : BOVINE BETA-LACTOGLOBULIN A
Authors : Kuwata, K.; Hoshino, M.; Forge, V.; Era, S.; Batt, C.A.; Goto, Y.
Deposited on : 1999-04-22

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The 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

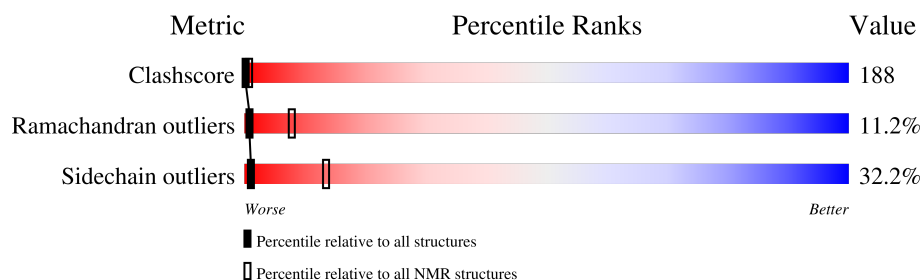
1 Overall quality at a glance

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	162	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 7 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:5-A:136, A:145-A:159 (147)	0.67	7

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 1 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2587 atoms, of which 1302 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called BETA-LACTOGLOBULIN A.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	162	Total	C	H	N	O	S	0
			2587	821	1302	206	249	9	

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

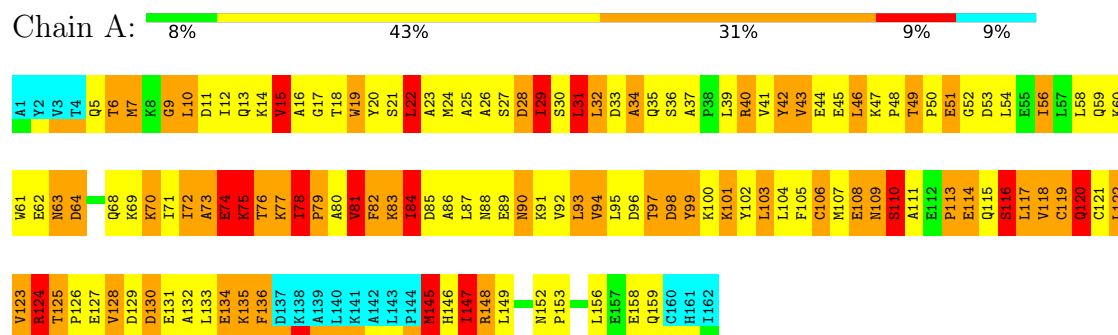
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ALA	-	insertion	UNP P02754
A	2	TYR	-	insertion	UNP P02754
A	105	PHE	VAL	conflict	UNP P02754

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: BETA-LACTOGLOBULIN A

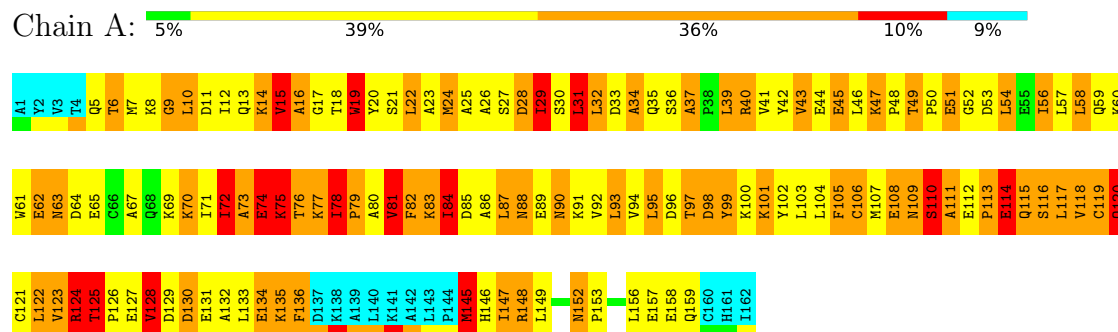


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

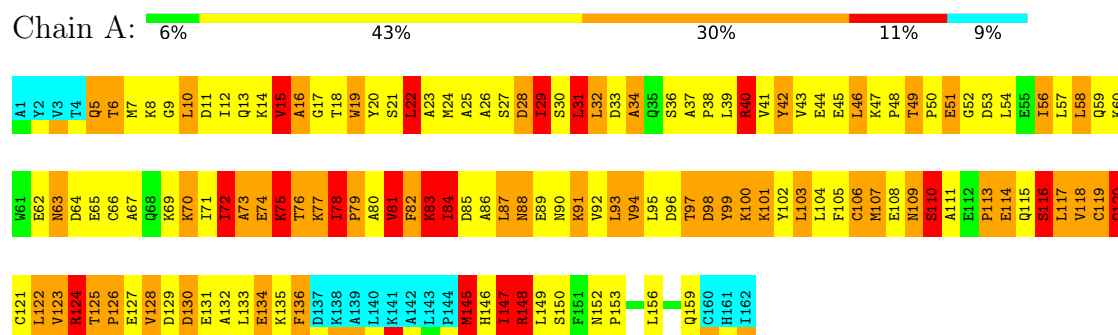
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



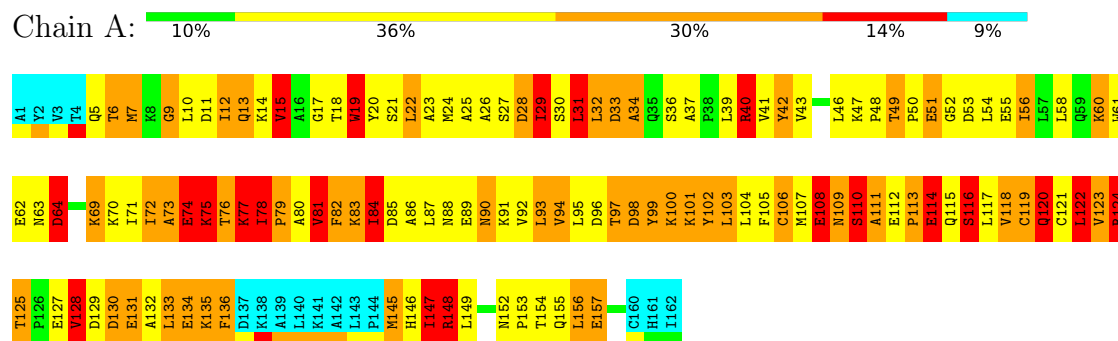
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



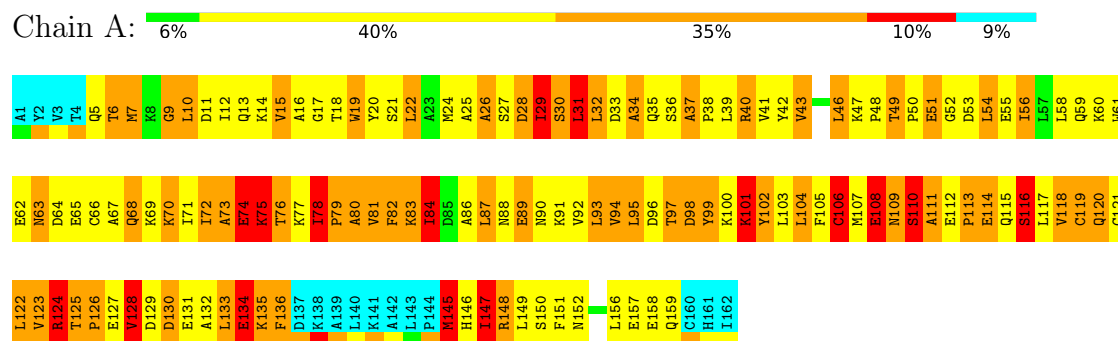
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



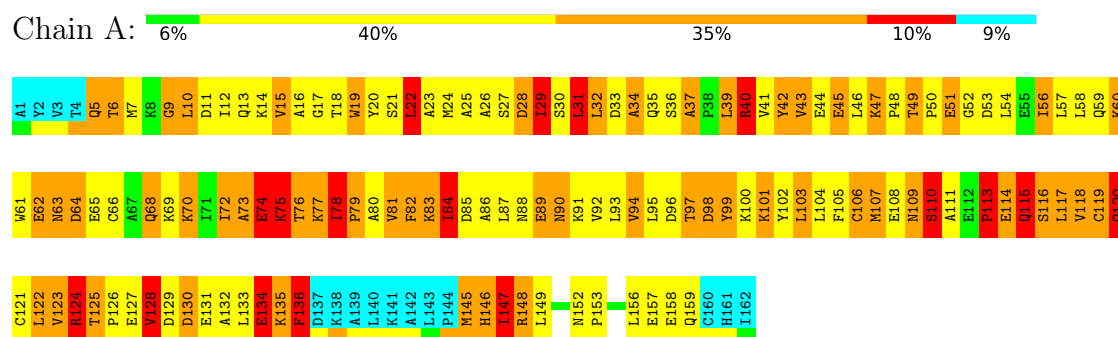
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



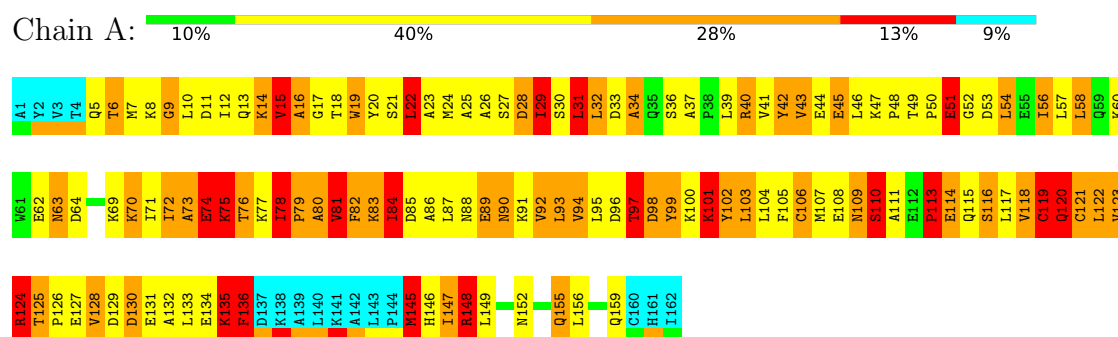
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



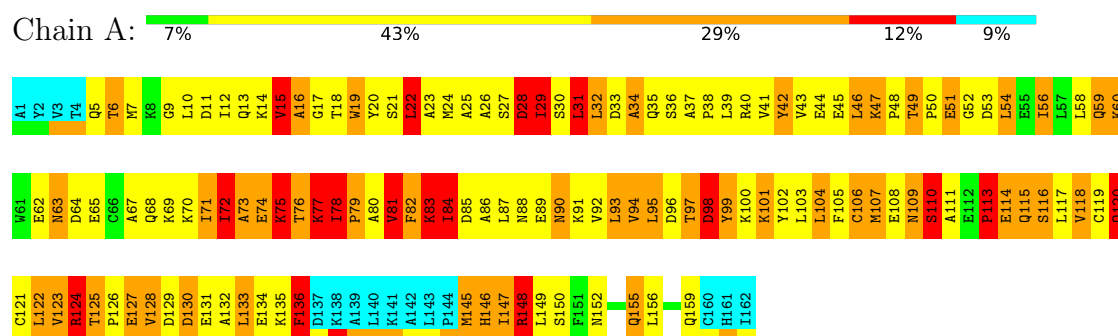
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

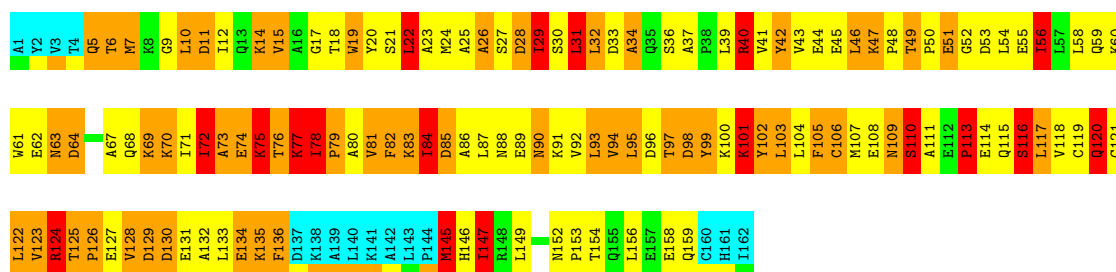
- Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



4.2.8 Score per residue for model 8

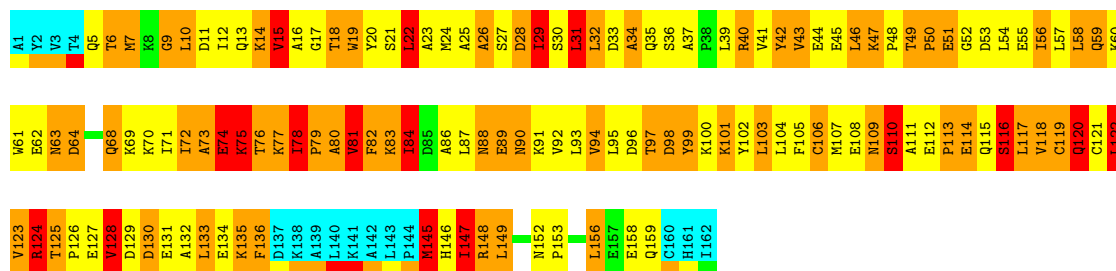
- Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A





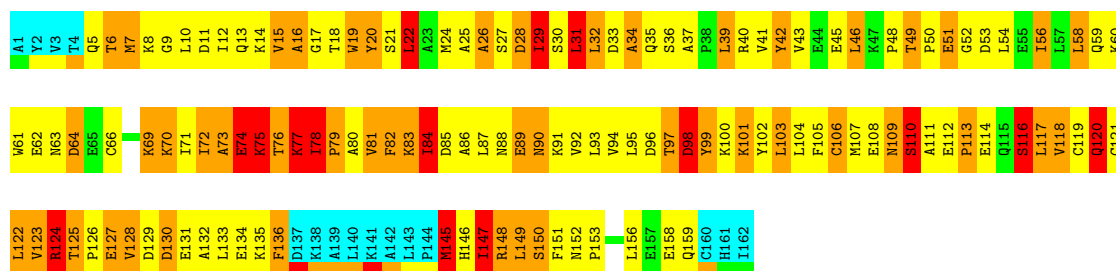
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: BETA-LACTOGLOBULIN A



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINTS VIOLATION*.

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.70±0.01	14±2/1192 (1.2± 0.1%)	1.96±0.02	33±3/1615 (2.0± 0.2%)
All	All	1.70	139/11920 (1.2%)	1.96	327/16150 (2.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	2.8±0.4
All	All	0	28

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	136	PHE	CA-C	-9.05	1.42	1.52	8	5
1	A	75	LYS	CA-C	-8.75	1.42	1.52	9	10
1	A	28	ASP	C-N	-8.08	1.22	1.33	4	10
1	A	76	THR	C-N	-7.40	1.24	1.33	9	10
1	A	120	GLN	C-N	-7.38	1.23	1.33	1	10
1	A	110	SER	N-CA	7.34	1.55	1.46	3	10
1	A	122	LEU	C-N	-7.15	1.26	1.33	6	10
1	A	6	THR	C-N	-6.76	1.24	1.33	8	10
1	A	111	ALA	N-CA	6.63	1.54	1.46	3	3
1	A	84	ILE	C-N	-6.59	1.24	1.33	6	10
1	A	81	VAL	C-N	-6.56	1.24	1.33	8	10
1	A	84	ILE	CA-C	-6.41	1.45	1.52	7	8
1	A	136	PHE	C-O	-5.84	1.15	1.23	4	1
1	A	6	THR	CA-C	-5.78	1.46	1.52	8	6
1	A	19	TRP	C-N	-5.77	1.25	1.33	1	4
1	A	75	LYS	C-N	-5.63	1.25	1.33	7	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	119	CYS	C-N	-5.60	1.26	1.33	4	7
1	A	136	PHE	N-CA	-5.54	1.39	1.46	2	1
1	A	136	PHE	C-N	-5.50	1.26	1.34	5	1
1	A	28	ASP	N-CA	-5.16	1.40	1.46	5	1
1	A	125	THR	N-CA	5.15	1.53	1.46	1	1
1	A	83	LYS	N-CA	-5.05	1.39	1.46	1	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	84	ILE	N-CA-C	-10.95	92.65	108.53	1	10
1	A	130	ASP	N-CA-C	-10.85	99.44	112.89	3	1
1	A	6	THR	N-CA-C	-10.84	92.38	109.72	6	10
1	A	29	ILE	N-CA-CB	-10.33	94.19	111.23	4	10
1	A	9	GLY	N-CA-C	-10.26	100.67	115.64	3	10
1	A	136	PHE	N-CA-C	-10.16	100.42	113.12	10	10
1	A	74	GLU	CA-C-N	-9.36	109.97	122.42	4	10
1	A	74	GLU	C-N-CA	-9.36	109.97	122.42	4	10
1	A	106	CYS	N-CA-CB	-8.97	95.74	111.08	8	3
1	A	22	LEU	N-CA-C	-8.71	101.79	111.28	8	10
1	A	128	VAL	N-CA-C	-8.42	98.60	109.80	3	10
1	A	99	TYR	N-CA-C	-8.00	103.31	113.23	1	10
1	A	6	THR	CA-C-N	-7.52	110.67	121.42	6	10
1	A	6	THR	C-N-CA	-7.52	110.67	121.42	6	10
1	A	109	ASN	N-CA-CB	-7.01	100.50	111.23	4	10
1	A	85	ASP	N-CA-CB	-6.96	98.73	110.49	7	7
1	A	15	VAL	N-CA-CB	-6.85	103.24	112.22	7	6
1	A	31	LEU	N-CA-C	-6.72	104.56	112.89	7	10
1	A	16	ALA	N-CA-C	6.70	119.44	109.59	7	5
1	A	43	VAL	N-CA-CB	-6.47	103.67	110.72	9	5
1	A	147	ILE	N-CA-C	-6.45	98.17	107.78	2	8
1	A	113	PRO	CB-CA-C	-6.37	101.05	111.56	9	7
1	A	75	LYS	N-CA-C	-6.36	98.18	108.41	4	5
1	A	109	ASN	N-CA-C	6.32	119.17	107.60	2	7
1	A	108	GLU	CA-C-N	-6.16	114.78	123.03	4	3
1	A	108	GLU	C-N-CA	-6.16	114.78	123.03	4	3
1	A	73	ALA	N-CA-CB	-6.07	100.98	110.87	6	10
1	A	83	LYS	N-CA-C	-5.98	99.49	109.24	6	8
1	A	82	PHE	N-CA-CB	-5.96	100.44	111.53	7	9
1	A	83	LYS	CA-C-N	-5.96	115.42	123.10	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	83	LYS	C-N-CA	-5.96	115.42	123.10	8	3
1	A	116	SER	N-CA-C	-5.85	106.31	113.50	8	6
1	A	128	VAL	CA-C-N	-5.84	112.80	122.32	3	1
1	A	128	VAL	C-N-CA	-5.84	112.80	122.32	3	1
1	A	134	GLU	N-CA-C	-5.84	104.27	111.33	5	3
1	A	102	TYR	N-CA-CB	-5.80	102.34	111.05	3	4
1	A	72	ILE	CA-C-N	-5.80	114.60	122.95	7	10
1	A	72	ILE	C-N-CA	-5.80	114.60	122.95	7	10
1	A	89	GLU	N-CA-CB	-5.79	101.59	110.85	10	5
1	A	136	PHE	O-C-N	5.71	129.66	122.19	8	1
1	A	135	LYS	CA-C-N	5.62	131.87	121.52	6	1
1	A	135	LYS	C-N-CA	5.62	131.87	121.52	6	1
1	A	78	ILE	N-CA-CB	-5.62	103.35	111.21	9	10
1	A	115	GLN	N-CA-C	-5.57	106.69	112.93	1	3
1	A	98	ASP	N-CA-CB	-5.48	105.60	113.65	10	1
1	A	114	GLU	N-CA-C	-5.46	105.72	112.38	1	2
1	A	136	PHE	CA-C-N	5.46	129.96	120.68	8	1
1	A	136	PHE	C-N-CA	5.46	129.96	120.68	8	1
1	A	136	PHE	N-CA-CB	-5.41	102.15	110.42	10	2
1	A	94	VAL	N-CA-CB	-5.29	104.80	111.41	9	6
1	A	14	LYS	N-CA-CB	-5.28	102.17	110.46	6	1
1	A	18	THR	CA-C-N	-5.28	114.58	122.39	9	2
1	A	18	THR	C-N-CA	-5.28	114.58	122.39	9	2
1	A	20	TYR	N-CA-CB	-5.24	102.47	110.85	10	1
1	A	26	ALA	N-CA-CB	-5.23	101.86	111.37	9	4
1	A	56	ILE	N-CA-CB	-5.21	104.22	111.41	8	1
1	A	82	PHE	CA-C-N	-5.20	115.54	122.72	6	5
1	A	82	PHE	C-N-CA	-5.20	115.54	122.72	6	5
1	A	71	ILE	N-CA-CB	-5.17	105.38	111.90	7	1
1	A	136	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	8	1
1	A	123	VAL	N-CA-CB	-5.08	106.55	112.34	3	1
1	A	43	VAL	N-CA-C	5.03	115.83	108.58	6	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	40	ARG	Sidechain	10
1	A	124	ARG	Sidechain	9
1	A	148	ARG	Sidechain	9

