



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 10, 2026 – 12:30 PM UTC

PDB ID : 1D2B / pdb_00001d2b
Title : THE MMP-INHIBITORY, N-TERMINAL DOMAIN OF HUMAN TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASES-1 (N-TIMP-1), SOLUTION NMR, 29 STRUCTURES
Authors : Wu, B.; Arumugam, S.; Semchenko, V.; Brew, K.; Van Doren, S.R.
Deposited on : 1999-09-22

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

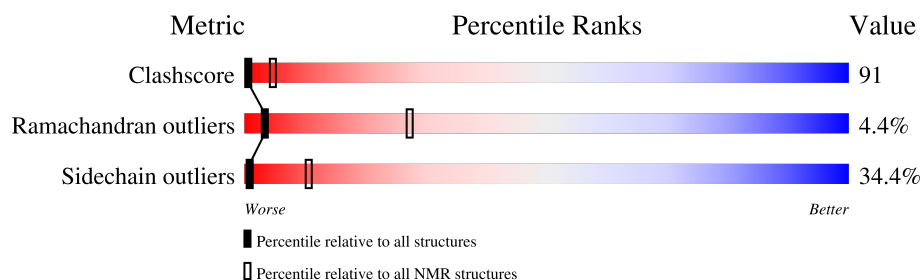
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 88%.

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	126	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 29 models. Model 22 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:51, A:57-A:126 (119)	0.83	22

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

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

NmrClust was unable to cluster the ensemble.

Error message: Inconsistent models

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1976 atoms, of which 976 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Metalloproteinase inhibitor 1.

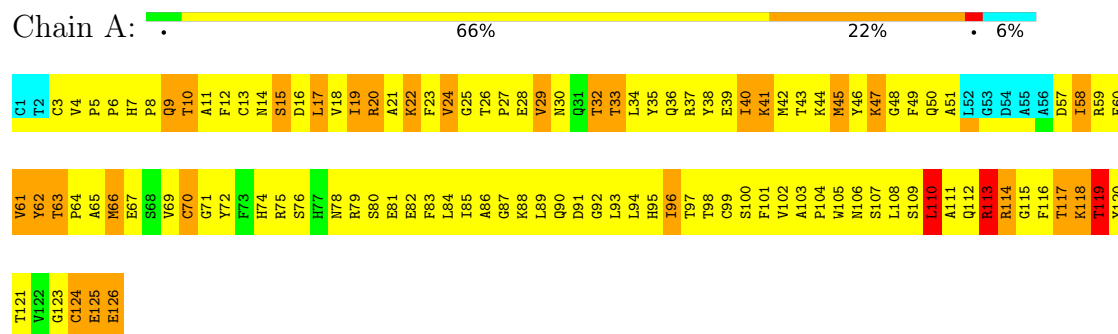
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	126	Total	C	H	N	O	S	0
			1976	635	976	172	184	9	

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: Metalloproteinase inhibitor 1

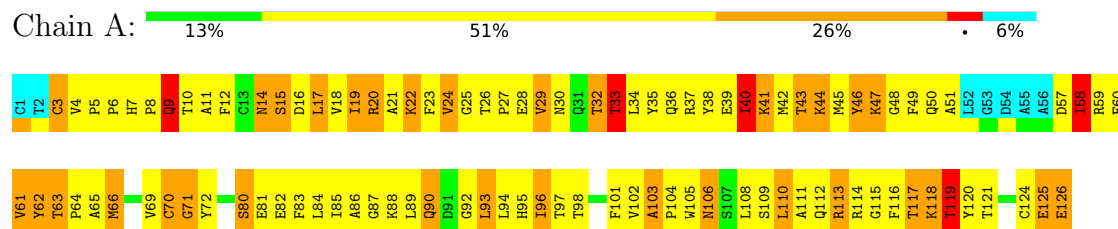


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

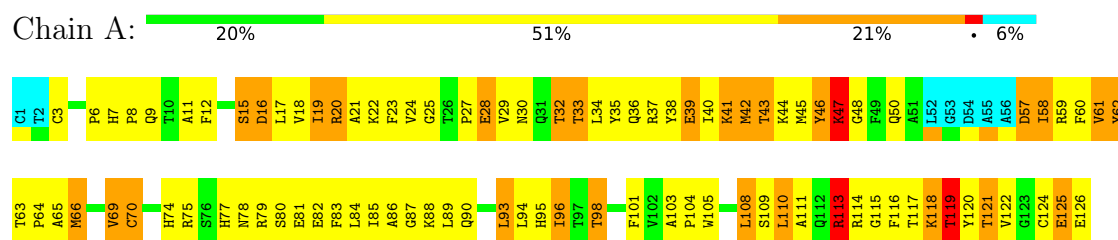
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



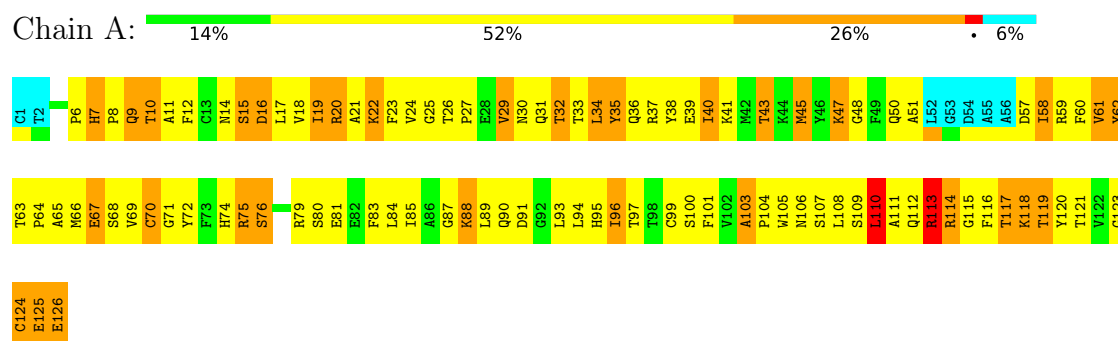
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



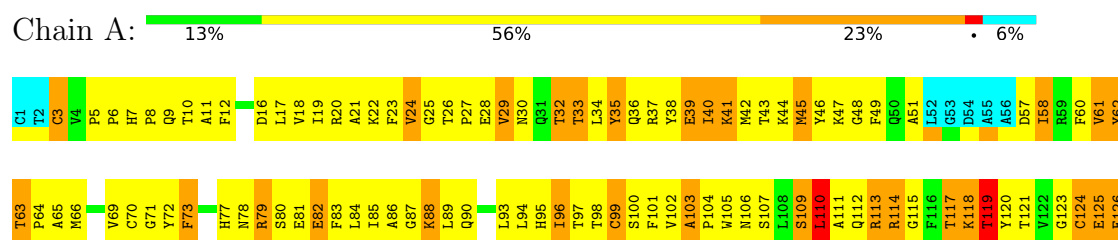
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



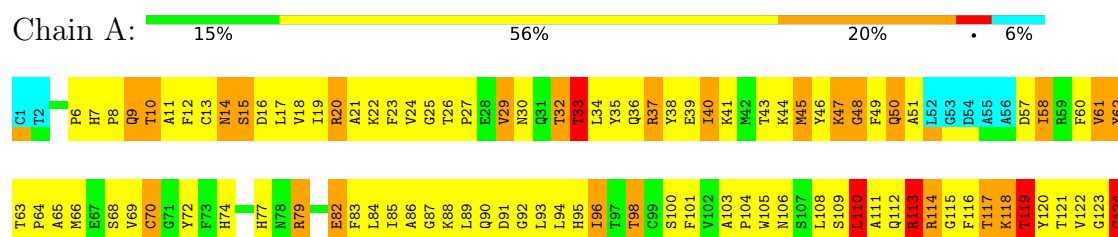
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

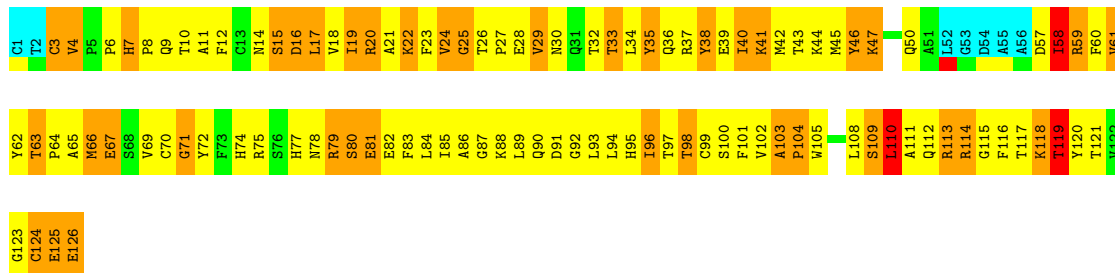


E125
E126

4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

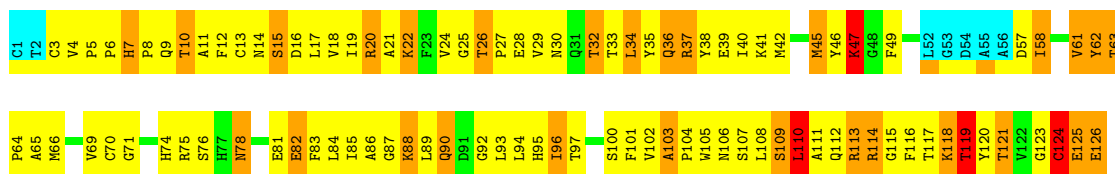
Chain A: 10% 52% 31% 6%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

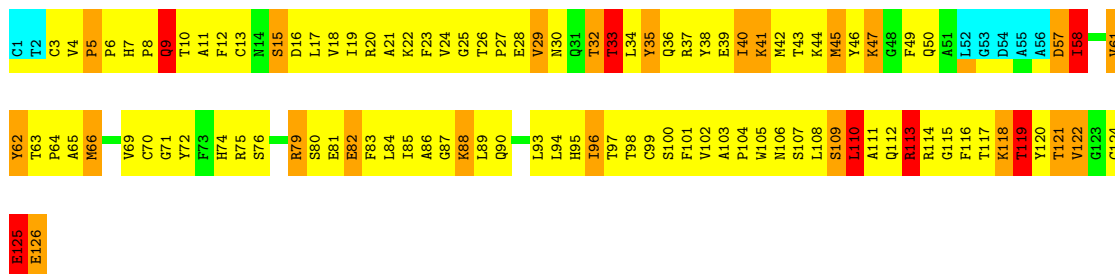
Chain A: 16% 53% 22% 6%



4.2.8 Score per residue for model 8

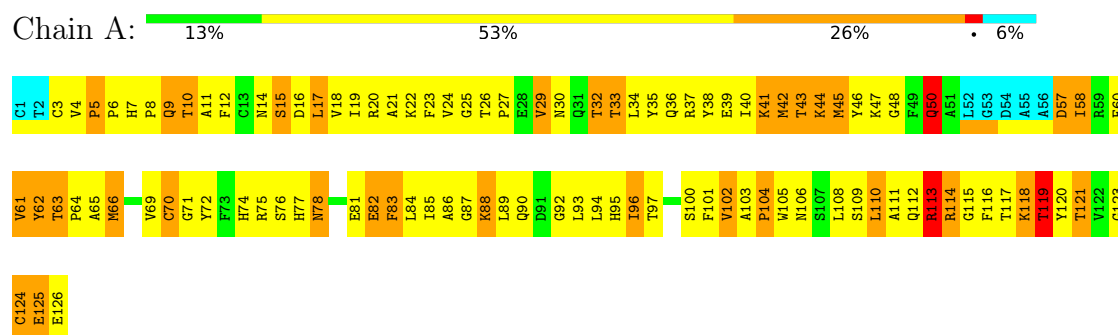
- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

Chain A: 11% 60% 17% 6% 6%



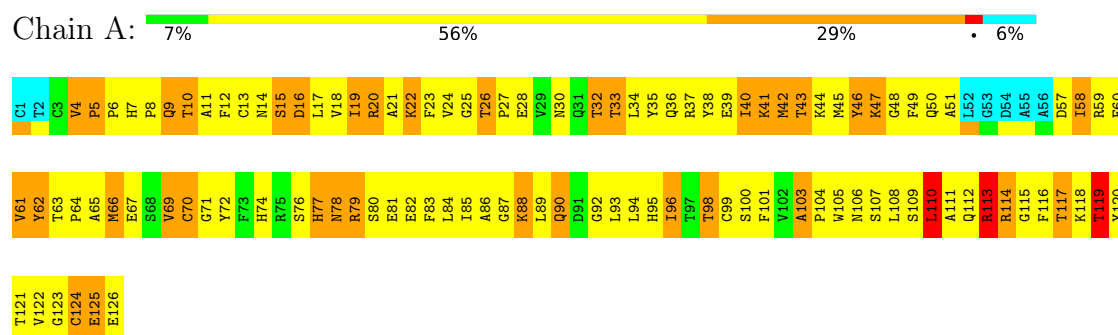
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



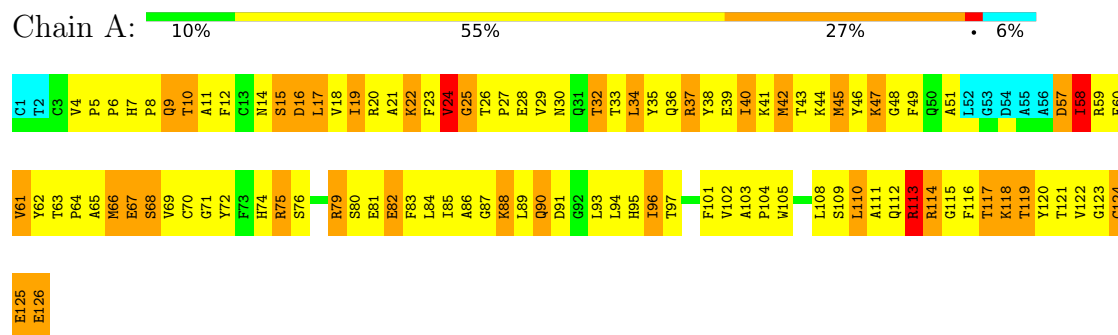
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



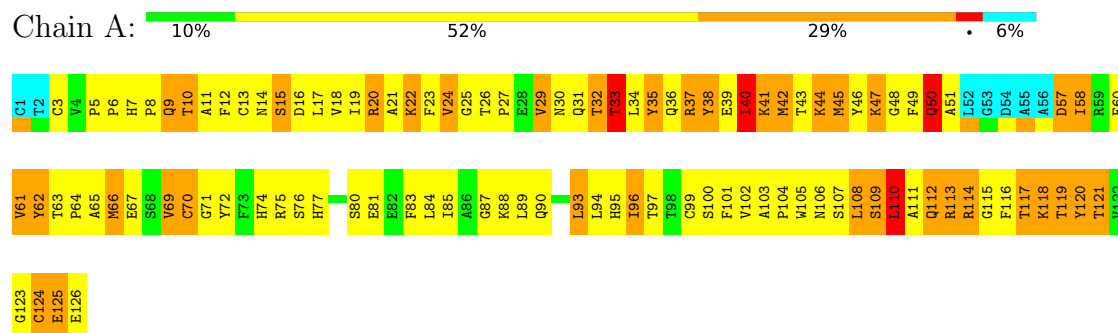
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



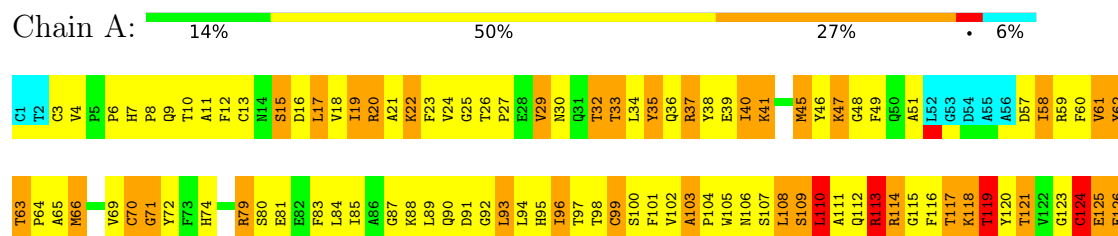
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



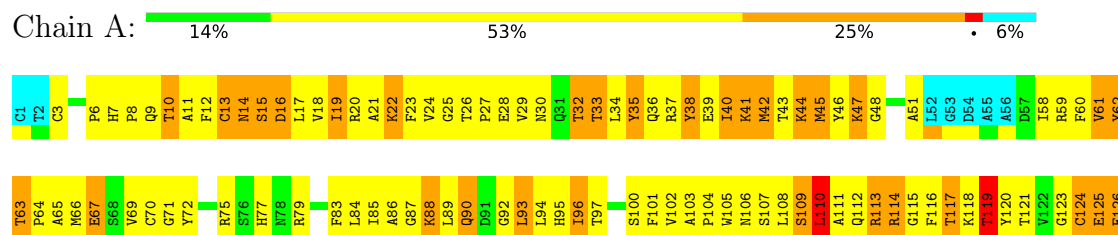
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



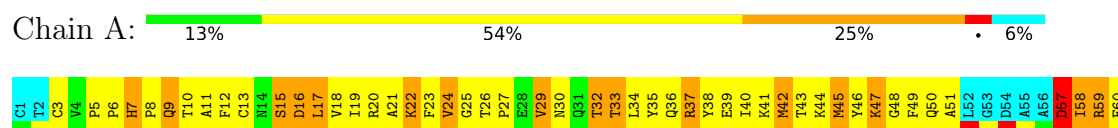
4.2.14 Score per residue for model 14

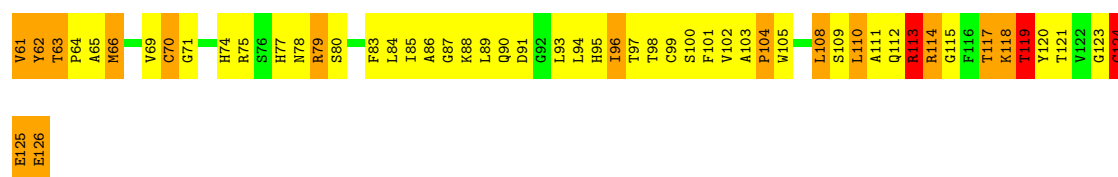
- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