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	1172	1181	1181	442±8
All	All	11720	11810	11810	4415

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 188.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:TRP:CG	1:A:46:LEU:HD11	1.10	1.80	8	3
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:HD13	1.10	1.76	4	3
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:CD1	1.09	1.77	4	7
1:A:103:LEU:O	1:A:121:CYS:HA	1.08	1.45	9	10
1:A:12:ILE:HG23	1:A:54:LEU:HD13	1.08	1.08	10	7
1:A:22:LEU:HD22	1:A:132:ALA:HB3	1.06	1.27	1	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:132:ALA:HB2	1.06	1.14	8	8
1:A:32:LEU:HD21	1:A:149:LEU:HD11	1.05	1.26	2	2
1:A:41:VAL:HG21	1:A:58:LEU:HD22	1.02	1.25	5	6
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:LEU:N	1.02	1.69	6	7
1:A:103:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD12	1.01	1.33	1	2
1:A:22:LEU:HD12	1:A:132:ALA:HB3	1.00	1.31	7	4
1:A:84:ILE:HD12	1:A:92:VAL:HG22	1.00	1.33	7	2
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:103:LEU:HD13	1.00	1.92	1	1
1:A:26:ALA:HB2	1:A:32:LEU:HD23	0.99	1.28	5	4
1:A:104:LEU:HD23	1:A:136:PHE:CZ	0.98	1.93	10	1
1:A:97:THR:OG1	1:A:103:LEU:HD12	0.98	1.58	7	3
1:A:105:PHE:CE2	1:A:107:MET:HE1	0.98	1.92	8	1
1:A:73:ALA:HB1	1:A:82:PHE:CG	0.96	1.95	3	10
1:A:12:ILE:HG23	1:A:54:LEU:CD1	0.96	1.90	4	5
1:A:25:ALA:O	1:A:118:VAL:HG23	0.96	1.60	4	10
1:A:56:ILE:HD13	1:A:56:ILE:O	0.95	1.61	9	4
1:A:32:LEU:CD2	1:A:149:LEU:HD11	0.95	1.92	4	2
1:A:26:ALA:HB2	1:A:32:LEU:HD13	0.95	1.39	10	3
1:A:19:TRP:CE3	1:A:46:LEU:HD21	0.94	1.97	4	5
1:A:26:ALA:HB2	1:A:118:VAL:HB	0.94	1.37	3	2
1:A:12:ILE:CG2	1:A:54:LEU:HD13	0.94	1.92	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:TRP:CD1	1:A:46:LEU:HD11	0.93	1.98	1	3
1:A:152:ASN:O	1:A:156:LEU:HD13	0.93	1.62	4	4
1:A:32:LEU:HD21	1:A:149:LEU:HD21	0.93	1.36	7	2
1:A:25:ALA:HB1	1:A:145:MET:HG2	0.93	1.40	10	2
1:A:73:ALA:CA	1:A:82:PHE:HB3	0.93	1.94	8	10
1:A:31:LEU:CD2	1:A:32:LEU:HD12	0.93	1.91	2	1
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HD13	0.93	1.36	9	3
1:A:31:LEU:HD12	1:A:116:SER:HA	0.93	1.39	8	3
1:A:19:TRP:CD2	1:A:46:LEU:HD21	0.93	1.97	3	4
1:A:12:ILE:O	1:A:15:VAL:HG22	0.92	1.63	7	7
1:A:46:LEU:CD1	1:A:54:LEU:HD21	0.92	1.95	7	3
1:A:25:ALA:HB1	1:A:145:MET:CG	0.92	1.95	9	4
1:A:32:LEU:HD23	1:A:147:ILE:CG1	0.92	1.95	4	3
1:A:124:ARG:O	1:A:125:THR:O	0.91	1.88	1	10
1:A:32:LEU:HD23	1:A:147:ILE:HG13	0.91	1.38	4	2
1:A:56:ILE:HD12	1:A:71:ILE:HD12	0.91	1.40	3	3
1:A:12:ILE:CD1	1:A:54:LEU:HD22	0.90	1.94	6	5
1:A:19:TRP:CD1	1:A:46:LEU:HD21	0.90	2.01	1	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:58:LEU:HD22	0.90	1.96	8	5
1:A:31:LEU:HD23	1:A:116:SER:O	0.90	1.67	4	3
1:A:12:ILE:CG1	1:A:54:LEU:HD13	0.90	1.97	6	3
1:A:123:VAL:HG13	1:A:132:ALA:CB	0.90	1.97	8	7
1:A:19:TRP:CD1	1:A:122:LEU:HD13	0.90	2.01	1	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HB	0.90	1.44	1	3
1:A:20:TYR:O	1:A:123:VAL:HG23	0.89	1.66	7	8
1:A:31:LEU:HD13	1:A:116:SER:O	0.89	1.67	6	4
1:A:97:THR:HA	1:A:102:TYR:O	0.89	1.66	6	10
1:A:12:ILE:HD11	1:A:19:TRP:CH2	0.89	2.02	9	4
1:A:26:ALA:HB3	1:A:31:LEU:HD21	0.89	1.43	2	3
1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:O	0.89	1.65	7	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:122:LEU:HD13	0.89	2.03	4	2
1:A:113:PRO:O	1:A:116:SER:N	0.89	2.05	4	5
1:A:22:LEU:CD1	1:A:132:ALA:HB3	0.88	1.98	10	4
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HG	0.87	1.47	6	5
1:A:23:ALA:HB3	1:A:136:PHE:CZ	0.86	2.04	9	3
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:HD13	0.86	1.69	8	8
1:A:71:ILE:HG23	1:A:107:MET:HE1	0.86	1.42	1	2
1:A:31:LEU:HD13	1:A:116:SER:C	0.86	1.95	7	4
1:A:104:LEU:HD23	1:A:136:PHE:CE1	0.86	2.04	10	1
1:A:24:MET:O	1:A:149:LEU:HD23	0.86	1.70	3	3
1:A:19:TRP:O	1:A:43:VAL:O	0.86	1.93	3	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:THR:O	1:A:78:ILE:HD12	0.86	1.71	10	8
1:A:31:LEU:HD23	1:A:116:SER:C	0.86	1.96	9	3
1:A:41:VAL:HB	1:A:58:LEU:HD13	0.86	1.45	3	5
1:A:22:LEU:HD12	1:A:123:VAL:HG13	0.86	1.43	10	1
1:A:12:ILE:CG1	1:A:54:LEU:HD22	0.86	2.01	6	6
1:A:148:ARG:O	1:A:149:LEU:HD13	0.85	1.72	10	4
1:A:32:LEU:HD21	1:A:149:LEU:CD1	0.85	2.01	4	2
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:HD13	0.85	1.45	2	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:97:THR:HG22	0.85	1.45	7	4
1:A:97:THR:HB	1:A:103:LEU:HD12	0.84	1.47	1	1
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:HD22	0.84	1.49	5	7
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HD12	0.84	1.49	2	3
1:A:103:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HD12	0.84	2.03	10	6
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	0.84	1.32	4	3
1:A:43:VAL:HG13	1:A:56:ILE:HD11	0.83	1.47	8	2
1:A:12:ILE:HD11	1:A:54:LEU:HD22	0.83	1.48	6	2
1:A:53:ASP:OD2	1:A:78:ILE:HD11	0.83	1.73	9	3
1:A:32:LEU:HD21	1:A:149:LEU:CD2	0.83	2.02	7	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:145:MET:HG3	0.83	1.51	9	3
1:A:84:ILE:HG23	1:A:92:VAL:CG2	0.83	2.03	8	7
1:A:31:LEU:HD23	1:A:32:LEU:HD12	0.83	1.51	2	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:121:CYS:SG	0.83	2.13	4	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:116:SER:CA	0.83	2.02	5	4
1:A:152:ASN:O	1:A:156:LEU:HD23	0.83	1.71	5	2
1:A:15:VAL:HG23	1:A:46:LEU:HD22	0.82	1.49	9	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:71:ILE:HD12	0.82	2.03	3	3
1:A:26:ALA:HB3	1:A:147:ILE:CG2	0.81	2.06	9	3
1:A:20:TYR:CB	1:A:123:VAL:HG23	0.81	2.05	10	5
1:A:12:ILE:HG13	1:A:54:LEU:HD13	0.81	1.51	6	2
1:A:106:CYS:HB3	1:A:119:CYS:CA	0.81	2.05	6	8
1:A:41:VAL:HG12	1:A:60:LYS:HD2	0.81	1.52	3	1
1:A:73:ALA:HB1	1:A:82:PHE:CD2	0.81	2.09	9	8
1:A:31:LEU:HD22	1:A:116:SER:HA	0.81	1.49	6	4
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:LYS:HG3	0.81	1.52	3	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD12	0.81	1.91	10	3
1:A:97:THR:CB	1:A:103:LEU:HD12	0.81	2.05	1	3
1:A:110:SER:C	1:A:113:PRO:HD3	0.80	2.00	9	8
1:A:75:LYS:O	1:A:78:ILE:N	0.80	2.14	5	10
1:A:73:ALA:HA	1:A:82:PHE:HB3	0.80	1.50	2	10
1:A:31:LEU:HD12	1:A:116:SER:CA	0.80	2.07	8	3
1:A:70:LYS:HE3	1:A:72:ILE:HD11	0.80	1.54	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:CYS:HA	1:A:118:VAL:O	0.80	1.77	7	10
1:A:71:ILE:HD12	1:A:107:MET:HE2	0.80	1.51	2	1
1:A:26:ALA:C	1:A:145:MET:HE3	0.79	2.02	10	4
1:A:73:ALA:HB1	1:A:82:PHE:CB	0.79	2.07	1	10
1:A:22:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HG	0.79	1.50	4	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:122:LEU:CD1	0.79	2.07	1	3
1:A:19:TRP:CG	1:A:122:LEU:HD12	0.79	2.12	3	2
1:A:109:ASN:C	1:A:113:PRO:CG	0.79	2.56	4	3
1:A:58:LEU:HD21	1:A:71:ILE:CG1	0.79	2.08	6	2
1:A:56:ILE:HD13	1:A:56:ILE:C	0.79	2.03	8	4
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HD12	0.79	1.77	4	1
1:A:129:ASP:O	1:A:131:GLU:N	0.78	2.16	9	9
1:A:46:LEU:HD23	1:A:56:ILE:HB	0.78	1.53	8	3
1:A:24:MET:HE3	1:A:39:LEU:O	0.78	1.77	1	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:ALA:HB2	0.78	1.53	1	1
1:A:5:GLN:C	1:A:95:LEU:HD13	0.78	2.02	4	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:118:VAL:HB	0.78	1.55	9	3
1:A:28:ASP:O	1:A:30:SER:N	0.78	2.15	4	10
1:A:72:ILE:HG22	1:A:74:GLU:OE2	0.78	1.79	6	4
1:A:106:CYS:CA	1:A:119:CYS:HA	0.78	2.08	3	10
1:A:128:VAL:HG22	1:A:153:PRO:CB	0.78	2.07	8	4
1:A:15:VAL:HG11	1:A:97:THR:OG1	0.78	1.78	9	8
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:CG	0.78	2.08	6	5
1:A:15:VAL:HG21	1:A:19:TRP:CZ2	0.78	2.14	6	4
1:A:108:GLU:OE1	1:A:117:LEU:HD12	0.78	1.79	10	4
1:A:19:TRP:CD1	1:A:46:LEU:HD22	0.78	2.14	2	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:118:VAL:HG11	0.78	1.56	4	2
1:A:39:LEU:HD23	1:A:118:VAL:CG1	0.77	2.09	4	2
1:A:21:SER:O	1:A:156:LEU:HD22	0.77	1.79	10	1
1:A:92:VAL:C	1:A:93:LEU:HD13	0.77	2.04	3	4
1:A:48:PRO:HB3	1:A:54:LEU:HD12	0.77	1.53	4	7
1:A:41:VAL:HG21	1:A:58:LEU:CD2	0.77	2.07	5	2
1:A:32:LEU:CD2	1:A:149:LEU:HD21	0.77	2.08	7	3
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD22	0.77	1.93	10	4
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:HD22	0.77	2.05	1	2
1:A:58:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	0.77	1.54	3	2
1:A:75:LYS:CB	1:A:81:VAL:O	0.77	2.33	5	10
1:A:110:SER:N	1:A:113:PRO:CG	0.77	2.47	1	9
1:A:97:THR:HB	1:A:103:LEU:HD13	0.77	1.56	10	7
1:A:22:LEU:HG	1:A:132:ALA:HB3	0.77	1.56	4	1
1:A:75:LYS:O	1:A:76:THR:C	0.76	2.28	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:VAL:HG12	1:A:60:LYS:CD	0.76	2.10	3	1
1:A:105:PHE:O	1:A:120:GLN:N	0.76	2.18	7	10
1:A:56:ILE:HG13	1:A:71:ILE:HD12	0.76	1.55	1	1
1:A:71:ILE:HD12	1:A:107:MET:HE1	0.76	1.57	7	1
1:A:106:CYS:HB3	1:A:118:VAL:C	0.76	2.05	1	8
1:A:19:TRP:CG	1:A:122:LEU:HD13	0.76	2.15	6	4
1:A:128:VAL:HG22	1:A:153:PRO:HB2	0.76	1.54	9	2
1:A:58:LEU:HD13	1:A:58:LEU:N	0.76	1.95	9	2
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:N	0.76	1.94	8	4
1:A:39:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG11	0.76	1.56	7	1
1:A:106:CYS:HG	1:A:119:CYS:HG	0.76	1.22	10	4
1:A:106:CYS:CB	1:A:119:CYS:HA	0.76	2.10	4	10
1:A:94:VAL:HG13	1:A:105:PHE:HB3	0.76	1.57	6	2
1:A:84:ILE:O	1:A:89:GLU:O	0.75	2.05	7	10
1:A:96:ASP:O	1:A:103:LEU:HA	0.75	1.82	9	10
1:A:10:LEU:HD23	1:A:80:ALA:CB	0.75	2.11	2	1
1:A:41:VAL:CB	1:A:58:LEU:HD13	0.75	2.11	5	2
1:A:112:GLU:N	1:A:113:PRO:HD3	0.75	1.97	4	3
1:A:19:TRP:HB3	1:A:122:LEU:HD13	0.75	1.57	2	2
1:A:106:CYS:HB3	1:A:119:CYS:N	0.75	1.97	6	8
1:A:148:ARG:C	1:A:149:LEU:HD12	0.75	2.06	1	3
1:A:148:ARG:O	1:A:149:LEU:HD23	0.75	1.82	2	1
1:A:149:LEU:HD12	1:A:149:LEU:N	0.75	1.96	1	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HD21	0.74	1.55	7	1
1:A:32:LEU:CB	1:A:147:ILE:HG21	0.74	2.12	10	5
1:A:24:MET:HE1	1:A:118:VAL:CG2	0.74	2.12	1	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:92:VAL:HG22	0.74	2.12	6	8
1:A:109:ASN:O	1:A:111:ALA:N	0.74	2.20	8	10
1:A:18:THR:O	1:A:19:TRP:CE3	0.74	2.39	10	1
1:A:73:ALA:C	1:A:82:PHE:HB3	0.74	2.08	5	8
1:A:58:LEU:HD13	1:A:58:LEU:H	0.74	1.42	1	2
1:A:84:ILE:O	1:A:89:GLU:C	0.74	2.31	10	10
1:A:82:PHE:O	1:A:92:VAL:HG23	0.73	1.83	4	8
1:A:109:ASN:C	1:A:113:PRO:HG2	0.73	2.09	4	1
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:HD12	0.73	2.08	8	5
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:HD22	0.73	1.97	6	1
1:A:109:ASN:C	1:A:113:PRO:HG3	0.73	2.08	3	3
1:A:83:LYS:HA	1:A:90:ASN:C	0.73	2.09	8	10
1:A:84:ILE:HG23	1:A:92:VAL:HG21	0.73	1.57	10	8
1:A:20:TYR:CB	1:A:123:VAL:HG22	0.73	2.14	3	1
1:A:29:ILE:HA	1:A:147:ILE:HG21	0.73	1.61	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD12	0.73	1.99	6	3
1:A:118:VAL:HG22	1:A:120:GLN:NE2	0.72	1.99	6	1
1:A:53:ASP:HA	1:A:78:ILE:HG21	0.72	1.59	3	2
1:A:25:ALA:HB3	1:A:145:MET:HG2	0.72	1.61	2	2
1:A:77:LYS:O	1:A:78:ILE:HB	0.72	1.84	6	10
1:A:15:VAL:HG12	1:A:98:ASP:OD2	0.72	1.85	2	7
1:A:49:THR:HG21	1:A:53:ASP:HB2	0.72	1.59	9	4
1:A:75:LYS:CG	1:A:79:PRO:CD	0.72	2.68	6	10
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:CD1	0.72	2.14	2	2
1:A:6:THR:HB	1:A:80:ALA:HB1	0.72	1.59	4	3
1:A:78:ILE:HG22	1:A:78:ILE:O	0.71	1.84	6	10
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:CA	0.71	2.39	9	8
1:A:24:MET:HE1	1:A:118:VAL:HG21	0.71	1.61	1	1
1:A:97:THR:HG1	1:A:103:LEU:HD12	0.71	1.43	4	3
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:ALA:CB	0.71	2.14	1	1
1:A:97:THR:HG23	1:A:97:THR:O	0.71	1.84	7	7
1:A:46:LEU:HD21	1:A:56:ILE:HD12	0.71	1.62	6	3
1:A:40:ARG:HG3	1:A:149:LEU:HD22	0.71	1.59	5	3
1:A:24:MET:HE1	1:A:42:TYR:CD2	0.71	2.21	9	4
1:A:33:ASP:O	1:A:34:ALA:HB2	0.71	1.85	4	1
1:A:33:ASP:O	1:A:34:ALA:HB3	0.71	1.86	6	9
1:A:39:LEU:CD2	1:A:118:VAL:HG11	0.71	2.15	4	2
1:A:19:TRP:CE2	1:A:103:LEU:CD2	0.71	2.73	3	5
1:A:97:THR:HG23	1:A:99:TYR:CE2	0.71	2.20	6	2
1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:LEU:HD13	0.71	1.62	10	1
1:A:43:VAL:CG2	1:A:122:LEU:HD13	0.71	2.15	10	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:89:GLU:HG2	0.71	1.63	10	2
1:A:58:LEU:HD12	1:A:69:LYS:HB2	0.71	1.62	6	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:32:LEU:HD23	0.70	2.15	9	2
1:A:83:LYS:HA	1:A:90:ASN:O	0.70	1.86	1	10
1:A:39:LEU:HD11	1:A:107:MET:HB2	0.70	1.62	9	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:ASP:N	0.70	2.25	7	7
1:A:123:VAL:HG12	1:A:129:ASP:CB	0.70	2.16	3	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:57:LEU:N	0.70	2.00	1	3
1:A:33:ASP:O	1:A:34:ALA:CB	0.70	2.39	1	10
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:LYS:CG	0.70	2.17	3	4
1:A:46:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HD21	0.70	1.64	7	2
1:A:21:SER:OG	1:A:42:TYR:HA	0.70	1.87	4	6
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:LEU:H	0.70	1.47	9	4
1:A:109:ASN:N	1:A:113:PRO:HB3	0.70	2.02	7	7
1:A:15:VAL:O	1:A:46:LEU:HD13	0.70	1.87	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD22	1:A:32:LEU:N	0.70	2.02	2	3
1:A:106:CYS:CA	1:A:118:VAL:O	0.69	2.40	7	10
1:A:15:VAL:HG23	1:A:46:LEU:CD2	0.69	2.17	9	3
1:A:75:LYS:HD3	1:A:76:THR:HG23	0.69	1.61	5	3
1:A:75:LYS:HG2	1:A:79:PRO:HD3	0.69	1.62	4	3
1:A:101:LYS:C	1:A:125:THR:HG22	0.69	2.12	3	4
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ASP:N	0.69	2.24	5	10
1:A:107:MET:HE1	1:A:120:GLN:CD	0.69	2.11	4	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD13	0.69	2.12	6	1
1:A:22:LEU:HG	1:A:156:LEU:HD11	0.69	1.61	6	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:HD22	0.69	2.01	8	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:132:ALA:HB3	0.69	2.12	1	1
1:A:15:VAL:HG21	1:A:19:TRP:CE2	0.69	2.22	5	4
1:A:148:ARG:C	1:A:149:LEU:HD13	0.69	2.12	9	4
1:A:12:ILE:HD13	1:A:54:LEU:HD22	0.69	1.63	9	3
1:A:79:PRO:O	1:A:80:ALA:HB2	0.69	1.87	4	3
1:A:19:TRP:HB3	1:A:43:VAL:HB	0.69	1.65	1	7
1:A:75:LYS:HG2	1:A:79:PRO:CD	0.69	2.18	4	5
1:A:110:SER:HA	1:A:113:PRO:HG3	0.68	1.64	6	7
1:A:23:ALA:HB1	1:A:149:LEU:O	0.68	1.87	3	7
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:CD2	0.68	2.72	8	2
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:CD1	0.68	2.41	4	4
1:A:70:LYS:CE	1:A:72:ILE:HD11	0.68	2.18	6	1
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:HD23	0.68	1.88	2	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:69:LYS:HB2	0.68	1.65	2	2
1:A:101:LYS:HB2	1:A:125:THR:HG22	0.68	1.63	5	4
1:A:43:VAL:HG11	1:A:46:LEU:CD1	0.68	2.18	10	2
1:A:11:ASP:N	1:A:99:TYR:OH	0.68	2.27	5	4
1:A:20:TYR:C	1:A:123:VAL:HG23	0.68	2.12	4	9
1:A:26:ALA:HB3	1:A:31:LEU:CD2	0.68	2.19	3	3
1:A:93:LEU:HD11	1:A:108:GLU:OE2	0.68	1.89	4	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:89:GLU:CG	0.68	2.17	10	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:97:THR:HG21	0.68	1.66	1	1
1:A:58:LEU:HD21	1:A:69:LYS:HB2	0.68	1.66	4	6
1:A:92:VAL:CG1	1:A:105:PHE:CD1	0.68	2.77	7	3
1:A:19:TRP:CB	1:A:43:VAL:HG11	0.68	2.19	3	4
1:A:31:LEU:HD23	1:A:32:LEU:CD1	0.68	2.18	2	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:46:LEU:CD1	0.67	2.76	1	1
1:A:103:LEU:O	1:A:121:CYS:CA	0.67	2.42	6	8
1:A:129:ASP:C	1:A:131:GLU:H	0.67	1.97	5	9
1:A:31:LEU:HB2	1:A:39:LEU:HD23	0.67	1.64	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:HD21	1:A:130:ASP:HA	0.67	1.66	1	1
1:A:110:SER:C	1:A:113:PRO:HG3	0.67	2.14	3	2
1:A:93:LEU:HD11	1:A:108:GLU:CD	0.67	2.14	4	1
1:A:127:GLU:O	1:A:129:ASP:N	0.67	2.27	1	9
1:A:106:CYS:SG	1:A:117:LEU:HD21	0.67	2.28	6	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:HG	0.67	2.18	3	3
1:A:31:LEU:HD21	1:A:32:LEU:HD12	0.67	1.64	2	1
1:A:123:VAL:CG1	1:A:129:ASP:HB2	0.67	2.19	3	1
1:A:75:LYS:N	1:A:81:VAL:O	0.67	2.28	9	10
1:A:110:SER:N	1:A:113:PRO:HG2	0.67	2.05	1	2
1:A:110:SER:CA	1:A:113:PRO:CG	0.67	2.72	3	9
1:A:129:ASP:C	1:A:131:GLU:N	0.67	2.53	2	9
1:A:82:PHE:CE2	1:A:94:VAL:HG21	0.67	2.25	9	2
1:A:121:CYS:HB2	1:A:136:PHE:CD2	0.67	2.24	10	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:89:GLU:CB	0.67	2.20	1	3
1:A:39:LEU:HD22	1:A:118:VAL:HG11	0.67	1.67	2	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.67	1.66	9	6
1:A:10:LEU:HG	1:A:80:ALA:HB2	0.67	1.66	1	1
1:A:118:VAL:HG22	1:A:120:GLN:HE22	0.67	1.50	6	1
1:A:113:PRO:HA	1:A:116:SER:HB2	0.66	1.67	3	8
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:H	0.66	1.50	2	3
1:A:84:ILE:HD12	1:A:92:VAL:CG2	0.66	2.14	7	1
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:LYS:HB2	0.66	1.66	1	7
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:PRO:CB	0.66	2.19	3	1
1:A:123:VAL:HG21	1:A:156:LEU:HD13	0.66	1.67	10	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD23	0.66	2.15	5	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:32:LEU:HD13	0.66	2.19	10	2
1:A:100:LYS:CB	1:A:102:TYR:CE2	0.66	2.78	5	7
1:A:17:GLY:H	1:A:46:LEU:HB2	0.66	1.49	10	4
1:A:106:CYS:HA	1:A:119:CYS:HA	0.66	1.66	6	10
1:A:15:VAL:HG11	1:A:97:THR:CG2	0.66	2.21	2	3
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HG	0.66	1.66	9	1
1:A:79:PRO:HD2	1:A:80:ALA:H	0.66	1.51	4	6
1:A:125:THR:HG21	1:A:131:GLU:HB3	0.66	1.66	5	4
1:A:19:TRP:CD2	1:A:122:LEU:CD1	0.66	2.79	4	2
1:A:19:TRP:CD2	1:A:122:LEU:HD12	0.66	2.26	5	1
1:A:24:MET:SD	1:A:24:MET:C	0.66	2.79	1	1
1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CD1	0.66	2.63	10	3
1:A:153:PRO:HA	1:A:156:LEU:HD22	0.66	1.68	3	1
1:A:19:TRP:HB2	1:A:46:LEU:HD13	0.66	1.67	5	1
1:A:106:CYS:SG	1:A:118:VAL:C	0.66	2.80	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:TYR:O	1:A:123:VAL:CG2	0.65	2.44	1	8
1:A:31:LEU:HD13	1:A:117:LEU:C	0.65	2.16	1	3
1:A:81:VAL:O	1:A:82:PHE:CD1	0.65	2.49	9	10
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:N	0.65	2.07	10	3
1:A:105:PHE:CZ	1:A:107:MET:HE2	0.65	2.26	4	1
1:A:12:ILE:HD13	1:A:82:PHE:CZ	0.65	2.26	6	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:46:LEU:CD2	0.65	2.78	1	1
1:A:25:ALA:HB3	1:A:145:MET:CG	0.65	2.21	2	2
1:A:71:ILE:HD12	1:A:107:MET:CE	0.65	2.19	7	2
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:VAL:CG1	0.65	2.21	9	1
1:A:20:TYR:CB	1:A:123:VAL:CG2	0.65	2.74	3	2
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:103:LEU:CD1	0.65	2.77	1	1
1:A:58:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HG12	0.65	1.67	6	1
1:A:20:TYR:HB2	1:A:123:VAL:HG23	0.65	1.68	10	1
1:A:24:MET:HE2	1:A:42:TYR:CD1	0.65	2.27	10	1
1:A:104:LEU:HG	1:A:136:PHE:CE2	0.65	2.26	10	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:122:LEU:CB	0.65	2.79	2	3
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:CB	0.65	2.44	5	10
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:HD13	0.65	1.67	8	2
1:A:82:PHE:O	1:A:92:VAL:N	0.65	2.30	8	10
1:A:110:SER:CA	1:A:113:PRO:HG3	0.65	2.21	7	9
1:A:58:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	0.65	1.66	6	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:107:MET:HE1	0.65	2.26	8	1
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:HD23	0.65	1.92	6	2
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:CB	0.64	2.46	3	10
1:A:31:LEU:HD12	1:A:32:LEU:N	0.64	2.07	9	2
1:A:100:LYS:HB2	1:A:102:TYR:CE2	0.64	2.28	8	6
1:A:148:ARG:C	1:A:149:LEU:HD22	0.64	2.18	3	4
1:A:15:VAL:HB	1:A:19:TRP:CZ2	0.64	2.27	1	2
1:A:84:ILE:CG1	1:A:89:GLU:HB3	0.64	2.22	5	10
1:A:73:ALA:O	1:A:82:PHE:CD1	0.64	2.50	9	10
1:A:26:ALA:HB3	1:A:147:ILE:HG23	0.64	1.70	9	1
1:A:26:ALA:HB2	1:A:32:LEU:CD1	0.64	2.18	10	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:CG1	0.64	2.23	9	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:19:TRP:CZ2	0.64	2.80	6	2
1:A:19:TRP:NE1	1:A:46:LEU:HD21	0.64	2.08	1	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:56:ILE:C	0.64	2.17	5	3
1:A:101:LYS:CB	1:A:125:THR:HG22	0.64	2.23	5	4
1:A:10:LEU:HD12	1:A:99:TYR:CD2	0.64	2.28	10	2
1:A:18:THR:C	1:A:46:LEU:HD12	0.64	2.18	8	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:89:GLU:CB	0.63	2.76	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:ASP:O	1:A:133:LEU:N	0.63	2.30	5	9
1:A:19:TRP:CE3	1:A:56:ILE:HD12	0.63	2.28	4	2
1:A:110:SER:N	1:A:113:PRO:HB3	0.63	2.08	5	7
1:A:101:LYS:CG	1:A:125:THR:HG22	0.63	2.23	5	3
1:A:109:ASN:O	1:A:113:PRO:HG3	0.63	1.93	4	3
1:A:24:MET:HE2	1:A:41:VAL:C	0.63	2.19	3	1
1:A:24:MET:HE1	1:A:42:TYR:CD1	0.63	2.29	3	1
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:PRO:CA	0.63	2.24	3	1
1:A:110:SER:N	1:A:113:PRO:HG3	0.63	2.09	9	9
1:A:24:MET:HE1	1:A:42:TYR:CE2	0.63	2.27	4	2
1:A:19:TRP:CE3	1:A:46:LEU:HD11	0.63	2.28	5	2
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:CG	0.63	2.47	6	2
1:A:21:SER:OG	1:A:42:TYR:CA	0.63	2.47	6	2
1:A:31:LEU:HD12	1:A:118:VAL:CB	0.63	2.21	1	2
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:H	0.63	1.53	2	4
1:A:84:ILE:HG12	1:A:89:GLU:CB	0.63	2.24	7	2
1:A:84:ILE:CG2	1:A:92:VAL:CG2	0.63	2.76	1	3
1:A:46:LEU:HD23	1:A:56:ILE:CB	0.63	2.24	3	2
1:A:102:TYR:CE1	1:A:104:LEU:HD12	0.63	2.29	4	3
1:A:21:SER:CB	1:A:42:TYR:HA	0.63	2.23	2	8
1:A:31:LEU:CD2	1:A:115:GLN:O	0.63	2.46	1	4
1:A:31:LEU:HD12	1:A:116:SER:C	0.63	2.19	3	3
1:A:105:PHE:CD1	1:A:120:GLN:O	0.63	2.51	6	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.63	1.71	7	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:CG	0.62	2.23	2	2
1:A:16:ALA:HB1	1:A:48:PRO:CD	0.62	2.24	10	3
1:A:25:ALA:O	1:A:145:MET:HE1	0.62	1.94	3	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD2	0.62	2.62	9	1
1:A:113:PRO:HD2	1:A:114:GLU:H	0.62	1.55	3	3
1:A:15:VAL:CG2	1:A:46:LEU:CD2	0.62	2.77	9	1
1:A:6:THR:HA	1:A:95:LEU:HA	0.62	1.70	9	8
1:A:73:ALA:CB	1:A:82:PHE:HB3	0.62	2.24	1	9
1:A:31:LEU:O	1:A:39:LEU:HD12	0.62	1.95	7	1
1:A:7:MET:O	1:A:10:LEU:CB	0.62	2.48	8	10
1:A:31:LEU:HD23	1:A:31:LEU:H	0.62	1.54	5	4
1:A:19:TRP:HB2	1:A:43:VAL:HG11	0.62	1.71	3	9
1:A:6:THR:HA	1:A:94:VAL:O	0.62	1.94	3	2
1:A:22:LEU:CD1	1:A:123:VAL:HG13	0.62	2.22	10	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:92:VAL:HG21	0.62	2.23	1	6
1:A:58:LEU:HD23	1:A:71:ILE:CD1	0.62	2.24	3	1
1:A:21:SER:OG	1:A:43:VAL:N	0.62	2.32	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:103:LEU:CD2	0.62	2.82	6	2
1:A:41:VAL:HG12	1:A:69:LYS:CD	0.62	2.25	6	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:69:LYS:CE	0.62	2.25	6	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:97:THR:OG1	0.62	2.47	1	9
1:A:39:LEU:HG	1:A:118:VAL:HG11	0.62	1.70	5	5
1:A:108:GLU:CG	1:A:117:LEU:HD12	0.62	2.24	1	1
1:A:121:CYS:SG	1:A:136:PHE:CE1	0.62	2.93	6	3
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:HD12	0.61	1.94	5	1
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:CD2	0.61	2.49	8	4
1:A:41:VAL:HB	1:A:58:LEU:HD23	0.61	1.72	1	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:121:CYS:CB	0.61	2.78	7	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:147:ILE:HG22	0.61	1.72	10	1
1:A:83:LYS:CB	1:A:90:ASN:O	0.61	2.49	1	5
1:A:40:ARG:HG3	1:A:149:LEU:HD13	0.61	1.72	2	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:46:LEU:HD11	0.61	1.71	10	2
1:A:133:LEU:CA	1:A:136:PHE:HB2	0.61	2.25	6	3
1:A:31:LEU:CD2	1:A:32:LEU:N	0.61	2.62	8	3
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:N	0.61	2.09	6	3
1:A:10:LEU:CD1	1:A:97:THR:CG2	0.61	2.79	1	1
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:CD2	0.61	2.74	9	2
1:A:80:ALA:HA	1:A:82:PHE:CZ	0.61	2.31	2	7
1:A:75:LYS:CD	1:A:76:THR:HG23	0.61	2.26	2	2
1:A:19:TRP:CB	1:A:43:VAL:CG1	0.61	2.78	3	4
1:A:6:THR:HG22	1:A:94:VAL:O	0.61	1.96	8	7
1:A:37:ALA:HB3	1:A:40:ARG:HB3	0.61	1.71	4	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:CG	0.61	2.78	3	3
1:A:53:ASP:CB	1:A:74:GLU:HG2	0.61	2.25	6	2
1:A:100:LYS:CB	1:A:102:TYR:CZ	0.61	2.84	5	4
1:A:112:GLU:N	1:A:113:PRO:CD	0.61	2.64	1	4
1:A:5:GLN:CA	1:A:95:LEU:HD13	0.61	2.25	4	1
1:A:58:LEU:HD21	1:A:69:LYS:CG	0.61	2.26	9	1
1:A:15:VAL:HA	1:A:19:TRP:CH2	0.61	2.31	10	1
1:A:92:VAL:HG12	1:A:105:PHE:CD2	0.61	2.31	4	2
1:A:102:TYR:HE1	1:A:104:LEU:HD12	0.61	1.56	9	3
1:A:19:TRP:CD2	1:A:46:LEU:HD11	0.61	2.31	8	2
1:A:40:ARG:NH1	1:A:149:LEU:HD22	0.61	2.11	8	1
1:A:75:LYS:O	1:A:75:LYS:HG3	0.60	1.95	1	7
1:A:19:TRP:NE1	1:A:103:LEU:CD2	0.60	2.63	8	3
1:A:31:LEU:HD21	1:A:117:LEU:O	0.60	1.96	4	1
1:A:32:LEU:HB3	1:A:147:ILE:HG21	0.60	1.72	10	1
1:A:92:VAL:CG1	1:A:105:PHE:CD2	0.60	2.84	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:VAL:CG1	1:A:103:LEU:CD1	0.60	2.79	3	1
1:A:24:MET:CE	1:A:118:VAL:CG2	0.60	2.79	1	1
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:LYS:CB	0.60	2.25	3	5
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HB3	0.60	1.95	7	10
1:A:70:LYS:C	1:A:71:ILE:HD13	0.60	2.21	10	2
1:A:25:ALA:CB	1:A:145:MET:HG3	0.60	2.26	4	5
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD2	0.60	2.75	5	2
1:A:82:PHE:O	1:A:91:LYS:HA	0.60	1.97	10	10
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HD11	0.60	1.72	10	3
1:A:103:LEU:HD12	1:A:103:LEU:C	0.60	2.22	8	5
1:A:128:VAL:HG13	1:A:128:VAL:O	0.60	1.97	6	7
1:A:46:LEU:HD13	1:A:56:ILE:HB	0.60	1.72	6	2
1:A:96:ASP:OD2	1:A:102:TYR:CE1	0.60	2.54	4	2
1:A:22:LEU:HA	1:A:156:LEU:HD21	0.60	1.72	6	2
1:A:105:PHE:O	1:A:105:PHE:CD1	0.60	2.54	1	3
1:A:123:VAL:CG1	1:A:132:ALA:HB2	0.60	2.26	1	2
1:A:28:ASP:C	1:A:30:SER:H	0.60	2.05	3	10
1:A:58:LEU:N	1:A:58:LEU:CD1	0.60	2.64	1	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:117:LEU:C	0.60	2.74	4	2
1:A:43:VAL:HG11	1:A:46:LEU:CD2	0.60	2.26	6	2
1:A:104:LEU:HA	1:A:136:PHE:CE2	0.60	2.32	10	1
1:A:32:LEU:HB2	1:A:147:ILE:HG21	0.60	1.71	1	3
1:A:10:LEU:HD23	1:A:80:ALA:HB1	0.60	1.74	2	1
1:A:12:ILE:HD12	1:A:82:PHE:CE2	0.60	2.32	7	2
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:HG13	0.60	1.74	9	1
1:A:71:ILE:HG23	1:A:84:ILE:HG21	0.60	1.74	10	1
1:A:121:CYS:CB	1:A:136:PHE:CD2	0.60	2.85	10	1
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:HD12	0.60	1.55	4	3
1:A:147:ILE:HG23	1:A:147:ILE:O	0.60	1.97	9	3
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:HD11	0.60	2.27	2	1
1:A:23:ALA:CB	1:A:136:PHE:CZ	0.60	2.82	9	1
1:A:16:ALA:HB1	1:A:48:PRO:HG3	0.60	1.72	1	3
1:A:24:MET:HB2	1:A:120:GLN:CG	0.60	2.27	4	10
1:A:31:LEU:CD1	1:A:117:LEU:C	0.60	2.75	1	4
1:A:73:ALA:C	1:A:82:PHE:CD1	0.60	2.80	3	9
1:A:76:THR:O	1:A:78:ILE:CD1	0.60	2.49	5	8
1:A:106:CYS:SG	1:A:118:VAL:N	0.60	2.74	8	2
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:HA	0.59	1.97	1	10
1:A:25:ALA:CB	1:A:145:MET:CG	0.59	2.80	4	6
1:A:31:LEU:CD1	1:A:115:GLN:O	0.59	2.49	8	2
1:A:93:LEU:HD21	1:A:108:GLU:OE2	0.59	1.96	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:VAL:O	1:A:19:TRP:CZ3	0.59	2.55	10	1
1:A:25:ALA:O	1:A:118:VAL:CG2	0.59	2.50	9	5
1:A:10:LEU:HD21	1:A:97:THR:HG21	0.59	1.74	3	1
1:A:22:LEU:CG	1:A:132:ALA:HB3	0.59	2.28	4	1
1:A:19:TRP:HA	1:A:19:TRP:CE3	0.59	2.31	1	1
1:A:132:ALA:O	1:A:136:PHE:HB2	0.59	1.96	6	6
1:A:16:ALA:HB1	1:A:48:PRO:HD3	0.59	1.73	2	3
1:A:15:VAL:HG21	1:A:19:TRP:NE1	0.59	2.11	9	2
1:A:72:ILE:O	1:A:83:LYS:O	0.59	2.20	6	9
1:A:58:LEU:CD2	1:A:71:ILE:HD11	0.59	2.26	3	1
1:A:21:SER:CB	1:A:42:TYR:HB3	0.59	2.28	10	2
1:A:46:LEU:HG	1:A:56:ILE:HD13	0.59	1.74	1	1
1:A:121:CYS:SG	1:A:132:ALA:HB1	0.59	2.37	10	2
1:A:56:ILE:HG23	1:A:71:ILE:HB	0.59	1.74	7	2
1:A:19:TRP:HB2	1:A:43:VAL:CG1	0.59	2.28	4	9
1:A:37:ALA:HB3	1:A:40:ARG:CB	0.59	2.26	4	2
1:A:121:CYS:SG	1:A:136:PHE:CG	0.59	2.95	8	1
1:A:73:ALA:CB	1:A:82:PHE:CB	0.59	2.80	1	8
1:A:12:ILE:HD13	1:A:82:PHE:CE2	0.59	2.32	5	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:118:VAL:CG1	0.59	2.28	7	1
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:CD1	0.59	2.51	4	10
1:A:75:LYS:HG2	1:A:79:PRO:CG	0.59	2.28	2	10
1:A:100:LYS:HB3	1:A:102:TYR:CE2	0.59	2.33	5	4
1:A:103:LEU:HD22	1:A:122:LEU:CG	0.59	2.27	4	2
1:A:103:LEU:O	1:A:120:GLN:O	0.59	2.21	10	3
1:A:10:LEU:CD1	1:A:99:TYR:CD2	0.59	2.86	8	1
1:A:52:GLY:C	1:A:78:ILE:HD13	0.59	2.22	9	2
1:A:104:LEU:CD2	1:A:136:PHE:CZ	0.59	2.79	10	1
1:A:48:PRO:O	1:A:49:THR:O	0.59	2.21	8	10
1:A:19:TRP:CE3	1:A:123:VAL:O	0.59	2.56	2	2
1:A:27:SER:O	1:A:146:HIS:CG	0.59	2.56	4	6
1:A:121:CYS:SG	1:A:136:PHE:CD1	0.59	2.95	8	2
1:A:12:ILE:HD11	1:A:54:LEU:CD2	0.59	2.27	6	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:107:MET:CB	0.59	2.27	9	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASN:C	0.58	2.46	7	7
1:A:88:ASN:O	1:A:109:ASN:CB	0.58	2.51	9	8
1:A:9:GLY:O	1:A:99:TYR:CZ	0.58	2.55	3	1
1:A:28:ASP:H	1:A:31:LEU:HD11	0.58	1.57	4	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:117:LEU:O	0.58	2.50	5	4
1:A:75:LYS:HB3	1:A:81:VAL:O	0.58	1.98	9	10
1:A:73:ALA:CA	1:A:82:PHE:CB	0.58	2.80	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLU:HB3	1:A:78:ILE:HD11	0.58	1.75	9	6
1:A:61:TRP:CD1	1:A:61:TRP:C	0.58	2.80	5	2
1:A:84:ILE:HG13	1:A:89:GLU:HB3	0.58	1.73	8	10
1:A:31:LEU:CD1	1:A:116:SER:HA	0.58	2.28	2	3
1:A:58:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HG13	0.58	1.74	6	3
1:A:20:TYR:HB2	1:A:123:VAL:CG2	0.58	2.28	3	2
1:A:46:LEU:HD22	1:A:56:ILE:HB	0.58	1.74	4	2
1:A:70:LYS:HE2	1:A:72:ILE:HD11	0.58	1.76	9	2
1:A:106:CYS:HB2	1:A:119:CYS:HA	0.58	1.73	5	2
1:A:18:THR:O	1:A:124:ARG:HG3	0.58	1.99	10	1
1:A:96:ASP:HB3	1:A:102:TYR:CE1	0.58	2.34	8	5
1:A:22:LEU:CD1	1:A:129:ASP:O	0.58	2.52	3	1
1:A:49:THR:HB	1:A:50:PRO:HD2	0.58	1.74	9	10
1:A:75:LYS:HG3	1:A:79:PRO:HD3	0.58	1.75	6	7
1:A:133:LEU:HA	1:A:136:PHE:HB2	0.58	1.73	1	3
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:CD2	0.58	2.67	6	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:117:LEU:C	0.58	2.23	9	2
1:A:6:THR:CB	1:A:94:VAL:O	0.58	2.52	8	8
1:A:15:VAL:HG23	1:A:15:VAL:O	0.58	1.97	1	5
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.58	2.81	3	6
1:A:18:THR:O	1:A:19:TRP:CG	0.58	2.56	7	2
1:A:100:LYS:HB2	1:A:102:TYR:CZ	0.58	2.34	5	3
1:A:96:ASP:OD2	1:A:102:TYR:CZ	0.58	2.56	4	1
1:A:106:CYS:HB2	1:A:119:CYS:CA	0.58	2.29	5	2
1:A:17:GLY:H	1:A:46:LEU:HB3	0.58	1.58	9	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:122:LEU:HB3	0.58	2.33	1	3
1:A:24:MET:SD	1:A:40:ARG:HA	0.58	2.38	1	1
1:A:106:CYS:CB	1:A:119:CYS:CA	0.58	2.82	4	9
1:A:75:LYS:CA	1:A:81:VAL:O	0.58	2.52	8	10
1:A:87:LEU:O	1:A:88:ASN:CB	0.58	2.51	2	9
1:A:43:VAL:HG13	1:A:56:ILE:HD13	0.58	1.75	5	2
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:CD2	0.58	2.51	6	2
1:A:58:LEU:HD21	1:A:69:LYS:CB	0.58	2.29	9	2
1:A:5:GLN:HA	1:A:95:LEU:HD13	0.58	1.76	4	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:133:LEU:CD2	0.58	2.82	9	1
1:A:80:ALA:O	1:A:94:VAL:HG23	0.57	1.98	3	1
1:A:34:ALA:HB3	1:A:37:ALA:HA	0.57	1.74	4	1
1:A:12:ILE:HD11	1:A:19:TRP:CZ2	0.57	2.34	9	1
1:A:121:CYS:SG	1:A:136:PHE:CD2	0.57	2.97	10	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:97:THR:CG2	0.57	2.29	1	2