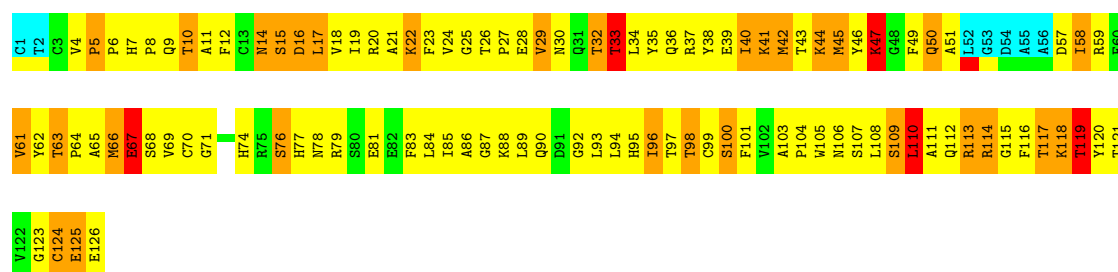




4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

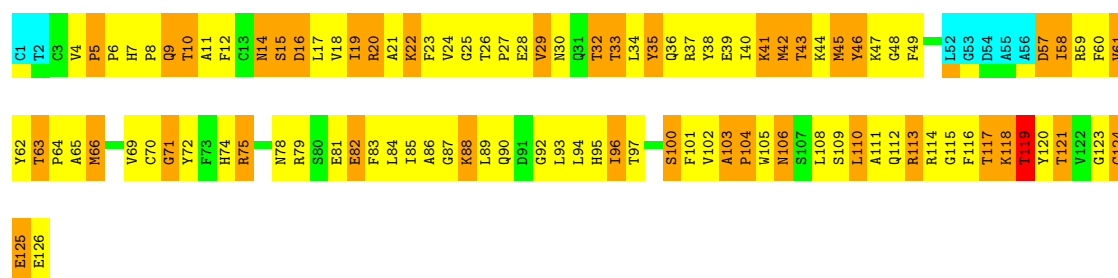
Chain A: 10% 56% 24% 6%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

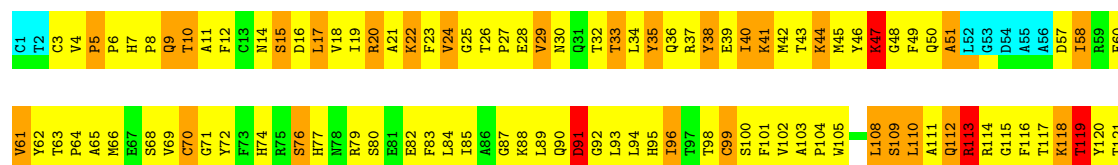
Chain A: 13% 50% 31% 6%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

Chain A: 10% 59% 23% 6%

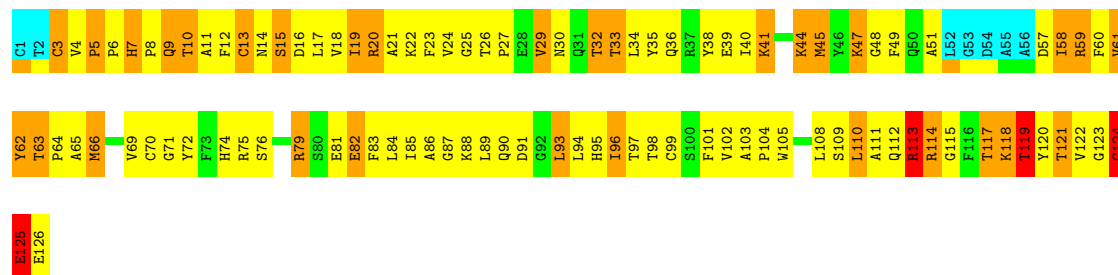


V122
G123
C124
E125
E126

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

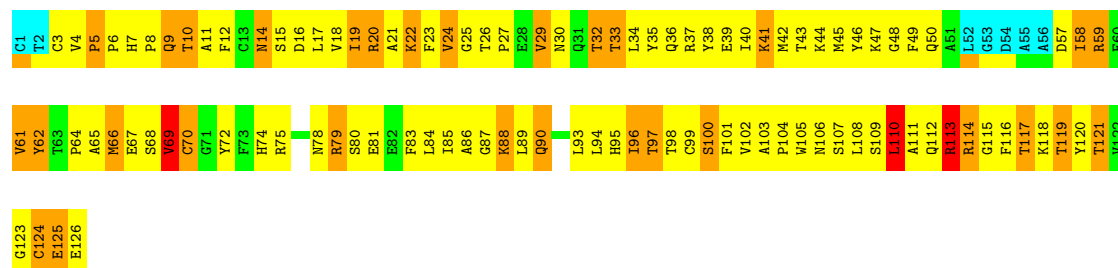
Chain A: 14% 52% 25% 6%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

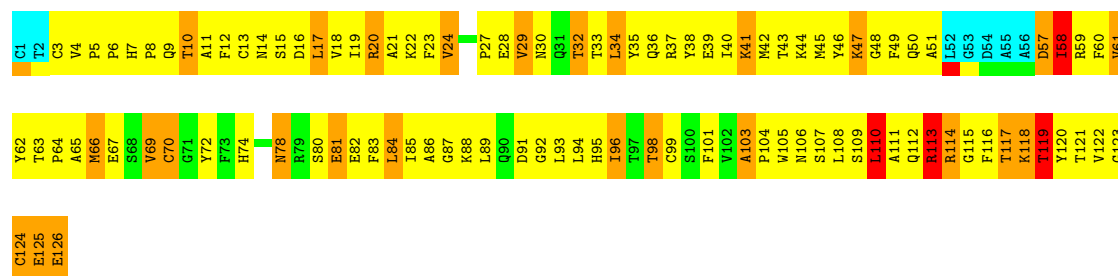
Chain A: 11% 57% 24% 6%



4.2.21 Score per residue for model 21

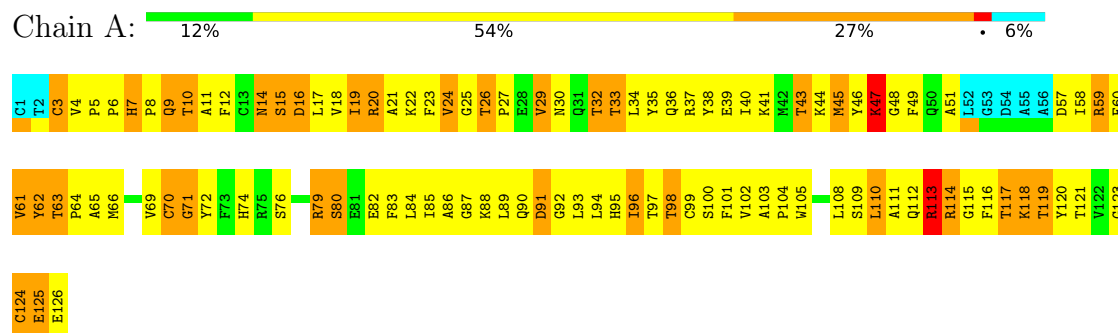
- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

Chain A: 11% 60% 21% 6%



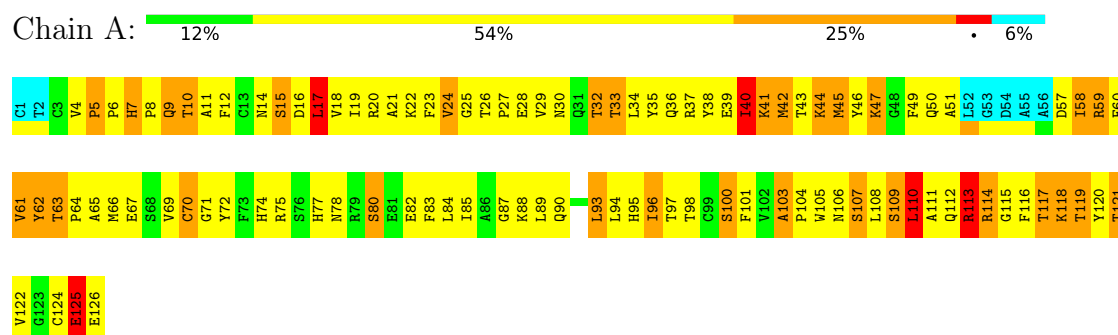
4.2.22 Score per residue for model 22 (medoid)

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



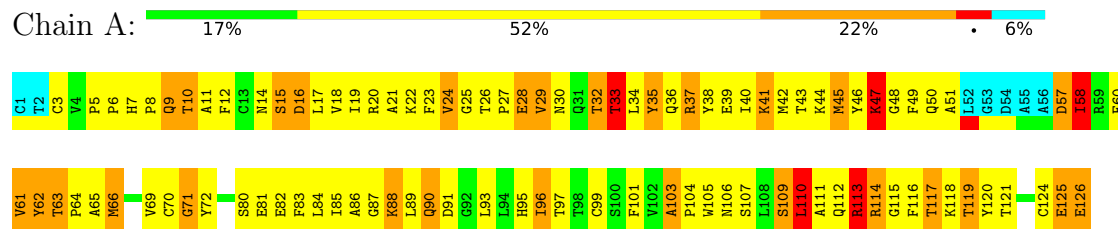
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



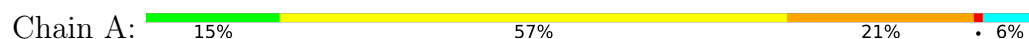
4.2.24 Score per residue for model 24

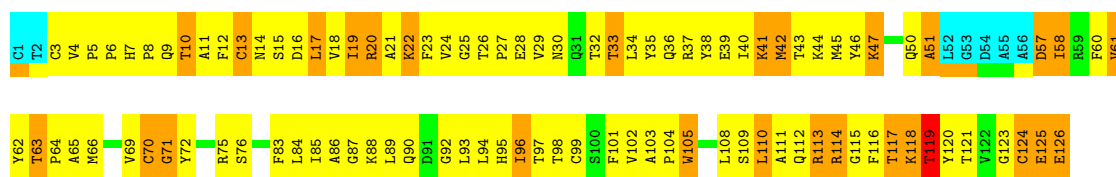
- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

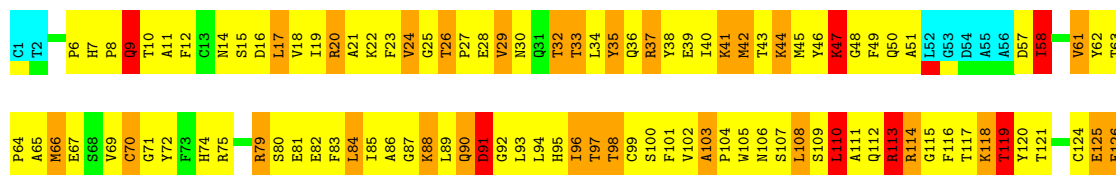




4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

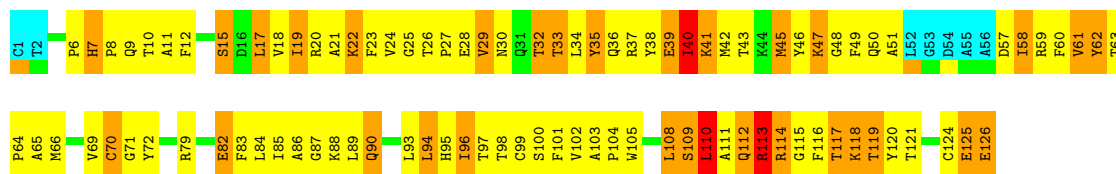
Chain A: 11% 56% 22% 6% 6%



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

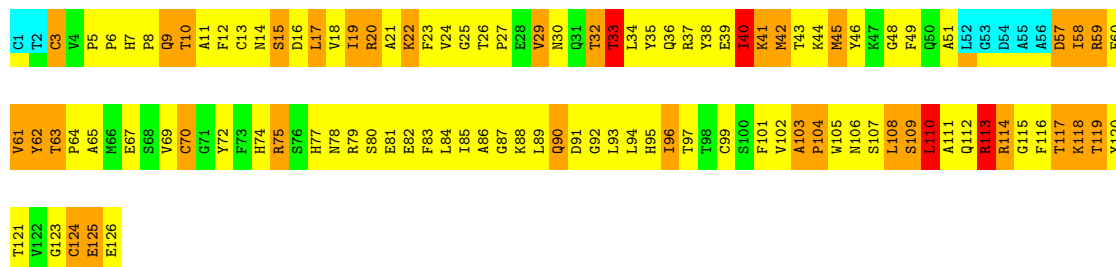
Chain A: 19% 49% 24% 6%



4.2.28 Score per residue for model 28

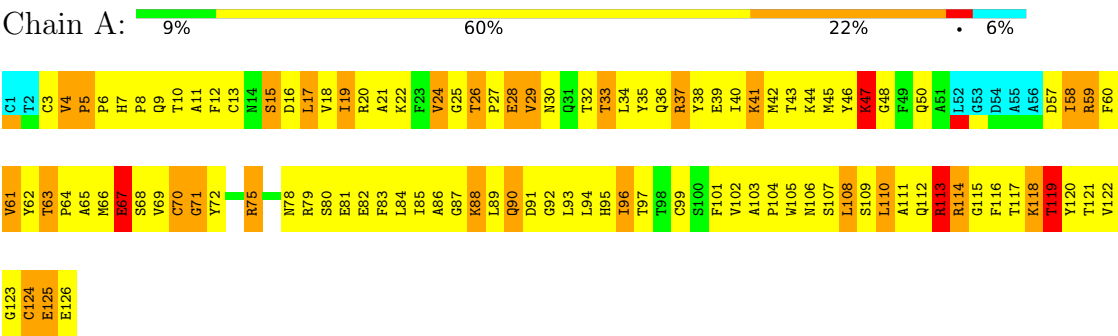
- Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1

Chain A: 10% 55% 26% 6%



4.2.29 Score per residue for model 29

● Molecule 1: Metalloproteinase inhibitor 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *TORSION ANGLE DYNAMICS FOLLOWED BY CARTESIAN SIMULATED ANNEALING*.

Of the 120 calculated structures, 29 were deposited, based on the following criterion: *STRUCTURES WITH THE LEAST RESTRAINT VIOLATIONS, STRUCTURES WITH THE LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.6
CNS	refinement	0.6

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1506
Number of shifts mapped to atoms	1506
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	88%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.66±0.02	0±0/982 (0.0± 0.0%)	1.08±0.03	4±2/1328 (0.3± 0.1%)
All	All	0.66	7/28478 (0.0%)	1.08	126/38512 (0.3%)

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	33	THR	CA-C	-5.68	1.46	1.52	5	7

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	79	ARG	CA-C-O	8.91	126.01	119.68	6	1
1	A	29	VAL	N-CA-C	8.65	119.14	106.85	15	23
1	A	113	ARG	N-CA-C	-7.94	102.23	112.23	5	29
1	A	9	GLN	N-CA-C	-7.65	102.63	110.97	9	4
1	A	119	THR	N-CA-C	7.34	119.36	111.36	11	29
1	A	79	ARG	O-C-N	6.53	127.95	120.58	6	1
1	A	40	ILE	N-CA-C	6.17	116.50	108.35	27	5
1	A	51	ALA	N-CA-C	-6.11	103.95	111.40	25	4
1	A	50	GLN	N-CA-C	-5.92	103.52	112.04	12	2
1	A	104	PRO	CB-CA-C	-5.66	104.51	111.64	28	5
1	A	103	ALA	N-CA-C	5.53	112.99	108.07	24	13
1	A	31	GLN	N-CA-C	-5.35	106.76	113.28	3	1
1	A	98	THR	N-CA-C	-5.27	106.53	113.17	26	1
1	A	58	ILE	N-CA-C	5.26	115.62	107.78	17	1
1	A	119	THR	CB-CA-C	-5.21	101.16	110.70	23	2
1	A	17	LEU	N-CA-CB	5.21	119.29	110.49	23	1
1	A	83	PHE	N-CA-C	5.06	116.37	109.18	9	1
1	A	105	TRP	N-CA-C	-5.05	105.66	111.07	25	1
1	A	7	HIS	CA-C-N	5.02	124.33	118.85	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	7	HIS	C-N-CA	5.02	124.33	118.85	15	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	957	935	931	171±17
All	All	27753	27115	26999	4965