1:A:46:LEU:CD1	1:A:56:ILE:HB	0.57	2.29	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:TYR:N	1:A:122:LEU:HD13	0.57	2.14	3	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:HG13	0.57	1.98	8	1
1:A:104:LEU:HA	1:A:136:PHE:CZ	0.57	2.33	10	1
1:A:113:PRO:CA	1:A:116:SER:HB2	0.57	2.29	4	3
1:A:7:MET:HG2	1:A:99:TYR:CD2	0.57	2.35	6	1
1:A:26:ALA:H	1:A:32:LEU:HD22	0.57	1.59	7	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:C	0.57	2.82	2	4
1:A:106:CYS:CB	1:A:118:VAL:C	0.57	2.78	6	7
1:A:41:VAL:HG12	1:A:69:LYS:HD2	0.57	1.76	6	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:116:SER:C	0.57	2.77	4	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:46:LEU:HD21	0.57	1.75	6	1
1:A:81:VAL:HA	1:A:92:VAL:O	0.57	2.00	5	9
1:A:110:SER:C	1:A:113:PRO:CG	0.57	2.78	3	2
1:A:84:ILE:HD13	1:A:92:VAL:HG22	0.57	1.75	3	3
1:A:7:MET:H	1:A:10:LEU:HD12	0.57	1.59	5	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:46:LEU:HD11	0.57	2.35	6	1
1:A:121:CYS:HB2	1:A:136:PHE:CE2	0.57	2.34	10	1
1:A:24:MET:HA	1:A:120:GLN:HG3	0.57	1.76	5	5
1:A:75:LYS:CG	1:A:79:PRO:CG	0.57	2.83	3	5
1:A:27:SER:O	1:A:146:HIS:HB2	0.57	2.00	8	9
1:A:63:ASN:O	1:A:64:ASP:CB	0.57	2.52	10	3
1:A:6:THR:CA	1:A:95:LEU:HA	0.57	2.30	9	10
1:A:19:TRP:HB3	1:A:43:VAL:CB	0.57	2.30	9	6
1:A:19:TRP:CD2	1:A:46:LEU:CD2	0.57	2.87	5	2
1:A:19:TRP:CD1	1:A:123:VAL:O	0.57	2.57	10	1
1:A:19:TRP:CB	1:A:43:VAL:HB	0.57	2.29	8	4
1:A:19:TRP:CE3	1:A:122:LEU:HB2	0.57	2.35	7	2
1:A:6:THR:CB	1:A:80:ALA:HB1	0.57	2.30	4	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HB2	0.57	1.75	5	2
1:A:89:GLU:HA	1:A:109:ASN:HB2	0.57	1.76	8	1
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:H	0.57	1.56	9	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:122:LEU:HB3	0.57	2.35	1	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:CG	0.57	2.53	6	10
1:A:39:LEU:CD2	1:A:118:VAL:CG1	0.57	2.78	4	4
1:A:70:LYS:C	1:A:71:ILE:HD12	0.57	2.25	4	1
1:A:48:PRO:CB	1:A:54:LEU:HD12	0.57	2.30	6	1
1:A:96:ASP:HB3	1:A:102:TYR:CZ	0.57	2.35	6	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:46:LEU:CD1	0.57	2.88	9	1
1:A:75:LYS:CG	1:A:79:PRO:HD3	0.56	2.30	5	10
1:A:96:ASP:CB	1:A:102:TYR:CZ	0.56	2.88	6	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD1	0.56	2.64	9	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:LEU:HA	1:A:120:GLN:O	0.56	2.01	3	4
1:A:123:VAL:HG12	1:A:129:ASP:HB2	0.56	1.74	3	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:53:ASP:O	0.56	2.23	9	9
1:A:97:THR:C	1:A:99:TYR:H	0.56	2.08	7	10
1:A:147:ILE:CG2	1:A:147:ILE:O	0.56	2.52	8	5
1:A:31:LEU:HD22	1:A:32:LEU:H	0.56	1.58	2	3
1:A:31:LEU:HD22	1:A:31:LEU:N	0.56	2.14	2	2
1:A:69:LYS:NZ	1:A:87:LEU:HD22	0.56	2.15	2	1
1:A:86:ALA:O	1:A:89:GLU:CG	0.56	2.53	2	7
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ARG:CB	0.56	2.53	9	9
1:A:117:LEU:HD21	1:A:119:CYS:SG	0.56	2.40	7	2
1:A:128:VAL:O	1:A:130:ASP:N	0.56	2.36	3	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:22:LEU:C	0.56	2.26	4	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:69:LYS:HD2	0.56	2.31	6	1
1:A:12:ILE:CD1	1:A:19:TRP:CH2	0.56	2.86	9	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:122:LEU:HD11	0.56	2.35	10	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:60:LYS:HG3	0.56	1.78	1	1
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:CD2	0.56	2.54	2	1
1:A:75:LYS:CD	1:A:76:THR:OG1	0.56	2.54	3	3
1:A:97:THR:O	1:A:99:TYR:CD2	0.56	2.59	5	2
1:A:15:VAL:O	1:A:15:VAL:HG23	0.56	1.98	10	2
1:A:87:LEU:O	1:A:88:ASN:HB2	0.56	2.00	6	10
1:A:116:SER:O	1:A:118:VAL:HG12	0.56	2.00	10	4
1:A:129:ASP:OD1	1:A:132:ALA:N	0.56	2.35	3	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:HB2	0.56	1.99	5	10
1:A:18:THR:O	1:A:19:TRP:CD2	0.56	2.58	10	2
1:A:19:TRP:CD2	1:A:122:LEU:CB	0.56	2.88	1	1
1:A:133:LEU:O	1:A:136:PHE:CB	0.56	2.54	9	7
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD2	0.56	2.66	3	4
1:A:101:LYS:O	1:A:125:THR:CG2	0.56	2.54	6	3
1:A:41:VAL:HG11	1:A:69:LYS:HG3	0.56	1.77	1	3
1:A:97:THR:O	1:A:97:THR:CG2	0.56	2.54	9	3
1:A:100:LYS:HB2	1:A:102:TYR:CE1	0.56	2.35	6	1
1:A:104:LEU:CG	1:A:136:PHE:CE2	0.56	2.88	10	1
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:O	0.56	2.24	2	7
1:A:70:LYS:O	1:A:84:ILE:HD13	0.56	2.00	1	1
1:A:129:ASP:CG	1:A:132:ALA:CB	0.56	2.79	3	1
1:A:27:SER:H	1:A:31:LEU:HD11	0.56	1.61	6	2
1:A:93:LEU:O	1:A:105:PHE:HA	0.56	2.01	2	9
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ARG:HB2	0.56	2.01	3	9
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:HD23	0.56	2.25	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:CD1	0.55	2.54	5	3
1:A:24:MET:CB	1:A:120:GLN:HG3	0.55	2.32	6	5
1:A:19:TRP:NE1	1:A:103:LEU:HD22	0.55	2.16	3	2
1:A:133:LEU:C	1:A:136:PHE:HB2	0.55	2.26	6	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:94:VAL:O	0.55	2.54	8	7
1:A:73:ALA:CB	1:A:82:PHE:CG	0.55	2.84	3	5
1:A:121:CYS:HB2	1:A:136:PHE:CE1	0.55	2.36	2	3
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASN:CB	0.55	2.53	10	3
1:A:20:TYR:O	1:A:123:VAL:N	0.55	2.39	2	7
1:A:97:THR:CA	1:A:102:TYR:O	0.55	2.50	6	10
1:A:19:TRP:HD1	1:A:46:LEU:HD22	0.55	1.57	2	1
1:A:75:LYS:O	1:A:75:LYS:CG	0.55	2.53	10	5
1:A:132:ALA:O	1:A:136:PHE:N	0.55	2.40	3	2
1:A:97:THR:CB	1:A:103:LEU:CD1	0.55	2.84	4	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:115:GLN:O	0.55	2.00	7	4
1:A:127:GLU:CB	1:A:129:ASP:HB2	0.55	2.31	5	8
1:A:127:GLU:N	1:A:131:GLU:OE1	0.55	2.39	2	3
1:A:133:LEU:O	1:A:136:PHE:HB2	0.55	2.02	5	4
1:A:96:ASP:HB3	1:A:102:TYR:CE2	0.55	2.36	6	1
1:A:101:LYS:HB2	1:A:125:THR:HA	0.55	1.77	10	2
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:CD1	0.55	2.79	6	1
1:A:81:VAL:C	1:A:82:PHE:CG	0.55	2.84	5	8
1:A:15:VAL:O	1:A:19:TRP:NE1	0.55	2.40	2	2
1:A:84:ILE:HG12	1:A:92:VAL:CG2	0.55	2.32	6	7
1:A:92:VAL:HG12	1:A:105:PHE:HD2	0.55	1.62	4	1
1:A:43:VAL:CG1	1:A:46:LEU:CD2	0.55	2.84	6	1
1:A:83:LYS:CA	1:A:90:ASN:O	0.55	2.54	1	6
1:A:113:PRO:O	1:A:114:GLU:C	0.55	2.46	4	8
1:A:110:SER:CA	1:A:113:PRO:HD3	0.55	2.31	9	6
1:A:23:ALA:CB	1:A:149:LEU:O	0.55	2.54	2	2
1:A:121:CYS:HB2	1:A:136:PHE:CZ	0.55	2.36	6	1
1:A:36:SER:O	1:A:37:ALA:C	0.55	2.48	5	8
1:A:31:LEU:HG	1:A:116:SER:HA	0.55	1.79	4	2
1:A:93:LEU:CD2	1:A:108:GLU:OE2	0.55	2.53	6	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:31:LEU:N	0.55	2.17	6	4
1:A:96:ASP:O	1:A:97:THR:HB	0.55	2.02	3	9
1:A:96:ASP:OD1	1:A:100:LYS:CG	0.55	2.55	4	4
1:A:108:GLU:CD	1:A:117:LEU:CD1	0.55	2.80	4	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:32:LEU:H	0.55	1.59	9	2
1:A:27:SER:N	1:A:31:LEU:HD11	0.55	2.16	6	2
1:A:113:PRO:C	1:A:115:GLN:N	0.55	2.63	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ALA:HB2	1:A:48:PRO:HG3	0.55	1.77	4	1
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:N	0.54	2.17	4	2
1:A:96:ASP:CG	1:A:102:TYR:CE1	0.54	2.84	5	6
1:A:152:ASN:O	1:A:156:LEU:CD1	0.54	2.55	9	3
1:A:10:LEU:O	1:A:79:PRO:O	0.54	2.25	4	9
1:A:109:ASN:O	1:A:109:ASN:CG	0.54	2.48	8	9
1:A:109:ASN:C	1:A:113:PRO:HB3	0.54	2.27	5	7
1:A:97:THR:HB	1:A:103:LEU:HG	0.54	1.78	7	2
1:A:12:ILE:CG1	1:A:54:LEU:CD1	0.54	2.80	6	1
1:A:24:MET:CG	1:A:40:ARG:CG	0.54	2.85	6	1
1:A:38:PRO:O	1:A:41:VAL:CG1	0.54	2.55	7	1
1:A:41:VAL:CB	1:A:58:LEU:HD22	0.54	2.32	8	2
1:A:62:GLU:CD	1:A:67:ALA:HB3	0.54	2.26	7	1
1:A:19:TRP:CH2	1:A:98:ASP:HB3	0.54	2.36	10	1
1:A:9:GLY:O	1:A:99:TYR:OH	0.54	2.25	3	1
1:A:149:LEU:CD1	1:A:149:LEU:N	0.54	2.69	4	1
1:A:24:MET:HA	1:A:120:GLN:CG	0.54	2.32	5	1
1:A:24:MET:HE2	1:A:42:TYR:HD1	0.54	1.62	10	2
1:A:123:VAL:HG21	1:A:156:LEU:CD2	0.54	2.32	9	1
1:A:113:PRO:HD2	1:A:114:GLU:N	0.54	2.18	4	3
1:A:90:ASN:HB3	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.17	9	2
1:A:79:PRO:O	1:A:80:ALA:CB	0.54	2.55	4	3
1:A:10:LEU:HG	1:A:99:TYR:CE2	0.54	2.37	5	1
1:A:12:ILE:CG1	1:A:54:LEU:CD2	0.54	2.83	6	1
1:A:25:ALA:O	1:A:118:VAL:HA	0.54	2.02	3	5
1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:GLU:CG	0.54	2.32	4	7
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:124:ARG:HD3	0.54	2.37	1	1
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD1	0.54	2.67	1	2
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:CD	0.54	2.55	2	2
1:A:84:ILE:CD1	1:A:92:VAL:CG2	0.54	2.85	6	3
1:A:47:LYS:N	1:A:55:GLU:O	0.54	2.41	4	4
1:A:6:THR:HA	1:A:95:LEU:CA	0.54	2.33	9	8
1:A:31:LEU:CD2	1:A:116:SER:HA	0.54	2.32	1	2
1:A:128:VAL:HG22	1:A:153:PRO:HB3	0.54	1.80	8	2
1:A:97:THR:HB	1:A:103:LEU:CD1	0.54	2.33	4	3
1:A:106:CYS:CB	1:A:118:VAL:O	0.54	2.56	1	7
1:A:128:VAL:O	1:A:153:PRO:CB	0.54	2.55	1	3
1:A:29:ILE:HG13	1:A:147:ILE:HB	0.54	1.80	3	3
1:A:56:ILE:CD1	1:A:56:ILE:C	0.54	2.77	3	2
1:A:107:MET:SD	1:A:107:MET:N	0.54	2.81	8	2
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD2	0.54	2.65	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:HD12	1:A:132:ALA:CB	0.54	2.22	7	2
1:A:97:THR:CG2	1:A:99:TYR:CE2	0.54	2.90	6	1
1:A:149:LEU:CD2	1:A:149:LEU:N	0.54	2.69	7	1
1:A:80:ALA:CA	1:A:82:PHE:CZ	0.54	2.90	7	7
1:A:25:ALA:O	1:A:145:MET:CE	0.54	2.56	3	2
1:A:112:GLU:CG	1:A:112:GLU:O	0.54	2.55	4	1
1:A:71:ILE:HD12	1:A:107:MET:SD	0.54	2.43	6	1
1:A:95:LEU:N	1:A:104:LEU:O	0.53	2.39	1	6
1:A:53:ASP:HA	1:A:78:ILE:HD11	0.53	1.81	6	1
1:A:25:ALA:C	1:A:118:VAL:HG23	0.53	2.28	2	5
1:A:74:GLU:HA	1:A:78:ILE:CG1	0.53	2.33	6	9
1:A:105:PHE:CE2	1:A:107:MET:HE2	0.53	2.38	4	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:58:LEU:O	0.53	2.03	1	2
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:CG	0.53	2.57	2	10
1:A:32:LEU:HB3	1:A:147:ILE:HD13	0.53	1.79	9	1
1:A:108:GLU:CB	1:A:117:LEU:HD12	0.53	2.33	1	1
1:A:19:TRP:CE2	1:A:46:LEU:HD21	0.53	2.38	5	2
1:A:90:ASN:ND2	1:A:110:SER:OG	0.53	2.42	6	2
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:LYS:HG2	0.53	1.80	5	1
1:A:29:ILE:HD11	1:A:146:HIS:O	0.53	2.02	1	1
1:A:17:GLY:H	1:A:46:LEU:CB	0.53	2.16	8	6
1:A:26:ALA:HB2	1:A:31:LEU:HG	0.53	1.80	2	2
1:A:44:GLU:OE2	1:A:159:GLN:CG	0.53	2.56	2	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:95:LEU:HD22	0.53	1.79	4	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:97:THR:HG22	0.53	2.33	6	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:117:LEU:HD23	0.53	2.04	6	1
1:A:96:ASP:CB	1:A:102:TYR:CE1	0.53	2.92	8	3
1:A:97:THR:C	1:A:99:TYR:N	0.53	2.66	4	9
1:A:19:TRP:HB3	1:A:43:VAL:CG1	0.53	2.33	3	3
1:A:92:VAL:CG1	1:A:105:PHE:CE2	0.53	2.91	4	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:80:ALA:HA	0.53	1.80	6	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:32:LEU:N	0.53	2.71	9	2
1:A:10:LEU:HA	1:A:99:TYR:CE2	0.53	2.39	2	8
1:A:97:THR:O	1:A:98:ASP:CG	0.53	2.52	10	10
1:A:15:VAL:HG11	1:A:97:THR:HG21	0.53	1.79	2	4
1:A:95:LEU:CD1	1:A:104:LEU:HB3	0.53	2.34	6	2
1:A:106:CYS:SG	1:A:119:CYS:CB	0.53	2.97	4	1
1:A:112:GLU:O	1:A:112:GLU:HG2	0.53	2.04	4	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:122:LEU:CB	0.53	2.34	9	2
1:A:70:LYS:HG2	1:A:86:ALA:HB2	0.53	1.80	6	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:136:PHE:CE2	0.53	2.92	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ASP:C	1:A:30:SER:N	0.53	2.65	7	7
1:A:90:ASN:O	1:A:90:ASN:ND2	0.53	2.42	8	2
1:A:113:PRO:CD	1:A:114:GLU:N	0.53	2.70	4	3
1:A:10:LEU:HD23	1:A:80:ALA:HB2	0.53	1.77	2	1
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:CD2	0.53	2.32	6	3
1:A:32:LEU:HD11	1:A:40:ARG:HB2	0.53	1.79	5	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD23	0.53	2.28	7	1
1:A:121:CYS:CB	1:A:136:PHE:CE2	0.53	2.92	10	1
1:A:19:TRP:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.53	2.34	3	2
1:A:102:TYR:HE2	1:A:104:LEU:HD12	0.53	1.63	6	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:67:ALA:CB	0.53	2.81	7	1
1:A:75:LYS:HB2	1:A:81:VAL:HB	0.53	1.81	6	10
1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:OE1	0.53	2.42	8	2
1:A:31:LEU:CB	1:A:39:LEU:HD23	0.53	2.34	6	4
1:A:130:ASP:OD1	1:A:130:ASP:N	0.53	2.41	8	3
1:A:39:LEU:HD11	1:A:89:GLU:CD	0.53	2.28	6	1
1:A:52:GLY:C	1:A:53:ASP:OD1	0.53	2.51	6	1
1:A:102:TYR:HB3	1:A:132:ALA:HA	0.53	1.80	10	1
1:A:88:ASN:N	1:A:88:ASN:OD1	0.52	2.42	2	3
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:CD1	0.52	2.29	2	1
1:A:94:VAL:HA	1:A:104:LEU:O	0.52	2.05	2	4
1:A:25:ALA:CB	1:A:145:MET:HG2	0.52	2.34	7	2
1:A:104:LEU:HD11	1:A:136:PHE:CE1	0.52	2.40	7	1
1:A:15:VAL:C	1:A:19:TRP:CZ3	0.52	2.87	10	1
1:A:15:VAL:CA	1:A:19:TRP:CZ3	0.52	2.92	10	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:147:ILE:HG21	0.52	1.81	1	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:89:GLU:HB2	0.52	2.34	1	3
1:A:100:LYS:C	1:A:101:LYS:HG2	0.52	2.30	9	10
1:A:44:GLU:CB	1:A:59:GLN:OE1	0.52	2.58	8	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:46:LEU:HD21	0.52	2.39	8	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:109:ASN:C	0.52	2.66	9	1
1:A:9:GLY:O	1:A:11:ASP:N	0.52	2.42	6	5
1:A:27:SER:O	1:A:146:HIS:ND1	0.52	2.42	3	3
1:A:75:LYS:HB3	1:A:79:PRO:HD2	0.52	1.81	4	7
1:A:27:SER:O	1:A:146:HIS:CB	0.52	2.56	2	2
1:A:90:ASN:C	1:A:90:ASN:OD1	0.52	2.51	4	5
1:A:26:ALA:N	1:A:32:LEU:HD22	0.52	2.19	7	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:133:LEU:HD23	0.52	2.34	9	1
1:A:18:THR:HG22	1:A:124:ARG:HG2	0.52	1.80	2	1
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LYS:CG	0.52	2.58	2	2
1:A:7:MET:O	1:A:10:LEU:HB2	0.52	2.04	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:HG3	1:A:99:TYR:OH	0.52	2.05	3	5
1:A:70:LYS:CD	1:A:72:ILE:HD11	0.52	2.35	6	1
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:HD23	0.52	2.30	7	1
1:A:32:LEU:HD22	1:A:147:ILE:HD12	0.52	1.81	10	1
1:A:90:ASN:OD1	1:A:109:ASN:HA	0.52	2.05	8	7
1:A:148:ARG:C	1:A:149:LEU:CD1	0.52	2.82	1	1
1:A:32:LEU:HD23	1:A:147:ILE:HG12	0.52	1.80	4	2
1:A:113:PRO:HB2	1:A:116:SER:HB3	0.52	1.82	4	1
1:A:13:GLN:NE2	1:A:51:GLU:O	0.52	2.43	5	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:LEU:CD1	0.52	2.35	6	1
1:A:44:GLU:N	1:A:59:GLN:OE1	0.52	2.43	9	1
1:A:6:THR:HB	1:A:94:VAL:O	0.52	2.05	4	8
1:A:43:VAL:HG13	1:A:56:ILE:CD1	0.52	2.29	8	3
1:A:110:SER:CA	1:A:113:PRO:HG2	0.52	2.34	3	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:56:ILE:CB	0.52	2.34	4	1
1:A:127:GLU:HB3	1:A:129:ASP:HB2	0.52	1.82	10	4
1:A:72:ILE:CG2	1:A:74:GLU:OE2	0.52	2.57	5	2
1:A:15:VAL:HG21	1:A:19:TRP:HZ2	0.52	1.64	6	1
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:103:LEU:HD21	0.52	2.40	6	2
1:A:26:ALA:CA	1:A:145:MET:HE3	0.52	2.35	8	1
1:A:5:GLN:C	1:A:95:LEU:HD23	0.52	2.29	10	1
1:A:7:MET:O	1:A:10:LEU:N	0.52	2.41	2	8
1:A:75:LYS:HB2	1:A:81:VAL:CB	0.52	2.35	3	8
1:A:92:VAL:HG12	1:A:105:PHE:CD1	0.52	2.39	7	2
1:A:94:VAL:HG13	1:A:103:LEU:HD11	0.52	1.80	3	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:100:LYS:CG	0.52	2.58	3	2
1:A:11:ASP:O	1:A:99:TYR:OH	0.52	2.26	6	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:133:LEU:CD2	0.52	2.33	9	1
1:A:19:TRP:HB3	1:A:122:LEU:HD22	0.52	1.80	1	1
1:A:92:VAL:HG11	1:A:105:PHE:CE2	0.52	2.40	1	1
1:A:110:SER:O	1:A:111:ALA:C	0.52	2.52	4	8
1:A:14:LYS:CB	1:A:98:ASP:OD2	0.52	2.57	9	2
1:A:25:ALA:O	1:A:118:VAL:CA	0.52	2.57	10	4
1:A:48:PRO:C	1:A:49:THR:O	0.52	2.52	2	10
1:A:90:ASN:C	1:A:90:ASN:ND2	0.52	2.68	1	1
1:A:133:LEU:HA	1:A:136:PHE:CB	0.52	2.35	6	2
1:A:121:CYS:CB	1:A:136:PHE:CE1	0.52	2.93	2	2