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 91.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:GLY:HA2	1:A:119:THR:OG1	1.20	1.34	2	22
1:A:30:ASN:CB	1:A:33:THR:HG23	1.17	1.67	11	4
1:A:63:THR:OG1	1:A:71:GLY:HA2	1.13	1.42	25	16
1:A:34:LEU:O	1:A:65:ALA:N	1.11	1.82	16	29
1:A:17:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HG	1.09	1.19	1	12
1:A:30:ASN:HB3	1:A:33:THR:HG22	1.07	1.25	17	25
1:A:30:ASN:HB3	1:A:33:THR:HG23	1.06	1.16	11	4
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:HG2	1.05	1.28	17	7
1:A:17:LEU:HD11	1:A:94:LEU:HD13	1.02	1.20	12	1
1:A:9:GLN:HB2	1:A:125:GLU:HA	1.02	1.25	1	20
1:A:19:ILE:HB	1:A:42:MET:HE1	1.00	1.29	12	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:ALA:N	1.00	1.70	28	10
1:A:115:GLY:HA2	1:A:119:THR:HG1	1.00	1.13	29	4
1:A:109:SER:HB2	1:A:112:GLN:HG2	0.99	1.31	11	3
1:A:34:LEU:C	1:A:65:ALA:H	0.98	1.66	3	29
1:A:115:GLY:CA	1:A:119:THR:OG1	0.97	2.12	24	10
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HD22	0.97	1.18	1	3
1:A:22:LYS:HE2	1:A:80:SER:HA	0.96	1.37	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PRO:HB3	1:A:38:TYR:HE1	0.94	1.22	9	1
1:A:63:THR:HG1	1:A:71:GLY:HA2	0.94	1.18	4	4
1:A:57:ASP:C	1:A:58:ILE:HD13	0.93	1.89	29	5
1:A:42:MET:HG3	1:A:45:MET:HE1	0.92	1.39	9	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:H	0.92	1.24	25	8
1:A:58:ILE:HG21	1:A:94:LEU:HD22	0.91	1.40	17	5
1:A:17:LEU:HD13	1:A:94:LEU:HD22	0.91	1.38	27	1
1:A:57:ASP:O	1:A:58:ILE:HG12	0.90	1.64	25	1
1:A:28:GLU:HG2	1:A:37:ARG:HG2	0.90	1.43	17	1
1:A:9:GLN:HA	1:A:124:CYS:HB2	0.90	1.39	19	5
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:HB3	0.90	1.40	11	18
1:A:9:GLN:O	1:A:124:CYS:HB2	0.90	1.66	25	2
1:A:20:ARG:HD3	1:A:43:THR:HB	0.90	1.40	28	3
1:A:61:VAL:HB	1:A:96:ILE:HD11	0.90	1.43	18	19
1:A:33:THR:OG1	1:A:35:TYR:O	0.89	1.90	7	9
1:A:33:THR:O	1:A:34:LEU:HB2	0.88	1.68	26	28
1:A:19:ILE:HD11	1:A:85:ILE:HD12	0.88	1.45	7	1
1:A:64:PRO:HB2	1:A:69:VAL:HG21	0.87	1.44	22	16
1:A:115:GLY:O	1:A:119:THR:N	0.87	2.05	3	22
1:A:17:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HG	0.87	1.41	23	1
1:A:9:GLN:HB2	1:A:126:GLU:H	0.87	1.29	17	7
1:A:108:LEU:HB3	1:A:113:ARG:NH1	0.87	1.83	8	1
1:A:25:GLY:HA3	1:A:39:GLU:HB3	0.87	1.44	24	14
1:A:114:ARG:O	1:A:117:THR:HG22	0.87	1.70	19	26
1:A:84:LEU:HD12	1:A:85:ILE:N	0.87	1.84	21	1
1:A:33:THR:HG1	1:A:35:TYR:HD1	0.86	0.94	17	1
1:A:17:LEU:HB2	1:A:87:GLY:O	0.86	1.70	14	14
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:HA	0.86	1.46	28	29
1:A:30:ASN:HB2	1:A:33:THR:HG23	0.86	1.46	3	3
1:A:105:TRP:CE2	1:A:113:ARG:HG3	0.86	2.06	11	20
1:A:9:GLN:HB3	1:A:126:GLU:H	0.86	1.31	27	5
1:A:30:ASN:CB	1:A:33:THR:HG22	0.85	1.99	17	22
1:A:109:SER:O	1:A:112:GLN:N	0.85	2.08	24	18
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:HB3	0.85	1.48	25	1
1:A:23:PHE:O	1:A:79:ARG:HB2	0.85	1.71	4	1
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:HG3	0.85	1.49	11	4
1:A:115:GLY:HA2	1:A:119:THR:CG2	0.85	2.01	11	1
1:A:25:GLY:HA3	1:A:39:GLU:HB2	0.85	1.43	15	14
1:A:22:LYS:HE3	1:A:80:SER:HA	0.85	1.46	23	2
1:A:42:MET:HG3	1:A:58:ILE:HB	0.84	1.49	20	4
1:A:17:LEU:HD13	1:A:58:ILE:HG12	0.84	1.49	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:N	0.84	1.87	17	19
1:A:17:LEU:HD21	1:A:89:LEU:CG	0.84	2.02	23	1
1:A:105:TRP:HA	1:A:108:LEU:HD23	0.84	1.47	2	3
1:A:62:TYR:CE2	1:A:93:LEU:HD13	0.84	2.08	7	5
1:A:17:LEU:CD1	1:A:94:LEU:HD13	0.83	2.03	12	8
1:A:24:VAL:HA	1:A:79:ARG:HD3	0.83	1.49	28	1
1:A:115:GLY:HA2	1:A:119:THR:HG23	0.83	1.47	11	4
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HG	0.83	2.03	16	10
1:A:114:ARG:HD3	1:A:118:LYS:HE2	0.83	1.51	16	10
1:A:111:ALA:O	1:A:114:ARG:HG3	0.82	1.74	8	16
1:A:95:HIS:C	1:A:96:ILE:HD13	0.82	1.98	19	16
1:A:58:ILE:CG2	1:A:94:LEU:HD22	0.82	2.03	28	16
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LEU:HD12	0.81	1.75	26	10
1:A:30:ASN:CB	1:A:33:THR:CG2	0.81	2.57	11	8
1:A:16:ASP:H	1:A:88:LYS:HG2	0.80	1.35	9	12
1:A:27:PRO:HB3	1:A:38:TYR:CZ	0.80	2.11	6	13
1:A:105:TRP:HA	1:A:108:LEU:HD22	0.80	1.50	18	4
1:A:58:ILE:HD12	1:A:94:LEU:HB2	0.80	1.52	25	1
1:A:22:LYS:O	1:A:41:LYS:N	0.80	2.14	8	28
1:A:89:LEU:HD23	1:A:94:LEU:HA	0.80	1.51	21	13
1:A:63:THR:OG1	1:A:71:GLY:CA	0.80	2.28	4	19
1:A:39:GLU:HG3	1:A:60:PHE:CE2	0.80	2.12	17	8
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:CG1	0.80	2.07	29	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:111:ALA:H	0.80	1.37	19	8
1:A:29:VAL:HA	1:A:36:GLN:NE2	0.80	1.92	22	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:65:ALA:HB2	0.80	1.54	12	28
1:A:115:GLY:C	1:A:119:THR:OG1	0.79	2.24	27	9
1:A:24:VAL:HG12	1:A:79:ARG:HG2	0.79	1.54	16	2
1:A:24:VAL:HG11	1:A:41:LYS:HD2	0.79	1.52	16	2
1:A:27:PRO:HA	1:A:37:ARG:O	0.79	1.78	25	12
1:A:9:GLN:H	1:A:126:GLU:HB2	0.79	1.37	25	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:89:LEU:CG	0.79	2.07	13	9
1:A:20:ARG:HH21	1:A:43:THR:HG21	0.79	1.38	9	2
1:A:16:ASP:CB	1:A:88:LYS:HG2	0.79	2.08	17	3
1:A:42:MET:HE1	1:A:44:LYS:O	0.79	1.76	23	2
1:A:123:GLY:O	1:A:125:GLU:HG2	0.79	1.78	9	12
1:A:112:GLN:HG3	1:A:120:TYR:HE2	0.79	1.38	9	2
1:A:105:TRP:CE3	1:A:108:LEU:HD23	0.79	2.13	15	3
1:A:114:ARG:O	1:A:118:LYS:HG2	0.79	1.76	13	1
1:A:70:CYS:O	1:A:97:THR:HA	0.79	1.77	22	8
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:CG	0.78	2.06	17	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:CD2	0.78	1.90	17	4
1:A:16:ASP:H	1:A:88:LYS:HG3	0.78	1.35	26	4
1:A:42:MET:HE3	1:A:58:ILE:HB	0.78	1.55	7	1
1:A:38:TYR:HB2	1:A:61:VAL:HG23	0.78	1.53	2	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:58:ILE:HG12	0.78	1.53	11	7
1:A:11:ALA:O	1:A:15:SER:OG	0.78	2.00	19	1
1:A:21:ALA:O	1:A:83:PHE:HB2	0.77	1.78	21	23
1:A:24:VAL:HG21	1:A:41:LYS:HB2	0.77	1.55	15	4
1:A:90:GLN:HG3	1:A:95:HIS:CG	0.77	2.14	9	1
1:A:118:LYS:HG3	1:A:119:THR:N	0.77	1.93	15	8
1:A:27:PRO:HB3	1:A:38:TYR:CE2	0.77	2.14	20	4
1:A:12:PHE:CD2	1:A:120:TYR:HB2	0.77	2.14	28	10
1:A:112:GLN:HG3	1:A:120:TYR:CE2	0.77	2.15	28	4
1:A:24:VAL:HG12	1:A:79:ARG:HB2	0.77	1.56	13	3
1:A:17:LEU:CD1	1:A:58:ILE:HG12	0.77	2.09	5	3
1:A:120:TYR:O	1:A:124:CYS:HB3	0.77	1.80	9	29
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CD2	0.76	2.46	17	17
1:A:33:THR:HG21	1:A:35:TYR:O	0.76	1.80	4	24
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:CD1	0.76	2.10	6	6
1:A:57:ASP:C	1:A:58:ILE:HD12	0.76	2.06	17	1
1:A:11:ALA:O	1:A:15:SER:HB2	0.76	1.81	2	24
1:A:12:PHE:CD1	1:A:120:TYR:O	0.76	2.39	5	8
1:A:42:MET:HE1	1:A:44:LYS:C	0.76	2.06	18	3
1:A:45:MET:HB2	1:A:49:PHE:CZ	0.76	2.16	12	1
1:A:18:VAL:HA	1:A:85:ILE:O	0.76	1.79	19	27
1:A:10:THR:O	1:A:14:ASN:HB2	0.75	1.82	17	22
1:A:79:ARG:H	1:A:79:ARG:HD2	0.75	1.41	11	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:PRO:HD2	0.75	1.58	21	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:45:MET:N	0.75	1.95	2	1
1:A:19:ILE:HD13	1:A:45:MET:HE3	0.75	1.57	9	1
1:A:9:GLN:O	1:A:13:CYS:SG	0.75	2.44	14	2
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:HA	0.75	1.57	17	1
1:A:17:LEU:O	1:A:87:GLY:O	0.75	2.05	25	13
1:A:108:LEU:HD22	1:A:113:ARG:NH2	0.75	1.96	8	1
1:A:66:MET:HE2	1:A:67:GLU:H	0.75	1.42	12	1
1:A:62:TYR:OH	1:A:93:LEU:HD22	0.75	1.82	19	2
1:A:109:SER:CB	1:A:112:GLN:HG2	0.75	2.11	21	2
1:A:17:LEU:HD21	1:A:89:LEU:CD1	0.74	2.11	23	1
1:A:9:GLN:HG2	1:A:120:TYR:CD2	0.74	2.16	25	1
1:A:35:TYR:HB3	1:A:64:PRO:HA	0.74	1.57	9	14
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HD11	0.74	1.59	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:MET:HE2	1:A:57:ASP:OD2	0.74	1.82	6	1
1:A:114:ARG:HD3	1:A:118:LYS:HE3	0.74	1.60	6	6
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HG3	0.74	2.17	13	18
1:A:24:VAL:HG21	1:A:41:LYS:HG2	0.74	1.57	1	3
1:A:24:VAL:HG22	1:A:41:LYS:N	0.74	1.97	12	24
1:A:42:MET:HE1	1:A:45:MET:N	0.74	1.98	18	1
1:A:35:TYR:HA	1:A:65:ALA:N	0.73	1.98	16	29
1:A:9:GLN:HB3	1:A:126:GLU:N	0.73	1.98	28	13
1:A:70:CYS:O	1:A:97:THR:HG22	0.73	1.84	14	9
1:A:9:GLN:HB2	1:A:125:GLU:CA	0.73	2.11	1	5
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:CA	0.73	2.14	28	20
1:A:19:ILE:HG21	1:A:45:MET:HE2	0.73	1.61	4	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:9:GLN:HG2	0.73	1.60	14	5
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HD13	0.73	1.59	8	9
1:A:38:TYR:HB2	1:A:61:VAL:HG22	0.73	1.61	13	28
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:HE2	0.73	1.59	29	3
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:HD13	0.73	1.99	25	2
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:ALA:H	0.72	1.44	18	5
1:A:17:LEU:HD12	1:A:87:GLY:O	0.72	1.84	12	3
1:A:74:HIS:C	1:A:75:ARG:HD2	0.72	2.08	17	3
1:A:30:ASN:HB3	1:A:33:THR:CG2	0.72	2.14	24	26
1:A:96:ILE:HG22	1:A:102:VAL:HG21	0.72	1.62	7	3
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:HG3	0.72	1.83	1	3
1:A:8:PRO:HA	1:A:11:ALA:HB3	0.72	1.62	6	24
1:A:69:VAL:HG13	1:A:70:CYS:N	0.72	2.00	20	6
1:A:26:THR:HG22	1:A:27:PRO:HD2	0.72	1.60	10	5
1:A:17:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HG	0.72	1.60	27	4
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:HG3	0.72	1.61	25	3
1:A:20:ARG:HG2	1:A:46:TYR:CE1	0.72	2.19	28	10
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:N	0.72	2.00	8	21
1:A:22:LYS:HG3	1:A:81:GLU:O	0.72	1.85	12	4
1:A:89:LEU:HD22	1:A:92:GLY:O	0.71	1.85	7	13
1:A:33:THR:OG1	1:A:35:TYR:HD1	0.71	1.65	17	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:9:GLN:HG3	0.71	1.61	18	4
1:A:8:PRO:O	1:A:12:PHE:N	0.71	2.22	19	3
1:A:24:VAL:HG12	1:A:79:ARG:HG3	0.71	1.61	2	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:18:VAL:HG11	0.71	2.21	10	10
1:A:45:MET:HE1	1:A:58:ILE:HD13	0.71	1.63	4	1
1:A:85:ILE:HD13	1:A:102:VAL:HG13	0.71	1.62	26	7
1:A:114:ARG:HA	1:A:117:THR:HG22	0.71	1.60	21	12
1:A:120:TYR:O	1:A:124:CYS:N	0.71	2.24	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:THR:HG21	1:A:72:TYR:HB3	0.71	1.60	21	3
1:A:19:ILE:HD13	1:A:45:MET:CE	0.71	2.15	9	1
1:A:90:GLN:HB2	1:A:95:HIS:CD2	0.71	2.21	28	20
1:A:33:THR:OG1	1:A:35:TYR:N	0.70	2.23	7	23
1:A:27:PRO:HB3	1:A:38:TYR:CE1	0.70	2.15	9	17
1:A:20:ARG:HD3	1:A:44:LYS:HB2	0.70	1.63	25	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:40:ILE:C	0.70	2.11	19	4
1:A:9:GLN:N	1:A:126:GLU:OXT	0.70	2.20	19	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:102:VAL:HG11	0.70	2.21	29	10
1:A:123:GLY:O	1:A:125:GLU:N	0.70	2.24	7	20
1:A:22:LYS:NZ	1:A:82:GLU:HG3	0.70	2.02	8	1
1:A:86:ALA:HB3	1:A:101:PHE:O	0.70	1.87	21	24
1:A:15:SER:HA	1:A:88:LYS:HD2	0.70	1.64	20	2
1:A:64:PRO:CB	1:A:69:VAL:HG21	0.70	2.17	22	5
1:A:34:LEU:O	1:A:64:PRO:HA	0.70	1.87	11	19
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:N	0.69	2.24	7	27
1:A:9:GLN:HB2	1:A:126:GLU:N	0.69	2.02	25	4
1:A:45:MET:HB3	1:A:58:ILE:HD11	0.69	1.63	20	2
1:A:19:ILE:CG2	1:A:45:MET:HG3	0.69	2.17	25	4
1:A:62:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HD22	0.69	2.23	22	7
1:A:22:LYS:HE2	1:A:80:SER:CA	0.69	2.17	20	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:58:ILE:HG13	0.69	1.63	28	1
1:A:61:VAL:HB	1:A:96:ILE:HD12	0.69	1.62	23	8
1:A:64:PRO:HD2	1:A:70:CYS:O	0.69	1.87	15	3
1:A:17:LEU:HD13	1:A:58:ILE:CG1	0.69	2.17	17	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:95:HIS:H	0.69	1.46	12	3
1:A:115:GLY:HA3	1:A:120:TYR:CZ	0.69	2.22	10	4
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:H	0.69	1.47	14	1
1:A:23:PHE:HA	1:A:40:ILE:HG22	0.69	1.64	13	16
1:A:24:VAL:CG1	1:A:41:LYS:HB2	0.69	2.18	28	10
1:A:70:CYS:HB3	1:A:97:THR:HG23	0.69	1.65	16	1
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HD13	0.69	1.46	18	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:SD	0.69	2.28	9	3
1:A:28:GLU:CG	1:A:37:ARG:HG2	0.69	2.18	17	1
1:A:26:THR:OG1	1:A:27:PRO:HD2	0.69	1.86	15	17
1:A:20:ARG:HG2	1:A:43:THR:HB	0.69	1.63	25	1
1:A:30:ASN:HB2	1:A:33:THR:CG2	0.68	2.16	11	4
1:A:9:GLN:HB3	1:A:124:CYS:C	0.68	2.14	25	2
1:A:8:PRO:CG	1:A:126:GLU:HB3	0.68	2.18	9	10
1:A:32:THR:HG22	1:A:32:THR:O	0.68	1.88	18	11
1:A:34:LEU:O	1:A:64:PRO:CA	0.68	2.42	11	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:LEU:HB3	1:A:103:ALA:O	0.68	1.88	8	26
1:A:112:GLN:HG2	1:A:116:PHE:CD2	0.68	2.24	28	2
1:A:90:GLN:CG	1:A:95:HIS:CD2	0.68	2.76	7	2
1:A:57:ASP:C	1:A:58:ILE:HG13	0.68	2.13	6	18
1:A:17:LEU:HD13	1:A:94:LEU:HD13	0.68	1.64	2	6
1:A:110:LEU:HD13	1:A:111:ALA:N	0.68	2.04	19	8
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:C	0.68	2.13	21	9
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:CB	0.68	2.18	28	8
1:A:40:ILE:HD12	1:A:61:VAL:HG13	0.68	1.66	8	3
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ALA:H	0.68	1.49	6	13
1:A:16:ASP:N	1:A:88:LYS:HG3	0.68	2.04	4	6
1:A:58:ILE:HD13	1:A:58:ILE:N	0.68	2.03	7	5
1:A:105:TRP:HA	1:A:108:LEU:CD2	0.67	2.19	2	5
1:A:17:LEU:HD13	1:A:94:LEU:CD2	0.67	2.16	27	1
1:A:105:TRP:HA	1:A:108:LEU:HD13	0.67	1.67	20	8
1:A:69:VAL:HG22	1:A:70:CYS:H	0.67	1.50	16	15
1:A:21:ALA:CB	1:A:42:MET:HA	0.67	2.19	28	11
1:A:28:GLU:HG2	1:A:37:ARG:HB2	0.67	1.66	23	5
1:A:105:TRP:O	1:A:108:LEU:HB2	0.67	1.90	15	22
1:A:105:TRP:NE1	1:A:113:ARG:HG3	0.67	2.05	28	10
1:A:24:VAL:CG2	1:A:40:ILE:C	0.67	2.67	4	9
1:A:61:VAL:HB	1:A:96:ILE:CD1	0.67	2.18	17	18
1:A:115:GLY:CA	1:A:119:THR:HG1	0.67	1.97	2	1
1:A:46:TYR:HD2	1:A:116:PHE:O	0.67	1.72	1	6
1:A:9:GLN:CB	1:A:125:GLU:HA	0.67	2.20	28	17
1:A:45:MET:HB3	1:A:57:ASP:HB2	0.67	1.67	17	1
1:A:28:GLU:O	1:A:28:GLU:HG3	0.66	1.90	1	6
1:A:20:ARG:HG3	1:A:43:THR:HB	0.66	1.65	29	7
1:A:58:ILE:HG21	1:A:94:LEU:CD2	0.66	2.19	17	1
1:A:115:GLY:HA3	1:A:119:THR:OG1	0.66	1.90	23	7
1:A:9:GLN:O	1:A:124:CYS:CB	0.66	2.43	15	1
1:A:22:LYS:HG2	1:A:81:GLU:O	0.66	1.90	2	11
1:A:8:PRO:HB3	1:A:101:PHE:CE2	0.66	2.25	25	13
1:A:96:ILE:H	1:A:96:ILE:HD12	0.66	1.50	29	1
1:A:9:GLN:HG3	1:A:125:GLU:HA	0.66	1.67	24	4
1:A:45:MET:HG2	1:A:58:ILE:HD13	0.66	1.68	12	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:116:PHE:CE1	0.66	2.49	27	1