1:A:7:MET:HB3	1:A:10:LEU:HD12	0.52	1.82	3	2
1:A:96:ASP:O	1:A:103:LEU:HG	0.52	2.04	7	2
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:CG2	0.52	2.56	6	1
1:A:109:ASN:O	1:A:109:ASN:OD1	0.52	2.27	5	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:ASP:OD2	1:A:132:ALA:HB2	0.52	2.05	3	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:117:LEU:O	0.52	2.58	4	1
1:A:108:GLU:CD	1:A:117:LEU:HD12	0.52	2.30	5	2
1:A:58:LEU:HD11	1:A:71:ILE:CD1	0.52	2.33	6	1
1:A:12:ILE:HB	1:A:82:PHE:CZ	0.52	2.39	8	2
1:A:119:CYS:HB2	1:A:145:MET:HE1	0.52	1.82	7	1
1:A:40:ARG:NH1	1:A:149:LEU:CD2	0.52	2.73	8	1
1:A:124:ARG:C	1:A:125:THR:O	0.51	2.53	8	10
1:A:6:THR:CA	1:A:94:VAL:O	0.51	2.58	3	2
1:A:7:MET:CB	1:A:10:LEU:HB2	0.51	2.35	3	1
1:A:21:SER:HA	1:A:122:LEU:HD22	0.51	1.81	3	1
1:A:109:ASN:O	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.43	9	2
1:A:102:TYR:CG	1:A:135:LYS:HG3	0.51	2.39	4	1
1:A:41:VAL:HB	1:A:58:LEU:HD22	0.51	1.80	7	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:89:GLU:HB2	0.51	1.82	1	1
1:A:88:ASN:O	1:A:109:ASN:HB2	0.51	2.06	3	6
1:A:94:VAL:HA	1:A:105:PHE:CB	0.51	2.35	1	3
1:A:96:ASP:CG	1:A:102:TYR:CZ	0.51	2.88	6	3
1:A:19:TRP:CG	1:A:122:LEU:CD1	0.51	2.93	5	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:HD21	0.51	2.33	8	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:124:ARG:HG3	0.51	2.40	10	1
1:A:43:VAL:HG11	1:A:46:LEU:HD13	0.51	1.83	2	1
1:A:71:ILE:HD12	1:A:71:ILE:N	0.51	2.20	4	1
1:A:59:GLN:N	1:A:59:GLN:OE1	0.51	2.43	5	1
1:A:121:CYS:SG	1:A:121:CYS:O	0.51	2.68	8	2
1:A:31:LEU:HB2	1:A:39:LEU:CD2	0.51	2.36	8	1
1:A:19:TRP:CG	1:A:46:LEU:HD13	0.51	2.40	9	1
1:A:24:MET:SD	1:A:40:ARG:CG	0.51	2.99	6	2
1:A:70:LYS:O	1:A:71:ILE:HD13	0.51	2.06	10	3
1:A:109:ASN:CA	1:A:113:PRO:HB3	0.51	2.35	8	7
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:HD13	0.51	2.05	4	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:ASP:OD1	0.51	2.28	4	1
1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:LEU:HD11	0.51	1.82	6	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:135:LYS:CG	0.51	2.94	7	1
1:A:82:PHE:HE2	1:A:94:VAL:HG21	0.51	1.63	9	1
1:A:129:ASP:OD1	1:A:130:ASP:N	0.51	2.43	9	1
1:A:24:MET:HE3	1:A:40:ARG:HA	0.51	1.82	1	1
1:A:75:LYS:HD2	1:A:76:THR:CG2	0.51	2.36	2	3
1:A:115:GLN:OE1	1:A:115:GLN:N	0.51	2.44	1	1
1:A:12:ILE:HD11	1:A:19:TRP:HH2	0.51	1.66	4	1
1:A:78:ILE:HG23	1:A:82:PHE:HE1	0.51	1.66	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:THR:O	1:A:19:TRP:CD1	0.51	2.64	6	3
1:A:41:VAL:CG2	1:A:58:LEU:HD13	0.51	2.36	5	1
1:A:152:ASN:OD1	1:A:155:GLN:NE2	0.51	2.44	6	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:94:VAL:C	0.51	2.30	7	3
1:A:26:ALA:HB1	1:A:31:LEU:HD12	0.51	1.80	7	1
1:A:97:THR:O	1:A:99:TYR:N	0.51	2.43	7	3
1:A:113:PRO:O	1:A:116:SER:CB	0.51	2.58	4	2
1:A:94:VAL:HG13	1:A:103:LEU:CD1	0.51	2.35	3	2
1:A:16:ALA:CB	1:A:48:PRO:HD3	0.51	2.35	10	1
1:A:74:GLU:HB3	1:A:78:ILE:CG1	0.51	2.36	10	7
1:A:90:ASN:HB3	1:A:109:ASN:OD1	0.51	2.06	5	6
1:A:20:TYR:HB3	1:A:123:VAL:CG2	0.51	2.36	3	1
1:A:102:TYR:CG	1:A:135:LYS:CG	0.51	2.93	4	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:118:VAL:CB	0.51	2.33	9	2
1:A:56:ILE:C	1:A:56:ILE:CD1	0.51	2.84	1	3
1:A:90:ASN:OD1	1:A:109:ASN:OD1	0.51	2.29	8	2
1:A:20:TYR:O	1:A:122:LEU:HA	0.51	2.05	3	5
1:A:53:ASP:OD2	1:A:74:GLU:HG2	0.51	2.06	3	3
1:A:46:LEU:O	1:A:47:LYS:CD	0.51	2.59	7	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:116:SER:O	0.51	2.53	9	2
1:A:121:CYS:CA	1:A:136:PHE:CE2	0.51	2.93	10	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:N	0.51	2.20	2	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:147:ILE:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:87:LEU:C	1:A:88:ASN:CG	0.51	2.78	4	7
1:A:19:TRP:C	1:A:20:TYR:CD1	0.51	2.89	3	1
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:56:ILE:CD1	0.51	2.94	4	1
1:A:24:MET:CB	1:A:120:GLN:CG	0.51	2.89	4	4
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HD12	0.51	1.83	8	1
1:A:150:SER:O	1:A:151:PHE:CD1	0.51	2.63	10	1
1:A:24:MET:HB2	1:A:120:GLN:HG3	0.51	1.83	9	7
1:A:70:LYS:HG3	1:A:72:ILE:HD13	0.51	1.83	2	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:116:SER:O	0.51	2.54	5	3
1:A:92:VAL:HG13	1:A:106:CYS:O	0.51	2.05	6	1
1:A:19:TRP:CB	1:A:46:LEU:HD11	0.50	2.34	8	3
1:A:30:SER:OG	1:A:31:LEU:HD23	0.50	2.06	1	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:31:LEU:H	0.50	2.18	1	2
1:A:75:LYS:HD2	1:A:76:THR:HG23	0.50	1.82	8	2
1:A:93:LEU:HD13	1:A:106:CYS:SG	0.50	2.46	1	1
1:A:21:SER:HB2	1:A:42:TYR:HA	0.50	1.81	2	5
1:A:53:ASP:OD2	1:A:74:GLU:CG	0.50	2.59	3	1
1:A:24:MET:SD	1:A:24:MET:O	0.50	2.68	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LYS:CG	1:A:90:ASN:O	0.50	2.59	1	2
1:A:25:ALA:C	1:A:145:MET:HG2	0.50	2.31	7	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:116:SER:HA	0.50	1.83	10	4
1:A:84:ILE:O	1:A:90:ASN:HA	0.50	2.07	7	10
1:A:42:TYR:CD1	1:A:42:TYR:N	0.50	2.80	2	2
1:A:19:TRP:CE3	1:A:122:LEU:CD1	0.50	2.93	6	2
1:A:75:LYS:HB3	1:A:79:PRO:CD	0.50	2.36	10	7
1:A:26:ALA:HB2	1:A:118:VAL:CB	0.50	2.26	3	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:105:PHE:CD1	0.50	2.41	9	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:120:GLN:CB	0.50	2.95	10	1
1:A:81:VAL:HG22	1:A:93:LEU:HD12	0.50	1.82	6	3
1:A:113:PRO:CG	1:A:114:GLU:N	0.50	2.73	9	7
1:A:15:VAL:CG2	1:A:19:TRP:NE1	0.50	2.74	4	4
1:A:18:THR:CG2	1:A:20:TYR:CE2	0.50	2.94	4	2
1:A:118:VAL:HG22	1:A:120:GLN:OE1	0.50	2.06	5	1
1:A:104:LEU:HD11	1:A:136:PHE:CD1	0.50	2.42	7	1
1:A:21:SER:OG	1:A:42:TYR:HB3	0.50	2.07	10	1
1:A:101:LYS:CG	1:A:102:TYR:CD2	0.50	2.94	10	1
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:CB	0.50	2.60	9	4
1:A:23:ALA:HB3	1:A:136:PHE:CE2	0.50	2.41	1	2
1:A:58:LEU:CD1	1:A:69:LYS:HB2	0.50	2.37	2	9
1:A:109:ASN:C	1:A:109:ASN:OD1	0.50	2.55	10	8
1:A:84:ILE:CD1	1:A:107:MET:CG	0.50	2.90	6	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:84:ILE:H	0.50	1.66	7	1
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:98:ASP:HB3	0.50	2.41	10	1
1:A:88:ASN:O	1:A:109:ASN:HB3	0.50	2.07	2	7
1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:O	0.50	2.06	1	2
1:A:113:PRO:HA	1:A:116:SER:CB	0.50	2.37	2	4
1:A:109:ASN:N	1:A:113:PRO:HG2	0.50	2.21	4	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:53:ASP:N	0.50	2.45	9	1
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:HD13	0.50	2.07	1	1
1:A:10:LEU:HA	1:A:99:TYR:CZ	0.50	2.42	2	8
1:A:106:CYS:SG	1:A:117:LEU:HD11	0.50	2.47	2	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:121:CYS:SG	0.50	3.00	7	2
1:A:14:LYS:HB2	1:A:99:TYR:OH	0.50	2.06	5	2
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:CG	0.50	2.37	6	1
1:A:24:MET:O	1:A:149:LEU:HD13	0.50	2.07	6	1
1:A:62:GLU:C	1:A:64:ASP:N	0.49	2.70	7	7
1:A:31:LEU:HD23	1:A:32:LEU:CG	0.49	2.37	2	1
1:A:105:PHE:O	1:A:120:GLN:HB2	0.49	2.07	10	3
1:A:125:THR:CB	1:A:131:GLU:HB3	0.49	2.37	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:HG	0.49	2.06	6	3
1:A:53:ASP:CB	1:A:74:GLU:CG	0.49	2.89	6	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:HD12	0.49	2.37	7	1
1:A:16:ALA:CB	1:A:48:PRO:HG3	0.49	2.37	6	8
1:A:130:ASP:O	1:A:131:GLU:C	0.49	2.54	9	9
1:A:110:SER:N	1:A:113:PRO:CB	0.49	2.74	5	7
1:A:46:LEU:CD2	1:A:56:ILE:HB	0.49	2.36	7	4
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HD23	0.49	2.05	4	1
1:A:93:LEU:HD11	1:A:108:GLU:OE1	0.49	2.07	4	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:121:CYS:HB2	0.49	2.37	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.49	2.32	1	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:ASP:C	0.49	2.55	2	9
1:A:7:MET:HE3	1:A:7:MET:HA	0.49	1.82	10	2
1:A:19:TRP:CE3	1:A:19:TRP:HA	0.49	2.43	7	2
1:A:100:LYS:C	1:A:101:LYS:CG	0.49	2.85	6	5
1:A:125:THR:CG2	1:A:131:GLU:HB3	0.49	2.37	8	3
1:A:34:ALA:HB3	1:A:37:ALA:CA	0.49	2.37	4	1
1:A:22:LEU:HB3	1:A:136:PHE:CE2	0.49	2.42	6	1
1:A:102:TYR:CE1	1:A:135:LYS:HG2	0.49	2.42	6	1
1:A:13:GLN:OE1	1:A:51:GLU:HA	0.49	2.07	9	1
1:A:147:ILE:C	1:A:147:ILE:CD1	0.49	2.85	10	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLU:CG	0.49	2.61	4	6
1:A:108:GLU:HG3	1:A:117:LEU:HD12	0.49	1.84	1	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:69:LYS:CB	0.49	2.36	6	1
1:A:11:ASP:HA	1:A:79:PRO:O	0.49	2.06	8	4
1:A:15:VAL:CG2	1:A:19:TRP:CE2	0.49	2.96	5	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:116:SER:O	0.49	2.07	9	3
1:A:46:LEU:O	1:A:47:LYS:HD3	0.49	2.08	2	5
1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:TYR:CD2	0.49	2.42	2	1
1:A:73:ALA:HB1	1:A:82:PHE:HB3	0.49	1.82	4	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:135:LYS:HG3	0.49	2.42	5	2
1:A:24:MET:CB	1:A:120:GLN:HG2	0.49	2.38	5	1
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:CD1	0.49	2.36	6	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:84:ILE:N	0.49	2.22	7	1
1:A:97:THR:OG1	1:A:124:ARG:NH1	0.49	2.46	8	1
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ARG:NE	0.49	2.46	8	1
1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:HD3	0.49	2.33	1	3
1:A:106:CYS:CB	1:A:119:CYS:HG	0.49	2.21	9	4
1:A:19:TRP:CE2	1:A:103:LEU:HD22	0.49	2.41	3	2
1:A:46:LEU:CD2	1:A:54:LEU:HD21	0.49	2.37	3	2
1:A:24:MET:HE1	1:A:42:TYR:CZ	0.49	2.43	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:GLU:O	1:A:131:GLU:OE1	0.49	2.30	5	5
1:A:26:ALA:HB2	1:A:32:LEU:CD2	0.49	2.27	9	2
1:A:26:ALA:HB3	1:A:32:LEU:HB2	0.49	1.83	7	4
1:A:90:ASN:HB3	1:A:109:ASN:CG	0.49	2.32	10	8
1:A:39:LEU:CD1	1:A:89:GLU:OE2	0.49	2.61	3	3
1:A:44:GLU:O	1:A:45:GLU:CD	0.49	2.56	5	1
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:NH2	0.49	2.46	9	1
1:A:32:LEU:HD22	1:A:147:ILE:HG23	0.49	1.84	10	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:31:LEU:CD1	0.49	2.89	7	4
1:A:49:THR:O	1:A:51:GLU:N	0.49	2.46	8	6
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HD2	0.49	2.08	6	3
1:A:148:ARG:C	1:A:149:LEU:HD23	0.49	2.32	2	1
1:A:26:ALA:C	1:A:145:MET:SD	0.49	2.96	5	2
1:A:108:GLU:HB3	1:A:117:LEU:HA	0.49	1.84	4	3
1:A:46:LEU:CD1	1:A:56:ILE:CG2	0.49	2.91	4	1
1:A:12:ILE:HG12	1:A:54:LEU:CB	0.49	2.38	6	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:132:ALA:HB3	0.49	1.83	10	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:80:ALA:CB	0.48	2.38	4	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:145:MET:CB	0.48	2.38	5	2
1:A:25:ALA:HB3	1:A:145:MET:SD	0.48	2.48	7	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:107:MET:O	0.48	2.08	9	2
1:A:104:LEU:CD2	1:A:136:PHE:CE1	0.48	2.91	10	1
1:A:75:LYS:HG2	1:A:79:PRO:HG2	0.48	1.84	3	6
1:A:109:ASN:N	1:A:113:PRO:CB	0.48	2.76	7	4
1:A:86:ALA:O	1:A:89:GLU:OE2	0.48	2.31	9	1
1:A:15:VAL:HA	1:A:19:TRP:CZ3	0.48	2.42	10	1
1:A:7:MET:O	1:A:10:LEU:HB3	0.48	2.07	1	2
1:A:15:VAL:CG1	1:A:97:THR:CG2	0.48	2.91	2	3
1:A:39:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG11	0.48	1.85	2	1
1:A:129:ASP:CG	1:A:132:ALA:HB2	0.48	2.33	3	1
1:A:17:GLY:N	1:A:46:LEU:HB2	0.48	2.23	8	1
1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:LEU:HD21	0.48	1.86	6	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:CD	0.48	2.62	6	1
1:A:130:ASP:CA	1:A:133:LEU:HB2	0.48	2.38	6	1
1:A:74:GLU:OE2	1:A:74:GLU:N	0.48	2.46	1	1
1:A:119:CYS:C	1:A:120:GLN:OE1	0.48	2.56	2	1
1:A:27:SER:N	1:A:145:MET:SD	0.48	2.87	5	1
1:A:106:CYS:HB2	1:A:119:CYS:CB	0.48	2.39	5	2
1:A:24:MET:CG	1:A:40:ARG:HG3	0.48	2.38	6	1
1:A:136:PHE:CD1	1:A:136:PHE:C	0.48	2.88	8	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:53:ASP:HB2	0.48	2.37	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:PHE:HE1	1:A:122:LEU:HD11	0.48	1.69	10	1
1:A:11:ASP:C	1:A:13:GLN:N	0.48	2.71	4	9
1:A:19:TRP:CE3	1:A:122:LEU:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:22:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HG	0.48	1.85	5	1
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:CB	0.48	2.62	5	2
1:A:86:ALA:O	1:A:89:GLU:CD	0.48	2.57	8	2
1:A:56:ILE:CG1	1:A:58:LEU:CD2	0.48	2.91	6	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:56:ILE:HG13	0.48	2.37	9	1
1:A:19:TRP:CH2	1:A:103:LEU:HB2	0.48	2.44	1	1
1:A:79:PRO:HD2	1:A:80:ALA:N	0.48	2.24	10	7
1:A:112:GLU:O	1:A:112:GLU:CG	0.48	2.61	1	2
1:A:58:LEU:CD2	1:A:69:LYS:HB2	0.48	2.36	4	6
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LYS:HB2	0.48	2.09	4	4
1:A:70:LYS:HE2	1:A:86:ALA:HB2	0.48	1.85	5	2
1:A:98:ASP:C	1:A:98:ASP:OD1	0.48	2.57	3	2
1:A:109:ASN:C	1:A:109:ASN:ND2	0.48	2.71	3	1
1:A:22:LEU:HB2	1:A:132:ALA:CB	0.48	2.39	8	2
1:A:119:CYS:SG	1:A:145:MET:HE2	0.48	2.48	5	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:117:LEU:CD2	0.48	2.61	6	1
1:A:104:LEU:HD21	1:A:121:CYS:SG	0.48	2.49	7	1
1:A:147:ILE:O	1:A:147:ILE:HG23	0.48	2.08	10	2
1:A:56:ILE:HD11	1:A:58:LEU:CD2	0.48	2.39	10	1
1:A:124:ARG:O	1:A:125:THR:C	0.48	2.57	8	8
1:A:24:MET:CG	1:A:40:ARG:HA	0.48	2.39	3	1
1:A:87:LEU:O	1:A:88:ASN:ND2	0.48	2.47	3	1
1:A:108:GLU:C	1:A:108:GLU:OE1	0.48	2.57	3	1
1:A:107:MET:O	1:A:117:LEU:HA	0.48	2.09	7	2
1:A:20:TYR:CA	1:A:123:VAL:HG23	0.48	2.37	10	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:56:ILE:HG13	0.48	1.85	10	1
1:A:22:LEU:HD11	1:A:130:ASP:HA	0.48	1.86	2	3
1:A:53:ASP:OD2	1:A:78:ILE:CD1	0.48	2.57	9	2
1:A:125:THR:OG1	1:A:131:GLU:OE1	0.48	2.32	3	2
1:A:58:LEU:HD11	1:A:71:ILE:CG1	0.48	2.39	6	1
1:A:96:ASP:CG	1:A:100:LYS:HG3	0.48	2.34	10	2
1:A:106:CYS:C	1:A:107:MET:SD	0.48	2.97	8	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:99:TYR:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:19:TRP:NE1	1:A:46:LEU:CD2	0.47	2.77	1	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:100:LYS:HG3	0.47	2.09	6	5
1:A:133:LEU:O	1:A:134:GLU:C	0.47	2.57	4	4
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:VAL:HB	0.47	1.85	3	1
1:A:74:GLU:N	1:A:82:PHE:HB3	0.47	2.24	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLU:OE2	0.47	2.31	7	1
1:A:19:TRP:HB3	1:A:122:LEU:HD12	0.47	1.86	9	1
1:A:61:TRP:O	1:A:62:GLU:CD	0.47	2.57	10	1
1:A:36:SER:O	1:A:37:ALA:O	0.47	2.32	4	3
1:A:72:ILE:O	1:A:84:ILE:HA	0.47	2.09	7	3
1:A:108:GLU:HG3	1:A:117:LEU:CD1	0.47	2.38	1	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:100:LYS:HG2	0.47	2.09	3	2
1:A:31:LEU:O	1:A:39:LEU:HB3	0.47	2.09	7	2
1:A:20:TYR:HB3	1:A:156:LEU:HD23	0.47	1.86	9	1
1:A:150:SER:C	1:A:151:PHE:CD1	0.47	2.92	10	1
1:A:48:PRO:O	1:A:49:THR:C	0.47	2.57	8	10
1:A:48:PRO:HA	1:A:54:LEU:HA	0.47	1.86	8	7
1:A:29:ILE:CG1	1:A:147:ILE:HB	0.47	2.38	7	3
1:A:84:ILE:CD1	1:A:89:GLU:HB3	0.47	2.39	5	4
1:A:98:ASP:OD1	1:A:98:ASP:C	0.47	2.56	2	5
1:A:75:LYS:HD3	1:A:76:THR:CG2	0.47	2.39	3	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:56:ILE:CG2	0.47	2.40	4	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:99:TYR:CE2	0.47	2.97	8	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:118:VAL:CG1	0.47	2.39	9	1
1:A:40:ARG:HG3	1:A:149:LEU:CD1	0.47	2.39	2	1
1:A:107:MET:C	1:A:108:GLU:OE1	0.47	2.57	2	2
1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CD2	0.47	2.77	4	1
1:A:104:LEU:HD11	1:A:135:LYS:O	0.47	2.09	4	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:54:LEU:CD2	0.47	2.82	7	1
1:A:102:TYR:CE2	1:A:135:LYS:HG3	0.47	2.44	7	1
1:A:14:LYS:O	1:A:98:ASP:OD2	0.47	2.33	8	1
1:A:61:TRP:C	1:A:62:GLU:CD	0.47	2.82	10	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:122:LEU:CD1	0.47	2.87	2	1
1:A:74:GLU:OE1	1:A:74:GLU:N	0.47	2.47	3	1
1:A:39:LEU:CG	1:A:118:VAL:HG11	0.47	2.39	9	3
1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:CD2	0.47	2.18	7	2
1:A:145:MET:HB3	1:A:147:ILE:O	0.47	2.09	7	3
1:A:46:LEU:HG	1:A:56:ILE:CG1	0.47	2.39	10	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:HG3	0.47	2.10	5	7
1:A:56:ILE:CG1	1:A:71:ILE:HD12	0.47	2.34	1	1
1:A:103:LEU:O	1:A:121:CYS:SG	0.47	2.72	9	2
1:A:18:THR:CG2	1:A:124:ARG:HG2	0.47	2.40	2	1
1:A:107:MET:O	1:A:118:VAL:HG12	0.47	2.09	5	2
1:A:118:VAL:O	1:A:120:GLN:OE1	0.47	2.33	3	2
1:A:20:TYR:HB2	1:A:123:VAL:HG22	0.47	1.82	3	1
1:A:25:ALA:C	1:A:145:MET:CE	0.47	2.88	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:HB2	1:A:123:VAL:HG22	0.47	1.86	4	1
1:A:52:GLY:C	1:A:53:ASP:CG	0.47	2.82	4	2
1:A:97:THR:HB	1:A:103:LEU:CG	0.47	2.39	4	2
1:A:152:ASN:O	1:A:156:LEU:CD2	0.47	2.57	5	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:118:VAL:HG11	0.47	1.86	7	1
1:A:29:ILE:HG12	1:A:147:ILE:CG1	0.47	2.40	8	1
1:A:70:LYS:CD	1:A:86:ALA:HB2	0.47	2.40	9	1
1:A:156:LEU:N	1:A:156:LEU:HD23	0.47	2.24	10	1
1:A:24:MET:SD	1:A:40:ARG:CB	0.47	3.03	1	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:74:GLU:HG2	0.47	2.10	1	5
1:A:32:LEU:HD13	1:A:147:ILE:HG23	0.47	1.86	2	1
1:A:96:ASP:CG	1:A:100:LYS:CG	0.47	2.88	3	1
1:A:102:TYR:CB	1:A:135:LYS:HG2	0.47	2.40	4	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:80:ALA:HA	0.47	2.40	6	1
1:A:105:PHE:C	1:A:119:CYS:SG	0.47	2.97	6	1
1:A:90:ASN:CG	1:A:109:ASN:OD1	0.47	2.57	7	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:46:LEU:CD1	0.47	2.97	9	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:122:LEU:HB2	0.47	2.45	10	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:136:PHE:CE2	0.47	2.42	10	1
1:A:40:ARG:CG	1:A:40:ARG:O	0.47	2.62	5	2
1:A:39:LEU:CD1	1:A:118:VAL:HG11	0.47	2.39	2	2
1:A:53:ASP:CG	1:A:74:GLU:HG2	0.47	2.35	6	2
1:A:128:VAL:O	1:A:153:PRO:HB2	0.47	2.10	10	2
1:A:123:VAL:CB	1:A:129:ASP:HB2	0.47	2.39	3	1
1:A:61:TRP:C	1:A:62:GLU:OE1	0.47	2.58	10	4
1:A:119:CYS:SG	1:A:145:MET:CE	0.47	3.03	5	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HB2	0.47	2.40	5	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:133:LEU:N	0.47	2.24	1	1
1:A:97:THR:O	1:A:98:ASP:OD2	0.47	2.34	1	3
1:A:31:LEU:HD22	1:A:31:LEU:H	0.47	1.67	8	3
1:A:59:GLN:OE1	1:A:66:CYS:SG	0.47	2.73	4	1
1:A:84:ILE:CB	1:A:89:GLU:HB3	0.47	2.40	4	3
1:A:11:ASP:OD2	1:A:13:GLN:OE1	0.47	2.33	5	1
1:A:103:LEU:O	1:A:122:LEU:N	0.47	2.46	8	2
1:A:31:LEU:HB3	1:A:116:SER:CA	0.47	2.40	10	2
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:CZ	0.47	2.63	9	1
1:A:108:GLU:HB2	1:A:113:PRO:O	0.46	2.10	8	7
1:A:104:LEU:CD1	1:A:136:PHE:CE1	0.46	2.98	7	1
1:A:24:MET:O	1:A:24:MET:SD	0.46	2.73	10	2
1:A:32:LEU:HG	1:A:147:ILE:HD12	0.46	1.87	8	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:54:LEU:HD21	0.46	1.86	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:PRO:O	0.46	2.10	9	1
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG13	0.46	2.09	1	1
1:A:97:THR:O	1:A:97:THR:HG23	0.46	2.10	2	2
1:A:46:LEU:O	1:A:47:LYS:HD2	0.46	2.09	3	2
1:A:113:PRO:CD	1:A:114:GLU:H	0.46	2.23	3	1
1:A:97:THR:OG1	1:A:103:LEU:CD1	0.46	2.50	4	1
1:A:14:LYS:HB2	1:A:99:TYR:HH	0.46	1.70	6	2
1:A:22:LEU:HG	1:A:156:LEU:HD21	0.46	1.88	6	1
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HD11	0.46	2.10	10	2
1:A:20:TYR:CD1	1:A:156:LEU:O	0.46	2.68	10	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:LEU:HB2	0.46	2.10	1	9
1:A:10:LEU:O	1:A:80:ALA:HB2	0.46	2.09	2	2
1:A:91:LYS:O	1:A:108:GLU:OE2	0.46	2.33	2	1
1:A:21:SER:CA	1:A:122:LEU:HD22	0.46	2.41	3	1
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:CD1	0.46	2.81	8	3
1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CD	0.46	2.74	3	1
1:A:19:TRP:CE2	1:A:103:LEU:HD23	0.46	2.44	6	1
1:A:44:GLU:HB2	1:A:59:GLN:OE1	0.46	2.11	8	2
1:A:24:MET:CE	1:A:40:ARG:HA	0.46	2.41	1	1
1:A:79:PRO:CD	1:A:80:ALA:N	0.46	2.78	10	8
1:A:113:PRO:O	1:A:117:LEU:N	0.46	2.49	2	3
1:A:97:THR:CB	1:A:103:LEU:HB2	0.46	2.41	8	2
1:A:154:THR:O	1:A:157:GLU:CG	0.46	2.64	3	1
1:A:14:LYS:C	1:A:98:ASP:OD2	0.46	2.59	6	3
1:A:53:ASP:OD2	1:A:74:GLU:CD	0.46	2.58	6	1
1:A:75:LYS:HD2	1:A:76:THR:OG1	0.46	2.11	5	5
1:A:109:ASN:H	1:A:113:PRO:CB	0.46	2.24	3	2
1:A:125:THR:C	1:A:127:GLU:N	0.46	2.73	1	2
1:A:7:MET:N	1:A:10:LEU:HB2	0.46	2.26	10	5
1:A:25:ALA:C	1:A:145:MET:HG3	0.46	2.36	8	3
1:A:26:ALA:N	1:A:145:MET:HE3	0.46	2.26	1	1
1:A:46:LEU:HA	1:A:56:ILE:HB	0.46	1.86	10	2
1:A:103:LEU:CG	1:A:122:LEU:HB2	0.46	2.40	5	1
1:A:145:MET:CB	1:A:148:ARG:HD3	0.46	2.40	6	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:74:GLU:OE2	0.46	2.34	7	1
1:A:75:LYS:CD	1:A:79:PRO:HG2	0.46	2.40	7	1
1:A:5:GLN:O	1:A:95:LEU:C	0.46	2.58	9	1
1:A:153:PRO:HA	1:A:156:LEU:CD1	0.46	2.41	10	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:56:ILE:HD13	0.46	2.30	2	1
1:A:107:MET:N	1:A:118:VAL:O	0.46	2.49	5	4
1:A:70:LYS:HD2	1:A:72:ILE:CG1	0.46	2.41	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:ALA:N	1:A:145:MET:HG2	0.46	2.25	7	1
1:A:34:ALA:O	1:A:35:GLN:C	0.46	2.58	1	2
1:A:101:LYS:HD3	1:A:125:THR:CG2	0.46	2.41	7	1
1:A:121:CYS:HB3	1:A:136:PHE:CD1	0.46	2.46	8	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:94:VAL:HB	0.46	2.41	9	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:107:MET:HG2	0.46	1.88	6	2
1:A:22:LEU:CG	1:A:156:LEU:HD11	0.46	2.38	6	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:135:LYS:HG2	0.46	2.45	7	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:147:ILE:HD12	0.46	2.41	10	1
1:A:6:THR:HA	1:A:95:LEU:C	0.46	2.36	7	7
1:A:152:ASN:OD1	1:A:152:ASN:N	0.46	2.49	10	3
1:A:7:MET:SD	1:A:99:TYR:CB	0.46	3.04	3	1
1:A:24:MET:HG3	1:A:40:ARG:HA	0.46	1.87	3	1
1:A:87:LEU:C	1:A:88:ASN:ND2	0.46	2.74	3	1
1:A:22:LEU:CB	1:A:132:ALA:CB	0.46	2.94	4	1
1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:OE1	0.46	2.49	5	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:89:GLU:OE2	0.46	2.10	6	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:121:CYS:CA	0.46	2.93	7	1
1:A:60:LYS:HB3	1:A:67:ALA:O	0.45	2.11	2	4
1:A:74:GLU:CA	1:A:78:ILE:HG13	0.45	2.41	2	6
1:A:19:TRP:CB	1:A:122:LEU:CD1	0.45	2.94	3	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.94	6	2
1:A:92:VAL:O	1:A:93:LEU:HD13	0.45	2.11	3	1
1:A:106:CYS:SG	1:A:117:LEU:CD2	0.45	3.02	6	1
1:A:61:TRP:O	1:A:62:GLU:OE1	0.45	2.34	1	1
1:A:127:GLU:C	1:A:129:ASP:N	0.45	2.74	1	8
1:A:41:VAL:HG12	1:A:60:LYS:HG2	0.45	1.87	5	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:107:MET:HG2	0.45	2.41	6	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.41	6	1
1:A:86:ALA:O	1:A:89:GLU:HG3	0.45	2.10	8	3
1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:OD1	0.45	2.49	7	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:121:CYS:HA	0.45	2.41	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:99:TYR:CG	0.45	2.45	10	1
1:A:92:VAL:C	1:A:93:LEU:HD12	0.45	2.35	10	1
1:A:76:THR:OG1	1:A:77:LYS:N	0.45	2.50	2	3
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HD13	0.45	2.11	3	1
1:A:22:LEU:CB	1:A:132:ALA:HB3	0.45	2.41	4	1
1:A:40:ARG:HD2	1:A:149:LEU:CD2	0.45	2.41	6	2
1:A:94:VAL:HA	1:A:105:PHE:HB2	0.45	1.87	4	1
1:A:102:TYR:CE2	1:A:104:LEU:HD12	0.45	2.46	6	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:89:GLU:HB3	0.45	1.87	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:THR:O	1:A:127:GLU:N	0.45	2.49	2	4
1:A:7:MET:HB2	1:A:95:LEU:O	0.45	2.11	3	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:H	0.45	1.71	4	1
1:A:88:ASN:C	1:A:109:ASN:CB	0.45	2.90	5	1
1:A:132:ALA:O	1:A:136:PHE:CB	0.45	2.64	8	2
1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CD	0.45	2.73	6	1
1:A:74:GLU:CB	1:A:78:ILE:CG1	0.45	2.95	7	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:147:ILE:O	0.45	2.11	2	1
1:A:75:LYS:CB	1:A:79:PRO:CD	0.45	2.95	5	5
1:A:101:LYS:O	1:A:125:THR:HG22	0.45	2.12	6	2
1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:GLU:HG2	0.45	1.87	7	3
1:A:44:GLU:OE2	1:A:45:GLU:OE1	0.45	2.34	5	1
1:A:7:MET:SD	1:A:8:LYS:N	0.45	2.90	6	1
1:A:34:ALA:O	1:A:37:ALA:HB2	0.45	2.12	6	2
1:A:96:ASP:CB	1:A:102:TYR:OH	0.45	2.65	6	1
1:A:104:LEU:HD21	1:A:136:PHE:CD1	0.45	2.47	7	1
1:A:69:LYS:HD3	1:A:87:LEU:CD1	0.45	2.42	10	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:56:ILE:HB	0.45	1.89	2	2
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ASP:HB2	0.45	2.11	4	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLU:HG2	0.45	2.12	9	3
1:A:64:ASP:OD2	1:A:65:GLU:OE1	0.45	2.34	7	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:122:LEU:CB	0.45	3.00	10	1
1:A:19:TRP:CZ2	1:A:97:THR:OG1	0.45	2.66	2	1
1:A:75:LYS:CD	1:A:76:THR:CG2	0.45	2.94	2	1
1:A:113:PRO:HG2	1:A:114:GLU:N	0.45	2.27	9	3
1:A:24:MET:HE1	1:A:42:TYR:HD1	0.45	1.72	3	1
1:A:84:ILE:HG12	1:A:92:VAL:HG22	0.45	1.88	10	2
1:A:110:SER:O	1:A:113:PRO:HD3	0.45	2.12	5	4
1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:OE1	0.45	2.50	6	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HG2	0.45	2.11	1	5
1:A:28:ASP:O	1:A:29:ILE:C	0.45	2.60	4	1
1:A:47:LYS:O	1:A:55:GLU:O	0.45	2.34	8	2
1:A:53:ASP:CA	1:A:74:GLU:HG2	0.45	2.42	6	1
1:A:19:TRP:CB	1:A:43:VAL:CB	0.45	2.94	8	1
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ARG:CG	0.45	2.65	9	1
1:A:71:ILE:CG2	1:A:84:ILE:HG21	0.45	2.41	10	1
1:A:79:PRO:CD	1:A:80:ALA:H	0.45	2.23	4	4
1:A:133:LEU:O	1:A:136:PHE:HB3	0.45	2.11	1	2
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:H	0.45	1.72	2	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:40:ARG:HB2	0.45	2.41	3	2
1:A:21:SER:HG	1:A:43:VAL:H	0.45	1.55	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LYS:O	1:A:78:ILE:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:7:MET:HB3	1:A:10:LEU:CD1	0.45	2.41	6	1
1:A:21:SER:OG	1:A:42:TYR:C	0.45	2.60	6	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:135:LYS:HG2	0.45	2.46	6	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:97:THR:HG1	0.45	1.71	8	1
1:A:18:THR:C	1:A:46:LEU:CD1	0.45	2.88	8	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:99:TYR:CZ	0.45	2.47	9	1
1:A:22:LEU:HD22	1:A:133:LEU:CD1	0.45	2.42	10	1
1:A:121:CYS:HA	1:A:136:PHE:CE2	0.45	2.47	10	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:94:VAL:O	0.45	2.12	2	1
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:56:ILE:HG21	0.45	2.47	3	1
1:A:22:LEU:HB2	1:A:123:VAL:CG1	0.45	2.42	3	1
1:A:60:LYS:HG3	1:A:62:GLU:CD	0.45	2.37	3	2
1:A:19:TRP:NE1	1:A:103:LEU:HD13	0.45	2.26	4	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HE3	0.45	2.11	5	1
1:A:106:CYS:HB2	1:A:119:CYS:SG	0.45	2.51	8	2
1:A:40:ARG:NH2	1:A:42:TYR:OH	0.45	2.49	6	1
1:A:148:ARG:NH2	1:A:150:SER:OG	0.44	2.50	4	2
1:A:132:ALA:HA	1:A:135:LYS:HB2	0.44	1.88	3	1
1:A:58:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	0.44	1.89	4	1
1:A:82:PHE:HB2	1:A:92:VAL:CG2	0.44	2.42	8	1
1:A:40:ARG:O	1:A:40:ARG:CG	0.44	2.64	2	1
1:A:106:CYS:HB3	1:A:118:VAL:O	0.44	2.12	4	1
1:A:84:ILE:HG12	1:A:89:GLU:HB2	0.44	1.86	7	1
1:A:75:LYS:CE	1:A:76:THR:OG1	0.44	2.65	8	1
1:A:97:THR:O	1:A:98:ASP:CB	0.44	2.64	10	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:59:GLN:OE1	0.44	2.35	1	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:LEU:CB	0.44	2.66	1	1
1:A:24:MET:HE3	1:A:24:MET:N	0.44	2.28	7	2
1:A:74:GLU:HB3	1:A:78:ILE:CD1	0.44	2.43	10	5
1:A:86:ALA:O	1:A:89:GLU:HG2	0.44	2.11	2	3
1:A:62:GLU:C	1:A:64:ASP:H	0.44	2.20	5	2
1:A:44:GLU:O	1:A:45:GLU:OE1	0.44	2.34	6	1
1:A:100:LYS:HB2	1:A:102:TYR:CD1	0.44	2.47	6	1
1:A:127:GLU:OE1	1:A:131:GLU:OE2	0.44	2.35	10	1
1:A:61:TRP:CE2	1:A:64:ASP:HA	0.44	2.47	3	1
1:A:17:GLY:HA2	1:A:46:LEU:O	0.44	2.12	8	2
1:A:13:GLN:OE1	1:A:51:GLU:CA	0.44	2.65	9	1
1:A:14:LYS:HB3	1:A:98:ASP:OD2	0.44	2.12	3	3
1:A:75:LYS:HB2	1:A:81:VAL:CG1	0.44	2.42	9	3
1:A:96:ASP:OD2	1:A:100:LYS:HB2	0.44	2.12	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:LEU:O	1:A:68:GLN:OE1	0.44	2.34	4	1
1:A:130:ASP:HA	1:A:133:LEU:HB2	0.44	1.89	6	1
1:A:25:ALA:HA	1:A:149:LEU:HD23	0.44	1.88	7	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:122:LEU:CG	0.44	2.42	7	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:120:GLN:HB3	0.44	2.48	10	1
1:A:49:THR:C	1:A:51:GLU:N	0.44	2.74	2	3
1:A:108:GLU:OE1	1:A:117:LEU:HD22	0.44	2.11	2	1
1:A:125:THR:HB	1:A:131:GLU:CD	0.44	2.37	3	1
1:A:125:THR:CB	1:A:131:GLU:OE1	0.44	2.66	3	1
1:A:106:CYS:HB3	1:A:119:CYS:CB	0.44	2.41	6	1
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:CD1	0.44	2.52	9	2
1:A:27:SER:CA	1:A:145:MET:SD	0.44	3.06	5	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:69:LYS:HE3	0.44	1.89	6	1
1:A:58:LEU:CD2	1:A:71:ILE:HG13	0.44	2.43	6	1
1:A:107:MET:HB2	1:A:118:VAL:CG1	0.44	2.43	8	1
1:A:70:LYS:O	1:A:70:LYS:CG	0.44	2.66	9	1
1:A:71:ILE:CG2	1:A:84:ILE:CG2	0.44	2.95	10	1
1:A:18:THR:HB	1:A:124:ARG:HD2	0.44	1.88	7	2
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:H	0.44	2.04	4	3
1:A:134:GLU:O	1:A:136:PHE:N	0.44	2.51	4	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:80:ALA:HB2	0.44	1.89	5	1
1:A:56:ILE:HG12	1:A:56:ILE:O	0.44	2.12	6	1
1:A:56:ILE:HG23	1:A:71:ILE:CB	0.44	2.42	7	1
1:A:27:SER:O	1:A:146:HIS:CD2	0.44	2.70	10	1
1:A:15:VAL:CB	1:A:19:TRP:CZ2	0.44	2.99	1	1
1:A:23:ALA:CB	1:A:136:PHE:CE2	0.44	3.01	1	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:115:GLN:C	0.44	2.37	5	2
1:A:121:CYS:HB3	1:A:136:PHE:CE1	0.44	2.48	9	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:94:VAL:O	0.44	2.66	2	1
1:A:26:ALA:HA	1:A:145:MET:HE1	0.44	1.90	3	1
1:A:96:ASP:O	1:A:97:THR:CB	0.43	2.65	1	4
1:A:74:GLU:CA	1:A:78:ILE:CG1	0.43	2.95	7	2
1:A:126:PRO:C	1:A:127:GLU:HG3	0.43	2.38	2	1
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:56:ILE:HD12	0.43	2.48	4	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:121:CYS:HA	0.43	1.89	7	1
1:A:24:MET:SD	1:A:40:ARG:HG2	0.43	2.53	6	2
1:A:70:LYS:HE3	1:A:72:ILE:CG1	0.43	2.43	3	2
1:A:76:THR:O	1:A:78:ILE:N	0.43	2.51	3	2
1:A:38:PRO:O	1:A:60:LYS:NZ	0.43	2.49	4	1
1:A:19:TRP:O	1:A:43:VAL:HB	0.43	2.13	5	3
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:HG21	0.43	2.14	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:MET:SD	1:A:120:GLN:OE1	0.43	2.76	5	1
1:A:70:LYS:HG2	1:A:86:ALA:CB	0.43	2.42	6	4
1:A:89:GLU:OE2	1:A:107:MET:SD	0.43	2.76	6	1
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:CD1	0.43	2.89	8	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASN:HB3	0.43	2.11	10	1
1:A:63:ASN:O	1:A:64:ASP:CG	0.43	2.61	10	1
1:A:95:LEU:HB2	1:A:104:LEU:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:PRO:HA	0.43	1.88	3	1
1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:ASP:OD2	0.43	2.13	3	1
1:A:31:LEU:CB	1:A:116:SER:O	0.43	2.66	9	2
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:HD23	0.43	2.28	9	1
1:A:101:LYS:HB2	1:A:125:THR:CA	0.43	2.44	10	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:69:LYS:HE3	0.43	2.44	6	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:53:ASP:N	0.43	2.50	6	1
1:A:92:VAL:HG13	1:A:107:MET:SD	0.43	2.54	8	1
1:A:29:ILE:HG12	1:A:147:ILE:HD12	0.43	1.88	9	1