1:A:20:ARG:HG3	1:A:43:THR:OG1	0.66	1.91	4	4
1:A:30:ASN:HD22	1:A:32:THR:H	0.66	1.34	9	4
1:A:90:GLN:HB2	1:A:95:HIS:NE2	0.66	2.04	28	10
1:A:74:HIS:NE2	1:A:76:SER:HB2	0.66	2.06	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ARG:NH1	1:A:43:THR:HG21	0.66	2.05	10	2
1:A:108:LEU:CD2	1:A:113:ARG:NH2	0.66	2.59	8	1
1:A:113:ARG:NE	1:A:113:ARG:HA	0.66	2.05	8	1
1:A:40:ILE:HD13	1:A:40:ILE:N	0.65	2.05	8	2
1:A:17:LEU:HD13	1:A:89:LEU:CB	0.65	2.21	29	5
1:A:112:GLN:HG3	1:A:120:TYR:OH	0.65	1.92	22	5
1:A:108:LEU:HG	1:A:112:GLN:OE1	0.65	1.91	18	1
1:A:9:GLN:HG3	1:A:126:GLU:CG	0.65	2.22	25	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:62:TYR:CE2	0.65	2.26	4	3
1:A:121:THR:HG23	1:A:122:VAL:HG23	0.65	1.69	21	3
1:A:116:PHE:HA	1:A:120:TYR:CD1	0.65	2.27	12	2
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:HB2	0.65	1.68	21	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:36:GLN:CG	0.65	2.21	29	16
1:A:72:TYR:HE1	1:A:102:VAL:HG11	0.65	1.51	19	6
1:A:114:ARG:HD2	1:A:115:GLY:N	0.65	2.07	20	16
1:A:9:GLN:H	1:A:126:GLU:HB3	0.65	1.51	17	1
1:A:4:VAL:HG23	1:A:5:PRO:HD2	0.65	1.69	10	6
1:A:9:GLN:HG3	1:A:10:THR:N	0.65	2.06	8	2
1:A:72:TYR:HE2	1:A:102:VAL:HG11	0.65	1.52	8	2
1:A:41:LYS:HE2	1:A:41:LYS:HA	0.65	1.68	16	2
1:A:62:TYR:O	1:A:95:HIS:HA	0.65	1.92	25	22
1:A:37:ARG:HD2	1:A:62:TYR:CE2	0.65	2.27	7	5
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:CE	0.65	2.22	5	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:120:TYR:HB3	0.65	2.26	23	1
1:A:120:TYR:CE2	1:A:126:GLU:HB2	0.64	2.27	20	4
1:A:120:TYR:OH	1:A:126:GLU:HG3	0.64	1.91	23	2
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:H	0.64	1.51	12	6
1:A:24:VAL:HG11	1:A:41:LYS:HB2	0.64	1.68	27	9
1:A:12:PHE:CD2	1:A:120:TYR:O	0.64	2.50	3	10
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HA	0.64	2.28	28	6
1:A:35:TYR:HA	1:A:64:PRO:HA	0.64	1.68	11	22
1:A:20:ARG:HE	1:A:44:LYS:HB2	0.64	1.53	8	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ARG:HG2	0.64	1.91	27	6
1:A:8:PRO:CD	1:A:126:GLU:HB3	0.64	2.21	25	1
1:A:17:LEU:HD23	1:A:45:MET:HE2	0.64	1.68	25	1
1:A:17:LEU:CB	1:A:87:GLY:O	0.64	2.46	14	18
1:A:42:MET:HG3	1:A:45:MET:CE	0.64	2.19	9	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:58:ILE:HD11	0.64	1.69	17	1
1:A:20:ARG:HA	1:A:83:PHE:O	0.64	1.93	6	21
1:A:25:GLY:HA3	1:A:39:GLU:CD	0.64	2.18	29	2
1:A:37:ARG:HD3	1:A:62:TYR:CZ	0.64	2.28	23	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HD22	1:A:58:ILE:CD1	0.64	2.23	17	2
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:CB	0.64	2.23	28	14
1:A:25:GLY:CA	1:A:39:GLU:HB3	0.64	2.23	11	1
1:A:20:ARG:HB2	1:A:20:ARG:NH1	0.63	2.09	9	1
1:A:18:VAL:O	1:A:46:TYR:HB2	0.63	1.92	23	1
1:A:9:GLN:HG2	1:A:13:CYS:SG	0.63	2.33	19	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:94:LEU:CA	0.63	2.22	21	7
1:A:62:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HD12	0.63	2.29	6	10
1:A:114:ARG:HD2	1:A:114:ARG:C	0.63	2.19	13	13
1:A:72:TYR:CE2	1:A:102:VAL:HG11	0.63	2.28	8	5
1:A:120:TYR:CZ	1:A:126:GLU:HG3	0.63	2.28	29	5
1:A:74:HIS:CE1	1:A:76:SER:HB2	0.63	2.29	11	1
1:A:120:TYR:HA	1:A:124:CYS:HA	0.63	1.70	11	2
1:A:75:ARG:N	1:A:75:ARG:HD3	0.63	2.07	3	2
1:A:120:TYR:CE2	1:A:126:GLU:HG3	0.63	2.29	18	3
1:A:108:LEU:HB3	1:A:113:ARG:CZ	0.63	2.23	8	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:89:LEU:CG	0.63	2.23	27	2
1:A:16:ASP:CB	1:A:88:LYS:HG3	0.63	2.22	11	2
1:A:118:LYS:HG2	1:A:119:THR:OG1	0.63	1.93	25	2
1:A:20:ARG:HD2	1:A:46:TYR:CE2	0.63	2.28	25	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:58:ILE:HG12	0.62	2.24	11	6
1:A:11:ALA:CB	1:A:101:PHE:HB2	0.62	2.24	25	29
1:A:20:ARG:HG2	1:A:44:LYS:HG2	0.62	1.69	29	2
1:A:78:ASN:CG	1:A:81:GLU:HB2	0.62	2.18	28	8
1:A:57:ASP:O	1:A:58:ILE:HG13	0.62	1.93	17	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:110:LEU:N	0.62	2.09	28	4
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:O	0.62	1.95	20	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:36:GLN:HA	0.62	2.08	22	1
1:A:19:ILE:CG2	1:A:45:MET:HA	0.62	2.24	28	26
1:A:19:ILE:HD13	1:A:58:ILE:HD13	0.62	1.71	16	2
1:A:24:VAL:HG23	1:A:39:GLU:OE1	0.62	1.93	5	1
1:A:18:VAL:HG23	1:A:47:LYS:HD3	0.62	1.69	22	1
1:A:32:THR:O	1:A:32:THR:CG2	0.62	2.47	24	12
1:A:62:TYR:CE1	1:A:93:LEU:HD12	0.62	2.29	6	2
1:A:79:ARG:HD2	1:A:79:ARG:N	0.62	2.07	11	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:120:TYR:HD2	0.62	2.11	28	6
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:CB	0.62	2.24	17	1
1:A:22:LYS:NZ	1:A:82:GLU:HG2	0.62	2.09	28	2
1:A:17:LEU:HB2	1:A:47:LYS:O	0.62	1.95	12	2
1:A:114:ARG:CD	1:A:118:LYS:HG2	0.62	2.25	15	7
1:A:64:PRO:HG2	1:A:70:CYS:SG	0.62	2.35	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:VAL:HA	1:A:36:GLN:CD	0.62	2.20	22	1
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:CB	0.62	2.25	11	10
1:A:32:THR:CG2	1:A:32:THR:O	0.62	2.47	14	16
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:MET:HE3	0.62	1.71	21	1
1:A:35:TYR:CB	1:A:64:PRO:HA	0.61	2.25	9	7
1:A:29:VAL:HG13	1:A:36:GLN:HG2	0.61	1.71	29	13
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:HG3	0.61	1.95	28	1
1:A:103:ALA:HB1	1:A:104:PRO:HD2	0.61	1.72	18	27
1:A:90:GLN:HG3	1:A:95:HIS:CE1	0.61	2.30	16	2
1:A:12:PHE:HD2	1:A:120:TYR:O	0.61	1.78	11	9
1:A:88:LYS:O	1:A:94:LEU:HD12	0.61	1.96	13	4
1:A:3:CYS:HB2	1:A:99:CYS:HA	0.61	1.72	13	3
1:A:115:GLY:HA2	1:A:119:THR:CB	0.61	2.25	2	11
1:A:34:LEU:CD2	1:A:66:MET:HB3	0.61	2.26	9	3
1:A:45:MET:HE3	1:A:57:ASP:OD1	0.61	1.95	25	1
1:A:20:ARG:HH21	1:A:105:TRP:CD1	0.61	2.14	5	1
1:A:97:THR:HG23	1:A:100:SER:HB2	0.61	1.73	20	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:75:ARG:N	0.61	2.11	28	3
1:A:20:ARG:NH2	1:A:43:THR:HG21	0.61	2.08	9	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:N	0.61	2.11	14	1
1:A:114:ARG:HD3	1:A:118:LYS:CE	0.61	2.26	16	2
1:A:7:HIS:HB3	1:A:9:GLN:CG	0.60	2.25	14	6
1:A:20:ARG:HD3	1:A:46:TYR:OH	0.60	1.95	11	2
1:A:8:PRO:O	1:A:12:PHE:HB2	0.60	1.95	24	14
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HG13	0.60	1.72	29	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:35:TYR:O	0.60	2.50	13	23
1:A:66:MET:O	1:A:69:VAL:HG12	0.60	1.95	1	4
1:A:23:PHE:CG	1:A:40:ILE:HG22	0.60	2.30	21	8
1:A:17:LEU:HD13	1:A:58:ILE:CD1	0.60	2.27	17	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:9:GLN:HG3	0.60	1.72	27	1
1:A:42:MET:HE2	1:A:45:MET:HB3	0.60	1.72	28	1
1:A:109:SER:HB2	1:A:112:GLN:CG	0.60	2.20	11	3
1:A:72:TYR:CE1	1:A:96:ILE:HG21	0.60	2.32	19	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:94:LEU:HB2	0.60	2.26	25	1
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:MET:HG2	0.60	1.74	21	2
1:A:90:GLN:HG3	1:A:95:HIS:CD2	0.60	2.31	9	2
1:A:61:VAL:HG12	1:A:94:LEU:HD23	0.60	1.72	10	2
1:A:35:TYR:HA	1:A:64:PRO:CA	0.60	2.27	11	17
1:A:29:VAL:HG22	1:A:36:GLN:HG2	0.60	1.72	13	6
1:A:70:CYS:HB3	1:A:98:THR:OG1	0.60	1.95	8	1
1:A:33:THR:C	1:A:35:TYR:H	0.60	2.04	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ARG:HG3	1:A:44:LYS:O	0.60	1.97	28	2
1:A:88:LYS:HD2	1:A:89:LEU:N	0.59	2.10	29	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:111:ALA:N	0.59	2.65	18	14
1:A:84:LEU:HD23	1:A:105:TRP:CE3	0.59	2.32	9	6
1:A:38:TYR:CE2	1:A:74:HIS:HB3	0.59	2.31	15	3
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:HB2	0.59	1.98	15	3
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:N	0.59	2.12	14	15
1:A:70:CYS:HB3	1:A:98:THR:HG22	0.59	1.74	26	2
1:A:112:GLN:HB3	1:A:113:ARG:HH12	0.59	1.55	8	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:79:ARG:HB3	0.59	1.75	15	1
1:A:9:GLN:HB3	1:A:124:CYS:HA	0.59	1.74	25	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:94:LEU:HD23	0.59	1.73	27	1
1:A:121:THR:OG1	1:A:122:VAL:N	0.59	2.34	19	3
1:A:16:ASP:N	1:A:88:LYS:HG2	0.59	2.12	28	9
1:A:9:GLN:HG3	1:A:120:TYR:CG	0.59	2.33	15	1
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:CB	0.59	2.27	17	1
1:A:96:ILE:HD12	1:A:96:ILE:N	0.59	2.13	29	1
1:A:62:TYR:CE2	1:A:93:LEU:HG	0.59	2.32	12	8
1:A:6:PRO:HG3	1:A:99:CYS:O	0.59	1.97	25	4
1:A:18:VAL:HG23	1:A:47:LYS:HZ2	0.59	1.58	15	2
1:A:19:ILE:O	1:A:84:LEU:HD22	0.59	1.98	23	6
1:A:66:MET:CB	1:A:69:VAL:HB	0.59	2.27	26	8
1:A:40:ILE:HG13	1:A:59:ARG:O	0.59	1.98	17	1
1:A:20:ARG:HD3	1:A:43:THR:CB	0.59	2.22	28	1
1:A:4:VAL:CG2	1:A:5:PRO:HD2	0.59	2.27	21	7
1:A:22:LYS:HB2	1:A:41:LYS:HB3	0.59	1.75	24	5
1:A:118:LYS:HG2	1:A:119:THR:N	0.59	2.12	25	2
1:A:21:ALA:HB2	1:A:42:MET:HA	0.59	1.74	28	7
1:A:17:LEU:HD11	1:A:94:LEU:HD12	0.59	1.74	15	1
1:A:14:ASN:O	1:A:88:LYS:HE3	0.58	1.98	28	1
1:A:28:GLU:CD	1:A:37:ARG:HD3	0.58	2.23	1	1
1:A:124:CYS:O	1:A:126:GLU:N	0.58	2.36	23	7
1:A:19:ILE:HB	1:A:42:MET:CE	0.58	2.29	25	2
1:A:63:THR:HG21	1:A:72:TYR:HB2	0.58	1.75	3	1
1:A:118:LYS:O	1:A:121:THR:HG23	0.58	1.98	20	2
1:A:15:SER:HA	1:A:88:LYS:HG2	0.58	1.75	13	3
1:A:39:GLU:HG3	1:A:60:PHE:CZ	0.58	2.32	17	2
1:A:27:PRO:HB3	1:A:38:TYR:CD1	0.58	2.33	21	2
1:A:105:TRP:CE3	1:A:108:LEU:HD22	0.58	2.33	22	10
1:A:24:VAL:HG13	1:A:41:LYS:HB2	0.58	1.74	16	3
1:A:19:ILE:HA	1:A:46:TYR:HD1	0.58	1.57	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ILE:CB	1:A:42:MET:HE1	0.58	2.18	12	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ALA:N	0.58	2.14	26	19
1:A:32:THR:O	1:A:32:THR:HG22	0.58	1.99	8	13
1:A:20:ARG:NH1	1:A:44:LYS:HE3	0.58	2.14	16	1
1:A:22:LYS:HD3	1:A:80:SER:C	0.58	2.23	8	5
1:A:28:GLU:CG	1:A:37:ARG:HB2	0.58	2.28	23	3
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:CE2	0.58	2.34	15	4
1:A:120:TYR:HA	1:A:124:CYS:CA	0.58	2.28	11	2
1:A:19:ILE:HB	1:A:42:MET:HE3	0.58	1.73	25	1
1:A:22:LYS:HD3	1:A:80:SER:CA	0.58	2.29	28	2
1:A:19:ILE:HG21	1:A:45:MET:HG3	0.58	1.74	9	1
1:A:12:PHE:HB2	1:A:116:PHE:HE1	0.58	1.59	25	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:58:ILE:CG1	0.58	2.28	28	1
1:A:17:LEU:O	1:A:87:GLY:N	0.58	2.34	2	16
1:A:15:SER:CB	1:A:87:GLY:O	0.58	2.52	2	4
1:A:66:MET:HE2	1:A:67:GLU:N	0.58	2.12	12	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:126:GLU:OXT	0.58	1.99	19	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:57:ASP:OD1	0.58	1.99	20	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:93:LEU:HB3	0.58	2.34	17	13
1:A:48:GLY:C	1:A:50:GLN:H	0.58	2.07	5	3
1:A:90:GLN:HG2	1:A:95:HIS:CD2	0.58	2.33	24	1
1:A:36:GLN:N	1:A:63:THR:O	0.57	2.34	13	19
1:A:66:MET:HE2	1:A:69:VAL:HB	0.57	1.75	5	1
1:A:114:ARG:C	1:A:117:THR:HG22	0.57	2.23	11	1
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:CB	0.57	2.29	21	1
1:A:103:ALA:HB1	1:A:104:PRO:CD	0.57	2.28	18	24
1:A:29:VAL:HG22	1:A:36:GLN:HE21	0.57	1.59	17	2
1:A:45:MET:HG2	1:A:58:ILE:HD11	0.57	1.76	18	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:116:PHE:HD2	0.57	1.58	28	1
1:A:24:VAL:HG23	1:A:40:ILE:C	0.57	2.25	26	7
1:A:23:PHE:O	1:A:79:ARG:HG3	0.57	1.99	5	3
1:A:105:TRP:CE2	1:A:113:ARG:HG2	0.57	2.34	6	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:89:LEU:CD2	0.57	2.28	7	5
1:A:45:MET:HG2	1:A:58:ILE:CD1	0.57	2.28	12	2
1:A:85:ILE:HD13	1:A:102:VAL:CG1	0.57	2.30	19	3
1:A:112:GLN:NE2	1:A:112:GLN:HA	0.57	2.14	20	1
1:A:20:ARG:HD3	1:A:44:LYS:CB	0.57	2.29	25	1
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:MET:CG	0.57	2.29	21	2
1:A:112:GLN:HA	1:A:120:TYR:OH	0.57	1.98	16	4
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:HG2	0.57	1.75	19	1
1:A:48:GLY:O	1:A:51:ALA:N	0.57	2.35	26	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:VAL:HG23	1:A:25:GLY:H	0.57	1.58	16	1
1:A:72:TYR:CZ	1:A:102:VAL:HG11	0.57	2.35	4	1
1:A:35:TYR:CA	1:A:64:PRO:HA	0.57	2.30	11	14
1:A:20:ARG:HD3	1:A:46:TYR:CE2	0.57	2.35	8	1
1:A:70:CYS:CB	1:A:97:THR:HG23	0.57	2.30	16	1
1:A:16:ASP:H	1:A:88:LYS:CG	0.57	2.13	25	1
1:A:113:ARG:HA	1:A:113:ARG:CZ	0.57	2.30	8	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:40:ILE:CA	0.57	2.30	16	2
1:A:17:LEU:CD2	1:A:89:LEU:HG	0.57	2.23	23	2
1:A:16:ASP:H	1:A:88:LYS:HA	0.56	1.59	8	3
1:A:17:LEU:HD23	1:A:58:ILE:HD11	0.56	1.76	13	2
1:A:64:PRO:C	1:A:69:VAL:HG21	0.56	2.26	4	1
1:A:85:ILE:CD1	1:A:102:VAL:HG13	0.56	2.30	11	2
1:A:24:VAL:HG11	1:A:41:LYS:HG2	0.56	1.77	14	1
1:A:115:GLY:O	1:A:120:TYR:N	0.56	2.38	13	12
1:A:24:VAL:HG22	1:A:40:ILE:HA	0.56	1.77	11	1
1:A:45:MET:SD	1:A:58:ILE:HG12	0.56	2.40	23	1
1:A:84:LEU:O	1:A:85:ILE:HD13	0.56	2.00	24	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:120:TYR:OH	0.56	2.13	24	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:HG2	0.56	1.75	17	2
1:A:17:LEU:HD11	1:A:94:LEU:CD1	0.56	2.31	15	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:70:CYS:N	0.56	2.69	20	5
1:A:36:GLN:CG	1:A:65:ALA:HB2	0.56	2.29	11	2
1:A:15:SER:OG	1:A:87:GLY:O	0.56	2.23	10	1
1:A:66:MET:O	1:A:69:VAL:HB	0.56	2.01	16	3
1:A:114:ARG:HD2	1:A:118:LYS:HG2	0.56	1.78	17	2
1:A:78:ASN:ND2	1:A:79:ARG:H	0.56	1.98	17	1
1:A:108:LEU:HB3	1:A:112:GLN:NE2	0.56	2.16	18	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:120:TYR:CE1	0.56	2.94	27	2
1:A:23:PHE:CG	1:A:74:HIS:CE1	0.56	2.94	2	7
1:A:24:VAL:CG1	1:A:79:ARG:HB2	0.56	2.30	26	1
1:A:17:LEU:HB3	1:A:94:LEU:HD13	0.56	1.76	8	2
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:CG	0.56	2.84	18	2
1:A:25:GLY:HA3	1:A:39:GLU:CB	0.55	2.32	4	4
1:A:18:VAL:HG23	1:A:47:LYS:NZ	0.55	2.16	7	2
1:A:90:GLN:NE2	1:A:95:HIS:HB2	0.55	2.16	7	1
1:A:57:ASP:C	1:A:58:ILE:CD1	0.55	2.79	17	1
1:A:19:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD13	0.55	2.31	11	3
1:A:112:GLN:HB3	1:A:126:GLU:OE2	0.55	2.01	21	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:79:ARG:O	0.55	2.01	8	2
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:C	0.55	2.26	28	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:SER:N	0.55	2.16	11	1
1:A:50:GLN:HE21	1:A:51:ALA:N	0.55	1.99	16	1
1:A:36:GLN:O	1:A:62:TYR:HA	0.55	2.00	7	4
1:A:37:ARG:CD	1:A:62:TYR:CE2	0.55	2.89	22	2
1:A:63:THR:HG21	1:A:71:GLY:C	0.55	2.26	18	4
1:A:79:ARG:HD3	1:A:80:SER:N	0.55	2.15	10	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LEU:HG	0.55	2.02	11	2