1:A:56:ILE:C	1:A:57:LEU:HD23	0.43	2.38	9	1
1:A:70:LYS:O	1:A:70:LYS:HG2	0.43	2.13	9	1
1:A:21:SER:HB3	1:A:42:TYR:HB3	0.43	1.89	10	1
1:A:36:SER:O	1:A:37:ALA:HB3	0.43	2.13	4	2
1:A:130:ASP:O	1:A:133:LEU:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:105:PHE:HD2	0.43	1.73	2	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:54:LEU:HD21	0.43	1.91	3	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:117:LEU:HG	0.43	2.14	4	1
1:A:19:TRP:HB2	1:A:46:LEU:CD1	0.43	2.41	5	1
1:A:18:THR:HB	1:A:124:ARG:NE	0.43	2.29	9	1
1:A:100:LYS:HA	1:A:100:LYS:CE	0.43	2.44	10	1
1:A:46:LEU:CG	1:A:56:ILE:HB	0.43	2.43	2	2
1:A:32:LEU:HA	1:A:37:ALA:HB1	0.43	1.91	2	1
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:HD11	0.43	2.14	6	2
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LYS:HD3	0.43	2.13	5	1
1:A:77:LYS:HD3	1:A:77:LYS:N	0.43	2.28	7	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:62:GLU:N	0.43	2.52	8	1
1:A:47:LYS:HB2	1:A:55:GLU:O	0.43	2.14	9	1
1:A:68:GLN:O	1:A:69:LYS:HE2	0.43	2.14	9	1
1:A:77:LYS:C	1:A:78:ILE:HD12	0.43	2.39	9	1
1:A:153:PRO:HA	1:A:156:LEU:HG	0.43	1.89	10	1
1:A:5:GLN:CG	1:A:6:THR:H	0.43	2.27	8	7
1:A:11:ASP:O	1:A:14:LYS:HB2	0.43	2.14	3	8
1:A:74:GLU:HA	1:A:78:ILE:HG13	0.43	1.91	2	1
1:A:6:THR:HA	1:A:94:VAL:C	0.43	2.38	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:VAL:CB	1:A:69:LYS:HE3	0.43	2.43	6	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:120:GLN:OE1	0.43	2.13	6	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLU:HG3	0.43	2.14	10	3
1:A:22:LEU:HD22	1:A:132:ALA:CB	0.43	2.20	1	1
1:A:60:LYS:HE3	1:A:67:ALA:HB3	0.43	1.90	2	1
1:A:108:GLU:CG	1:A:113:PRO:HB2	0.43	2.44	2	1
1:A:63:ASN:O	1:A:64:ASP:HB2	0.43	2.12	5	3
1:A:80:ALA:HA	1:A:82:PHE:CE2	0.43	2.49	7	1
1:A:75:LYS:HG3	1:A:76:THR:OG1	0.43	2.14	10	1
1:A:121:CYS:SG	1:A:132:ALA:C	0.43	3.01	10	1
1:A:103:LEU:HG	1:A:104:LEU:N	0.43	2.29	1	1
1:A:73:ALA:C	1:A:82:PHE:CB	0.43	2.89	8	3
1:A:41:VAL:CG1	1:A:58:LEU:HD13	0.43	2.44	5	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:65:GLU:OE2	0.43	2.37	7	1
1:A:82:PHE:O	1:A:91:LYS:CA	0.43	2.66	8	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:122:LEU:HG	0.43	2.39	9	1
1:A:5:GLN:HA	1:A:95:LEU:HD23	0.43	1.90	10	1
1:A:98:ASP:OD1	1:A:98:ASP:O	0.43	2.37	10	1
1:A:17:GLY:O	1:A:45:GLU:OE2	0.43	2.36	1	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:148:ARG:HA	0.43	1.91	2	1
1:A:41:VAL:HG11	1:A:69:LYS:CD	0.43	2.43	3	1
1:A:58:LEU:CG	1:A:69:LYS:HB2	0.43	2.43	5	5
1:A:75:LYS:HG3	1:A:79:PRO:CD	0.43	2.42	3	1
1:A:101:LYS:HG3	1:A:125:THR:HG22	0.43	1.90	5	1
1:A:106:CYS:SG	1:A:117:LEU:HG	0.43	2.54	5	1
1:A:27:SER:H	1:A:31:LEU:HD21	0.43	1.74	10	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:121:CYS:HB2	0.42	1.90	1	1
1:A:84:ILE:O	1:A:90:ASN:CA	0.42	2.67	5	2
1:A:130:ASP:HA	1:A:133:LEU:HD12	0.42	1.90	3	1
1:A:11:ASP:C	1:A:99:TYR:OH	0.42	2.62	6	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:117:LEU:O	0.42	2.13	6	1
1:A:75:LYS:O	1:A:75:LYS:HG2	0.42	2.14	7	1
1:A:82:PHE:HB2	1:A:92:VAL:HB	0.42	1.91	9	2
1:A:84:ILE:HG23	1:A:92:VAL:HG22	0.42	1.87	8	1
1:A:88:ASN:OD1	1:A:88:ASN:N	0.42	2.49	8	1
1:A:22:LEU:HG	1:A:133:LEU:HD23	0.42	1.91	9	1
1:A:31:LEU:CB	1:A:116:SER:HA	0.42	2.44	9	2
1:A:147:ILE:C	1:A:147:ILE:HD13	0.42	2.39	10	1
1:A:48:PRO:HB3	1:A:54:LEU:CD1	0.42	2.44	1	2
1:A:30:SER:OG	1:A:115:GLN:O	0.42	2.29	4	1
1:A:105:PHE:N	1:A:120:GLN:O	0.42	2.46	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:LYS:CB	1:A:102:TYR:CE1	0.42	3.02	6	1
1:A:26:ALA:HA	1:A:145:MET:HE3	0.42	1.90	8	1
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HD21	0.42	2.13	8	1
1:A:121:CYS:CB	1:A:136:PHE:CD1	0.42	3.02	8	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:HB	0.42	1.91	9	1
1:A:60:LYS:HD2	1:A:69:LYS:CD	0.42	2.44	1	1
1:A:42:TYR:OH	1:A:151:PHE:CZ	0.42	2.71	4	1
1:A:83:LYS:HB3	1:A:90:ASN:O	0.42	2.15	4	1
1:A:102:TYR:HB3	1:A:135:LYS:HG2	0.42	1.91	4	1
1:A:113:PRO:O	1:A:115:GLN:N	0.42	2.52	4	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:LYS:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:19:TRP:CB	1:A:122:LEU:HD13	0.42	2.44	6	2
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ARG:HG3	0.42	2.14	9	2
1:A:29:ILE:HG12	1:A:147:ILE:CD1	0.42	2.45	9	1
1:A:21:SER:OG	1:A:42:TYR:CB	0.42	2.67	10	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:100:LYS:HG3	0.42	2.14	10	2
1:A:29:ILE:O	1:A:32:LEU:N	0.42	2.52	2	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:32:LEU:HB2	0.42	2.44	8	2
1:A:36:SER:HB2	1:A:62:GLU:CG	0.42	2.45	3	1
1:A:46:LEU:HA	1:A:56:ILE:CB	0.42	2.45	3	2
1:A:113:PRO:O	1:A:116:SER:CA	0.42	2.67	4	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:LYS:HG3	0.42	2.13	9	2
1:A:12:ILE:CD1	1:A:19:TRP:CZ2	0.42	3.01	9	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:153:PRO:O	0.42	2.67	10	1
1:A:7:MET:SD	1:A:99:TYR:HB3	0.42	2.55	3	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:94:VAL:O	0.42	2.68	3	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:122:LEU:H	0.42	1.75	4	1
1:A:60:LYS:HD3	1:A:60:LYS:C	0.42	2.40	5	2
1:A:22:LEU:CA	1:A:156:LEU:HD21	0.42	2.44	9	2
1:A:46:LEU:HD12	1:A:54:LEU:CD2	0.42	2.37	7	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:133:LEU:HG	0.42	2.44	8	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:69:LYS:O	0.42	2.14	2	1
1:A:7:MET:N	1:A:94:VAL:O	0.42	2.52	6	2
1:A:59:GLN:N	1:A:59:GLN:CD	0.42	2.77	5	1
1:A:103:LEU:CB	1:A:122:LEU:HB2	0.42	2.44	8	3
1:A:75:LYS:HE3	1:A:76:THR:OG1	0.42	2.15	8	1
1:A:23:ALA:HB3	1:A:136:PHE:CE1	0.42	2.49	9	1
1:A:129:ASP:OD2	1:A:131:GLU:HG3	0.42	2.14	9	1
1:A:19:TRP:NE1	1:A:122:LEU:HD13	0.42	2.26	1	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:133:LEU:N	0.42	2.83	1	1
1:A:24:MET:HB2	1:A:120:GLN:NE2	0.42	2.30	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:ASN:OD1	1:A:91:LYS:N	0.42	2.53	4	1
1:A:106:CYS:HG	1:A:119:CYS:CB	0.42	2.28	4	1
1:A:41:VAL:HG21	1:A:58:LEU:HD13	0.42	1.90	5	1
1:A:88:ASN:C	1:A:109:ASN:HB2	0.42	2.40	5	1
1:A:101:LYS:CB	1:A:126:PRO:CD	0.42	2.98	6	1
1:A:72:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HA	0.42	1.74	7	1
1:A:129:ASP:HB3	1:A:131:GLU:CD	0.42	2.39	8	1
1:A:12:ILE:CG2	1:A:54:LEU:CB	0.42	2.98	9	1
1:A:36:SER:O	1:A:40:ARG:HD3	0.42	2.15	1	1
1:A:125:THR:OG1	1:A:127:GLU:O	0.42	2.34	1	1
1:A:125:THR:HB	1:A:131:GLU:OE1	0.42	2.15	3	2
1:A:7:MET:HG3	1:A:8:LYS:N	0.42	2.30	2	1
1:A:106:CYS:HB3	1:A:119:CYS:SG	0.42	2.54	9	3
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ASP:CB	0.42	2.67	4	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:122:LEU:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:31:LEU:HG	1:A:115:GLN:O	0.42	2.15	9	1
1:A:110:SER:CA	1:A:113:PRO:CD	0.42	2.97	9	2
1:A:25:ALA:N	1:A:118:VAL:HG23	0.42	2.30	3	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HD3	0.42	2.14	3	1
1:A:74:GLU:HA	1:A:78:ILE:HG12	0.42	1.91	6	3
1:A:56:ILE:CG1	1:A:56:ILE:O	0.42	2.67	6	1
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:HB	0.42	2.14	8	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:99:TYR:CE1	0.42	2.49	9	1
1:A:60:LYS:HG3	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.15	10	1
1:A:7:MET:C	1:A:10:LEU:HB2	0.42	2.39	3	1
1:A:69:LYS:CE	1:A:87:LEU:HD22	0.42	2.45	3	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:118:VAL:HG12	0.42	1.90	4	1
1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:GLU:HG3	0.42	1.91	4	1
1:A:103:LEU:O	1:A:121:CYS:HB3	0.42	2.15	6	2
1:A:44:GLU:HB3	1:A:59:GLN:OE1	0.42	2.14	5	1
1:A:60:LYS:NZ	1:A:61:TRP:O	0.42	2.51	5	1
1:A:92:VAL:HG13	1:A:105:PHE:CD1	0.42	2.50	7	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:108:GLU:N	0.42	2.52	10	1
1:A:12:ILE:C	1:A:54:LEU:HD13	0.41	2.40	2	2
1:A:60:LYS:CD	1:A:69:LYS:HE3	0.41	2.44	2	1
1:A:7:MET:HB3	1:A:10:LEU:HB2	0.41	1.91	3	1
1:A:20:TYR:HB3	1:A:123:VAL:HG22	0.41	1.87	3	1
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:HG12	0.41	2.14	4	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:133:LEU:N	0.41	2.30	5	1
1:A:90:ASN:CG	1:A:109:ASN:HA	0.41	2.40	5	1
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HG	0.41	2.15	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LYS:N	1:A:135:LYS:CD	0.41	2.82	7	2
1:A:28:ASP:O	1:A:31:LEU:HD22	0.41	2.14	8	1
1:A:75:LYS:HB2	1:A:81:VAL:HG12	0.41	1.92	9	1
1:A:84:ILE:HB	1:A:89:GLU:HB3	0.41	1.92	9	1
1:A:16:ALA:CB	1:A:48:PRO:CD	0.41	2.95	10	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:31:LEU:C	0.41	2.93	3	3
1:A:49:THR:O	1:A:50:PRO:C	0.41	2.61	2	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:122:LEU:CG	0.41	2.97	2	1
1:A:123:VAL:CG1	1:A:129:ASP:CB	0.41	2.87	3	1
1:A:60:LYS:HD3	1:A:62:GLU:OE1	0.41	2.15	5	1
1:A:90:ASN:ND2	1:A:110:SER:HB3	0.41	2.30	5	1
1:A:110:SER:HA	1:A:113:PRO:CG	0.41	2.42	8	2
1:A:105:PHE:O	1:A:105:PHE:CG	0.41	2.74	6	1
1:A:80:ALA:C	1:A:82:PHE:CE2	0.41	2.98	7	1
1:A:18:THR:O	1:A:124:ARG:HD3	0.41	2.14	8	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	0.41	1.92	9	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:ILE:C	0.41	2.62	7	5
1:A:108:GLU:HB3	1:A:117:LEU:HD12	0.41	1.92	1	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:107:MET:HB3	0.41	2.45	5	2
1:A:129:ASP:OD1	1:A:131:GLU:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:133:LEU:N	0.41	2.83	5	1
1:A:96:ASP:C	1:A:97:THR:HG22	0.41	2.40	10	2
1:A:103:LEU:O	1:A:121:CYS:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:41:VAL:HB	1:A:58:LEU:CD1	0.41	2.43	7	1
1:A:33:ASP:OD1	1:A:33:ASP:C	0.41	2.60	8	1
1:A:19:TRP:HD1	1:A:122:LEU:CB	0.41	2.27	10	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:92:VAL:HG22	0.41	2.46	4	1
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ILE:CG1	0.41	2.68	5	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:107:MET:SD	0.41	3.08	6	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:102:TYR:OH	0.41	2.34	8	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:VAL:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:N	0.41	2.75	10	2
1:A:32:LEU:HB3	1:A:147:ILE:CD1	0.41	2.44	9	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:56:ILE:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:112:GLU:O	1:A:116:SER:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:125:THR:C	1:A:127:GLU:H	0.41	2.22	1	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:59:GLN:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:69:LYS:HZ3	1:A:87:LEU:HD22	0.41	1.74	2	1
1:A:148:ARG:HG2	1:A:149:LEU:N	0.41	2.30	2	2
1:A:24:MET:HB2	1:A:120:GLN:CD	0.41	2.40	3	2
1:A:75:LYS:CE	1:A:79:PRO:CG	0.41	2.98	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:VAL:HG21	1:A:19:TRP:HE1	0.41	1.73	9	1
1:A:5:GLN:C	1:A:95:LEU:HA	0.41	2.41	10	2
1:A:60:LYS:HD2	1:A:69:LYS:CG	0.41	2.46	1	1
1:A:62:GLU:HB2	1:A:65:GLU:O	0.41	2.15	1	3
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:CG	0.41	2.62	2	2
1:A:14:LYS:HB3	1:A:98:ASP:CG	0.41	2.40	3	1
1:A:129:ASP:HB3	1:A:131:GLU:OE1	0.41	2.15	4	1
1:A:134:GLU:C	1:A:136:PHE:H	0.41	2.23	4	1
1:A:14:LYS:CB	1:A:99:TYR:CE1	0.41	3.03	6	1
1:A:75:LYS:CG	1:A:79:PRO:HD2	0.41	2.44	6	1
1:A:44:GLU:CD	1:A:159:GLN:HG2	0.41	2.40	1	1
1:A:27:SER:C	1:A:146:HIS:HB2	0.41	2.40	2	2
1:A:102:TYR:CE2	1:A:135:LYS:HD2	0.41	2.50	2	1
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:CG1	0.41	2.69	2	2
1:A:19:TRP:CG	1:A:46:LEU:CD1	0.41	2.81	3	1
1:A:97:THR:OG1	1:A:103:LEU:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:127:GLU:HB2	1:A:131:GLU:CD	0.41	2.40	3	1
1:A:74:GLU:CD	1:A:74:GLU:N	0.41	2.77	4	1
1:A:113:PRO:CB	1:A:116:SER:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:100:LYS:HG3	1:A:102:TYR:OH	0.41	2.14	5	1
1:A:24:MET:N	1:A:24:MET:HE3	0.41	2.31	6	1
1:A:101:LYS:CE	1:A:131:GLU:HG2	0.41	2.45	6	1
1:A:60:LYS:CD	1:A:62:GLU:OE2	0.41	2.68	7	1
1:A:104:LEU:HD21	1:A:136:PHE:CE1	0.41	2.50	7	1
1:A:46:LEU:CG	1:A:54:LEU:HD21	0.41	2.45	9	1
1:A:43:VAL:CG1	1:A:56:ILE:CD1	0.41	2.98	1	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:32:LEU:CD1	0.41	2.80	2	1
1:A:110:SER:H	1:A:113:PRO:HG3	0.41	1.74	2	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:32:LEU:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:76:THR:C	1:A:78:ILE:N	0.41	2.78	7	2
1:A:22:LEU:CD1	1:A:22:LEU:C	0.41	2.93	9	2
1:A:73:ALA:C	1:A:82:PHE:CG	0.41	2.98	9	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HG	0.41	1.93	1	1
1:A:24:MET:CE	1:A:39:LEU:O	0.41	2.61	1	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:32:LEU:HB2	0.41	2.45	1	2
1:A:89:GLU:OE1	1:A:107:MET:SD	0.41	2.79	1	1
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LYS:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:153:PRO:HA	1:A:156:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:155:GLN:O	1:A:156:LEU:C	0.41	2.64	3	1
1:A:43:VAL:CG1	1:A:56:ILE:HD13	0.41	2.46	5	1
1:A:106:CYS:SG	1:A:119:CYS:N	0.41	2.94	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:GLN:OE1	1:A:59:GLN:HA	0.41	2.16	7	2
1:A:101:LYS:CD	1:A:125:THR:HG22	0.41	2.45	7	1
1:A:58:LEU:O	1:A:68:GLN:HG3	0.41	2.16	8	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:CG1	0.41	2.68	8	1
1:A:118:VAL:O	1:A:120:GLN:NE2	0.41	2.54	9	1
1:A:24:MET:SD	1:A:149:LEU:CB	0.41	3.09	10	1
1:A:19:TRP:HA	1:A:19:TRP:HE3	0.41	1.72	1	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:65:GLU:CD	0.41	2.64	7	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:46:LEU:HD13	0.41	2.50	9	1
1:A:34:ALA:O	1:A:37:ALA:N	0.40	2.47	2	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:46:LEU:CD2	0.40	2.86	4	1
1:A:68:GLN:C	1:A:69:LYS:HD3	0.40	2.41	5	1
1:A:101:LYS:HD3	1:A:125:THR:HG22	0.40	1.92	7	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:104:LEU:N	0.40	2.70	9	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:97:THR:CG2	0.40	2.44	1	1
1:A:24:MET:SD	1:A:40:ARG:HG3	0.40	2.56	1	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:102:TYR:CE1	0.40	2.73	2	2
1:A:152:ASN:OD1	1:A:155:GLN:HB2	0.40	2.17	3	1
1:A:92:VAL:CG1	1:A:105:PHE:CE1	0.40	3.05	7	1
1:A:152:ASN:OD1	1:A:154:THR:HB	0.40	2.17	8	1
1:A:106:CYS:HB3	1:A:119:CYS:HA	0.40	1.85	9	1
1:A:69:LYS:HD3	1:A:87:LEU:HD13	0.40	1.93	1	1
1:A:108:GLU:CD	1:A:108:GLU:N	0.40	2.80	2	1
1:A:19:TRP:CE2	1:A:103:LEU:HD21	0.40	2.50	3	1
1:A:58:LEU:HD23	1:A:71:ILE:CG1	0.40	2.46	3	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:60:LYS:HZ2	0.40	1.75	4	1
1:A:84:ILE:O	1:A:90:ASN:N	0.40	2.55	5	2
1:A:12:ILE:HG13	1:A:54:LEU:CD1	0.40	2.35	6	1
1:A:17:GLY:CA	1:A:46:LEU:HB2	0.40	2.46	8	1
1:A:43:VAL:CG1	1:A:56:ILE:HD11	0.40	2.36	1	1
1:A:38:PRO:HA	1:A:60:LYS:HD2	0.40	1.94	2	1
1:A:60:LYS:HB3	1:A:67:ALA:HB3	0.40	1.93	4	1
1:A:106:CYS:N	1:A:119:CYS:SG	0.40	2.94	6	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:VAL:HB	0.40	1.93	9	1
1:A:26:ALA:N	1:A:145:MET:HG3	0.40	2.32	10	1
1:A:61:TRP:C	1:A:61:TRP:CD1	0.40	2.99	10	1
1:A:70:LYS:CE	1:A:86:ALA:HB2	0.40	2.46	5	1
1:A:60:LYS:HG2	1:A:62:GLU:CD	0.40	2.42	6	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:107:MET:SD	0.40	2.56	6	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	147/162 (91%)	110±2 (75±1%)	21±2 (14±1%)	16±1 (11±1%)	1	8
All	All	1467/1620 (91%)	1096 (75%)	207 (14%)	164 (11%)	1	8