1:A:45:MET:HE2	1:A:45:MET:H	0.55	1.59	2	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:43:THR:HG23	0.55	1.79	8	1
1:A:43:THR:HG21	1:A:82:GLU:HG2	0.55	1.79	8	2
1:A:17:LEU:CD2	1:A:58:ILE:HG13	0.55	2.32	28	1
1:A:106:ASN:HA	1:A:113:ARG:NH2	0.55	2.16	1	1
1:A:42:MET:CE	1:A:45:MET:HG3	0.55	2.32	12	2
1:A:70:CYS:CB	1:A:98:THR:HG22	0.55	2.30	21	2
1:A:9:GLN:HB3	1:A:124:CYS:CA	0.55	2.31	25	1
1:A:17:LEU:N	1:A:87:GLY:O	0.55	2.39	15	18
1:A:34:LEU:C	1:A:65:ALA:N	0.55	2.54	21	7
1:A:66:MET:HG3	1:A:69:VAL:CG2	0.55	2.31	4	1
1:A:19:ILE:CD1	1:A:85:ILE:HB	0.55	2.32	14	4
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CD1	0.55	2.70	28	1
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:HD3	0.55	1.78	29	1
1:A:88:LYS:CD	1:A:89:LEU:N	0.55	2.69	29	1
1:A:114:ARG:CA	1:A:117:THR:HG22	0.55	2.32	9	6
1:A:105:TRP:C	1:A:107:SER:H	0.55	2.09	13	15
1:A:19:ILE:CG2	1:A:45:MET:HG2	0.55	2.32	7	1
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:HB2	0.55	1.78	17	1
1:A:46:TYR:HB3	1:A:116:PHE:O	0.55	2.02	2	1
1:A:92:GLY:C	1:A:93:LEU:HD22	0.55	2.27	9	2
1:A:19:ILE:HD11	1:A:85:ILE:HB	0.55	1.77	14	2
1:A:43:THR:HG1	1:A:82:GLU:CD	0.55	2.10	27	1
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:OE2	0.55	2.00	6	2
1:A:64:PRO:O	1:A:71:GLY:HA2	0.55	2.02	10	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:93:LEU:HB3	0.55	2.37	12	3
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LEU:CD1	0.54	2.53	25	7
1:A:69:VAL:HG22	1:A:70:CYS:N	0.54	2.16	4	15
1:A:12:PHE:CE1	1:A:116:PHE:HD2	0.54	2.20	9	3
1:A:94:LEU:HD12	1:A:95:HIS:N	0.54	2.15	12	1
1:A:20:ARG:HB3	1:A:46:TYR:CE1	0.54	2.37	29	6
1:A:46:TYR:CE2	1:A:105:TRP:CH2	0.54	2.95	13	4
1:A:35:TYR:HA	1:A:64:PRO:C	0.54	2.28	28	16
1:A:114:ARG:CD	1:A:114:ARG:C	0.54	2.80	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:PHE:CB	1:A:74:HIS:CE1	0.54	2.90	19	1
1:A:58:ILE:HD11	1:A:89:LEU:HD21	0.54	1.76	25	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:41:LYS:H	0.54	1.60	1	4
1:A:30:ASN:ND2	1:A:32:THR:HB	0.54	2.16	11	4
1:A:112:GLN:O	1:A:113:ARG:NH2	0.54	2.40	8	1
1:A:116:PHE:CE1	1:A:120:TYR:CZ	0.54	2.96	23	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:65:ALA:HA	0.54	2.01	28	4
1:A:114:ARG:O	1:A:117:THR:N	0.54	2.38	25	12
1:A:66:MET:HE2	1:A:68:SER:H	0.54	1.63	18	1
1:A:28:GLU:HB3	1:A:37:ARG:CZ	0.54	2.33	24	1
1:A:39:GLU:CG	1:A:60:PHE:CE2	0.54	2.91	4	4
1:A:105:TRP:CH2	1:A:113:ARG:O	0.54	2.60	25	9
1:A:105:TRP:CH2	1:A:113:ARG:HA	0.54	2.38	11	4
1:A:79:ARG:HD3	1:A:80:SER:H	0.54	1.61	10	1
1:A:34:LEU:CD1	1:A:66:MET:HE3	0.54	2.33	21	1
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:H	0.54	1.62	28	6
1:A:64:PRO:HB2	1:A:69:VAL:CG2	0.54	2.31	4	4
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:HA	0.54	1.80	23	11
1:A:64:PRO:O	1:A:69:VAL:HG11	0.54	2.03	19	5
1:A:12:PHE:CD1	1:A:18:VAL:HG11	0.54	2.37	10	3
1:A:12:PHE:CZ	1:A:46:TYR:O	0.54	2.60	11	2
1:A:61:VAL:HB	1:A:96:ILE:CG1	0.54	2.33	16	2
1:A:115:GLY:C	1:A:120:TYR:HD1	0.54	2.11	17	1
1:A:114:ARG:C	1:A:114:ARG:HD2	0.54	2.28	25	1
1:A:87:GLY:HA3	1:A:96:ILE:HG22	0.54	1.79	27	1
1:A:19:ILE:N	1:A:19:ILE:HD13	0.54	2.18	1	11
1:A:62:TYR:CD1	1:A:62:TYR:N	0.54	2.76	12	28
1:A:9:GLN:HA	1:A:124:CYS:O	0.54	2.02	23	5
1:A:114:ARG:HD2	1:A:119:THR:OG1	0.54	2.02	26	6
1:A:22:LYS:CE	1:A:80:SER:HA	0.54	2.32	12	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:116:PHE:CE1	0.54	2.96	18	2
1:A:18:VAL:HB	1:A:47:LYS:HB2	0.54	1.79	16	2
1:A:120:TYR:CD2	1:A:124:CYS:HA	0.54	2.37	27	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:43:THR:OG1	0.54	2.03	16	8
1:A:114:ARG:C	1:A:114:ARG:CD	0.54	2.80	26	7
1:A:115:GLY:O	1:A:116:PHE:C	0.54	2.46	24	3
1:A:22:LYS:HG2	1:A:80:SER:C	0.54	2.28	4	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:CG	0.54	2.33	17	1
1:A:109:SER:O	1:A:111:ALA:N	0.53	2.40	4	18
1:A:12:PHE:CZ	1:A:121:THR:HG22	0.53	2.38	13	3
1:A:17:LEU:CD1	1:A:94:LEU:HD22	0.53	2.24	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TYR:HB2	1:A:94:LEU:O	0.53	2.04	1	10
1:A:8:PRO:HB3	1:A:101:PHE:CD2	0.53	2.39	25	5
1:A:33:THR:CB	1:A:35:TYR:O	0.53	2.56	3	3
1:A:78:ASN:OD1	1:A:81:GLU:HB2	0.53	2.03	28	2
1:A:22:LYS:HG3	1:A:82:GLU:HA	0.53	1.79	5	3
1:A:37:ARG:HA	1:A:61:VAL:O	0.53	2.03	28	7
1:A:42:MET:HE2	1:A:44:LYS:C	0.53	2.28	12	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:126:GLU:HA	0.53	2.18	15	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:41:LYS:N	0.53	2.71	1	11
1:A:61:VAL:CB	1:A:96:ILE:HD11	0.53	2.28	18	6
1:A:97:THR:OG1	1:A:100:SER:HB2	0.53	2.04	7	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:58:ILE:HB	0.53	1.79	9	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HB2	0.53	1.78	29	2
1:A:45:MET:HB2	1:A:57:ASP:OD2	0.53	2.03	25	1
1:A:70:CYS:O	1:A:71:GLY:O	0.53	2.27	25	6
1:A:112:GLN:C	1:A:113:ARG:NH1	0.53	2.66	8	1
1:A:18:VAL:O	1:A:47:LYS:N	0.53	2.40	23	8
1:A:110:LEU:CD2	1:A:111:ALA:H	0.53	2.16	23	12
1:A:24:VAL:HG23	1:A:39:GLU:C	0.53	2.28	11	1
1:A:23:PHE:CZ	1:A:72:TYR:CE2	0.53	2.96	19	5
1:A:115:GLY:HA3	1:A:120:TYR:CE1	0.53	2.38	1	4
1:A:84:LEU:C	1:A:84:LEU:HD13	0.53	2.29	2	14
1:A:121:THR:OG1	1:A:122:VAL:HG23	0.53	2.04	2	3
1:A:17:LEU:HG	1:A:89:LEU:HG	0.53	1.80	5	3
1:A:44:LYS:HB3	1:A:46:TYR:HE1	0.53	1.64	9	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:84:LEU:C	0.53	2.28	21	1
1:A:114:ARG:HD2	1:A:118:LYS:CE	0.53	2.34	5	2
1:A:19:ILE:HD12	1:A:20:ARG:N	0.53	2.18	7	1
1:A:84:LEU:HG	1:A:108:LEU:HD21	0.53	1.79	25	3
1:A:72:TYR:HD1	1:A:97:THR:O	0.53	1.87	26	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:HG2	0.53	1.80	7	2
1:A:23:PHE:CZ	1:A:72:TYR:CE1	0.53	2.97	27	3
1:A:9:GLN:HB3	1:A:125:GLU:HA	0.53	1.80	18	3
1:A:24:VAL:HG23	1:A:39:GLU:HG3	0.53	1.80	23	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:84:LEU:O	0.53	2.04	26	1
1:A:116:PHE:CE1	1:A:120:TYR:CE2	0.53	2.97	22	3
1:A:110:LEU:CD1	1:A:110:LEU:N	0.53	2.72	11	7
1:A:114:ARG:HG3	1:A:115:GLY:N	0.53	2.19	27	3
1:A:17:LEU:HD13	1:A:89:LEU:CD1	0.53	2.33	28	2
1:A:15:SER:O	1:A:47:LYS:NZ	0.53	2.42	7	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:120:TYR:HB3	0.53	2.39	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:CB	1:A:94:LEU:HD13	0.53	2.34	8	3
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HD21	0.53	2.33	7	1
1:A:110:LEU:HA	1:A:113:ARG:HH11	0.53	1.63	28	1
1:A:6:PRO:O	1:A:7:HIS:C	0.52	2.51	15	29
1:A:37:ARG:HG2	1:A:62:TYR:CE2	0.52	2.39	1	1
1:A:46:TYR:O	1:A:49:PHE:CZ	0.52	2.62	4	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:61:VAL:HG13	0.52	2.33	8	1
1:A:43:THR:HG21	1:A:82:GLU:OE2	0.52	2.04	11	1
1:A:63:THR:OG1	1:A:71:GLY:O	0.52	2.28	3	1
1:A:71:GLY:O	1:A:97:THR:HA	0.52	2.05	11	3
1:A:72:TYR:CD2	1:A:96:ILE:HG13	0.52	2.39	4	2
1:A:66:MET:H	1:A:69:VAL:HG11	0.52	1.63	10	5
1:A:9:GLN:O	1:A:124:CYS:O	0.52	2.27	14	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:116:PHE:HD1	0.52	2.22	21	4
1:A:47:LYS:HD2	1:A:47:LYS:C	0.52	2.29	14	1
1:A:9:GLN:HB3	1:A:126:GLU:CG	0.52	2.35	17	1
1:A:27:PRO:HD3	1:A:38:TYR:CE1	0.52	2.39	1	4
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:CG	0.52	2.55	1	3
1:A:21:ALA:O	1:A:83:PHE:N	0.52	2.42	7	21
1:A:22:LYS:O	1:A:40:ILE:HB	0.52	2.04	17	3
1:A:9:GLN:NE2	1:A:124:CYS:HA	0.52	2.20	25	1
1:A:18:VAL:HG23	1:A:47:LYS:HB3	0.52	1.81	4	2
1:A:8:PRO:CG	1:A:126:GLU:HA	0.52	2.33	17	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:116:PHE:CD1	0.52	2.97	18	2
1:A:45:MET:HG2	1:A:49:PHE:CE1	0.52	2.39	20	1
1:A:83:PHE:CE2	1:A:104:PRO:HG3	0.52	2.40	21	2
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:SER:H	0.52	1.63	29	2
1:A:96:ILE:CG2	1:A:102:VAL:HG21	0.52	2.34	7	1
1:A:83:PHE:CZ	1:A:104:PRO:HG3	0.52	2.40	21	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:ALA:CA	0.52	2.35	28	1
1:A:46:TYR:HD2	1:A:116:PHE:C	0.52	2.13	2	3
1:A:17:LEU:CD2	1:A:58:ILE:HD11	0.52	2.35	17	2
1:A:45:MET:N	1:A:45:MET:CE	0.52	2.71	2	1
1:A:97:THR:O	1:A:100:SER:HB3	0.52	2.05	17	1
1:A:120:TYR:CZ	1:A:126:GLU:CD	0.52	2.88	20	1
1:A:9:GLN:HB3	1:A:125:GLU:C	0.52	2.29	20	4
1:A:90:GLN:O	1:A:90:GLN:HG3	0.52	2.04	24	1
1:A:48:GLY:C	1:A:50:GLN:N	0.51	2.68	5	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.51	2.73	7	3
1:A:15:SER:O	1:A:47:LYS:HE3	0.51	2.04	18	2
1:A:35:TYR:O	1:A:36:GLN:HG3	0.51	2.05	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:LEU:HG	1:A:112:GLN:NE2	0.51	2.20	3	1
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:MET:CE	0.51	2.35	21	1
1:A:105:TRP:CA	1:A:108:LEU:HD23	0.51	2.29	2	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:116:PHE:HD1	0.51	2.23	28	2
1:A:66:MET:O	1:A:67:GLU:C	0.51	2.54	14	2
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:OE2	0.51	2.04	9	1
1:A:15:SER:O	1:A:47:LYS:CE	0.51	2.58	19	1
1:A:45:MET:CB	1:A:58:ILE:HD11	0.51	2.33	20	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:116:PHE:CD1	0.51	2.41	23	1
1:A:62:TYR:N	1:A:62:TYR:CD1	0.51	2.79	25	1
1:A:44:LYS:HG3	1:A:46:TYR:CE1	0.51	2.40	29	1
1:A:20:ARG:HD2	1:A:43:THR:CG2	0.51	2.34	12	2
1:A:8:PRO:O	1:A:9:GLN:C	0.51	2.53	19	2
1:A:9:GLN:HB3	1:A:126:GLU:O	0.51	2.06	19	1
1:A:16:ASP:HA	1:A:47:LYS:NZ	0.51	2.21	14	2
1:A:20:ARG:O	1:A:43:THR:OG1	0.51	2.25	23	2
1:A:105:TRP:O	1:A:107:SER:N	0.51	2.42	13	8
1:A:24:VAL:CG2	1:A:41:LYS:HB2	0.51	2.36	22	6
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:HE3	0.51	1.81	5	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:47:LYS:HD3	0.51	2.40	25	1
1:A:90:GLN:HB3	1:A:95:HIS:NE2	0.51	2.21	27	3
1:A:112:GLN:C	1:A:113:ARG:CZ	0.51	2.83	8	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:88:LYS:HD2	0.51	2.31	9	1
1:A:27:PRO:HD3	1:A:38:TYR:HE1	0.51	1.65	28	2
1:A:45:MET:HG2	1:A:49:PHE:CZ	0.51	2.41	16	3
1:A:70:CYS:HB3	1:A:97:THR:CG2	0.51	2.36	16	2
1:A:113:ARG:CZ	1:A:113:ARG:CA	0.51	2.89	8	1
1:A:45:MET:HE3	1:A:45:MET:H	0.51	1.65	12	1
1:A:45:MET:HG3	1:A:58:ILE:CD1	0.51	2.36	9	3
1:A:66:MET:O	1:A:67:GLU:HG2	0.51	2.06	16	1
1:A:45:MET:HB3	1:A:58:ILE:CD1	0.51	2.35	20	1
1:A:9:GLN:HB2	1:A:126:GLU:HB2	0.51	1.83	25	1
1:A:38:TYR:O	1:A:60:PHE:HA	0.51	2.05	19	5
1:A:23:PHE:HB3	1:A:74:HIS:CE1	0.51	2.41	15	2
1:A:16:ASP:HB2	1:A:88:LYS:CA	0.50	2.35	15	4
1:A:17:LEU:CD2	1:A:58:ILE:CD1	0.50	2.88	26	2
1:A:110:LEU:CD1	1:A:110:LEU:H	0.50	2.19	11	2
1:A:96:ILE:O	1:A:97:THR:HG23	0.50	2.06	11	4
1:A:3:CYS:N	1:A:99:CYS:SG	0.50	2.84	15	3
1:A:29:VAL:HG13	1:A:36:GLN:CD	0.50	2.31	17	1
1:A:19:ILE:HG21	1:A:57:ASP:OD1	0.50	2.06	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:GLN:CG	1:A:125:GLU:HA	0.50	2.35	24	3
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:CG	0.50	2.36	7	2
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:MET:SD	0.50	2.45	21	2
1:A:35:TYR:HA	1:A:63:THR:O	0.50	2.06	19	3
1:A:111:ALA:O	1:A:115:GLY:N	0.50	2.44	11	2
1:A:120:TYR:HE2	1:A:125:GLU:O	0.50	1.88	17	1
1:A:20:ARG:HD3	1:A:82:GLU:CD	0.50	2.31	19	1
1:A:22:LYS:HE2	1:A:82:GLU:CG	0.50	2.35	22	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:120:TYR:HB3	0.50	2.41	23	1
1:A:46:TYR:CD2	1:A:116:PHE:O	0.50	2.60	1	4
1:A:109:SER:C	1:A:111:ALA:N	0.50	2.70	21	18
1:A:20:ARG:HH22	1:A:82:GLU:HB2	0.50	1.67	5	1
1:A:23:PHE:HZ	1:A:72:TYR:HH	0.50	1.48	6	2
1:A:19:ILE:HD12	1:A:19:ILE:C	0.50	2.30	7	1
1:A:120:TYR:O	1:A:124:CYS:CB	0.50	2.58	19	3
1:A:20:ARG:HH22	1:A:82:GLU:HB3	0.50	1.64	9	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:N	0.50	2.79	12	4
1:A:21:ALA:O	1:A:83:PHE:CB	0.50	2.57	21	1
1:A:36:GLN:HE21	1:A:65:ALA:HA	0.50	1.64	25	2
1:A:39:GLU:HG3	1:A:60:PHE:CD2	0.50	2.41	28	1
1:A:94:LEU:O	1:A:95:HIS:CD2	0.50	2.65	2	9
1:A:9:GLN:O	1:A:13:CYS:HB2	0.50	2.06	8	2
1:A:19:ILE:HD13	1:A:85:ILE:HB	0.50	1.81	20	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:120:TYR:O	0.50	2.64	6	3
1:A:45:MET:CE	1:A:58:ILE:HB	0.50	2.37	9	1
1:A:66:MET:CG	1:A:69:VAL:HB	0.50	2.36	18	2
1:A:9:GLN:CD	1:A:126:GLU:HA	0.50	2.31	15	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:41:LYS:CB	0.50	2.35	15	1
1:A:114:ARG:CD	1:A:115:GLY:N	0.50	2.74	25	9
1:A:94:LEU:HG	1:A:96:ILE:CD1	0.50	2.36	13	3
1:A:38:TYR:CZ	1:A:74:HIS:HB3	0.50	2.42	2	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD12	0.50	1.84	27	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:120:TYR:CZ	0.50	2.41	28	1
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:HE2	0.50	1.65	6	3
1:A:12:PHE:CD2	1:A:116:PHE:CD2	0.50	3.00	14	2
1:A:77:HIS:H	1:A:77:HIS:CD2	0.50	2.25	28	1
1:A:20:ARG:HB2	1:A:83:PHE:O	0.50	2.07	25	2
1:A:108:LEU:CB	1:A:113:ARG:CZ	0.50	2.90	8	1
1:A:72:TYR:CE2	1:A:74:HIS:HB2	0.50	2.42	28	3
1:A:19:ILE:CG1	1:A:58:ILE:HG13	0.50	2.37	29	1
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:CD1	0.49	2.73	3	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ALA:CB	1:A:101:PHE:CB	0.49	2.90	25	7
1:A:25:GLY:N	1:A:39:GLU:HB3	0.49	2.22	11	1
1:A:20:ARG:CZ	1:A:44:LYS:HE2	0.49	2.37	1	1
1:A:19:ILE:HG21	1:A:45:MET:CE	0.49	2.36	4	1
1:A:99:CYS:SG	1:A:99:CYS:O	0.49	2.70	6	3
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:CZ	0.49	2.42	5	1
1:A:26:THR:CG2	1:A:27:PRO:HD2	0.49	2.37	12	3
1:A:12:PHE:CE2	1:A:116:PHE:CD2	0.49	2.99	7	5
1:A:19:ILE:HG21	1:A:45:MET:HE3	0.49	1.83	9	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:94:LEU:HD22	0.49	1.82	18	1
1:A:23:PHE:CD2	1:A:40:ILE:HG22	0.49	2.42	25	2
1:A:12:PHE:HB3	1:A:124:CYS:HB2	0.49	1.83	2	2
1:A:20:ARG:HB2	1:A:20:ARG:HH11	0.49	1.68	9	1
1:A:50:GLN:HG3	1:A:51:ALA:N	0.49	2.22	12	2
1:A:46:TYR:CD2	1:A:117:THR:HA	0.49	2.43	10	4
1:A:15:SER:HB3	1:A:87:GLY:O	0.49	2.07	2	1
1:A:82:GLU:O	1:A:83:PHE:CD1	0.49	2.65	29	2
1:A:33:THR:C	1:A:35:TYR:N	0.49	2.71	11	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:41:LYS:HG3	0.49	1.84	12	1
1:A:114:ARG:HA	1:A:117:THR:CG2	0.49	2.37	9	4
1:A:74:HIS:CD2	1:A:74:HIS:C	0.49	2.91	26	1
1:A:42:MET:CE	1:A:45:MET:HB3	0.49	2.38	28	1
1:A:17:LEU:CA	1:A:87:GLY:O	0.49	2.60	18	14
1:A:109:SER:O	1:A:110:LEU:C	0.49	2.55	3	18
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:HG3	0.49	1.85	15	1