All 24 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	29	ILE	10
1	A	34	ALA	10
1	A	51	GLU	10
1	A	78	ILE	10
1	A	79	PRO	10
1	A	97	THR	10
1	A	101	LYS	10
1	A	110	SER	10
1	A	124	ARG	10
1	A	125	THR	10
1	A	145	MET	10
1	A	49	THR	9
1	A	130	ASP	9
1	A	63	ASN	7
1	A	113	PRO	7
1	A	77	LYS	4
1	A	37	ALA	3
1	A	5	GLN	3
1	A	126	PRO	3
1	A	64	ASP	3
1	A	80	ALA	3
1	A	135	LYS	1
1	A	98	ASP	1
1	A	50	PRO	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	132/144 (92%)	90±3 (68±2%)	42±3 (32±2%)	1	13
All	All	1320/1440 (92%)	895 (68%)	425 (32%)	1	13

All 97 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	15	VAL	10
1	A	29	ILE	10
1	A	31	LEU	10
1	A	32	LEU	10
1	A	56	ILE	10
1	A	75	LYS	10
1	A	84	ILE	10
1	A	98	ASP	10
1	A	116	SER	10
1	A	147	ILE	10
1	A	118	VAL	9
1	A	120	GLN	9
1	A	123	VAL	9
1	A	19	TRP	8
1	A	45	GLU	8
1	A	77	LYS	8
1	A	90	ASN	8
1	A	106	CYS	8
1	A	114	GLU	8
1	A	42	TYR	8
1	A	78	ILE	8
1	A	70	LYS	7
1	A	74	GLU	7
1	A	93	LEU	7
1	A	145	MET	7
1	A	22	LEU	7
1	A	103	LEU	7
1	A	10	LEU	6
1	A	81	VAL	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	117	LEU	6
1	A	124	ARG	6
1	A	135	LYS	6
1	A	158	GLU	6
1	A	46	LEU	6
1	A	47	LYS	5
1	A	58	LEU	5
1	A	128	VAL	5
1	A	134	GLU	5
1	A	148	ARG	5
1	A	7	MET	5
1	A	54	LEU	4
1	A	72	ILE	4
1	A	95	LEU	4
1	A	157	GLU	4
1	A	40	ARG	4
1	A	60	LYS	4
1	A	133	LEU	4
1	A	68	GLN	4
1	A	35	GLN	4
1	A	14	LYS	3
1	A	39	LEU	3
1	A	87	LEU	3
1	A	88	ASN	3
1	A	83	LYS	3
1	A	107	MET	3
1	A	64	ASP	3
1	A	69	LYS	3
1	A	101	LYS	3
1	A	136	PHE	3
1	A	8	LYS	2
1	A	62	GLU	2
1	A	105	PHE	2
1	A	100	LYS	2
1	A	115	GLN	2
1	A	94	VAL	2
1	A	108	GLU	2
1	A	122	LEU	2
1	A	156	LEU	2
1	A	104	LEU	2
1	A	146	HIS	2
1	A	155	GLN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	59	GLN	2
1	A	127	GLU	2
1	A	150	SER	2
1	A	149	LEU	2
1	A	24	MET	1
1	A	125	THR	1
1	A	152	ASN	1
1	A	66	CYS	1
1	A	91	LYS	1
1	A	12	ILE	1
1	A	13	GLN	1
1	A	33	ASP	1
1	A	131	GLU	1
1	A	30	SER	1
1	A	65	GLU	1
1	A	63	ASN	1
1	A	51	GLU	1
1	A	92	VAL	1
1	A	97	THR	1
1	A	119	CYS	1
1	A	121	CYS	1
1	A	159	GLN	1
1	A	28	ASP	1
1	A	44	GLU	1
1	A	11	ASP	1
1	A	129	ASP	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

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