1:A:20:ARG:HD3	1:A:46:TYR:CE1	0.49	2.42	27	2
1:A:7:HIS:HB2	1:A:9:GLN:HG2	0.49	1.84	7	1
1:A:20:ARG:HD2	1:A:44:LYS:CG	0.49	2.37	19	1
1:A:29:VAL:HG22	1:A:36:GLN:NE2	0.49	2.23	27	1
1:A:34:LEU:O	1:A:64:PRO:C	0.49	2.54	7	5
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:CD1	0.49	2.43	9	1
1:A:42:MET:SD	1:A:45:MET:HG3	0.49	2.46	12	1
1:A:82:GLU:HG3	1:A:106:ASN:ND2	0.49	2.23	17	1
1:A:45:MET:CG	1:A:49:PHE:CZ	0.49	2.96	20	1
1:A:24:VAL:CA	1:A:79:ARG:HD3	0.49	2.30	28	1
1:A:104:PRO:O	1:A:105:TRP:C	0.49	2.55	26	17
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HG2	0.49	2.42	6	1
1:A:37:ARG:HD2	1:A:62:TYR:CZ	0.49	2.42	22	2
1:A:20:ARG:O	1:A:43:THR:HB	0.49	2.08	18	2
1:A:120:TYR:HE2	1:A:126:GLU:HB2	0.49	1.65	22	2
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HB2	0.49	2.38	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:TYR:CB	1:A:63:THR:O	0.48	2.60	4	5
1:A:105:TRP:NE1	1:A:113:ARG:HD3	0.48	2.22	4	1
1:A:125:GLU:O	1:A:126:GLU:C	0.48	2.56	15	4
1:A:22:LYS:HD3	1:A:80:SER:HA	0.48	1.86	29	12
1:A:46:TYR:CD1	1:A:46:TYR:N	0.48	2.82	1	7
1:A:19:ILE:CD1	1:A:42:MET:HE1	0.48	2.38	7	1
1:A:22:LYS:HG2	1:A:79:ARG:O	0.48	2.08	18	2
1:A:74:HIS:CE1	1:A:76:SER:O	0.48	2.66	7	2
1:A:120:TYR:O	1:A:124:CYS:CA	0.48	2.61	8	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:94:LEU:HD22	0.48	1.86	11	2
1:A:114:ARG:CD	1:A:118:LYS:HE3	0.48	2.37	21	1
1:A:16:ASP:CB	1:A:88:LYS:HD3	0.48	2.38	29	1
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:CD2	0.48	2.87	19	8
1:A:18:VAL:C	1:A:19:ILE:HG23	0.48	2.34	4	3
1:A:115:GLY:C	1:A:120:TYR:HD2	0.48	2.16	6	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LEU:CG	0.48	2.61	11	2
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:HG3	0.48	1.86	26	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:88:LYS:HE2	0.48	2.09	28	1
1:A:45:MET:O	1:A:45:MET:HE2	0.48	2.08	28	1
1:A:33:THR:O	1:A:35:TYR:CE1	0.48	2.67	2	17
1:A:59:ARG:C	1:A:60:PHE:CD1	0.48	2.92	22	4
1:A:22:LYS:HG2	1:A:81:GLU:C	0.48	2.34	9	1
1:A:30:ASN:HD22	1:A:32:THR:N	0.48	2.06	17	2
1:A:123:GLY:O	1:A:125:GLU:CG	0.48	2.61	14	12
1:A:47:LYS:HD2	1:A:48:GLY:N	0.48	2.23	14	1
1:A:63:THR:OG1	1:A:71:GLY:HA3	0.48	2.07	14	3
1:A:115:GLY:O	1:A:118:LYS:N	0.48	2.45	23	4
1:A:44:LYS:HE3	1:A:46:TYR:CZ	0.48	2.43	26	1
1:A:70:CYS:CA	1:A:98:THR:HG22	0.48	2.39	26	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:120:TYR:HB2	0.48	2.43	28	6
1:A:23:PHE:CD2	1:A:40:ILE:CG2	0.48	2.97	25	7
1:A:35:TYR:O	1:A:65:ALA:HB2	0.48	2.09	6	1
1:A:114:ARG:O	1:A:118:LYS:N	0.48	2.47	4	6
1:A:20:ARG:HD2	1:A:43:THR:HB	0.48	1.86	12	2
1:A:112:GLN:NE2	1:A:112:GLN:O	0.48	2.43	18	1
1:A:20:ARG:HB3	1:A:20:ARG:CZ	0.48	2.38	20	1
1:A:114:ARG:NE	1:A:118:LYS:HE2	0.48	2.24	28	1
1:A:40:ILE:HD12	1:A:61:VAL:CG1	0.47	2.39	1	1
1:A:45:MET:HE2	1:A:57:ASP:CG	0.47	2.33	6	1
1:A:40:ILE:N	1:A:40:ILE:CD1	0.47	2.75	8	1
1:A:118:LYS:HE3	1:A:119:THR:HG23	0.47	1.85	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:MET:HE2	1:A:45:MET:HG3	0.47	1.86	18	1
1:A:108:LEU:HB3	1:A:112:GLN:HE22	0.47	1.69	18	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:96:ILE:HD11	0.47	2.39	11	1
1:A:118:LYS:HG3	1:A:119:THR:OG1	0.47	2.08	18	2
1:A:35:TYR:C	1:A:36:GLN:HG3	0.47	2.34	17	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:89:LEU:HD11	0.47	2.09	10	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:36:GLN:NE2	0.47	2.25	17	2
1:A:114:ARG:CD	1:A:118:LYS:HE2	0.47	2.37	1	3
1:A:115:GLY:O	1:A:119:THR:OG1	0.47	2.32	3	5
1:A:72:TYR:CD1	1:A:96:ILE:HG13	0.47	2.44	23	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:88:LYS:HE2	0.47	2.09	17	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:120:TYR:HH	0.47	2.12	24	1
1:A:75:ARG:H	1:A:75:ARG:HH11	0.47	1.52	29	1
1:A:43:THR:HG21	1:A:82:GLU:CG	0.47	2.39	8	1
1:A:12:PHE:HE2	1:A:121:THR:HG22	0.47	1.69	9	2
1:A:62:TYR:O	1:A:95:HIS:CG	0.47	2.68	2	3
1:A:114:ARG:HD3	1:A:118:LYS:HG2	0.47	1.84	3	2
1:A:34:LEU:HD23	1:A:66:MET:HB3	0.47	1.87	5	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:116:PHE:CD2	0.47	3.03	11	2
1:A:42:MET:HE2	1:A:58:ILE:HD12	0.47	1.86	26	2
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:O	0.47	2.68	18	13
1:A:19:ILE:HG13	1:A:58:ILE:HD13	0.47	1.85	6	1
1:A:45:MET:CG	1:A:58:ILE:HD11	0.47	2.39	18	2
1:A:20:ARG:NE	1:A:46:TYR:OH	0.47	2.47	7	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:117:THR:HA	0.47	2.44	24	2
1:A:31:GLN:NE2	1:A:31:GLN:HA	0.47	2.25	12	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:95:HIS:N	0.47	2.24	14	1
1:A:20:ARG:HH11	1:A:44:LYS:HE3	0.47	1.67	16	1
1:A:57:ASP:O	1:A:58:ILE:CG1	0.47	2.63	17	2
1:A:20:ARG:O	1:A:42:MET:HE2	0.47	2.10	23	2
1:A:9:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HG3	0.47	1.86	25	1
1:A:61:VAL:HB	1:A:96:ILE:HG13	0.47	1.87	29	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:79:ARG:CG	0.47	2.33	16	2
1:A:22:LYS:CD	1:A:79:ARG:O	0.47	2.63	8	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:120:TYR:HB2	0.47	2.45	12	1
1:A:24:VAL:HA	1:A:79:ARG:HG2	0.47	1.86	16	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:18:VAL:HG11	0.47	2.45	23	2
1:A:86:ALA:CB	1:A:101:PHE:O	0.47	2.63	26	3
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:CE1	0.47	2.44	9	1
1:A:29:VAL:HA	1:A:36:GLN:HG2	0.47	1.87	21	2
1:A:112:GLN:HG2	1:A:120:TYR:HE2	0.47	1.69	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ARG:CD	1:A:44:LYS:HB2	0.47	2.37	25	1
1:A:3:CYS:SG	1:A:4:VAL:N	0.47	2.88	6	3
1:A:15:SER:HG	1:A:87:GLY:C	0.47	2.17	10	1
1:A:9:GLN:HG3	1:A:124:CYS:O	0.47	2.10	11	1
1:A:119:THR:OG1	1:A:120:TYR:CD1	0.47	2.64	12	1
1:A:33:THR:O	1:A:34:LEU:CB	0.46	2.52	19	5
1:A:4:VAL:HB	1:A:5:PRO:HD2	0.46	1.85	16	9
1:A:66:MET:HB2	1:A:69:VAL:HB	0.46	1.87	23	7
1:A:23:PHE:HB2	1:A:74:HIS:CE1	0.46	2.45	19	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:116:PHE:CD2	0.46	2.97	20	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PHE:HD2	0.46	1.92	1	1
1:A:120:TYR:O	1:A:121:THR:C	0.46	2.57	8	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:66:MET:HG3	0.46	2.40	10	2
1:A:9:GLN:HG2	1:A:10:THR:N	0.46	2.25	11	1
1:A:105:TRP:CE3	1:A:108:LEU:CD2	0.46	2.98	27	1
1:A:41:LYS:CE	1:A:41:LYS:HA	0.46	2.40	1	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:LEU:C	0.46	2.35	14	5
1:A:46:TYR:CE1	1:A:117:THR:HA	0.46	2.46	5	1
1:A:82:GLU:HG3	1:A:106:ASN:OD1	0.46	2.10	5	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:120:TYR:CE2	0.46	3.04	11	2
1:A:110:LEU:HA	1:A:113:ARG:NH1	0.46	2.25	28	1
1:A:35:TYR:CA	1:A:63:THR:O	0.46	2.63	19	3
1:A:92:GLY:C	1:A:93:LEU:HD13	0.46	2.35	13	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:79:ARG:HG2	0.46	2.34	16	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:120:TYR:CB	0.46	2.98	23	1
1:A:19:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HG13	0.46	2.40	29	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:120:TYR:CB	0.46	2.98	4	11
1:A:59:ARG:H	1:A:59:ARG:CD	0.46	2.24	6	1
1:A:9:GLN:HA	1:A:124:CYS:CB	0.46	2.39	26	2
1:A:33:THR:OG1	1:A:35:TYR:CG	0.46	2.68	24	4
1:A:75:ARG:HH11	1:A:75:ARG:HA	0.46	1.71	17	1
1:A:12:PHE:HB2	1:A:116:PHE:CE1	0.46	2.45	25	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:116:PHE:CD1	0.46	3.04	1	2
1:A:16:ASP:CB	1:A:88:LYS:HA	0.46	2.41	10	1
1:A:114:ARG:HB2	1:A:118:LYS:HD3	0.46	1.87	13	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:116:PHE:CD2	0.46	2.98	28	1
1:A:33:THR:OG1	1:A:34:LEU:N	0.46	2.47	7	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:116:PHE:CD2	0.46	3.03	11	1
1:A:35:TYR:N	1:A:65:ALA:H	0.46	2.06	11	1
1:A:42:MET:HE3	1:A:44:LYS:CA	0.46	2.40	14	1
1:A:7:HIS:O	1:A:11:ALA:N	0.46	2.47	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:VAL:CG1	1:A:79:ARG:HB3	0.46	2.40	15	1
1:A:47:LYS:HE3	1:A:48:GLY:N	0.46	2.26	21	1
1:A:85:ILE:CG2	1:A:94:LEU:HD21	0.46	2.41	21	1
1:A:17:LEU:HB3	1:A:47:LYS:O	0.46	2.11	23	1
1:A:120:TYR:HD1	1:A:124:CYS:HA	0.46	1.70	24	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:OE1	0.46	2.10	26	1
1:A:39:GLU:HG2	1:A:60:PHE:CD2	0.46	2.46	1	2
1:A:39:GLU:CD	1:A:60:PHE:CZ	0.46	2.94	14	3
1:A:108:LEU:CB	1:A:112:GLN:HE22	0.46	2.24	18	1
1:A:116:PHE:CG	1:A:120:TYR:CD2	0.46	3.04	28	1
1:A:64:PRO:CG	1:A:69:VAL:HG21	0.46	2.41	1	2
1:A:17:LEU:CG	1:A:89:LEU:HG	0.46	2.41	5	2
1:A:113:ARG:NE	1:A:113:ARG:CA	0.46	2.79	8	1
1:A:27:PRO:HG3	1:A:38:TYR:CZ	0.46	2.46	11	2
1:A:74:HIS:CD2	1:A:76:SER:HB2	0.46	2.46	16	2
1:A:85:ILE:HG21	1:A:94:LEU:HD21	0.46	1.87	21	1
1:A:15:SER:HA	1:A:88:LYS:HG3	0.46	1.87	22	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:84:LEU:C	0.46	2.35	26	1
1:A:9:GLN:HB2	1:A:124:CYS:O	0.46	2.11	4	2
1:A:42:MET:HE1	1:A:45:MET:HE3	0.46	1.88	10	1
1:A:22:LYS:CG	1:A:81:GLU:O	0.46	2.64	13	5
1:A:83:PHE:CE1	1:A:104:PRO:HG3	0.46	2.46	20	3
1:A:83:PHE:HE1	1:A:104:PRO:HD3	0.45	1.71	17	1
1:A:120:TYR:CZ	1:A:126:GLU:CG	0.45	2.99	21	2
1:A:9:GLN:CB	1:A:126:GLU:C	0.45	2.89	19	1
1:A:114:ARG:CG	1:A:115:GLY:N	0.45	2.79	22	17
1:A:62:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HG	0.45	2.46	23	3
1:A:27:PRO:CB	1:A:38:TYR:CE1	0.45	2.99	28	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:96:ILE:HD11	0.45	1.88	11	2
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:CG2	0.45	2.64	20	14
1:A:88:LYS:HG3	1:A:89:LEU:N	0.45	2.26	2	1
1:A:20:ARG:NH1	1:A:44:LYS:HD3	0.45	2.27	4	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:42:MET:HA	0.45	1.86	6	2
1:A:9:GLN:CB	1:A:126:GLU:N	0.45	2.79	15	1
1:A:70:CYS:CB	1:A:97:THR:HG22	0.45	2.42	15	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:126:GLU:C	0.45	2.37	19	1
1:A:90:GLN:O	1:A:92:GLY:N	0.45	2.50	6	3
1:A:105:TRP:CE2	1:A:113:ARG:CG	0.45	2.97	18	2
1:A:20:ARG:CZ	1:A:44:LYS:HD3	0.45	2.42	29	1
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:CB	0.45	2.65	25	3
1:A:120:TYR:CE1	1:A:126:GLU:OE2	0.45	2.70	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:MET:HG3	1:A:69:VAL:HG23	0.45	1.88	4	1
1:A:88:LYS:HD3	1:A:89:LEU:N	0.45	2.26	17	1
1:A:90:GLN:HE21	1:A:95:HIS:CE1	0.45	2.29	17	1
1:A:72:TYR:CE2	1:A:96:ILE:HG13	0.45	2.47	24	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:92:GLY:C	0.45	2.37	5	3
1:A:22:LYS:HE3	1:A:79:ARG:O	0.45	2.11	16	1
1:A:8:PRO:CD	1:A:126:GLU:OXT	0.45	2.65	19	1
1:A:9:GLN:N	1:A:126:GLU:HB2	0.45	2.17	25	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:47:LYS:HD3	0.45	2.46	25	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:94:LEU:HG	0.45	1.88	2	1
1:A:63:THR:HB	1:A:96:ILE:CD1	0.45	2.42	2	2
1:A:85:ILE:HA	1:A:102:VAL:HG13	0.45	1.88	9	1
1:A:104:PRO:O	1:A:108:LEU:HD13	0.45	2.11	25	2
1:A:12:PHE:CZ	1:A:120:TYR:HB2	0.45	2.47	23	1
1:A:42:MET:HG2	1:A:58:ILE:O	0.45	2.11	25	1
1:A:22:LYS:HZ1	1:A:82:GLU:HG2	0.45	1.70	28	1
1:A:45:MET:SD	1:A:57:ASP:CB	0.45	3.05	29	1
1:A:22:LYS:CD	1:A:80:SER:O	0.45	2.65	4	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:59:ARG:N	0.45	2.80	6	1
1:A:63:THR:HB	1:A:96:ILE:O	0.45	2.11	11	2
1:A:72:TYR:CG	1:A:96:ILE:HG13	0.45	2.47	23	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:92:GLY:O	0.44	2.64	1	3
1:A:63:THR:OG1	1:A:64:PRO:HD2	0.44	2.12	4	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:58:ILE:HD11	0.44	2.12	6	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:CD2	0.44	2.94	7	2
1:A:43:THR:O	1:A:44:LYS:HG2	0.44	2.12	8	2
1:A:12:PHE:CE1	1:A:116:PHE:CD1	0.44	3.05	18	4
1:A:112:GLN:NE2	1:A:120:TYR:HE1	0.44	2.10	20	1
1:A:28:GLU:HG2	1:A:37:ARG:CB	0.44	2.39	23	1
1:A:42:MET:HE2	1:A:45:MET:N	0.44	2.27	24	1
1:A:70:CYS:O	1:A:97:THR:CA	0.44	2.65	1	2
1:A:20:ARG:HG2	1:A:46:TYR:OH	0.44	2.12	6	3
1:A:116:PHE:CE1	1:A:120:TYR:CD2	0.44	3.05	2	1
1:A:109:SER:HB2	1:A:112:GLN:HB3	0.44	1.89	12	5
1:A:58:ILE:HG23	1:A:94:LEU:HB2	0.44	1.89	5	2
1:A:19:ILE:HG21	1:A:45:MET:HG2	0.44	1.89	7	1
1:A:9:GLN:CB	1:A:126:GLU:H	0.44	2.12	17	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:112:GLN:CA	0.44	2.81	20	1
1:A:39:GLU:CD	1:A:60:PHE:CE2	0.44	2.95	23	1
1:A:82:GLU:HA	1:A:82:GLU:OE1	0.44	2.12	27	1
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:NE	0.44	2.50	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:LEU:CB	1:A:103:ALA:O	0.44	2.65	4	5
1:A:82:GLU:O	1:A:83:PHE:CD2	0.44	2.70	24	2
1:A:113:ARG:NH1	1:A:113:ARG:N	0.44	2.65	8	1
1:A:120:TYR:OH	1:A:126:GLU:HA	0.44	2.13	14	1
1:A:108:LEU:CG	1:A:112:GLN:OE1	0.44	2.65	18	1
1:A:64:PRO:HB3	1:A:69:VAL:HG21	0.44	1.87	20	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:94:LEU:HD13	0.44	1.83	23	2
1:A:72:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG11	0.44	2.13	22	1
1:A:22:LYS:HE3	1:A:82:GLU:HG2	0.44	1.90	27	1
1:A:118:LYS:CG	1:A:119:THR:N	0.44	2.80	19	4
1:A:15:SER:HB2	1:A:87:GLY:O	0.44	2.13	19	1
1:A:15:SER:HA	1:A:88:LYS:CD	0.44	2.41	20	1
1:A:115:GLY:C	1:A:117:THR:N	0.44	2.72	20	4
1:A:28:GLU:CG	1:A:37:ARG:HD3	0.44	2.43	1	1
1:A:105:TRP:C	1:A:107:SER:N	0.44	2.75	13	7
1:A:64:PRO:O	1:A:69:VAL:HG21	0.44	2.13	4	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HD12	0.44	2.43	6	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:87:GLY:C	0.44	2.37	15	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:66:MET:CE	0.44	2.39	16	1
1:A:9:GLN:HG2	1:A:124:CYS:O	0.44	2.12	6	1
1:A:23:PHE:CG	1:A:40:ILE:CG2	0.44	3.00	12	1
1:A:17:LEU:HD23	1:A:58:ILE:CD1	0.44	2.43	21	2
1:A:17:LEU:CB	1:A:47:LYS:O	0.44	2.65	15	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:116:PHE:HD2	0.44	2.11	18	1
1:A:62:TYR:O	1:A:95:HIS:ND1	0.44	2.51	2	1
1:A:20:ARG:NE	1:A:82:GLU:OE2	0.44	2.51	4	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PHE:CD2	0.44	2.71	12	1
1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CD1	0.44	2.85	24	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:58:ILE:N	0.44	2.51	25	1
1:A:70:CYS:HB3	1:A:97:THR:HB	0.44	1.90	4	2
1:A:51:ALA:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.44	2.42	15	1
1:A:114:ARG:HH11	1:A:114:ARG:HB3	0.44	1.73	15	1
1:A:41:LYS:HA	1:A:41:LYS:CE	0.44	2.42	16	1
1:A:8:PRO:N	1:A:126:GLU:OXT	0.44	2.51	19	1
1:A:25:GLY:CA	1:A:39:GLU:HB2	0.44	2.42	29	1
1:A:20:ARG:HG2	1:A:44:LYS:CG	0.44	2.43	1	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:LEU:O	0.44	2.13	10	2
1:A:50:GLN:O	1:A:51:ALA:C	0.44	2.58	15	1
1:A:120:TYR:CE2	1:A:126:GLU:CG	0.44	3.01	18	2
1:A:66:MET:SD	1:A:69:VAL:HB	0.44	2.52	22	1
1:A:23:PHE:CZ	1:A:72:TYR:OH	0.44	2.70	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ARG:HD2	1:A:43:THR:CB	0.43	2.43	6	3
1:A:37:ARG:NH1	1:A:62:TYR:OH	0.43	2.51	7	1
1:A:82:GLU:HG3	1:A:106:ASN:HD21	0.43	1.71	17	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:70:CYS:H	0.43	1.70	20	1
1:A:60:PHE:O	1:A:94:LEU:HB3	0.43	2.13	2	1
1:A:15:SER:OG	1:A:87:GLY:CA	0.43	2.66	3	2
1:A:23:PHE:CE2	1:A:72:TYR:CE1	0.43	3.06	4	1
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:OE1	0.43	2.12	15	1
1:A:36:GLN:HE21	1:A:65:ALA:CB	0.43	2.26	15	1
1:A:74:HIS:CD2	1:A:76:SER:H	0.43	2.31	16	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PHE:HD1	0.43	1.97	17	1
1:A:120:TYR:CZ	1:A:126:GLU:HB2	0.43	2.49	20	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:116:PHE:CE2	0.43	3.00	22	1
1:A:114:ARG:O	1:A:115:GLY:C	0.43	2.62	10	5
1:A:16:ASP:N	1:A:87:GLY:O	0.43	2.51	7	1
1:A:78:ASN:HB3	1:A:81:GLU:HB2	0.43	1.90	9	1
1:A:58:ILE:H	1:A:58:ILE:CD1	0.43	2.23	14	1
1:A:42:MET:HB2	1:A:58:ILE:O	0.43	2.13	17	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:124:CYS:HA	0.43	2.48	24	1
1:A:35:TYR:HD2	1:A:37:ARG:HH12	0.43	1.55	1	1
1:A:62:TYR:CG	1:A:93:LEU:HB3	0.43	2.48	1	2
1:A:64:PRO:HG2	1:A:69:VAL:CG2	0.43	2.44	1	1
1:A:70:CYS:HA	1:A:98:THR:CG2	0.43	2.43	6	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:93:LEU:C	0.43	2.91	7	5
1:A:35:TYR:N	1:A:35:TYR:CD1	0.43	2.86	12	1
1:A:114:ARG:NE	1:A:118:LYS:HE3	0.43	2.28	21	1
1:A:38:TYR:CE1	1:A:74:HIS:HB3	0.43	2.49	2	1
1:A:19:ILE:O	1:A:85:ILE:N	0.43	2.49	4	1
1:A:45:MET:CE	1:A:58:ILE:HD13	0.43	2.38	4	1
1:A:70:CYS:HB2	1:A:97:THR:HB	0.43	1.89	29	5
1:A:72:TYR:CD1	1:A:96:ILE:HB	0.43	2.48	19	3
1:A:57:ASP:C	1:A:58:ILE:CG1	0.43	2.91	17	1
1:A:19:ILE:HB	1:A:44:LYS:O	0.43	2.12	19	2
1:A:112:GLN:OE1	1:A:120:TYR:CE1	0.43	2.71	20	1
1:A:90:GLN:HB2	1:A:95:HIS:CG	0.43	2.48	27	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:116:PHE:HD2	0.43	1.73	22	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:120:TYR:CB	0.43	3.01	23	1
1:A:62:TYR:N	1:A:62:TYR:HD1	0.43	2.10	22	4
1:A:90:GLN:C	1:A:92:GLY:N	0.43	2.77	6	5
1:A:43:THR:C	1:A:44:LYS:HG2	0.43	2.38	11	1
1:A:22:LYS:HE3	1:A:80:SER:CA	0.43	2.39	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:CD2	1:A:94:LEU:N	0.43	2.82	13	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:41:LYS:CG	0.43	2.44	14	1
1:A:39:GLU:OE1	1:A:59:ARG:O	0.43	2.36	14	1
1:A:15:SER:HA	1:A:88:LYS:CG	0.43	2.44	23	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:97:THR:HB	0.43	2.53	3	1
1:A:20:ARG:HG2	1:A:46:TYR:CZ	0.43	2.48	7	1
1:A:17:LEU:HA	1:A:47:LYS:O	0.43	2.14	13	1
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:HG3	0.43	1.90	15	1
1:A:120:TYR:CE1	1:A:126:GLU:HG3	0.43	2.49	28	1
1:A:33:THR:HB	1:A:35:TYR:O	0.43	2.14	3	1
1:A:18:VAL:C	1:A:19:ILE:CG2	0.43	2.91	20	4
1:A:69:VAL:CG2	1:A:70:CYS:N	0.43	2.81	4	1
1:A:66:MET:HG3	1:A:69:VAL:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:CG	0.43	2.38	25	1
1:A:66:MET:HB3	1:A:69:VAL:HB	0.43	1.90	10	3
1:A:18:VAL:HG22	1:A:86:ALA:HA	0.43	1.91	11	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:101:PHE:CD1	0.42	2.48	11	2
1:A:114:ARG:CD	1:A:118:LYS:HG3	0.42	2.44	13	1
1:A:115:GLY:C	1:A:120:TYR:CD1	0.42	2.96	17	1
1:A:12:PHE:HE1	1:A:18:VAL:HG11	0.42	1.74	21	2
1:A:84:LEU:N	1:A:103:ALA:O	0.42	2.52	18	1
1:A:114:ARG:CD	1:A:118:LYS:HD3	0.42	2.44	19	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:CYS:C	0.42	2.62	19	1
1:A:19:ILE:HD13	1:A:19:ILE:N	0.42	2.29	20	1
1:A:64:PRO:CB	1:A:69:VAL:CG2	0.42	2.97	20	1
1:A:120:TYR:OH	1:A:126:GLU:CB	0.42	2.66	20	1
1:A:97:THR:C	1:A:99:CYS:H	0.42	2.21	27	2
1:A:9:GLN:CG	1:A:10:THR:N	0.42	2.80	8	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:120:TYR:CD2	0.42	3.01	28	2
1:A:110:LEU:HA	1:A:113:ARG:HB2	0.42	1.90	12	1
1:A:23:PHE:CB	1:A:74:HIS:NE2	0.42	2.82	13	1
1:A:92:GLY:O	1:A:93:LEU:HD13	0.42	2.14	14	1
1:A:23:PHE:CE2	1:A:72:TYR:CZ	0.42	3.08	18	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:116:PHE:CD1	0.42	3.01	23	1
1:A:64:PRO:HG2	1:A:69:VAL:HG21	0.42	1.91	1	1
1:A:19:ILE:HD13	1:A:42:MET:SD	0.42	2.54	7	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:HB3	0.42	1.74	7	1
1:A:95:HIS:O	1:A:96:ILE:HD13	0.42	2.13	9	1
1:A:9:GLN:CB	1:A:124:CYS:O	0.42	2.67	11	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:58:ILE:CG1	0.42	2.95	11	2
1:A:8:PRO:HD2	1:A:126:GLU:CD	0.42	2.39	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LYS:HE3	1:A:82:GLU:HG3	0.42	1.91	18	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:66:MET:HG2	0.42	2.44	22	1
1:A:29:VAL:HG22	1:A:36:GLN:OE1	0.42	2.14	24	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:10:THR:HB	0.42	1.90	25	1
1:A:97:THR:C	1:A:99:CYS:N	0.42	2.78	28	1
1:A:72:TYR:CD1	1:A:96:ILE:HG12	0.42	2.49	29	1
1:A:73:PHE:H	1:A:98:THR:HG22	0.42	1.74	4	1
1:A:28:GLU:CD	1:A:37:ARG:HG3	0.42	2.38	7	1
1:A:76:SER:C	1:A:78:ASN:H	0.42	2.22	10	1
1:A:11:ALA:HB1	1:A:101:PHE:HB3	0.42	1.92	15	1
1:A:97:THR:O	1:A:100:SER:HB2	0.42	2.14	16	2
1:A:8:PRO:HG2	1:A:126:GLU:CG	0.42	2.44	25	1
1:A:9:GLN:HB3	1:A:125:GLU:N	0.42	2.29	25	1
1:A:20:ARG:HG3	1:A:43:THR:HG1	0.42	1.73	1	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:62:TYR:CZ	0.42	2.87	7	1
1:A:62:TYR:HB2	1:A:95:HIS:CD2	0.42	2.50	7	2
1:A:109:SER:C	1:A:113:ARG:HG3	0.42	2.39	14	1
1:A:9:GLN:CB	1:A:126:GLU:HB2	0.42	2.44	25	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:89:LEU:CD1	0.42	2.44	27	1
1:A:116:PHE:CG	1:A:120:TYR:HD2	0.42	2.32	28	1
1:A:20:ARG:C	1:A:43:THR:HG1	0.42	2.21	1	1
1:A:90:GLN:O	1:A:91:ASP:C	0.42	2.63	26	4
1:A:20:ARG:CA	1:A:83:PHE:O	0.42	2.66	6	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HD21	0.42	1.90	7	1
1:A:115:GLY:C	1:A:120:TYR:CD2	0.42	2.97	26	3
1:A:39:GLU:OE2	1:A:60:PHE:CZ	0.42	2.73	24	2
1:A:114:ARG:O	1:A:117:THR:CG2	0.42	2.57	19	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:120:TYR:HE1	0.42	1.98	20	1
1:A:26:THR:CB	1:A:27:PRO:HD2	0.42	2.44	29	1
1:A:37:ARG:CZ	1:A:62:TYR:CD2	0.42	3.02	1	1
1:A:27:PRO:CG	1:A:38:TYR:CE1	0.42	3.02	3	1
1:A:63:THR:CB	1:A:96:ILE:O	0.42	2.67	11	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:120:TYR:HE1	0.42	2.23	20	1
1:A:35:TYR:C	1:A:65:ALA:HB2	0.42	2.39	6	1
1:A:84:LEU:HD23	1:A:105:TRP:CZ3	0.42	2.50	10	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:89:LEU:CB	0.42	2.98	18	1
1:A:109:SER:CB	1:A:112:GLN:HG3	0.42	2.45	19	1
1:A:16:ASP:C	1:A:17:LEU:HG	0.42	2.39	23	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:88:LYS:HG2	0.42	2.39	25	1
1:A:23:PHE:CE2	1:A:72:TYR:HE2	0.42	2.32	25	1
1:A:114:ARG:HD2	1:A:119:THR:HG1	0.42	1.74	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HG12	0.42	1.88	29	1
1:A:19:ILE:HG13	1:A:58:ILE:HG13	0.42	1.90	29	1
1:A:9:GLN:CA	1:A:124:CYS:O	0.42	2.67	4	3
1:A:79:ARG:H	1:A:79:ARG:CD	0.42	2.21	11	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD2	0.42	2.83	14	1
1:A:20:ARG:HB2	1:A:82:GLU:OE2	0.42	2.14	19	1
1:A:70:CYS:HA	1:A:98:THR:OG1	0.42	2.15	19	1
1:A:20:ARG:NH2	1:A:82:GLU:HB2	0.42	2.30	5	1
1:A:48:GLY:O	1:A:50:GLN:N	0.42	2.52	5	1
1:A:20:ARG:HD3	1:A:46:TYR:CZ	0.42	2.50	8	1
1:A:66:MET:HG2	1:A:69:VAL:HB	0.42	1.92	18	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:65:ALA:CB	0.42	2.68	22	1
1:A:17:LEU:HG	1:A:48:GLY:HA3	0.42	1.91	26	1
1:A:90:GLN:CB	1:A:95:HIS:CD2	0.42	3.03	27	1
1:A:19:ILE:HG22	1:A:45:MET:HB2	0.42	1.91	28	1
1:A:39:GLU:HA	1:A:60:PHE:CD2	0.41	2.50	1	1
1:A:108:LEU:HB3	1:A:112:GLN:CD	0.41	2.40	18	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:120:TYR:CE1	0.41	2.87	20	1
1:A:105:TRP:CZ3	1:A:108:LEU:HD22	0.41	2.50	3	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:58:ILE:CD1	0.41	2.68	6	1
1:A:19:ILE:HD13	1:A:19:ILE:H	0.41	1.75	14	1
1:A:67:GLU:O	1:A:69:VAL:N	0.41	2.53	16	1
1:A:105:TRP:CA	1:A:108:LEU:HD13	0.41	2.45	21	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:65:ALA:HB2	0.41	1.91	22	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:79:ARG:CD	0.41	2.45	28	1
1:A:40:ILE:HD13	1:A:59:ARG:O	0.41	2.14	28	1
1:A:18:VAL:O	1:A:46:TYR:N	0.41	2.52	22	2
1:A:72:TYR:CE1	1:A:74:HIS:HB2	0.41	2.50	10	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:81:GLU:HB2	0.41	2.29	17	2
1:A:45:MET:HG2	1:A:58:ILE:HD12	0.41	1.90	13	1
1:A:46:TYR:HD2	1:A:117:THR:N	0.41	2.13	13	1
1:A:72:TYR:HB2	1:A:96:ILE:HG12	0.41	1.91	23	1
1:A:20:ARG:C	1:A:43:THR:OG1	0.41	2.64	2	1
1:A:74:HIS:O	1:A:74:HIS:CD2	0.41	2.74	8	1
1:A:20:ARG:NH2	1:A:46:TYR:CD2	0.41	2.88	20	1
1:A:18:VAL:HB	1:A:47:LYS:CB	0.41	2.44	22	1
1:A:43:THR:OG1	1:A:82:GLU:OE1	0.41	2.38	27	1
1:A:126:GLU:N	1:A:126:GLU:OE1	0.41	2.53	27	1
1:A:72:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG1	0.41	2.69	4	1
1:A:23:PHE:CD2	1:A:74:HIS:CE1	0.41	3.09	5	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:88:LYS:HD3	0.41	2.16	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ILE:HD13	1:A:61:VAL:HG12	0.41	1.92	18	1
1:A:8:PRO:HB2	1:A:120:TYR:CE2	0.41	2.50	20	1
1:A:70:CYS:O	1:A:71:GLY:C	0.41	2.63	25	2
1:A:116:PHE:CD2	1:A:120:TYR:CE2	0.41	3.09	28	1
1:A:18:VAL:O	1:A:19:ILE:CG2	0.41	2.68	13	2
1:A:44:LYS:HE3	1:A:46:TYR:OH	0.41	2.15	5	1
1:A:99:CYS:O	1:A:99:CYS:SG	0.41	2.79	8	2
1:A:16:ASP:CG	1:A:88:LYS:HG3	0.41	2.40	11	1
1:A:9:GLN:O	1:A:13:CYS:N	0.41	2.50	19	1
1:A:23:PHE:CG	1:A:74:HIS:NE2	0.41	2.88	20	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:120:TYR:CD1	0.41	3.09	22	1
1:A:96:ILE:HD12	1:A:96:ILE:H	0.41	1.74	2	1
1:A:35:TYR:CD1	1:A:35:TYR:N	0.41	2.89	3	1
1:A:19:ILE:HA	1:A:46:TYR:CD1	0.41	2.47	12	1
1:A:46:TYR:O	1:A:47:LYS:HB2	0.41	2.15	18	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:112:GLN:HE22	0.41	1.75	18	1
1:A:23:PHE:CZ	1:A:72:TYR:HE2	0.41	2.34	22	1
1:A:45:MET:CE	1:A:57:ASP:H	0.41	2.28	23	1
1:A:62:TYR:OH	1:A:93:LEU:HD12	0.41	2.15	28	1
1:A:108:LEU:HB2	1:A:113:ARG:HD2	0.41	1.93	2	1
1:A:46:TYR:CE1	1:A:117:THR:OG1	0.41	2.71	5	1
1:A:120:TYR:C	1:A:124:CYS:HB3	0.41	2.40	11	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:34:LEU:N	0.41	2.31	25	1
1:A:105:TRP:NE1	1:A:113:ARG:CG	0.41	2.83	28	1
1:A:28:GLU:O	1:A:36:GLN:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:61:VAL:HG13	1:A:94:LEU:HD23	0.41	1.92	2	1
1:A:90:GLN:CB	1:A:95:HIS:NE2	0.41	2.84	11	2
1:A:23:PHE:HZ	1:A:72:TYR:OH	0.41	1.98	4	1
1:A:78:ASN:HB3	1:A:81:GLU:CB	0.41	2.46	7	1
1:A:37:ARG:HD2	1:A:62:TYR:CD2	0.41	2.51	12	1
1:A:109:SER:CB	1:A:112:GLN:HB3	0.41	2.45	12	1
1:A:114:ARG:CZ	1:A:118:LYS:HE2	0.41	2.46	12	1
1:A:66:MET:HG3	1:A:69:VAL:HB	0.41	1.93	13	2
1:A:19:ILE:CB	1:A:45:MET:HA	0.41	2.46	14	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:126:GLU:HB3	0.41	1.91	17	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:PRO:CD	0.41	2.39	21	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:65:ALA:HB2	0.41	2.16	22	1
1:A:23:PHE:HE1	1:A:83:PHE:CG	0.41	2.33	24	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:120:TYR:HA	0.41	2.31	25	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:71:GLY:H	0.41	1.76	25	1
1:A:120:TYR:CE1	1:A:126:GLU:CG	0.41	3.04	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLU:HB2	1:A:37:ARG:CZ	0.41	2.46	29	1
1:A:88:LYS:CD	1:A:88:LYS:C	0.41	2.93	29	1
1:A:115:GLY:CA	1:A:119:THR:CG2	0.41	2.99	3	1
1:A:113:ARG:CZ	1:A:113:ARG:N	0.41	2.84	8	1
1:A:109:SER:HB2	1:A:112:GLN:CB	0.41	2.46	9	2
1:A:35:TYR:CA	1:A:65:ALA:N	0.41	2.83	11	1
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:CD2	0.41	2.27	12	1
1:A:22:LYS:HG3	1:A:81:GLU:C	0.41	2.40	16	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:36:GLN:CA	0.41	2.77	22	1
1:A:17:LEU:C	1:A:87:GLY:O	0.41	2.64	25	1
1:A:90:GLN:NE2	1:A:95:HIS:CE1	0.40	2.89	1	1
1:A:30:ASN:C	1:A:33:THR:HG22	0.40	2.41	6	1
1:A:34:LEU:HD21	1:A:66:MET:HE2	0.40	1.92	14	1
1:A:120:TYR:CE2	1:A:126:GLU:OE2	0.40	2.73	21	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:117:THR:CA	0.40	3.04	24	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:116:PHE:CD1	0.40	3.09	28	1
1:A:15:SER:C	1:A:47:LYS:HZ1	0.40	2.21	7	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:121:THR:N	0.40	2.90	8	1
1:A:46:TYR:N	1:A:46:TYR:CD1	0.40	2.89	9	1
1:A:23:PHE:HZ	1:A:72:TYR:CE2	0.40	2.35	11	1
1:A:108:LEU:CG	1:A:112:GLN:HE22	0.40	2.29	18	1
1:A:15:SER:O	1:A:47:LYS:HE2	0.40	2.16	19	1
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG23	0.40	2.16	23	1
1:A:9:GLN:HB3	1:A:126:GLU:OE1	0.40	2.15	26	1
1:A:17:LEU:HB2	1:A:94:LEU:CD1	0.40	2.46	17	1
1:A:109:SER:O	1:A:113:ARG:HD3	0.40	2.16	18	1
1:A:120:TYR:CE2	1:A:125:GLU:OE2	0.40	2.75	19	1
1:A:118:LYS:HE3	1:A:119:THR:CG2	0.40	2.47	23	1
1:A:20:ARG:CD	1:A:46:TYR:HE1	0.40	2.29	26	1
1:A:39:GLU:HG3	1:A:60:PHE:CD1	0.40	2.52	3	1
1:A:24:VAL:HG23	1:A:39:GLU:O	0.40	2.15	11	1
1:A:22:LYS:HB3	1:A:79:ARG:O	0.40	2.16	15	1
1:A:6:PRO:HG3	1:A:99:CYS:HA	0.40	1.93	16	1
1:A:20:ARG:CG	1:A:43:THR:HB	0.40	2.41	17	1
1:A:108:LEU:CB	1:A:112:GLN:OE1	0.40	2.69	18	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:60:PHE:HA	0.40	2.46	28	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	0.40	1.70	3	1
1:A:65:ALA:C	1:A:66:MET:HG3	0.40	2.42	6	1
1:A:77:HIS:CD2	1:A:77:HIS:N	0.40	2.90	10	1
1:A:115:GLY:C	1:A:120:TYR:CE2	0.40	3.00	10	1
1:A:7:HIS:HB3	1:A:9:GLN:HE21	0.40	1.77	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TYR:HA	1:A:124:CYS:N	0.40	2.31	23	1
1:A:114:ARG:NH1	1:A:114:ARG:HG2	0.40	2.32	24	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	118/126 (94%)	89±4 (75±3%)	23±3 (20±2%)	5±1 (4±1%)	3	27
All	All	3400/3654 (93%)	2579 (76%)	672 (20%)	149 (4%)	3	27

All 19 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	124	CYS	22
1	A	47	LYS	20
1	A	106	ASN	19
1	A	110	LEU	18
1	A	5	PRO	15
1	A	58	ILE	8
1	A	71	GLY	8
1	A	125	GLU	8
1	A	91	ASP	8
1	A	69	VAL	5
1	A	67	GLU	4
1	A	48	GLY	3
1	A	57	ASP	3
1	A	77	HIS	2
1	A	25	GLY	2
1	A	73	PHE	1
1	A	49	PHE	1
1	A	24	VAL	1
1	A	68	SER	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	105/109 (96%)	69±3 (66±3%)	36±3 (34±3%)	1	10
All	All	3045/3161 (96%)	1996 (66%)	1049 (34%)	1	10

All 81 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	61	VAL	29
1	A	96	ILE	29
1	A	110	LEU	29
1	A	118	LYS	27
1	A	15	SER	26
1	A	58	ILE	26
1	A	121	THR	26
1	A	32	THR	25
1	A	33	THR	25
1	A	10	THR	24
1	A	114	ARG	24
1	A	125	GLU	24
1	A	41	LYS	23
1	A	47	LYS	22
1	A	117	THR	21
1	A	62	TYR	20
1	A	119	THR	20
1	A	113	ARG	20
1	A	70	CYS	19
1	A	45	MET	19
1	A	100	SER	19
1	A	20	ARG	18
1	A	9	GLN	17
1	A	22	LYS	17
1	A	40	ILE	17
1	A	50	GLN	17
1	A	63	THR	17
1	A	66	MET	17
1	A	75	ARG	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	19	ILE	16
1	A	79	ARG	16
1	A	3	CYS	15
1	A	17	LEU	15
1	A	44	LYS	15
1	A	126	GLU	15
1	A	24	VAL	14
1	A	82	GLU	14
1	A	59	ARG	13
1	A	42	MET	13
1	A	88	LYS	13
1	A	109	SER	13
1	A	28	GLU	12
1	A	35	TYR	12
1	A	13	CYS	12
1	A	37	ARG	12
1	A	90	GLN	11
1	A	98	THR	11
1	A	16	ASP	11
1	A	57	ASP	10
1	A	67	GLU	10
1	A	77	HIS	10
1	A	108	LEU	9
1	A	26	THR	9
1	A	14	ASN	7
1	A	43	THR	7
1	A	93	LEU	7
1	A	29	VAL	7
1	A	7	HIS	7
1	A	91	ASP	7
1	A	78	ASN	7
1	A	76	SER	6
1	A	46	TYR	5
1	A	99	CYS	5
1	A	124	CYS	5
1	A	80	SER	4
1	A	34	LEU	4
1	A	122	VAL	4
1	A	4	VAL	4
1	A	38	TYR	4
1	A	39	GLU	3
1	A	68	SER	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	102	VAL	3
1	A	112	GLN	3
1	A	81	GLU	2
1	A	107	SER	2
1	A	97	THR	2
1	A	84	LEU	2
1	A	36	GLN	1
1	A	120	TYR	1
1	A	69	VAL	1
1	A	94	LEU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 88% for the well-defined parts and 88% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *rcsb009726-cs-deposited.any*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1506
Number of shifts mapped to atoms	1506
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	122	0.23 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	113	0.20 ± 0.26	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	113	0.27 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	114	-0.14 ± 0.35	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 88%, i.e. 1444 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1641. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	564/590 (96%)	232/239 (97%)	223/238 (94%)	109/113 (96%)
Sidechain	744/873 (85%)	507/568 (89%)	230/268 (86%)	7/37 (19%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	136/178 (76%)	70/86 (81%)	65/83 (78%)	1/9 (11%)
Overall	1444/1641 (88%)	809/893 (91%)	518/589 (88%)	117/159 (74%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 1506 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1711. 0 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	594/626 (95%)	245/254 (96%)	235/252 (93%)	114/120 (95%)
Sidechain	776/907 (86%)	530/591 (90%)	239/279 (86%)	7/37 (19%)
Aromatic	136/178 (76%)	70/86 (81%)	65/83 (78%)	1/9 (11%)
Overall	1506/1711 (88%)	845/931 (91%)	539/614 (88%)	122/166 (73%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	20	ARG	HD2	1.55	1.97 – 4.26	-6.8
1	A	37	ARG	HD2	1.67	1.97 – 4.26	-6.3

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:

