



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 02:26 AM UTC

PDB ID : 2EU0 / pdb_00002eu0
Title : The NMR ensemble structure of the Itk SH2 domain bound to a phosphopeptide
Authors : Sundd, M.; Pletneva, E.V.; Fulton, D.B.; Andreotti, A.H.
Deposited on : 2005-10-27

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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
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

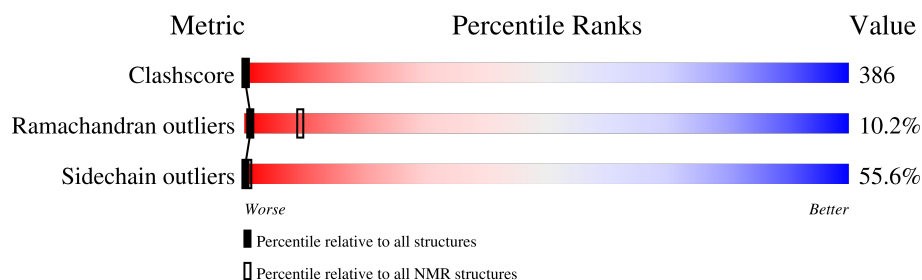
1 Overall quality at a glance

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	109	
2	B	8	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:38, A:45-A:53, A:59-A:69, A:75-A:111 (91)	0.73	15

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

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

The models can be grouped into 5 clusters and 6 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	10, 12, 13, 15
2	2, 3, 8
3	1, 6, 7
4	16, 19
5	5, 18
Single-model clusters	4; 9; 11; 14; 17; 20

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1857 atoms, of which 915 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Tyrosine-protein kinase ITK/TSK.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	109	Total	C	H	N	O	S	0
			1761	567	875	150	166	3	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	111	GLY	-	cloning artifact	UNP Q03526

- Molecule 2 is a protein called Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	8	Total	C	H	N	O	P	1
			96	33	40	7	15	1	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

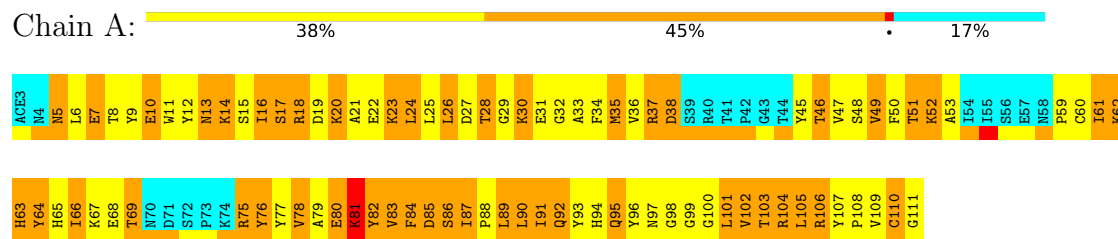
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	121	PTR	TYR	modified residue	UNP Q60787

4 Residue-property plots

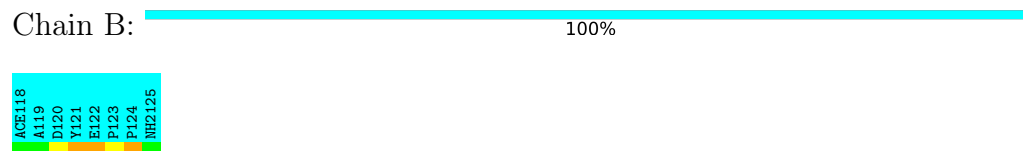
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

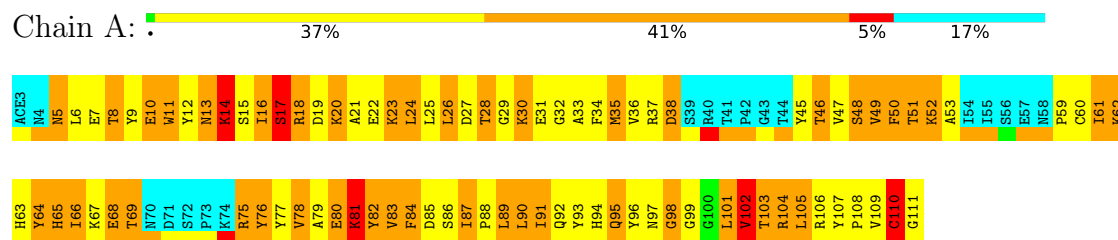


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

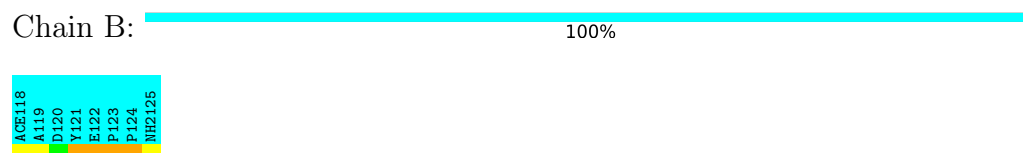
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

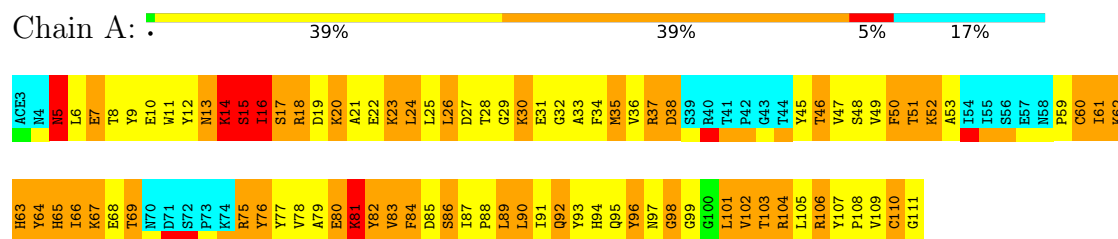


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

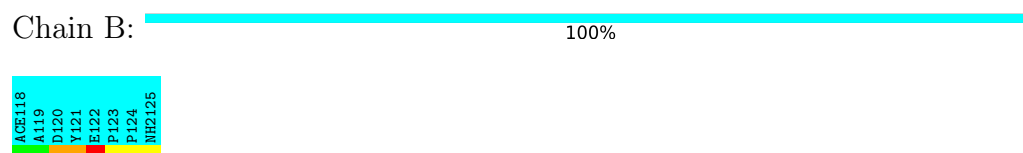


4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

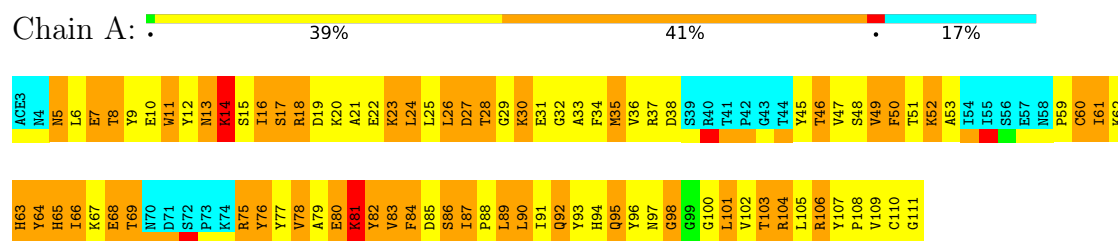


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

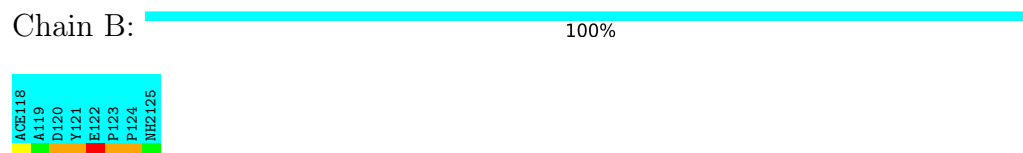


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

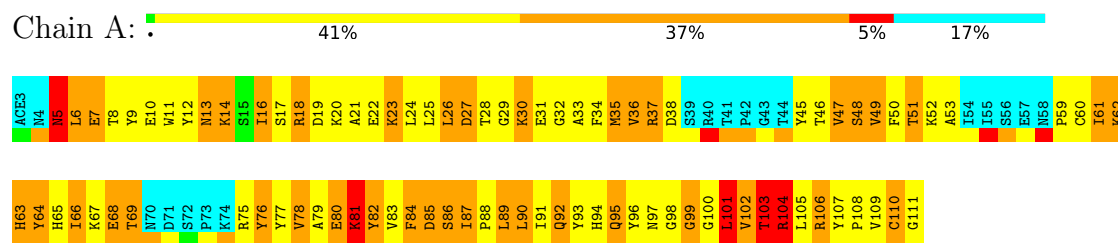


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

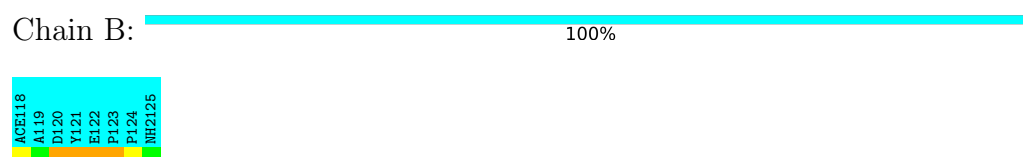


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

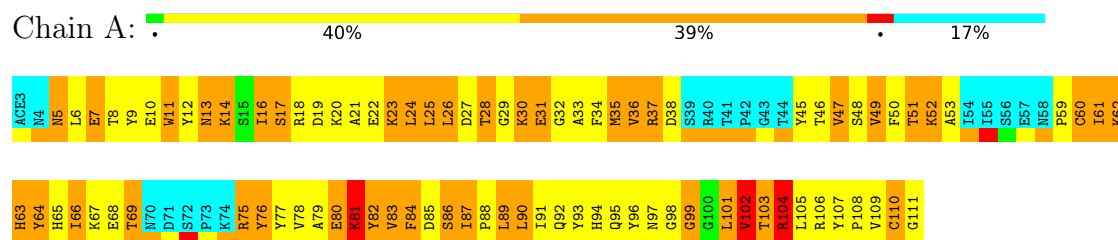


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

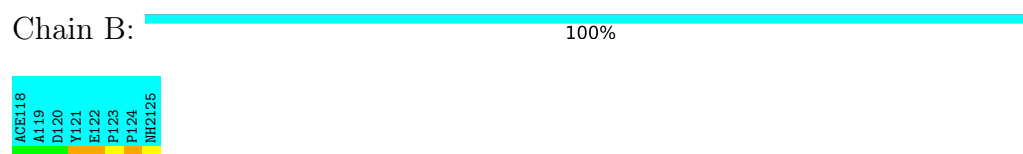


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

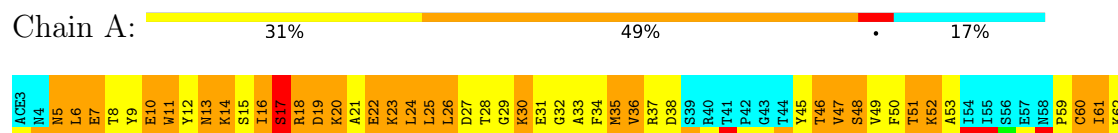


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment



4.2.6 Score per residue for model 6

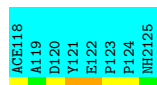
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK





- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%



4.2.7 Score per residue for model 7

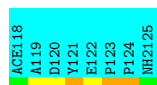
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 39% 42% 17%



- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%



4.2.8 Score per residue for model 8

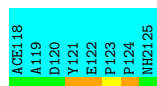
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 32% 48% 17%



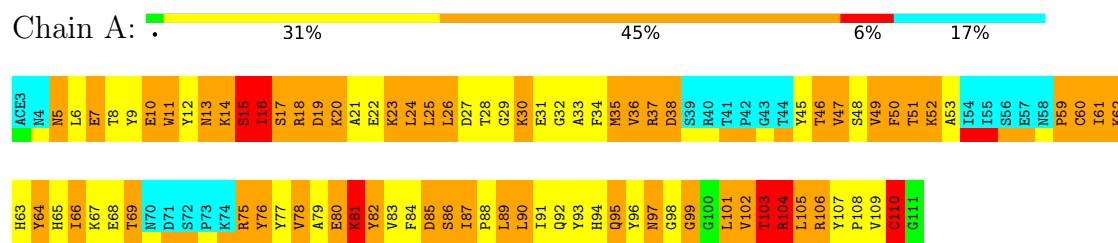
- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%

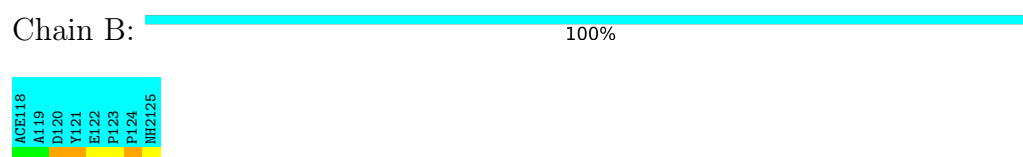


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

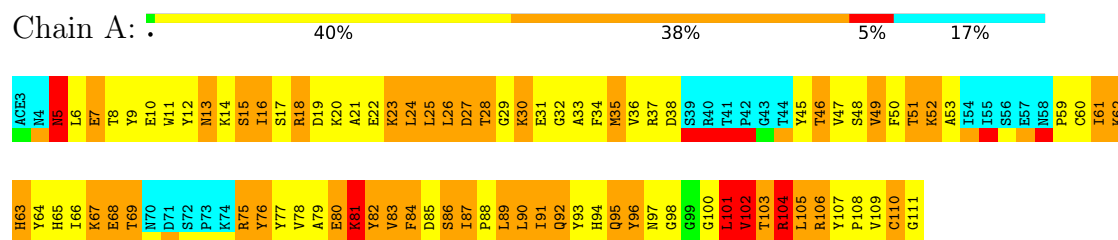


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

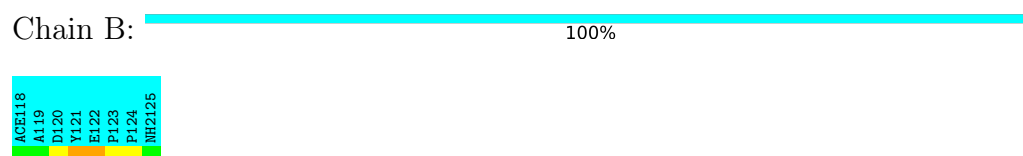


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

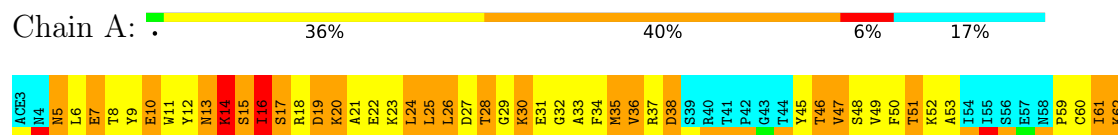


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment



4.2.11 Score per residue for model 11

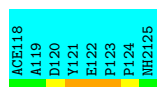
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK





- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

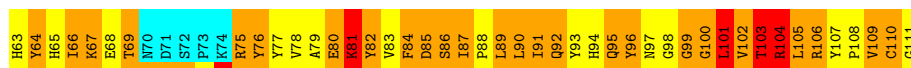
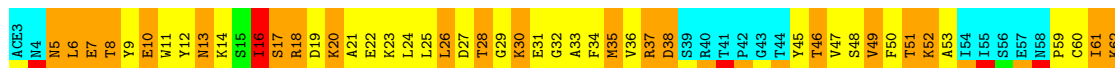
Chain B: 100%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 36% 42% 5% 17%



- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

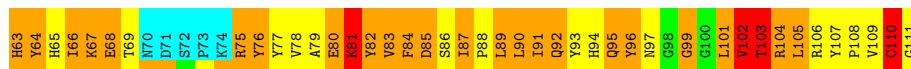
Chain B: 100%



4.2.13 Score per residue for model 13

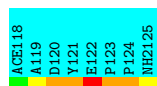
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 35% 39% 6% 17%



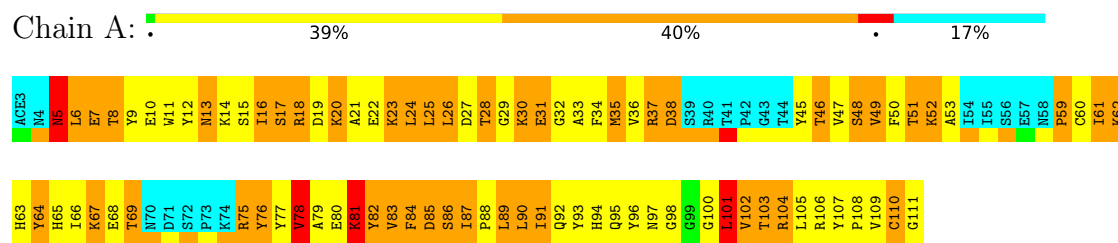
- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%

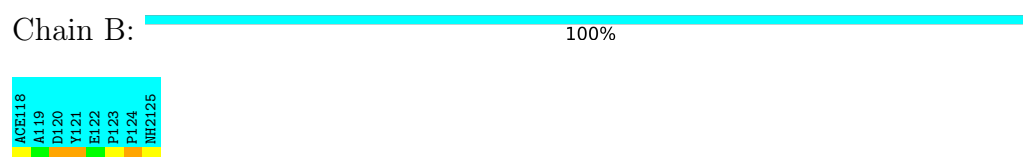


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

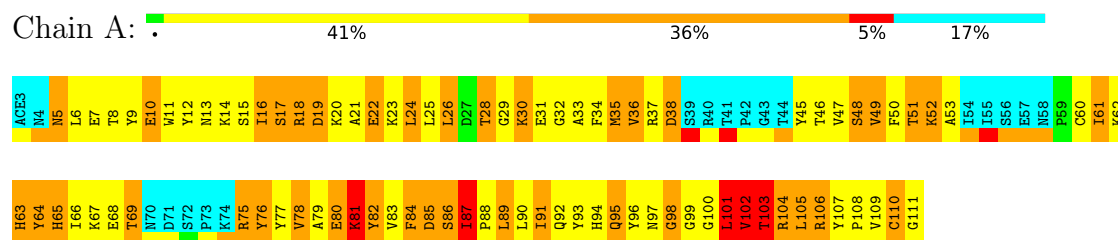


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

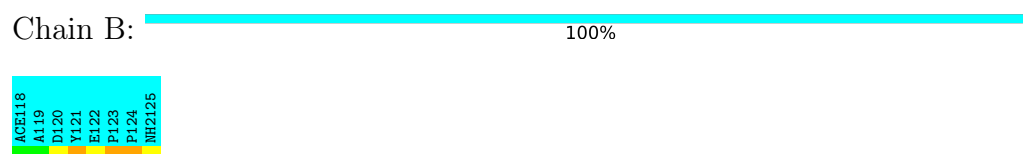


4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

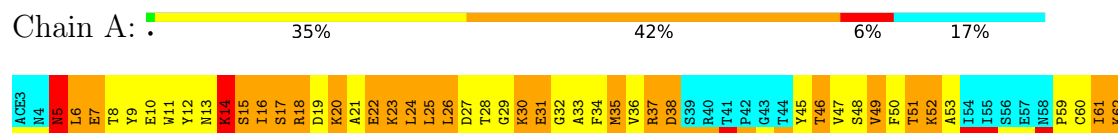


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK





- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 37% 41% 5% 17%



- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%



4.2.18 Score per residue for model 18

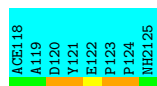
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: 42% 35% 5% 17%



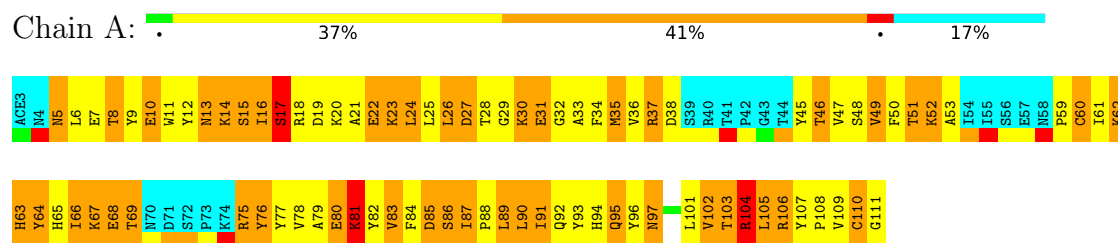
- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

Chain B: 100%

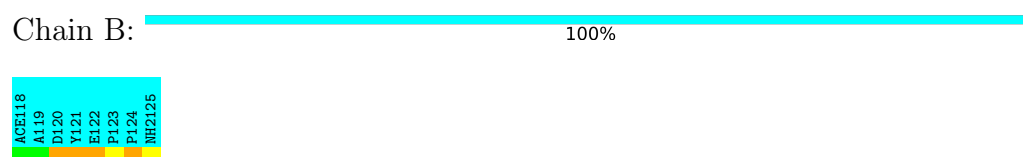


4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

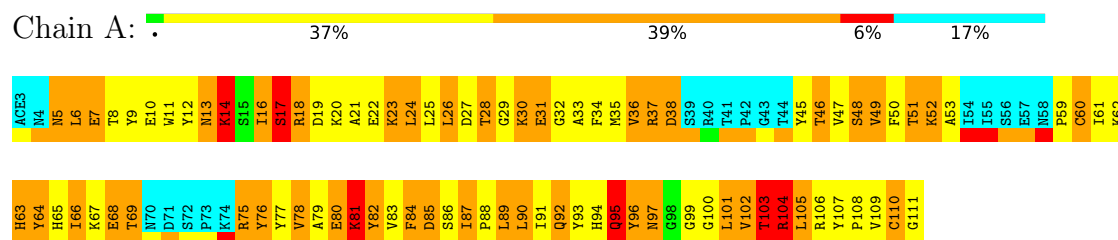


- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment

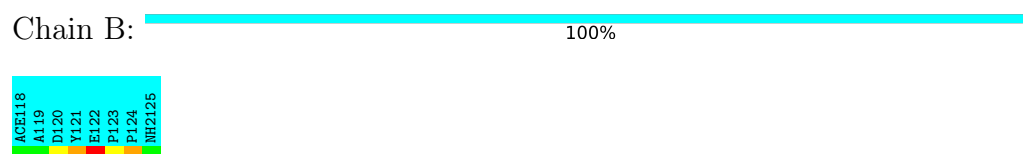


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



- Molecule 2: Lymphocyte cytosolic protein 2 phosphopeptide fragment



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *Distance geometry simulated annealing was used for refinement.*

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations.*

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: PTR, ACE, NH2

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	0.37±0.02	0±0/776 (0.0± 0.0%)	0.77±0.02	0±0/1048 (0.0± 0.0%)
All	All	0.37	0/15520 (0.0%)	0.77	2/20960 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	87	ILE	CB-CA-C	-5.42	108.60	114.35	18	2

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	756	750	749	580±28
2	B	0	0	0	0±0
All	All	15120	15000	14974	11605

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 386.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:HG23	1.29	1.56	5	4
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CZ3	1.28	1.63	6	3
1:A:6:LEU:HD11	1:A:11:TRP:CZ3	1.27	1.65	3	11
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:CD1	1.26	1.58	7	14
1:A:66:ILE:HA	1:A:77:TYR:O	1.26	1.25	14	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:LEU:N	1.24	1.43	16	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:HG22	1.24	1.63	3	13
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD13	1.23	1.68	5	14
1:A:26:LEU:HD23	1:A:27:ASP:N	1.23	1.44	20	8
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD21	1.22	1.63	10	2
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG11	1.22	1.63	13	9
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:HD11	1.21	1.66	14	13
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD11	1.21	1.66	8	16
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD22	1.20	1.37	20	7
1:A:25:LEU:HD13	1:A:35:MET:CE	1.19	1.67	16	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:12:TYR:CD2	1.18	1.74	19	8
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:CE1	1.18	1.72	5	9
1:A:6:LEU:HD23	1:A:12:TYR:CE2	1.18	1.73	5	8
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CZ	1.18	1.73	5	12
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD13	1.18	1.67	16	2
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD13	1.17	1.74	13	10
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD12	1.17	1.73	17	11
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:CE	1.17	1.70	1	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE2	1.16	1.70	16	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CG2	1.16	1.71	11	4
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:SD	1.15	1.81	19	4
1:A:94:HIS:ND1	1:A:101:LEU:HD11	1.15	1.57	18	2
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:HG22	1.15	1.16	20	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD23	1.15	1.41	11	6
1:A:78:VAL:HG23	1:A:94:HIS:CE1	1.15	1.76	8	8
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:C	1.15	1.66	9	15
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG2	1.15	1.71	13	9
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:ASP:N	1.15	1.56	6	3
1:A:6:LEU:C	1:A:6:LEU:HD12	1.15	1.66	6	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:35:MET:SD	1.15	1.81	10	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ASP:N	1.15	1.57	11	1
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:CD1	1.14	1.71	14	10
1:A:46:THR:HG23	1:A:64:TYR:C	1.14	1.66	18	2
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD13	1.14	1.76	12	19
1:A:34:PHE:HB3	1:A:49:VAL:HG13	1.13	1.19	9	12
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HD22	1.13	1.77	8	6
1:A:49:VAL:HG11	1:A:105:LEU:HD22	1.13	1.19	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD12	1.13	1.73	1	3
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD12	1.13	1.14	16	14
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:O	1.13	1.44	18	13
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG12	1.13	1.79	8	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD23	1.13	1.79	7	3
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD11	1.12	1.15	20	11
1:A:87:ILE:O	1:A:90:LEU:HD23	1.12	1.41	13	19
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD23	1.12	1.43	20	6
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD22	1.12	1.79	6	12
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:NZ	1.12	1.58	3	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:HG13	1.12	1.83	1	2
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:CG2	1.12	1.73	10	13
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HD11	1.12	1.74	7	7
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ASP:N	1.11	1.59	1	3
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:CG1	1.11	1.73	19	12
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG21	1.11	1.16	13	8
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HG22	1.11	1.13	16	12
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:N	1.11	1.61	7	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HD13	1.10	1.80	7	4
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE3	1.10	1.74	9	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:75:ARG:NE	1.10	1.45	20	3
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG23	1.10	1.81	11	3
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:CG1	1.10	1.77	9	6
1:A:81:LYS:C	1:A:82:TYR:CD1	1.09	2.30	16	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD13	1.09	1.18	18	8
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:HG23	1.09	1.22	2	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG13	1.09	1.77	4	5
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HG13	1.09	1.25	17	5
1:A:89:LEU:HD23	1:A:90:LEU:N	1.09	1.60	20	2
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HD3	1.09	1.46	16	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:HD2	1.09	1.12	12	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:94:HIS:CE1	1.09	1.81	3	6
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD22	1.08	1.83	12	8
1:A:75:ARG:HA	1:A:75:ARG:CZ	1.08	1.76	20	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HG21	1.08	1.23	11	8
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD11	1.08	1.18	14	4
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CB	1.08	1.78	10	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HD12	1.08	1.48	11	1
1:A:5:ASN:O	1:A:8:THR:HG22	1.07	1.48	13	12
1:A:21:ALA:O	1:A:35:MET:HE3	1.07	1.45	16	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:83:VAL:CG1	1.07	1.77	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:CG	1.07	1.79	7	11
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD23	1.07	1.21	19	2
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:CG2	1.07	1.80	20	5
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG13	1.06	1.27	18	9
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD22	1.06	1.49	16	6
1:A:76:TYR:CE1	1:A:85:ASP:HA	1.06	1.84	13	4
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HG12	1.06	1.23	5	6
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:HD13	1.06	1.84	7	3
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE1	1.06	1.17	20	2
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:HA	1.06	1.48	19	9
1:A:79:ALA:HB3	1:A:82:TYR:CD1	1.06	1.85	18	19
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:HD11	1.06	1.28	14	16
1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:LEU:N	1.06	1.65	17	17
1:A:78:VAL:HG13	1:A:90:LEU:HD11	1.06	1.12	5	9
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CD	1.06	1.62	20	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HD12	1.06	1.80	11	4
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:N	1.05	1.88	9	20
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:CB	1.05	1.79	3	7
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD13	1.05	1.51	18	11
1:A:25:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HD12	1.05	1.13	1	2
1:A:75:ARG:O	1:A:83:VAL:HG12	1.05	1.50	13	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:90:LEU:HD11	1.05	1.82	14	6
1:A:34:PHE:C	1:A:35:MET:HE2	1.05	1.75	9	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG12	1.04	1.50	19	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:OH	1.04	1.49	7	7
1:A:51:THR:HG23	1:A:60:CYS:O	1.04	1.53	19	3
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HG2	1.04	1.52	7	4
1:A:75:ARG:CZ	1:A:83:VAL:HG21	1.04	1.82	12	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:33:ALA:HB2	1.04	1.82	1	5
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HD13	1.04	1.76	10	6
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:CB	1.04	1.81	20	4
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:HG23	1.04	1.13	5	4
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:HD22	1.04	1.20	13	19
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD23	1.04	1.52	10	2
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD1	1.04	1.83	11	3
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CB	1.03	1.82	11	15
1:A:11:TRP:O	1:A:36:VAL:N	1.03	1.90	4	20
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:SD	1.03	1.93	14	4
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:HG12	1.03	1.77	13	1
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD13	1.03	1.86	6	15
1:A:34:PHE:C	1:A:35:MET:HE3	1.03	1.78	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:HG23	1.03	1.30	18	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:HG12	1.03	1.07	9	5
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:CA	1.03	1.82	6	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HB2	1.03	1.20	10	2
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD12	1.03	1.11	7	5
1:A:25:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE3	1.03	1.30	9	1
1:A:34:PHE:CB	1:A:49:VAL:HG12	1.03	1.82	11	8
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HD22	1.03	1.79	16	4
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:HB3	1.02	1.29	11	20
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:NE2	1.02	1.67	5	5
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD13	1.02	1.85	20	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD11	1.02	1.28	7	4
1:A:47:VAL:HG21	1:A:91:ILE:HD11	1.02	1.31	6	6
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:HD21	1.02	1.32	10	2
1:A:75:ARG:HA	1:A:83:VAL:CG1	1.02	1.83	16	2
1:A:34:PHE:HB3	1:A:49:VAL:HG12	1.02	1.11	11	8
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:CE	1.02	1.85	8	4
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:HB	1.01	1.85	18	7
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD12	1.01	1.69	7	2
1:A:66:ILE:CA	1:A:77:TYR:O	1.01	2.07	14	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CG2	1.01	2.43	17	19
1:A:30:LYS:HB3	1:A:33:ALA:HB2	1.01	1.25	1	2
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD12	1.01	1.86	2	11
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:O	1.01	1.92	8	10
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CG1	1.01	1.85	18	8
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HA	1.01	1.31	8	18
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG22	1.01	1.07	5	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:HG21	1.01	1.83	1	6
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:CG1	1.01	1.86	17	5
1:A:101:LEU:HD21	1:A:104:ARG:HA	1.01	1.31	14	1
1:A:34:PHE:HA	1:A:48:SER:O	1.00	1.56	4	20
1:A:25:LEU:HD22	1:A:35:MET:SD	1.00	1.96	6	2
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:HD22	1.00	1.56	20	3
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG11	1.00	1.30	15	10
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HD12	1.00	1.56	10	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:20:LYS:CB	1.00	1.87	9	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:6:LEU:HD22	1.00	1.72	17	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HB3	1.00	1.92	11	16
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD13	1.00	1.57	11	4
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE1	0.99	2.44	20	7
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CD2	0.99	2.09	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HD12	0.99	1.30	6	14
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HA	0.99	1.54	20	20
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:O	0.99	2.15	8	17
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:SD	0.99	1.97	12	5
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:NH2	0.99	1.73	16	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:45:TYR:CG	0.99	1.91	8	4
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CD	0.99	2.09	17	2
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HD13	0.99	1.34	16	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:6:LEU:O	0.99	1.56	6	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:61:ILE:CD1	0.98	1.87	1	2
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG21	0.98	1.34	5	7
1:A:94:HIS:HB3	1:A:101:LEU:HD21	0.98	1.33	7	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD12	0.98	1.58	14	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:OH	0.98	1.58	1	14
1:A:24:LEU:HD13	1:A:111:GLY:HA2	0.98	1.32	8	4
1:A:75:ARG:C	1:A:76:TYR:HD1	0.98	1.66	20	9
1:A:24:LEU:HD13	1:A:111:GLY:CA	0.98	1.88	8	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:102:VAL:HG12	0.98	1.73	13	2
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:CG	0.98	1.89	20	17
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG22	0.98	1.92	11	5
1:A:84:PHE:HB2	1:A:89:LEU:HD21	0.98	1.31	10	2
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG13	0.97	1.92	14	5
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG11	0.97	1.31	19	3
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG13	0.97	1.32	18	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:CG	0.97	2.48	12	12
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:HB2	0.97	1.34	20	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HG21	0.97	1.34	6	5
1:A:24:LEU:HD22	1:A:111:GLY:HA2	0.97	1.33	16	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:HB3	0.97	1.37	19	2
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE1	0.97	1.35	8	2
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD2	0.97	1.89	15	16
1:A:84:PHE:HB2	1:A:89:LEU:HD11	0.97	1.32	19	11
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:OG	0.97	1.59	3	2
1:A:36:VAL:CG2	1:A:47:VAL:HG23	0.97	1.89	6	3
1:A:75:ARG:C	1:A:75:ARG:NH1	0.97	2.23	20	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HG21	0.97	1.89	5	6
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:HG2	0.97	1.34	11	7
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:CD	0.97	1.89	12	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HD13	0.96	1.60	4	4
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD12	0.96	1.57	7	2
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:SD	0.96	2.00	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD23	0.96	1.86	7	5
1:A:25:LEU:HD11	1:A:50:PHE:CB	0.96	1.89	6	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD21	0.96	1.33	17	6
1:A:75:ARG:NE	1:A:75:ARG:CA	0.96	2.28	20	3
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HD2	0.96	1.60	20	3
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:O	0.96	1.61	18	17
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG22	0.96	1.91	17	5
1:A:79:ALA:HB1	1:A:82:TYR:CZ	0.95	1.95	11	1
1:A:75:ARG:O	1:A:83:VAL:CG1	0.95	2.13	13	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:50:PHE:HB2	0.95	1.38	6	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD22	0.95	1.97	11	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD22	0.95	1.61	17	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD22	0.95	1.34	1	5
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CD1	0.95	1.91	5	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HG11	0.95	1.34	12	6
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:NE2	0.95	2.00	18	7
1:A:79:ALA:HB1	1:A:82:TYR:CD1	0.95	1.97	8	16
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CD1	0.95	1.97	11	14
1:A:109:VAL:HG12	1:A:109:VAL:O	0.95	1.61	8	4
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD13	0.95	1.61	7	1
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:HG	0.94	1.34	20	19
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:N	0.94	1.99	10	11
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:C	0.94	1.86	19	4
1:A:24:LEU:HB2	1:A:35:MET:HE1	0.94	1.36	16	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:SER:N	0.94	1.75	12	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:O	0.94	1.60	6	16
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HD11	0.94	1.35	12	1
1:A:26:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD13	0.94	1.93	5	3
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HG21	0.94	1.92	16	5
1:A:77:TYR:HD1	1:A:83:VAL:HG13	0.94	1.21	13	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:85:ASP:HA	0.94	1.39	3	3
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CD	0.94	2.15	16	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CE1	0.93	2.51	5	12
1:A:76:TYR:CE2	1:A:87:ILE:HD12	0.93	1.98	10	3
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:CD1	0.93	2.50	1	19
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CD1	0.93	2.51	9	12
1:A:66:ILE:HD13	1:A:78:VAL:CG1	0.93	1.93	15	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HB	0.93	1.36	18	3
1:A:77:TYR:CZ	1:A:83:VAL:HG22	0.93	1.97	14	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HG21	0.93	1.98	17	18
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:HD22	0.93	1.87	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD12	0.93	1.40	8	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CA	0.93	1.93	8	13
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:N	0.93	1.78	18	5
1:A:78:VAL:HG12	1:A:90:LEU:HD11	0.93	1.38	3	4
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HG23	0.93	1.63	7	2
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD13	0.93	1.99	10	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:C	0.93	1.87	15	3
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:CG	0.93	2.52	14	7
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:N	0.93	1.79	1	4
1:A:24:LEU:HD11	1:A:111:GLY:CA	0.93	1.94	1	3
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:C	0.93	1.88	7	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:11:TRP:CH2	0.92	1.98	10	4
1:A:25:LEU:HA	1:A:109:VAL:HG11	0.92	1.41	5	2
1:A:51:THR:HG23	1:A:59:PRO:HB2	0.92	1.38	4	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG23	0.92	1.14	11	3
1:A:34:PHE:O	1:A:35:MET:HE2	0.92	1.63	9	2
1:A:79:ALA:HB1	1:A:82:TYR:CE1	0.92	2.00	11	12
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.92	1.63	9	4
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:HD11	0.92	1.41	10	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:HA	0.92	1.42	17	8
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD1	0.92	1.94	7	6
1:A:16:ILE:HD13	1:A:20:LYS:HD2	0.92	1.38	13	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:61:ILE:HD13	0.92	1.94	19	1
1:A:47:VAL:HB	1:A:66:ILE:HD11	0.91	1.38	9	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG13	0.91	1.95	18	2
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:CG	0.91	2.24	16	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CB	0.91	2.53	16	14
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CZ3	0.91	2.52	14	16
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD12	0.91	1.65	19	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD13	0.91	1.25	17	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HB3	0.91	2.01	1	2
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CE	0.91	2.33	17	3
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD12	0.91	1.91	14	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CZ	0.91	2.53	18	12
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:HG21	0.91	1.40	9	6
1:A:24:LEU:HD11	1:A:111:GLY:HA2	0.91	1.41	1	2
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.91	2.38	8	15
1:A:16:ILE:HD13	1:A:16:ILE:O	0.91	1.66	6	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HD13	0.91	1.39	19	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:78:VAL:O	0.91	2.18	3	5
1:A:51:THR:CG2	1:A:102:VAL:HG22	0.91	1.95	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD12	0.91	1.26	17	8
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:HB2	0.91	1.43	7	3
1:A:32:GLY:N	1:A:50:PHE:O	0.90	2.04	11	19
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CD1	0.90	2.54	1	14
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HD13	0.90	1.64	19	6
1:A:25:LEU:HD21	1:A:61:ILE:HD11	0.90	1.43	6	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:83:VAL:CG1	0.90	2.48	16	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:82:TYR:O	0.90	2.20	9	17
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CD1	0.90	1.78	15	15
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:CD2	0.90	2.19	13	8
1:A:25:LEU:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.90	1.96	5	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HE21	0.90	1.23	5	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:87:ILE:CG2	0.90	1.96	17	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:36:VAL:HG11	0.90	1.38	6	1
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:CD1	0.90	2.24	13	18
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:HG13	0.90	1.44	6	4
1:A:47:VAL:CG1	1:A:66:ILE:HD11	0.89	1.96	4	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD1	0.89	2.50	7	2
1:A:34:PHE:HB3	1:A:49:VAL:CG1	0.89	1.96	11	13
1:A:78:VAL:HG22	1:A:90:LEU:HD11	0.89	1.40	20	5
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.89	2.51	9	16
1:A:25:LEU:CA	1:A:109:VAL:HG11	0.89	1.98	5	1
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:CE	0.89	2.44	16	8
1:A:6:LEU:HD22	1:A:6:LEU:H	0.89	1.24	17	1
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HG	0.89	1.45	14	7
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG22	0.89	1.97	13	2
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CE1	0.89	2.03	10	8
1:A:75:ARG:HB3	1:A:83:VAL:O	0.89	1.68	13	1
1:A:60:CYS:O	1:A:102:VAL:HG21	0.89	1.67	4	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:CB	0.89	1.98	9	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:83:VAL:HG13	0.89	1.98	16	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:27:ASP:H	0.89	1.26	13	8
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD11	0.89	1.97	20	6
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:CD1	0.89	2.25	16	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CG1	0.88	2.20	13	5
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE2	0.88	2.02	18	7
1:A:6:LEU:HD13	1:A:36:VAL:HG21	0.88	1.44	13	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:CD2	0.88	2.44	3	15
1:A:69:THR:HG23	1:A:83:VAL:HG11	0.88	0.90	17	2
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:CZ	0.88	1.99	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:36:VAL:HG21	0.88	1.97	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:CD1	1:A:90:LEU:N	0.88	2.35	16	17
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CG2	0.88	2.57	17	5
1:A:77:TYR:HD2	1:A:79:ALA:O	0.88	1.50	19	19
1:A:90:LEU:HG	1:A:94:HIS:CE1	0.88	2.03	17	17
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CE1	0.88	2.03	12	5
1:A:25:LEU:HD23	1:A:49:VAL:C	0.88	1.93	18	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:45:TYR:CD2	0.88	2.04	8	3
1:A:75:ARG:CZ	1:A:75:ARG:CA	0.88	2.51	20	2
1:A:87:ILE:O	1:A:90:LEU:CD2	0.88	2.22	13	15
1:A:75:ARG:C	1:A:76:TYR:CD1	0.88	2.52	17	8
1:A:6:LEU:HB3	1:A:11:TRP:CZ3	0.88	2.03	17	2
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.88	2.26	15	3
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG21	0.88	1.68	9	7
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD11	0.88	1.99	10	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:CE	0.88	1.98	20	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD13	0.87	1.44	2	3
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HZ1	0.87	1.05	3	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:105:LEU:O	0.87	1.69	18	11
1:A:78:VAL:HG13	1:A:94:HIS:HE1	0.87	1.27	14	4
1:A:48:SER:HG	1:A:63:HIS:CE1	0.87	1.86	19	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG22	0.87	2.05	6	8
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD13	0.87	1.70	18	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:CD	0.87	2.37	20	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:CZ	0.87	2.37	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CH2	0.87	2.57	10	8
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG1	0.87	2.00	10	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:20:LYS:HB3	0.87	1.45	9	2
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:HG12	0.87	1.46	13	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:SD	0.87	2.08	16	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:87:ILE:HG21	0.87	1.43	17	1
1:A:34:PHE:O	1:A:35:MET:HE3	0.87	1.68	14	5
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:CD1	0.87	2.56	1	19
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB2	0.87	1.68	1	15
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CB	0.87	2.23	18	19
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HG	0.87	1.70	4	7
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:HH	0.86	1.26	19	2
1:A:6:LEU:CD2	1:A:12:TYR:CD2	0.86	2.58	5	7
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HG	0.86	1.71	2	6
1:A:77:TYR:CE1	1:A:83:VAL:CG2	0.86	2.58	14	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:102:VAL:O	0.86	1.64	19	3
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:HB3	0.86	1.45	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:NE	0.86	2.08	6	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:36:VAL:HG21	0.86	1.99	4	5
1:A:75:ARG:NH1	1:A:83:VAL:HG21	0.86	1.84	12	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CG	0.86	2.58	4	19
1:A:6:LEU:CD2	1:A:36:VAL:HG21	0.86	1.99	9	4
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD23	0.86	1.70	18	4
1:A:22:GLU:OE1	1:A:26:LEU:HD21	0.86	1.70	10	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:83:VAL:CG2	0.86	2.58	14	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:HG3	0.86	1.45	7	11
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:N	0.86	1.84	12	8
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:CG2	0.86	1.99	15	5
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG3	0.86	1.68	5	4
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CE1	0.86	2.59	20	17
1:A:25:LEU:CD2	1:A:61:ILE:HD11	0.86	2.01	6	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:HB	0.86	1.46	11	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG1	0.86	2.00	17	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD2	0.86	2.52	17	8
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE1	0.86	2.05	10	6
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CG	0.86	2.23	7	4
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HG23	0.86	1.47	5	2
1:A:13:ASN:HB2	1:A:35:MET:HE3	0.86	1.44	11	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:36:VAL:CG2	0.86	2.01	4	3
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.86	1.70	17	5
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HG23	0.86	1.47	15	2
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:C	0.86	1.96	18	2
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD2	0.86	2.23	17	4
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:CE1	0.86	2.59	7	12
1:A:102:VAL:HG12	1:A:102:VAL:O	0.86	1.67	5	3
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD13	0.86	1.46	10	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD12	0.86	1.45	16	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:95:GLN:HA	0.86	1.83	20	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:78:VAL:HG11	0.85	2.06	10	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:NE	0.85	2.08	17	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:O	0.85	1.70	5	3
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:HB	0.85	1.45	12	2
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:N	0.85	1.86	14	7
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:NE2	0.85	1.86	5	7
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HD12	0.85	1.96	12	3
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:HA	0.85	1.71	18	12
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:CD1	0.85	2.54	6	15
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:HB2	0.85	2.02	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LYS:HZ1	1:A:102:VAL:HG12	0.85	1.31	13	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CE1	0.85	2.60	7	3
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ARG:N	0.85	2.08	20	5
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CG	0.85	2.01	14	9
1:A:75:ARG:HB2	1:A:85:ASP:CA	0.85	2.02	11	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:77:TYR:CE1	0.85	2.60	11	5
1:A:103:THR:HG23	1:A:103:THR:O	0.85	1.71	19	4
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:O	0.85	1.72	18	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CA	0.85	2.24	11	20
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CG	0.85	2.60	2	12
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:H	0.85	1.27	1	4
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD1	0.85	2.23	7	6
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:NE	0.85	1.68	20	2
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:HD1	0.85	1.69	12	17
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:N	0.85	1.87	6	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG22	0.85	1.48	12	5
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CD2	0.84	2.25	2	8
1:A:21:ALA:HB2	1:A:35:MET:HE2	0.84	1.46	7	1
1:A:46:THR:HG23	1:A:65:HIS:N	0.84	1.85	18	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:27:ASP:N	0.84	2.40	6	5
1:A:95:GLN:CB	1:A:105:LEU:O	0.84	2.24	19	16
1:A:76:TYR:CD1	1:A:84:PHE:O	0.84	2.30	16	9
1:A:6:LEU:CD2	1:A:11:TRP:CH2	0.84	2.60	13	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ASP:H	0.84	1.22	14	2
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:CB	0.84	2.02	18	12
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CD1	0.84	2.06	4	9
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:SD	0.84	2.13	4	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.84	1.87	13	4
1:A:6:LEU:C	1:A:6:LEU:CD1	0.84	2.44	6	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD21	0.84	2.03	6	1
1:A:36:VAL:HG23	1:A:47:VAL:CG2	0.84	2.02	6	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE3	0.84	1.72	17	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE1	0.84	2.01	20	2
1:A:53:ALA:HB3	1:A:59:PRO:HA	0.84	1.49	19	2
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:CD1	0.84	2.30	5	15
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD23	0.84	1.26	7	2
1:A:51:THR:HG22	1:A:102:VAL:HG22	0.84	1.46	19	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD11	0.84	2.07	16	3
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:HG13	0.84	2.01	8	6
1:A:24:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG1	0.84	2.01	8	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:101:LEU:HD11	0.84	1.32	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LYS:CD	1:A:77:TYR:CE2	0.84	2.61	8	8
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:HE2	0.84	2.02	7	1
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:CD1	0.84	2.08	14	3
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.84	2.55	20	2
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:CE2	0.84	2.45	1	2
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:HG22	0.84	1.49	17	5
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:CE1	0.84	2.45	9	3
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CD2	0.83	2.61	5	9
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CG2	0.83	1.85	17	12
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:CD1	0.83	2.61	6	17
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:HD13	0.83	2.03	17	6
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HG3	0.83	2.07	8	4
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG1	0.83	2.03	7	10
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CZ	0.83	2.61	4	17
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD1	0.83	2.61	6	8
1:A:67:LYS:CE	1:A:77:TYR:CE2	0.83	2.61	2	2
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CD1	0.83	2.25	9	12
1:A:76:TYR:H	1:A:84:PHE:C	0.83	1.82	13	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG11	0.83	1.48	2	3
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CE1	0.83	2.07	5	7
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:CD1	0.83	2.03	10	18
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HG22	0.83	2.00	5	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD23	0.83	2.02	19	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HB3	0.83	2.09	19	16
1:A:78:VAL:HG23	1:A:94:HIS:NE2	0.83	1.88	7	8
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CD1	0.83	2.26	7	7
1:A:18:ARG:CD	1:A:63:HIS:CD2	0.83	2.62	1	2
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:N	0.83	2.12	18	20
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:HG23	0.83	1.48	4	5
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.83	2.04	2	5
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD11	0.83	1.50	11	3
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:ASP:H	0.83	1.28	6	3
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:CE1	0.83	2.62	7	3
1:A:47:VAL:CG1	1:A:66:ILE:CD1	0.83	2.57	18	1
1:A:10:GLU:O	1:A:108:PRO:HB2	0.83	1.74	14	19
1:A:82:TYR:CD1	1:A:82:TYR:N	0.83	2.44	11	19
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD12	0.83	2.08	5	8
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD2	0.83	2.62	9	7
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CD1	0.83	2.62	7	10
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.83	2.03	11	12
1:A:89:LEU:O	1:A:92:GLN:HG2	0.83	1.74	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:CB	0.83	2.62	8	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG22	0.82	1.74	17	5
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:HG12	0.82	1.73	9	10
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HH22	0.82	1.29	16	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CD1	0.82	2.10	10	10
1:A:78:VAL:CG1	1:A:94:HIS:CE1	0.82	2.62	17	5
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:HD12	0.82	1.99	4	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:76:TYR:CZ	0.82	2.62	9	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:61:ILE:HG22	0.82	2.09	13	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:26:LEU:HD11	0.82	1.49	15	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:83:VAL:HG13	0.82	1.89	20	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:89:LEU:HD21	0.82	2.09	8	6
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:CG1	0.82	2.57	15	11
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:HG22	0.82	1.48	13	2
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:NH2	0.82	2.13	19	2
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:CG2	0.82	2.04	11	2
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:HG3	0.82	2.05	12	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CZ	0.82	1.87	20	1
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:O	0.82	2.13	15	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD11	0.82	2.03	7	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:CE1	0.82	2.48	19	3
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG12	0.82	2.03	8	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:NH2	0.82	2.11	20	2
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG13	0.82	2.09	15	9
1:A:33:ALA:O	1:A:50:PHE:N	0.82	2.13	13	20
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:CD1	0.82	2.57	16	7
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:CG	0.82	2.58	12	6
1:A:62:LYS:HE3	1:A:64:TYR:CE1	0.82	2.10	13	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.82	2.04	10	3
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:HD21	0.82	1.75	11	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:CB	0.82	2.62	4	7
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG12	0.82	1.51	6	2
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CD2	0.82	2.33	9	7
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:CG2	0.82	2.05	6	6
1:A:53:ALA:N	1:A:59:PRO:CG	0.82	2.43	4	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:105:LEU:HD21	0.81	2.10	13	5
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CG	0.81	2.68	2	11
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD2	0.81	2.10	17	1
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:HB2	0.81	1.52	19	5
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CG	0.81	2.08	11	11
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG11	0.81	2.04	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:HD2	0.81	1.72	14	14
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:CD1	0.81	2.28	14	5
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE1	0.81	2.64	10	7
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:N	0.81	1.91	2	6
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:HB	0.81	1.50	4	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:CZ	0.81	2.62	11	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HB2	0.81	2.10	4	17
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:CZ	0.81	2.43	3	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HG2	0.81	2.11	17	19
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB2	0.81	2.06	10	4
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:O	0.81	1.74	1	4
1:A:75:ARG:CZ	1:A:76:TYR:CD1	0.81	2.64	2	2
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:HG23	0.81	1.49	6	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:105:LEU:CD2	0.81	2.04	6	2
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD1	0.81	2.53	7	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:CD1	0.81	2.62	7	2
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:CD2	0.81	2.05	13	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:90:LEU:HD13	0.81	1.53	15	1
1:A:87:ILE:CA	1:A:90:LEU:HD22	0.81	2.06	13	6
1:A:16:ILE:CG1	1:A:16:ILE:O	0.81	2.29	10	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:52:LYS:NZ	0.81	2.49	19	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD2	0.81	2.69	14	7
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:ND2	0.81	2.49	16	3
1:A:34:PHE:CA	1:A:48:SER:O	0.81	2.29	5	20
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:CE1	0.81	2.34	8	16
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG13	0.81	1.52	2	4
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.81	2.09	9	5
1:A:95:GLN:NE2	1:A:95:GLN:N	0.81	2.29	17	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:HG23	0.81	2.05	2	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:76:TYR:CD1	0.81	2.48	8	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CZ	0.81	2.48	13	4
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG21	0.80	2.09	6	9
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.80	2.63	6	6
1:A:91:ILE:CD1	1:A:105:LEU:HG	0.80	2.05	20	7
1:A:75:ARG:NH1	1:A:75:ARG:O	0.80	2.14	20	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CZ	0.80	2.29	3	4
1:A:49:VAL:CG1	1:A:105:LEU:HD22	0.80	2.06	6	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:36:VAL:O	0.80	2.34	17	3
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:OG	0.80	1.76	3	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:33:ALA:HB2	0.80	2.05	8	2
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:NE2	0.80	2.45	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:GLU:CG	1:A:26:LEU:HD21	0.80	2.06	19	2
1:A:51:THR:HG21	1:A:102:VAL:HG22	0.80	1.53	2	4
1:A:109:VAL:HG22	1:A:109:VAL:O	0.80	1.77	4	6
1:A:69:THR:CA	1:A:75:ARG:HG3	0.80	2.05	12	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CZ	0.80	2.11	8	12
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CG	0.80	2.29	5	5
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD11	0.80	2.07	12	5
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:CE	0.80	2.60	9	4
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD2	0.80	2.29	5	6
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:CD	0.80	2.45	11	20
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CZ	0.80	2.12	12	16
1:A:75:ARG:CB	1:A:85:ASP:HA	0.80	2.07	11	6
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CZ	0.80	2.11	17	18
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:CB	0.80	2.64	10	16
1:A:75:ARG:HB3	1:A:85:ASP:HA	0.80	1.52	5	4
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HD13	0.80	1.76	6	1
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:HB3	0.80	1.52	13	19
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:HB3	0.80	2.12	9	13
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CD1	0.80	2.45	7	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG1	0.80	2.07	11	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:NE	0.80	2.40	20	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:33:ALA:O	0.80	1.77	2	6
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:ND1	0.80	2.15	12	7
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:CD1	0.80	2.43	12	5
1:A:75:ARG:CB	1:A:83:VAL:C	0.80	2.55	13	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HG	0.80	1.76	16	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:46:THR:O	0.79	1.77	15	20
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:OE1	0.79	1.77	17	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD12	0.79	2.06	16	2
1:A:66:ILE:HG13	1:A:78:VAL:HG22	0.79	1.53	8	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:N	0.79	2.15	17	20
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.79	2.06	9	11
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:CG2	0.79	2.57	9	11
1:A:6:LEU:HD11	1:A:11:TRP:CE3	0.79	2.11	4	2
1:A:36:VAL:CG2	1:A:47:VAL:CG2	0.79	2.59	6	3
1:A:49:VAL:HG11	1:A:105:LEU:HD13	0.79	1.54	8	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:48:SER:OG	0.79	1.76	13	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:HG21	0.79	1.53	16	2
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG13	0.79	1.36	15	9
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CD2	0.79	2.12	2	6
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:HG21	0.79	1.76	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.79	2.49	11	13
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CD1	0.79	2.34	2	3
1:A:38:ASP:OD1	1:A:45:TYR:CD2	0.79	2.36	7	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CD2	0.79	2.30	10	2
1:A:84:PHE:HB2	1:A:89:LEU:CD1	0.79	2.07	4	14
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG11	0.79	1.55	4	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:109:VAL:HG23	0.79	1.78	11	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.79	2.66	11	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:CG	0.79	2.31	19	3
1:A:10:GLU:O	1:A:108:PRO:CB	0.79	2.31	4	15
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD2	0.79	2.55	17	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:CB	0.79	2.60	6	8
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:CD2	0.79	2.30	14	5
1:A:81:LYS:HE2	1:A:81:LYS:C	0.79	2.01	11	5
1:A:78:VAL:HG13	1:A:90:LEU:CD1	0.79	2.05	5	3
1:A:89:LEU:HD23	1:A:90:LEU:H	0.79	1.37	10	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:HG22	0.79	1.53	13	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:CE	0.79	2.58	1	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.79	2.61	7	3
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:CD2	0.79	2.36	1	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:CB	0.79	2.60	6	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:17:SER:H	0.79	1.34	8	3
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:N	0.78	2.15	14	20
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:CB	0.78	2.31	14	10
1:A:26:LEU:CD2	1:A:27:ASP:N	0.78	2.43	11	8
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CD	0.78	2.31	10	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:HA	0.78	1.53	15	4
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:CG1	0.78	2.31	5	11
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:CG2	0.78	2.61	15	6
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:NE2	0.78	2.47	18	6
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD22	0.78	1.53	10	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:83:VAL:HG23	0.78	1.55	19	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:CD1	0.78	2.13	4	9
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HG13	0.78	1.56	15	5
1:A:36:VAL:HG11	1:A:47:VAL:HG22	0.78	1.56	15	6
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CZ2	0.78	2.72	11	10
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HD11	0.78	1.53	13	7
1:A:24:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG12	0.78	1.54	8	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:90:LEU:CD1	0.78	2.09	15	3
1:A:7:GLU:CD	1:A:12:TYR:CE2	0.78	2.62	18	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:CB	0.78	2.32	3	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CG2	0.78	2.09	5	1
1:A:31:GLU:CB	1:A:52:LYS:CB	0.78	2.60	7	3
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:HD23	0.78	1.54	6	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HB	0.78	1.53	9	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HB	0.78	1.53	18	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:CD	0.78	2.32	20	2
1:A:90:LEU:HD12	1:A:94:HIS:CD2	0.78	2.13	15	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:CG2	0.78	2.61	5	7
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD12	0.78	1.56	5	5
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:HD1	0.78	1.76	11	1
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:O	0.78	2.32	12	6
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:HA	0.78	1.79	19	14
1:A:82:TYR:C	1:A:84:PHE:CE1	0.78	2.62	6	13
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HG	0.78	1.78	9	8
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG22	0.78	1.94	3	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:17:SER:N	0.78	1.93	16	4
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:C	0.78	2.04	16	1
1:A:90:LEU:CG	1:A:94:HIS:CE1	0.78	2.67	17	16
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:CE	0.78	2.46	6	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:45:TYR:CE2	0.78	2.36	7	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HD11	0.78	2.08	20	3
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:CB	0.77	2.62	18	7
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:CD2	0.77	2.67	4	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG1	0.77	2.61	17	2
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:CG1	0.77	2.62	9	4
1:A:93:TYR:CE2	1:A:97:ASN:CG	0.77	2.62	8	4
1:A:24:LEU:HD22	1:A:111:GLY:CA	0.77	2.09	12	3
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:CA	0.77	2.31	19	2
1:A:77:TYR:CE1	1:A:83:VAL:HG22	0.77	2.12	14	1
1:A:101:LEU:HD21	1:A:104:ARG:CA	0.77	2.08	14	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CG	0.77	2.32	2	6
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CG	0.77	2.32	16	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:CB	0.77	2.08	16	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:6:LEU:CD2	0.77	2.46	17	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB3	0.77	1.57	10	18
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:CD2	0.77	2.37	6	8
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD21	0.77	2.08	17	4
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:CB	0.77	2.09	12	2
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:HB2	0.77	1.55	15	2
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:O	0.77	2.17	16	17
1:A:6:LEU:CD2	1:A:45:TYR:CG	0.77	2.67	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD23	0.77	1.57	8	4
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:O	0.77	2.17	4	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HG3	0.77	2.13	19	12
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HG22	0.77	1.79	18	2
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:HD13	0.77	1.54	20	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CE1	0.77	2.13	2	11
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.77	2.13	5	1
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.77	2.31	9	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:SD	0.77	2.73	8	3
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:HB3	0.77	1.56	14	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HG21	0.77	2.03	9	7
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG12	0.77	2.14	6	4
1:A:47:VAL:HG21	1:A:91:ILE:CD1	0.77	2.09	6	2
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HE3	0.77	1.94	10	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:CB	0.77	2.62	9	2
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:CB	0.77	2.09	14	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD1	0.77	2.14	17	2
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CE2	0.77	2.15	15	13
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:SD	0.77	2.73	5	3
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HA	0.77	1.56	12	14
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HD12	0.77	1.54	5	1
1:A:76:TYR:HB3	1:A:90:LEU:CD2	0.77	2.09	15	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HG2	0.77	2.13	12	11
1:A:6:LEU:HD11	1:A:36:VAL:CG1	0.77	2.10	6	1
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:HB2	0.77	1.54	9	7
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CD1	0.77	2.33	11	5
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:CG2	0.77	2.63	14	4
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:NH2	0.77	2.18	5	3
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:C	0.77	2.03	20	7
1:A:47:VAL:HG12	1:A:66:ILE:HD11	0.77	1.55	4	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG23	0.77	2.10	18	3
1:A:75:ARG:HA	1:A:84:PHE:C	0.77	2.05	13	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.76	2.10	5	11
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE1	0.76	2.39	13	1
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.76	2.11	15	2
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CB	0.76	2.34	9	14
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:N	0.76	2.48	7	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:SD	0.76	2.73	10	6
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:CE1	0.76	2.62	8	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:82:TYR:C	0.76	2.06	13	2
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:N	0.76	1.95	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:CG	0.76	2.33	15	1
1:A:5:ASN:O	1:A:8:THR:HG23	0.76	1.78	17	6
1:A:6:LEU:HD11	1:A:36:VAL:HG21	0.76	1.54	14	6
1:A:89:LEU:HD22	1:A:90:LEU:N	0.76	1.95	18	10
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG12	0.76	2.01	9	2
1:A:84:PHE:HB2	1:A:89:LEU:CD2	0.76	2.10	20	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:NE2	0.76	2.19	17	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:NH1	0.76	2.32	20	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HG3	0.76	2.15	2	7
1:A:96:TYR:CD1	1:A:96:TYR:C	0.76	2.62	2	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG22	0.76	2.15	9	8
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:N	0.76	1.95	18	2
1:A:34:PHE:O	1:A:35:MET:CE	0.76	2.33	14	5
1:A:79:ALA:HB1	1:A:81:LYS:NZ	0.76	1.95	6	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:NH1	0.76	2.43	7	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:CB	0.76	2.10	12	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:HG22	0.76	2.16	13	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD23	0.76	1.56	16	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG23	0.76	1.58	19	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD11	0.76	1.58	10	1
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:CE1	0.76	2.14	10	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:NH1	0.76	1.94	20	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD2	0.76	2.74	14	9
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:N	0.76	2.54	17	3
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:HG3	0.76	1.54	11	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:CG	0.76	2.10	20	4
1:A:78:VAL:HG13	1:A:94:HIS:NE2	0.76	1.96	17	1
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:N	0.76	2.17	8	19
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:CD	0.76	2.06	18	10
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:C	0.76	2.58	14	4
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:CB	0.76	2.11	5	3
1:A:35:MET:CE	1:A:110:CYS:N	0.76	2.48	14	2
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:HE1	0.76	1.92	14	2
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HB2	0.76	2.11	3	13
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:HB3	0.76	1.40	1	18
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HB3	0.76	1.56	13	11
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CG	0.76	2.16	2	13
1:A:12:TYR:CE2	1:A:45:TYR:CE1	0.76	2.74	2	4
1:A:16:ILE:HD12	1:A:20:LYS:CB	0.76	2.11	3	3
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:OD1	0.76	2.39	4	1
1:A:11:TRP:HZ3	1:A:36:VAL:HG21	0.76	1.36	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:CE1	0.76	2.39	16	2
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:HG13	0.76	2.06	16	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CG2	0.76	2.11	6	9
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CG	0.76	2.11	4	5
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:O	0.76	1.81	19	2
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HD2	0.76	2.03	12	1
1:A:101:LEU:HD23	1:A:101:LEU:H	0.76	1.41	18	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:HB3	0.76	2.11	1	8
1:A:6:LEU:CD2	1:A:11:TRP:CZ3	0.76	2.69	13	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:CD1	0.76	2.59	12	4
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HD13	0.76	1.58	16	2
1:A:81:LYS:C	1:A:82:TYR:CG	0.76	2.64	16	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:N	0.75	2.18	17	15
1:A:94:HIS:HB3	1:A:101:LEU:HD11	0.75	1.57	15	4
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:HB3	0.75	1.56	6	7
1:A:6:LEU:CD1	1:A:36:VAL:HG11	0.75	2.11	6	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:75:ARG:C	0.75	2.58	20	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:45:TYR:CD1	0.75	2.16	1	3
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HG2	0.75	2.16	14	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD22	0.75	2.11	15	8
1:A:90:LEU:HD23	1:A:91:ILE:N	0.75	1.96	8	15
1:A:25:LEU:HB3	1:A:109:VAL:HG21	0.75	1.56	5	1
1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:HE2	0.75	2.12	7	3
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:H	0.75	1.40	16	2
1:A:37:ARG:HB3	1:A:46:THR:HG22	0.75	1.57	10	2
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:NH2	0.75	2.19	18	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:33:ALA:O	0.75	2.34	13	6
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:SD	0.75	2.74	4	3
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:CG1	0.75	2.34	15	5
1:A:93:TYR:CE2	1:A:97:ASN:ND2	0.75	2.54	16	3
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:CG2	0.75	2.70	6	9
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CG	0.75	2.11	4	5
1:A:28:THR:OG1	1:A:109:VAL:HG21	0.75	1.79	7	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:C	0.75	2.60	18	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:CE1	0.75	2.17	4	1
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:O	0.75	2.05	5	8
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:CG2	0.75	2.60	8	4
1:A:66:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG11	0.75	2.11	6	5
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CE1	0.75	2.15	17	15
1:A:12:TYR:CA	1:A:36:VAL:HG23	0.75	2.10	9	5
1:A:16:ILE:HG13	1:A:17:SER:N	0.75	1.96	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:OD1	0.75	2.40	2	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:97:ASN:OD1	0.75	2.38	4	1
1:A:38:ASP:CG	1:A:45:TYR:CE2	0.75	2.64	5	2
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:O	0.75	1.82	18	8
1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CD1	0.75	2.55	7	4
1:A:79:ALA:HB3	1:A:82:TYR:HB2	0.75	1.59	8	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HB2	0.75	1.58	14	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:CG	0.75	2.60	1	1
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:CB	0.75	2.60	5	5
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:CD2	0.75	2.60	5	2
1:A:34:PHE:C	1:A:35:MET:CE	0.75	2.60	8	7
1:A:94:HIS:CB	1:A:101:LEU:HD21	0.75	2.11	7	2
1:A:7:GLU:OE1	1:A:12:TYR:CE2	0.75	2.40	18	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:45:TYR:CE1	0.75	2.40	1	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:99:GLY:O	0.75	2.40	2	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:79:ALA:O	0.75	2.38	19	13
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:CB	0.75	2.63	20	4
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:CE1	0.75	2.69	10	2
1:A:96:TYR:O	1:A:96:TYR:CD1	0.74	2.40	8	6
1:A:6:LEU:HD22	1:A:11:TRP:CZ3	0.74	2.18	13	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG22	0.74	1.82	18	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD2	0.74	2.17	11	10
1:A:47:VAL:HG11	1:A:105:LEU:HD11	0.74	1.58	17	8
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:CG2	0.74	2.35	18	4
1:A:47:VAL:CG1	1:A:105:LEU:HD11	0.74	2.12	17	2
1:A:75:ARG:CB	1:A:83:VAL:O	0.74	2.35	13	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:NE	0.74	2.18	15	1
1:A:34:PHE:N	1:A:107:TYR:O	0.74	2.20	3	20
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD13	0.74	1.83	15	5
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:SER:N	0.74	2.48	12	2
1:A:101:LEU:CD2	1:A:104:ARG:HA	0.74	2.12	14	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HB3	0.74	2.12	16	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:25:LEU:HD21	0.74	1.83	1	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:CE1	0.74	2.40	8	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HD11	0.74	1.59	7	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:104:ARG:CA	0.74	2.13	9	1
1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CD2	0.74	2.55	13	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:CB	0.74	2.70	14	3
1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:LEU:H	0.74	1.40	5	14
1:A:6:LEU:HD11	1:A:11:TRP:HZ3	0.74	1.41	2	8
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:CD2	0.74	2.17	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:ASP:OD1	1:A:45:TYR:CZ	0.74	2.41	5	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:35:MET:SD	0.74	2.75	12	4
1:A:76:TYR:CG	1:A:84:PHE:O	0.74	2.41	13	4
1:A:68:GLU:CB	1:A:75:ARG:O	0.74	2.36	17	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:NH2	0.74	2.49	17	1
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:CD2	0.74	2.41	19	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:83:VAL:CG2	0.74	2.50	19	1
1:A:14:LYS:N	1:A:16:ILE:CD1	0.74	2.50	1	3
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CB	0.74	2.36	11	4
1:A:75:ARG:NH2	1:A:76:TYR:OH	0.74	2.21	4	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:HG2	0.74	2.12	18	6
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:CA	0.74	2.34	5	4
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.74	2.40	6	2
1:A:64:TYR:CE1	1:A:78:VAL:HG11	0.74	2.18	10	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:HG23	0.74	1.59	15	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG11	0.74	1.59	7	6
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:CG1	0.74	2.12	4	8
1:A:67:LYS:HE2	1:A:77:TYR:CE2	0.74	2.18	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CZ	0.74	2.70	5	2
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CD2	0.74	2.55	9	15
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:HG22	0.74	1.83	9	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:111:GLY:C	0.74	2.61	14	3
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG13	0.74	1.55	11	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD1	0.74	2.35	18	5
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.74	2.60	16	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:81:LYS:CA	0.74	2.11	16	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CZ	0.74	2.35	18	1
1:A:10:GLU:O	1:A:108:PRO:O	0.74	2.05	19	8
1:A:33:ALA:HA	1:A:107:TYR:O	0.74	1.82	11	19
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:HA	0.74	1.83	11	10
1:A:84:PHE:CD2	1:A:89:LEU:HD11	0.74	2.18	15	5
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD23	0.74	2.12	8	5
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HB2	0.74	2.16	16	10
1:A:67:LYS:HD3	1:A:77:TYR:CE2	0.74	2.18	8	4
1:A:7:GLU:CD	1:A:12:TYR:CE1	0.74	2.66	17	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CE2	0.74	2.71	10	4
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:N	0.74	2.20	13	5
1:A:35:MET:N	1:A:48:SER:O	0.74	2.21	5	20
1:A:77:TYR:HB2	1:A:82:TYR:O	0.74	1.82	8	17
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:H	0.74	1.40	18	5
1:A:48:SER:CB	1:A:63:HIS:CD2	0.74	2.71	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:VAL:HG11	1:A:90:LEU:HD21	0.74	1.57	14	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HB3	0.74	2.18	15	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:CB	0.73	2.64	3	7
1:A:51:THR:HG22	1:A:102:VAL:CG1	0.73	2.13	2	1
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LYS:CG	0.73	2.36	19	2
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:NZ	0.73	2.46	16	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:60:CYS:O	0.73	2.35	9	8
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:O	0.73	2.35	20	8
1:A:47:VAL:HG21	1:A:105:LEU:HD11	0.73	1.60	4	1
1:A:67:LYS:CD	1:A:77:TYR:O	0.73	2.36	19	3
1:A:75:ARG:NE	1:A:75:ARG:HA	0.73	1.96	17	2
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CG2	0.73	2.13	12	3
1:A:49:VAL:O	1:A:62:LYS:N	0.73	2.22	16	20
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CE1	0.73	2.18	20	9
1:A:30:LYS:HD3	1:A:33:ALA:HB2	0.73	1.56	8	2
1:A:35:MET:SD	1:A:36:VAL:N	0.73	2.61	3	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HD11	0.73	1.60	5	2
1:A:75:ARG:O	1:A:75:ARG:HD3	0.73	1.83	20	2
1:A:93:TYR:CE2	1:A:97:ASN:OD1	0.73	2.41	8	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CG1	0.73	2.71	15	14
1:A:18:ARG:HD3	1:A:63:HIS:CD2	0.73	2.18	1	1
1:A:109:VAL:O	1:A:111:GLY:N	0.73	2.21	2	12
1:A:47:VAL:O	1:A:64:TYR:N	0.73	2.21	10	19
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:CD2	0.73	2.14	11	1
1:A:76:TYR:HD1	1:A:76:TYR:N	0.73	1.81	20	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD12	0.73	1.60	14	5
1:A:16:ILE:CG1	1:A:17:SER:N	0.73	2.51	17	10
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:NE	0.73	2.35	20	2
1:A:62:LYS:CE	1:A:101:LEU:CB	0.73	2.67	1	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:78:VAL:CG1	0.73	2.66	6	8
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:CG	0.73	2.66	9	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:83:VAL:CG2	0.73	2.51	12	1
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CD1	0.73	2.51	4	9
1:A:60:CYS:O	1:A:102:VAL:CG2	0.73	2.37	4	4
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG1	0.73	2.36	19	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:63:HIS:CD2	0.73	2.19	1	3
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD21	0.73	2.18	4	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:OD1	0.73	2.07	7	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HB2	0.73	2.13	6	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:NH2	0.73	1.99	16	2
1:A:15:SER:N	1:A:37:ARG:NH2	0.73	2.36	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:HE2	1:A:105:LEU:HD21	0.73	1.42	13	9
1:A:5:ASN:O	1:A:8:THR:CG2	0.73	2.36	15	13
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HB2	0.73	2.13	17	5
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:HB3	0.73	1.60	20	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HD13	0.73	2.09	18	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:HB3	0.72	2.18	3	18
1:A:26:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HG21	0.72	1.60	7	3
1:A:102:VAL:O	1:A:104:ARG:N	0.72	2.22	14	14
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:O	0.72	2.07	20	17
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HG23	0.72	1.83	13	2
1:A:64:TYR:CD1	1:A:101:LEU:HD22	0.72	2.18	8	2
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD12	0.72	2.18	20	5
1:A:75:ARG:HA	1:A:75:ARG:HE	0.72	1.41	17	2
1:A:101:LEU:O	1:A:103:THR:N	0.72	2.22	19	7
1:A:35:MET:SD	1:A:35:MET:N	0.72	2.62	12	3
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:HD2	0.72	1.99	13	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:75:ARG:O	0.72	2.36	17	2
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CG	0.72	2.43	1	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HB2	0.72	1.61	4	2
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HG12	0.72	2.19	18	8
1:A:109:VAL:O	1:A:110:CYS:C	0.72	2.32	5	8
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG23	0.72	1.61	14	3
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB3	0.72	1.83	18	13
1:A:51:THR:CB	1:A:103:THR:HG1	0.72	1.98	3	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:45:TYR:CD2	0.72	2.19	4	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:NE2	0.72	2.47	16	5
1:A:53:ALA:HB3	1:A:59:PRO:N	0.72	1.99	7	8
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD22	0.72	2.13	10	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CA	0.72	2.38	15	3
1:A:90:LEU:HG	1:A:94:HIS:CD2	0.72	2.19	20	2
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HB3	0.72	1.84	8	6
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:CG2	0.72	2.37	16	7
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD23	0.72	1.61	16	4
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE2	0.72	1.59	5	2
1:A:25:LEU:CB	1:A:35:MET:SD	0.72	2.78	6	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:78:VAL:HG13	0.72	1.60	6	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:CD1	0.72	2.62	15	3
1:A:6:LEU:CG	1:A:36:VAL:CG2	0.72	2.66	4	3
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:O	0.72	2.37	15	5
1:A:67:LYS:HE3	1:A:77:TYR:CE2	0.72	2.19	2	2
1:A:67:LYS:HD2	1:A:77:TYR:CE2	0.72	2.18	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:CG	1:A:36:VAL:HG12	0.72	2.20	6	1
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:CE1	0.72	2.18	7	3
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:SER:H	0.72	1.44	12	2
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:HB2	0.72	2.14	14	1
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:HD12	0.72	1.45	14	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:LYS:O	0.72	2.07	2	7
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CB	0.72	2.13	3	19
1:A:37:ARG:NE	1:A:38:ASP:O	0.72	2.22	15	4
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CD1	0.72	2.18	20	13
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:CD2	0.72	2.18	4	2
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:HD13	0.72	2.19	7	2
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD12	0.72	1.60	14	2
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CD1	0.72	2.68	7	11
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:N	0.72	2.52	12	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE1	0.72	2.14	8	3
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:HB	0.72	1.60	8	2
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:O	0.72	2.38	16	6
1:A:31:GLU:HA	1:A:51:THR:HA	0.72	1.60	2	9
1:A:26:LEU:CD2	1:A:26:LEU:C	0.72	2.62	11	5
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:H	0.72	1.43	7	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:CB	0.72	2.38	19	4
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:CD	0.72	2.62	14	3
1:A:38:ASP:CB	1:A:45:TYR:CE1	0.72	2.73	20	2
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:HH11	0.72	1.42	20	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CH2	0.72	2.20	9	4
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:CE1	0.72	2.20	7	4
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:N	0.72	2.21	11	2
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:CG2	0.72	2.37	19	4
1:A:75:ARG:HD3	1:A:83:VAL:CG1	0.72	2.14	12	1
1:A:49:VAL:N	1:A:62:LYS:O	0.72	2.22	18	16
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CE2	0.72	2.20	10	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:TYR:CD1	0.72	2.57	12	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:CG2	0.72	2.73	13	1
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:HD2	0.71	2.00	9	5
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CB	0.71	2.13	9	9
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:CG2	0.71	2.15	13	2
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HE2	0.71	2.00	7	2
1:A:66:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG11	0.71	1.61	15	2
1:A:66:ILE:CA	1:A:78:VAL:HG13	0.71	2.15	8	3
1:A:12:TYR:CE1	1:A:13:ASN:O	0.71	2.43	16	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.71	2.68	2	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD1	0.71	2.52	18	5
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:HB2	0.71	2.19	4	9
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:HB3	0.71	2.21	16	4
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CE1	0.71	2.20	6	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG23	0.71	1.61	10	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CB	0.71	2.13	11	3
1:A:24:LEU:HD23	1:A:35:MET:SD	0.71	2.25	15	1
1:A:13:ASN:C	1:A:37:ARG:NH2	0.71	2.47	16	2
1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:LEU:CA	0.71	2.13	16	1
1:A:38:ASP:HB2	1:A:45:TYR:CE1	0.71	2.20	17	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:CD1	0.71	2.15	10	2
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG22	0.71	2.18	13	4
1:A:26:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD13	0.71	1.60	5	3
1:A:80:GLU:N	1:A:80:GLU:CD	0.71	2.47	1	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:CD1	0.71	2.38	7	5
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG11	0.71	1.60	15	6
1:A:63:HIS:CD2	1:A:63:HIS:N	0.71	2.58	8	3
1:A:6:LEU:CD2	1:A:36:VAL:HB	0.71	2.14	11	1
1:A:37:ARG:N	1:A:46:THR:O	0.71	2.23	10	20
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:HG23	0.71	1.83	1	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CD1	0.71	2.69	10	4
1:A:25:LEU:CG	1:A:35:MET:SD	0.71	2.79	8	4
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HB2	0.71	1.63	6	4
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:CD1	0.71	2.69	8	3
1:A:87:ILE:O	1:A:90:LEU:HG	0.71	1.86	15	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HB3	0.71	2.12	16	2
1:A:81:LYS:HE2	1:A:81:LYS:HA	0.71	1.63	16	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HG3	0.71	1.61	17	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CZ	0.71	2.39	18	1
1:A:77:TYR:HA	1:A:82:TYR:O	0.71	1.84	13	12
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HB3	0.71	2.15	13	12
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:CD	0.71	2.15	13	1
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.71	2.20	13	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:CA	0.71	2.38	18	6
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:CA	0.71	2.38	13	13
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:OH	0.71	2.37	7	7
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:CD2	0.71	2.39	11	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:N	0.71	1.99	14	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:NZ	0.71	2.24	16	1
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:CE2	0.71	2.44	14	2
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD11	0.71	2.20	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:THR:N	1:A:60:CYS:O	0.71	2.23	10	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:82:TYR:CG	0.71	2.21	19	6
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:CD1	0.71	2.16	11	1
1:A:37:ARG:CZ	1:A:38:ASP:O	0.71	2.39	11	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HB2	0.71	2.20	20	2
1:A:10:GLU:O	1:A:108:PRO:C	0.71	2.34	9	11
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CG	0.71	2.39	16	7
1:A:64:TYR:OH	1:A:91:ILE:CD1	0.71	2.39	10	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:HG22	0.71	1.62	17	2
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:HG23	0.71	2.16	15	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CE	0.71	2.39	16	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:NH2	0.71	2.00	20	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:CG1	0.70	2.69	15	7
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:N	0.70	2.23	15	4
1:A:87:ILE:HG13	1:A:90:LEU:HD22	0.70	1.62	20	2
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE3	0.70	1.60	15	2
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CG2	0.70	2.69	12	2
1:A:37:ARG:HA	1:A:37:ARG:NE	0.70	2.01	14	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:26:LEU:HD21	0.70	1.63	19	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:83:VAL:CG2	0.70	2.16	19	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD12	0.70	1.63	2	2
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:CG	0.70	2.16	19	5
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:HB	0.70	2.21	13	7
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CD2	0.70	2.57	7	5
1:A:68:GLU:CD	1:A:75:ARG:NH2	0.70	2.48	9	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:CD2	0.70	2.69	4	5
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:CE	0.70	2.39	15	3
1:A:16:ILE:HG12	1:A:17:SER:N	0.70	2.01	18	5
1:A:25:LEU:HB2	1:A:109:VAL:HG21	0.70	1.62	5	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:33:ALA:O	0.70	2.39	11	3
1:A:36:VAL:CA	1:A:46:THR:O	0.70	2.38	15	7
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:O	0.70	2.24	17	2
1:A:77:TYR:CE1	1:A:83:VAL:CG1	0.70	2.73	14	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:HE3	0.70	1.61	20	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:NE1	0.70	2.02	6	16
1:A:12:TYR:CB	1:A:36:VAL:HG23	0.70	2.16	9	7
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG22	0.70	1.86	3	4
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HD12	0.70	2.20	14	4
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE2	0.70	2.74	18	3
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.70	2.22	5	1
1:A:66:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG13	0.70	1.62	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:NE	1:A:83:VAL:HG11	0.70	2.01	12	1
1:A:78:VAL:O	1:A:101:LEU:CD2	0.70	2.39	13	2
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HG2	0.70	1.85	8	8
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG12	0.70	1.85	2	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CD	0.70	2.39	17	3
1:A:26:LEU:HD23	1:A:61:ILE:CD1	0.70	2.16	19	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HB2	0.70	2.21	20	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:88:PRO:HA	0.70	2.20	10	18
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CE	0.70	2.16	6	6
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:CB	0.70	2.17	5	5
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:N	0.70	2.24	8	1
1:A:51:THR:CB	1:A:103:THR:OG1	0.70	2.39	9	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:NH1	0.70	2.02	16	1
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:N	0.70	2.23	16	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:OH	0.70	2.39	12	10
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HD12	0.70	2.21	4	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CG1	0.70	2.16	18	4
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:N	0.70	2.24	11	5
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:OG	0.70	2.38	3	2
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:CG2	0.70	2.11	2	1
1:A:80:GLU:N	1:A:81:LYS:CE	0.70	2.55	6	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:HG3	0.70	2.17	15	5
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:HB2	0.70	2.16	14	1
1:A:94:HIS:O	1:A:95:GLN:HG2	0.70	1.87	20	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CG	0.70	2.39	9	11
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:CB	0.70	2.16	9	16
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:CG	0.70	2.17	15	3
1:A:37:ARG:NE	1:A:37:ARG:CA	0.70	2.53	14	2
1:A:17:SER:OG	1:A:18:ARG:CZ	0.70	2.40	7	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CE	0.70	2.38	17	3
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CD1	0.70	2.21	10	3
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:O	0.70	2.40	17	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:109:VAL:HG11	0.70	2.17	5	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:O	0.70	2.40	18	7
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CB	0.70	2.40	9	2
1:A:45:TYR:C	1:A:66:ILE:HD12	0.70	2.12	10	1
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:N	0.70	2.40	13	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HB3	0.70	2.16	1	11
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:CG	0.70	2.49	1	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:CB	0.70	2.17	6	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CG	0.70	2.40	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:OG1	1:A:109:VAL:CG2	0.70	2.40	11	1
1:A:23:LYS:HA	1:A:23:LYS:CE	0.70	2.17	18	1
1:A:46:THR:CG2	1:A:64:TYR:C	0.70	2.59	18	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:45:TYR:CE1	0.69	2.22	1	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CD1	0.69	2.22	8	9
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CE2	0.69	2.22	5	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:HG13	0.69	1.62	11	1
1:A:18:ARG:NE	1:A:19:ASP:N	0.69	2.39	20	3
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:CG1	0.69	2.40	13	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD22	0.69	1.45	19	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:O	0.69	2.10	20	2
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:CZ	0.69	2.40	1	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD2	0.69	2.40	1	2
1:A:80:GLU:N	1:A:81:LYS:HE2	0.69	2.00	6	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HG3	0.69	2.17	9	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HB	0.69	1.87	9	3
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CZ	0.69	2.22	15	5
1:A:75:ARG:NE	1:A:83:VAL:HG21	0.69	2.02	19	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:88:PRO:HA	0.69	2.22	5	6
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:HD3	0.69	2.17	4	1
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:CG	0.69	2.40	8	2
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:CD	0.69	2.40	8	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CD1	0.69	2.22	14	3
1:A:66:ILE:HD13	1:A:87:ILE:HG12	0.69	1.63	10	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:83:VAL:HG12	0.69	1.62	13	1
1:A:22:GLU:HB3	1:A:63:HIS:CE1	0.69	2.22	18	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:26:LEU:O	0.69	1.88	14	2
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	0.69	2.22	13	10
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CB	0.69	2.40	1	1
1:A:77:TYR:CA	1:A:82:TYR:O	0.69	2.40	13	11
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:CG2	0.69	2.40	16	3
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:O	0.69	1.86	11	4
1:A:64:TYR:OH	1:A:91:ILE:HD12	0.69	1.87	10	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:85:ASP:OD2	0.69	2.24	13	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HG2	0.69	1.63	10	6
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:CG2	0.69	2.75	18	4
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD1	0.69	2.81	10	3
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:CG1	0.69	2.75	14	7
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CG	0.69	2.40	9	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CE2	0.69	2.22	1	17
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CE2	0.69	2.23	10	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE1	0.69	2.46	9	10
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:CG2	0.69	2.41	7	1
1:A:97:ASN:O	1:A:99:GLY:N	0.69	2.26	1	3
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:C	0.69	2.36	1	12
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:HB2	0.69	1.65	12	1
1:A:35:MET:CE	1:A:48:SER:OG	0.69	2.40	13	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HB3	0.69	1.87	7	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:O	0.69	2.40	6	5
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CB	0.69	2.76	7	9
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CE2	0.69	2.75	9	11
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:HE2	0.69	2.12	15	3
1:A:89:LEU:CD2	1:A:90:LEU:N	0.69	2.51	20	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HB3	0.69	2.22	11	1
1:A:45:TYR:O	1:A:65:HIS:CD2	0.69	2.46	16	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:98:GLY:N	0.69	2.50	17	2
1:A:16:ILE:HG12	1:A:16:ILE:O	0.69	1.87	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:37:ARG:NH1	0.69	2.26	13	2
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:HG11	0.69	1.65	6	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:95:GLN:CA	0.69	2.56	20	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:CE1	0.69	2.75	11	9
1:A:68:GLU:CG	1:A:75:ARG:NH2	0.69	2.56	2	5
1:A:16:ILE:HD12	1:A:20:LYS:HB3	0.69	1.62	16	3
1:A:35:MET:SD	1:A:35:MET:C	0.69	2.76	11	4
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CD2	0.69	2.23	9	12
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:OH	0.69	2.25	9	2
1:A:29:GLY:C	1:A:50:PHE:CE1	0.69	2.70	8	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:26:LEU:C	0.69	2.11	11	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:103:THR:HG21	0.69	1.87	11	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:6:LEU:N	0.69	2.00	17	1
1:A:94:HIS:C	1:A:95:GLN:HE21	0.69	1.96	20	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:11:TRP:CZ3	0.68	2.23	17	3
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:CD	0.68	2.18	1	4
1:A:6:LEU:HG	1:A:36:VAL:HG21	0.68	1.65	18	2
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:HZ3	0.68	1.44	12	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:HB2	0.68	1.88	18	3
1:A:5:ASN:ND2	1:A:5:ASN:O	0.68	2.23	14	2
1:A:92:GLN:CA	1:A:95:GLN:OE1	0.68	2.40	17	1
1:A:10:GLU:O	1:A:10:GLU:HG3	0.68	1.88	10	13
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:CD	0.68	2.66	1	1
1:A:64:TYR:HB2	1:A:78:VAL:CG1	0.68	2.18	1	4
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:N	0.68	2.26	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:HA	1:A:109:VAL:CG1	0.68	2.17	5	2
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:CD	0.68	2.40	6	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:111:GLY:C	0.68	2.13	8	2
1:A:6:LEU:HD21	1:A:11:TRP:CH2	0.68	2.21	13	1
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:HD13	0.68	2.13	1	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CZ	0.68	2.24	10	6
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HB3	0.68	1.63	9	4
1:A:47:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CZ	0.68	2.22	10	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CD	0.68	2.40	16	1
1:A:64:TYR:HE1	1:A:102:VAL:HG12	0.68	1.48	18	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD11	0.68	2.17	1	1
1:A:35:MET:SD	1:A:37:ARG:HG3	0.68	2.27	3	1
1:A:5:ASN:O	1:A:5:ASN:ND2	0.68	2.26	12	2
1:A:62:LYS:HE3	1:A:64:TYR:CD1	0.68	2.23	7	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:111:GLY:O	0.68	2.41	8	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:33:ALA:O	0.68	1.88	10	2
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HG	0.68	2.23	11	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.68	2.77	13	1
1:A:48:SER:HB3	1:A:63:HIS:CD2	0.68	2.23	14	1
1:A:75:ARG:N	1:A:75:ARG:HD2	0.68	2.03	15	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:HB2	0.68	1.65	15	8
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:HB3	0.68	1.88	19	8
1:A:67:LYS:C	1:A:77:TYR:CD1	0.68	2.72	17	6
1:A:23:LYS:CE	1:A:24:LEU:N	0.68	2.57	4	4
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:HB3	0.68	2.18	5	2
1:A:75:ARG:NH2	1:A:76:TYR:CZ	0.68	2.61	9	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:NH1	0.68	2.27	10	4
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:NE2	0.68	2.26	16	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:102:VAL:CG2	0.68	2.71	2	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CG	0.68	2.23	3	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CB	0.68	2.76	4	7
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:CG	0.68	2.66	19	8
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HE2	0.68	2.04	6	1
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:CD2	0.68	2.18	18	2
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD12	0.68	2.13	7	1
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:CG	0.68	2.46	8	2
1:A:69:THR:HG23	1:A:77:TYR:CE1	0.68	2.21	11	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:NH2	0.68	2.57	20	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:101:LEU:HB2	0.68	2.19	1	1
1:A:12:TYR:CG	1:A:36:VAL:HG23	0.68	2.23	12	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:111:GLY:N	0.68	2.40	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:CB	0.68	2.66	17	3
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD1	0.68	2.82	4	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:NH1	0.68	2.26	6	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:CG2	0.68	2.40	9	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:20:LYS:HB2	0.68	1.66	9	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:HG2	0.68	1.88	19	3
1:A:50:PHE:CZ	1:A:59:PRO:HB2	0.68	2.24	3	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CE1	0.68	2.61	1	4
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:CG2	0.68	2.19	9	8
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:CD2	0.68	2.24	14	2
1:A:107:TYR:CD1	1:A:108:PRO:HD2	0.68	2.23	17	9
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:CB	0.68	2.19	6	2
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:CG1	0.68	2.19	6	2
1:A:12:TYR:C	1:A:110:CYS:SG	0.68	2.77	7	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CG2	0.68	2.18	12	4
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CE1	0.68	2.61	20	3
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:CG	0.68	2.37	4	8
1:A:6:LEU:HD21	1:A:11:TRP:HZ3	0.68	1.49	4	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:35:MET:SD	0.68	2.29	8	5
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG13	0.68	1.63	4	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:81:LYS:O	0.68	1.88	11	7
1:A:75:ARG:NH2	1:A:76:TYR:CE2	0.68	2.62	9	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:O	0.68	2.37	17	2
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CG1	0.68	2.19	10	2
1:A:92:GLN:CD	1:A:96:TYR:OH	0.68	2.37	12	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:12:TYR:CE2	0.68	2.72	15	5
1:A:31:GLU:CB	1:A:52:LYS:HB3	0.68	2.18	7	5
1:A:80:GLU:N	1:A:80:GLU:OE1	0.68	2.27	1	1
1:A:34:PHE:C	1:A:35:MET:SD	0.68	2.76	6	4
1:A:47:VAL:N	1:A:64:TYR:O	0.68	2.27	8	10
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CE1	0.68	2.23	7	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG12	0.68	1.66	19	2
1:A:37:ARG:CB	1:A:46:THR:HG22	0.68	2.19	10	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG12	0.68	1.64	10	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG3	0.68	1.89	16	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CG1	0.67	2.02	15	6
1:A:66:ILE:N	1:A:78:VAL:HG13	0.67	2.05	8	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:NZ	0.67	2.27	9	1
1:A:31:GLU:N	1:A:31:GLU:OE1	0.67	2.27	9	1
1:A:35:MET:SD	1:A:35:MET:O	0.67	2.52	11	1
1:A:97:ASN:O	1:A:98:GLY:C	0.67	2.36	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HG12	0.67	1.89	13	7
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CZ	0.67	2.25	9	2
1:A:37:ARG:NE	1:A:37:ARG:HA	0.67	2.04	6	1
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:NZ	0.67	2.03	8	1
1:A:34:PHE:CA	1:A:35:MET:HE2	0.67	2.18	9	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:N	0.67	2.27	12	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE2	0.67	2.05	20	1
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LYS:CB	0.67	2.42	19	16
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CZ	0.67	2.24	5	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:62:LYS:NZ	0.67	2.04	10	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HG	0.67	2.20	16	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:HB2	0.67	1.66	17	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CB	0.67	2.43	17	9
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD21	0.67	2.14	10	5
1:A:49:VAL:O	1:A:62:LYS:O	0.67	2.12	9	6
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:NE	0.67	2.27	5	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD21	0.67	1.64	6	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CB	0.67	2.19	18	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HG2	0.67	2.20	18	1
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:HD11	0.67	2.13	1	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:N	0.67	2.28	11	7
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:CB	0.67	2.20	8	3
1:A:53:ALA:HB3	1:A:59:PRO:HD3	0.67	1.65	4	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:HB3	0.67	1.90	13	10
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB3	0.67	2.19	6	1
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:CG1	0.67	2.68	8	2
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HB	0.67	1.90	9	5
1:A:69:THR:CG2	1:A:77:TYR:CD1	0.67	2.78	10	2
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NH2	0.67	2.27	10	2
1:A:75:ARG:HB3	1:A:83:VAL:C	0.67	2.12	13	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HB2	0.67	2.24	13	1
1:A:37:ARG:CB	1:A:37:ARG:CZ	0.67	2.72	20	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:101:LEU:CB	0.67	2.20	1	1
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:H	0.67	1.48	4	4
1:A:31:GLU:CB	1:A:52:LYS:HB2	0.67	2.19	5	2
1:A:34:PHE:N	1:A:109:VAL:HG23	0.67	2.05	5	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:HD21	0.67	2.20	16	4
1:A:68:GLU:CG	1:A:75:ARG:NE	0.67	2.57	6	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:CA	0.67	2.19	7	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:75:ARG:HA	0.67	2.04	7	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:CE	0.67	2.19	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLU:CD	1:A:110:CYS:SG	0.67	2.78	10	2
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:CE	0.67	2.20	8	4
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:C	0.67	2.36	1	9
1:A:7:GLU:CD	1:A:7:GLU:C	0.67	2.63	15	3
1:A:48:SER:HB2	1:A:63:HIS:CD2	0.67	2.24	3	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:109:VAL:HG11	0.67	1.67	5	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD1	0.67	2.82	7	6
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD22	0.67	2.24	7	3
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CD1	0.67	2.40	10	1
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:HG21	0.67	1.67	10	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.67	2.63	12	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:CB	0.67	2.77	13	1
1:A:37:ARG:CZ	1:A:37:ARG:HB3	0.67	2.20	20	2
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ASP:H	0.67	1.48	11	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:HG3	0.67	1.89	12	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:CG1	0.67	2.19	13	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:24:LEU:HD11	0.67	2.19	16	1
1:A:80:GLU:C	1:A:81:LYS:HG3	0.67	2.15	6	5
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:SG	0.67	2.78	2	9
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CD1	0.67	2.19	7	2
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HB2	0.67	2.20	15	8
1:A:18:ARG:NH2	1:A:19:ASP:OD2	0.67	2.27	2	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HB	0.67	2.24	13	5
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD22	0.67	1.67	5	6
1:A:53:ALA:N	1:A:59:PRO:HG3	0.67	2.04	4	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CB	0.67	2.78	15	4
1:A:31:GLU:CA	1:A:52:LYS:HB2	0.67	2.20	14	3
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CD2	0.67	2.25	10	1
1:A:95:GLN:HB2	1:A:105:LEU:O	0.67	1.89	20	9
1:A:75:ARG:HD3	1:A:75:ARG:C	0.67	2.15	5	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.67	2.20	6	5
1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CD1	0.67	2.56	10	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:HB3	0.67	2.20	14	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:O	0.66	2.54	16	3
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:HA	0.66	2.20	19	4
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:HB3	0.66	1.66	6	4
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD11	0.66	1.89	6	2
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:HG22	0.66	1.90	4	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG3	0.66	1.89	19	5
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:CG	0.66	2.20	9	3
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HB	0.66	2.20	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG23	0.66	2.20	14	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:35:MET:HE3	0.66	1.65	2	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HA	0.66	2.17	8	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HB	0.66	2.25	8	8
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CE2	0.66	2.25	17	4
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.72	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HB3	0.66	2.19	20	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HG23	0.66	2.19	15	2
1:A:6:LEU:HD23	1:A:45:TYR:CG	0.66	2.25	16	1
1:A:16:ILE:H	1:A:37:ARG:NH2	0.66	1.88	16	2
1:A:14:LYS:O	1:A:37:ARG:CG	0.66	2.43	1	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:NE	0.66	2.58	3	1
1:A:110:CYS:SG	1:A:110:CYS:O	0.66	2.52	5	4
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HB3	0.66	2.06	6	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:CD	0.66	2.20	9	4
1:A:76:TYR:C	1:A:83:VAL:HA	0.66	2.14	19	2
1:A:10:GLU:CB	1:A:108:PRO:HB2	0.66	2.20	1	16
1:A:12:TYR:HB2	1:A:36:VAL:CG2	0.66	2.20	16	7
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CD2	0.66	2.79	4	7
1:A:6:LEU:HG	1:A:36:VAL:HG23	0.66	1.67	4	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD2	0.66	2.26	4	3
1:A:37:ARG:HG3	1:A:46:THR:HG22	0.66	1.66	4	2
1:A:38:ASP:HA	1:A:45:TYR:CD2	0.66	2.25	14	2
1:A:66:ILE:HG13	1:A:78:VAL:CG1	0.66	2.21	6	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CD2	0.66	2.25	19	3
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:CG	0.66	2.43	9	2
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:CG	0.66	2.43	10	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD2	0.66	2.20	16	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:N	0.66	2.05	20	1
1:A:64:TYR:HB2	1:A:78:VAL:HG11	0.66	1.67	1	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:C	0.66	2.16	18	3
1:A:84:PHE:HB2	1:A:89:LEU:HD12	0.66	1.66	13	3
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:CD2	0.66	2.69	18	7
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:NE	0.66	2.05	2	1
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB2	0.66	2.15	5	5
1:A:84:PHE:CG	1:A:90:LEU:HB2	0.66	2.25	4	4
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:N	0.66	2.06	4	3
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:CA	0.66	2.73	10	4
1:A:93:TYR:CE2	1:A:97:ASN:CB	0.66	2.79	8	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:102:VAL:CG2	0.66	2.20	19	2
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CE1	0.66	2.26	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:O	1:A:37:ARG:NE	0.66	2.27	16	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:CD1	0.66	2.21	20	1
1:A:34:PHE:HB2	1:A:49:VAL:HG12	0.66	1.63	8	4
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:HE1	0.66	2.07	9	15
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:NH2	0.66	2.05	3	3
1:A:92:GLN:HG3	1:A:96:TYR:CE2	0.66	2.26	9	2
1:A:16:ILE:C	1:A:37:ARG:NH1	0.66	2.54	6	1
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE1	0.66	2.25	6	1
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:HE3	0.66	2.14	7	6
1:A:12:TYR:HD1	1:A:13:ASN:N	0.66	1.88	16	14
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.21	4	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:HG3	0.66	1.91	10	2
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:O	0.66	1.90	12	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HB3	0.66	1.67	10	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE1	0.66	2.25	13	2
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HG21	0.66	1.68	16	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CG	0.66	2.25	20	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:89:LEU:HD21	0.66	2.26	20	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:CG2	0.66	2.79	14	5
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CG1	0.66	2.21	1	3
1:A:84:PHE:CG	1:A:89:LEU:HD11	0.66	2.26	6	6
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE1	0.66	2.26	16	4
1:A:22:GLU:HB2	1:A:63:HIS:CD2	0.66	2.26	5	2
1:A:101:LEU:HD13	1:A:104:ARG:HA	0.66	1.68	9	2
1:A:37:ARG:HB3	1:A:46:THR:CG2	0.66	2.20	10	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HB	0.66	2.21	15	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:94:HIS:NE2	0.66	2.59	17	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:CD	0.66	2.21	19	1
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.66	2.62	14	3
1:A:34:PHE:CD1	1:A:108:PRO:HA	0.66	2.26	8	9
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:HG	0.66	1.90	10	1
1:A:48:SER:CA	1:A:63:HIS:CD2	0.66	2.78	14	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG11	0.66	2.17	19	2
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:CG	0.66	2.69	15	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD23	0.66	1.66	19	1
1:A:18:ARG:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.66	2.06	4	1
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:CD	0.66	2.69	16	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:36:VAL:HG21	0.66	1.68	7	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.66	2.62	7	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:CG	0.66	2.21	9	3
1:A:95:GLN:HB2	1:A:105:LEU:CB	0.66	2.20	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:HB3	1:A:105:LEU:CB	0.66	2.20	19	2
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:CZ	0.66	2.44	16	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CE1	0.66	2.26	16	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:OG1	0.66	2.14	16	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:36:VAL:HB	0.66	2.20	20	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:83:VAL:CG1	0.66	2.58	20	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE2	0.65	1.66	1	1
1:A:110:CYS:O	1:A:110:CYS:SG	0.65	2.54	1	2
1:A:12:TYR:CB	1:A:36:VAL:CG2	0.65	2.75	13	9
1:A:37:ARG:HG3	1:A:46:THR:CG2	0.65	2.21	4	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:78:VAL:CG1	0.65	2.74	6	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:35:MET:CE	0.65	2.21	11	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:CG2	0.65	2.21	17	3
1:A:75:ARG:HB2	1:A:83:VAL:CG1	0.65	2.21	13	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:26:LEU:HD21	0.65	1.91	15	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HD3	0.65	1.48	20	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CG	0.65	2.85	19	10
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:ND1	0.65	2.05	13	4
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CD2	0.65	2.26	7	6
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:O	0.65	2.14	9	7
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HD2	0.65	1.68	19	1
1:A:95:GLN:O	1:A:96:TYR:CB	0.65	2.44	20	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:N	0.65	2.29	11	11
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:O	0.65	2.14	16	7
1:A:5:ASN:O	1:A:5:ASN:CG	0.65	2.40	4	1
1:A:52:LYS:CA	1:A:59:PRO:HG2	0.65	2.21	4	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:105:LEU:CD2	0.65	2.75	15	2
1:A:25:LEU:HB3	1:A:109:VAL:CG2	0.65	2.22	5	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG12	0.65	2.22	10	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:CG	0.65	2.39	7	6
1:A:69:THR:HG23	1:A:77:TYR:CD1	0.65	2.26	11	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:CD	0.65	2.71	12	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:33:ALA:O	0.65	1.92	19	2
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:HD2	0.65	1.51	17	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:OE1	0.65	2.14	17	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:82:TYR:O	0.65	1.88	13	6
1:A:68:GLU:HG2	1:A:75:ARG:NH2	0.65	2.06	2	5
1:A:6:LEU:HD21	1:A:11:TRP:CZ3	0.65	2.26	4	3
1:A:101:LEU:CD1	1:A:104:ARG:HA	0.65	2.21	18	6
1:A:5:ASN:C	1:A:8:THR:HG22	0.65	2.15	11	6
1:A:92:GLN:HB2	1:A:96:TYR:CZ	0.65	2.26	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG21	0.65	1.69	18	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HG3	0.65	1.91	9	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CE2	0.65	2.26	9	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CE1	0.65	2.79	14	3
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:H	0.65	1.52	11	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:36:VAL:CG2	0.65	2.21	13	1
1:A:22:GLU:HB3	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.07	20	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:102:VAL:HB	0.65	2.21	17	3
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.65	2.16	5	9
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:HB3	0.65	1.92	14	11
1:A:11:TRP:HZ3	1:A:36:VAL:HG11	0.65	1.52	9	2
1:A:22:GLU:HB2	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.07	5	4
1:A:64:TYR:CD1	1:A:78:VAL:CG1	0.65	2.79	10	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:37:ARG:HH11	0.65	2.04	16	2
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:HG23	0.65	1.69	15	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:CZ	0.65	2.73	20	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:45:TYR:CD2	0.65	2.79	4	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:HB	0.65	2.21	4	2
1:A:22:GLU:CB	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.60	20	3
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:HD12	0.65	1.68	5	4
1:A:17:SER:OG	1:A:18:ARG:NH1	0.65	2.29	7	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CZ	0.65	2.26	11	2
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HG2	0.65	1.68	8	2
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:CG	0.65	2.75	8	1
1:A:96:TYR:CD1	1:A:97:ASN:ND2	0.65	2.65	12	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:105:LEU:HB2	0.65	1.69	15	2
1:A:75:ARG:CB	1:A:83:VAL:CG1	0.65	2.73	16	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:52:LYS:CE	0.65	2.79	19	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CE2	0.65	2.79	6	12
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CD1	0.65	2.26	3	2
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:CB	0.65	2.22	5	4
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CD1	0.65	2.65	7	3
1:A:69:THR:HG22	1:A:75:ARG:O	0.65	1.92	5	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:CB	0.65	2.80	13	3
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:O	0.65	2.15	10	4
1:A:64:TYR:CZ	1:A:105:LEU:HD22	0.65	2.26	20	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:45:TYR:CD1	0.65	2.79	1	3
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:CG1	0.65	2.22	15	9
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CD2	0.65	2.26	5	1
1:A:12:TYR:HH	1:A:38:ASP:HB3	0.65	1.52	18	2
1:A:68:GLU:HG3	1:A:75:ARG:NE	0.65	2.06	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CE1	0.65	2.27	15	7
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD12	0.65	1.91	12	4
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:N	0.65	2.65	20	5
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CG1	0.65	2.74	16	3
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE1	0.65	2.27	9	3
1:A:6:LEU:CD2	1:A:36:VAL:CG2	0.65	2.75	18	4
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CE2	0.65	2.27	19	2
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:C	0.65	2.39	18	4
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CB	0.65	2.75	14	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:CG2	0.65	2.45	17	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:HB2	0.65	1.91	14	6
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB2	0.65	2.22	1	2
1:A:12:TYR:HD1	1:A:36:VAL:O	0.65	1.71	7	15
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:O	0.65	2.15	18	7
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:CB	0.65	2.22	10	2
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CB	0.65	2.04	6	1
1:A:87:ILE:CA	1:A:90:LEU:CD2	0.65	2.73	13	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:102:VAL:HG12	0.65	2.27	18	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:HB	0.64	1.69	18	7
1:A:81:LYS:HE3	1:A:81:LYS:C	0.64	2.17	4	6
1:A:75:ARG:CZ	1:A:75:ARG:HA	0.64	2.22	7	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:22:GLU:N	0.64	2.56	8	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HG	0.64	2.26	11	1
1:A:35:MET:SD	1:A:48:SER:O	0.64	2.55	12	1
1:A:62:LYS:HD2	1:A:63:HIS:C	0.64	2.17	13	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:11:TRP:CH2	0.64	2.28	5	6
1:A:15:SER:O	1:A:16:ILE:C	0.64	2.39	13	4
1:A:18:ARG:HD2	1:A:19:ASP:N	0.64	2.06	4	6
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:CB	0.64	2.22	14	4
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:CD1	0.64	2.44	6	1
1:A:69:THR:HB	1:A:75:ARG:O	0.64	1.92	8	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG2	0.64	2.22	10	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HB	0.64	2.22	9	9
1:A:62:LYS:HE2	1:A:64:TYR:CE1	0.64	2.26	1	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:NE2	0.64	2.08	12	8
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB2	0.64	2.22	8	10
1:A:75:ARG:HB2	1:A:85:ASP:CB	0.64	2.22	11	3
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD2	0.64	1.91	5	3
1:A:38:ASP:C	1:A:38:ASP:OD1	0.64	2.40	14	4
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:HG12	0.64	2.22	13	2
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:HD11	0.64	2.22	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLN:NE2	1:A:96:TYR:OH	0.64	2.30	12	1
1:A:95:GLN:HE21	1:A:96:TYR:N	0.64	1.90	18	3
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:N	0.64	2.24	20	2
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:HE2	0.64	2.23	19	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HB2	0.64	2.07	20	1
1:A:95:GLN:O	1:A:96:TYR:HB3	0.64	1.92	20	1
1:A:5:ASN:OD1	1:A:9:TYR:OH	0.64	2.13	9	2
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:H	0.64	2.00	9	7
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HD2	0.64	2.22	1	2
1:A:35:MET:HE2	1:A:37:ARG:HD3	0.64	1.69	3	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:35:MET:HE2	0.64	1.68	5	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG3	0.64	1.69	8	1
1:A:91:ILE:CD1	1:A:105:LEU:HD11	0.64	2.22	10	3
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:C	0.64	2.40	20	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:CG1	0.64	2.85	14	2
1:A:48:SER:CA	1:A:63:HIS:HB3	0.64	2.23	13	8
1:A:26:LEU:CA	1:A:61:ILE:HD13	0.64	2.22	5	1
1:A:68:GLU:HG2	1:A:75:ARG:CZ	0.64	2.21	6	2
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:ND2	0.64	2.29	9	4
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:O	0.64	2.46	11	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HB	0.64	2.21	12	1
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG13	0.64	1.92	17	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CE	0.64	2.45	17	2
1:A:25:LEU:HB3	1:A:35:MET:CE	0.64	2.22	1	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:C	0.64	2.41	15	16
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CD1	0.64	2.81	4	4
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD21	0.64	1.69	5	2
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:HB3	0.64	2.28	13	3
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.64	2.76	18	2
1:A:38:ASP:HB2	1:A:45:TYR:CE2	0.64	2.27	11	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:59:PRO:HB2	0.64	2.27	19	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB2	0.64	1.68	17	16
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HG13	0.64	1.92	13	2
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:N	0.64	2.61	6	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:38:ASP:N	0.64	2.07	16	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:HB2	0.64	2.23	8	6
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:CE	0.64	2.23	5	1
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:HD13	0.64	2.08	5	3
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD23	0.64	1.90	10	3
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CD1	0.64	2.81	7	2
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CD	0.64	2.41	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:CG1	1:A:105:LEU:HD13	0.64	2.23	8	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:CZ	0.64	2.23	16	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD23	0.64	2.17	17	2
1:A:12:TYR:O	1:A:110:CYS:SG	0.64	2.56	3	2
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG22	0.64	2.28	5	6
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:C	0.64	2.41	5	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:97:ASN:HB3	0.64	2.28	8	1
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:HD11	0.64	1.70	10	6
1:A:82:TYR:CE2	1:A:99:GLY:HA2	0.64	2.28	13	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CE1	0.64	2.28	16	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG11	0.64	2.22	18	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:7:GLU:O	0.64	2.40	3	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:N	0.64	2.25	14	6
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HG12	0.64	1.70	4	2
1:A:25:LEU:CG	1:A:61:ILE:HD11	0.64	2.21	10	3
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:HE1	0.64	1.90	12	3
1:A:30:LYS:HB2	1:A:30:LYS:HZ2	0.64	1.53	8	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:12:TYR:HE2	0.64	1.52	11	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:104:ARG:HB2	0.64	2.18	20	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:94:HIS:ND1	0.63	2.08	5	15
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:CZ	0.63	2.22	20	4
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CB	0.63	2.23	8	5
1:A:68:GLU:CD	1:A:75:ARG:CZ	0.63	2.71	8	2
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:CG2	0.63	2.24	12	1
1:A:15:SER:N	1:A:37:ARG:HH22	0.63	1.91	19	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:63:HIS:NE2	0.63	2.08	1	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:THR:OG1	0.63	1.93	15	3
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:CG	0.63	2.29	14	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:HA	0.63	1.64	6	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:33:ALA:O	0.63	1.93	6	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG12	0.63	1.67	19	6
1:A:66:ILE:CA	1:A:78:VAL:HG12	0.63	2.23	6	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:9:TYR:CD2	0.63	2.82	9	1
1:A:91:ILE:CD1	1:A:105:LEU:CD1	0.63	2.76	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HG2	0.63	2.23	13	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:CD2	0.63	2.29	17	1
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:NH2	0.63	2.31	3	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:105:LEU:CD2	0.63	2.81	13	3
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:NH2	0.63	2.08	17	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:CG2	0.63	2.72	14	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:36:VAL:HB	0.63	1.68	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:CB	1:A:20:LYS:HE3	0.63	2.23	8	5
1:A:25:LEU:HG	1:A:35:MET:HE2	0.63	1.70	2	1
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:CG	0.63	2.47	16	3
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:CD1	0.63	2.29	4	1
1:A:18:ARG:CD	1:A:19:ASP:N	0.63	2.61	14	4
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HB2	0.63	1.93	17	7
1:A:36:VAL:HG23	1:A:47:VAL:HG22	0.63	1.70	6	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD13	0.63	2.16	7	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD13	0.63	1.53	19	3
1:A:26:LEU:CD1	1:A:26:LEU:N	0.63	2.62	15	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.63	2.08	16	1
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:HB2	0.63	2.19	17	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:O	0.63	1.94	17	1
1:A:7:GLU:OE2	1:A:12:TYR:CE2	0.63	2.51	18	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:O	0.63	1.92	12	9
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:HD12	0.63	2.24	14	2
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:CB	0.63	2.46	13	2
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB3	0.63	2.19	5	10
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG22	0.63	1.70	4	2
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:CG	0.63	2.76	6	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:HD2	0.63	1.71	7	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:CB	0.63	2.77	14	2
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:N	0.63	2.31	9	4
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:O	0.63	1.94	9	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:83:VAL:HG11	0.63	2.07	15	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:109:VAL:HB	0.63	2.27	19	1
1:A:33:ALA:O	1:A:49:VAL:HA	0.63	1.93	20	13
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD22	0.63	2.17	17	5
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:CA	0.63	2.47	8	8
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB3	0.63	2.24	10	6
1:A:22:GLU:HB2	1:A:63:HIS:CE1	0.63	2.29	19	2
1:A:90:LEU:HG	1:A:94:HIS:NE2	0.63	2.07	18	3
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CZ	0.63	2.82	11	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:83:VAL:HG11	0.63	1.94	11	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:12:TYR:CE1	0.63	2.29	17	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:CE	0.63	2.24	17	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CZ2	0.63	2.87	20	5
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD12	0.63	2.07	18	6
1:A:107:TYR:CE2	1:A:109:VAL:HG22	0.63	2.28	2	1
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:CZ	0.63	2.47	3	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:CG	0.63	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:16:ILE:HG13	1:A:24:LEU:CD2	0.63	2.23	6	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:HA	0.63	1.69	10	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:91:ILE:CG1	0.63	2.81	9	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:HD21	0.63	1.93	10	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:CG	0.63	2.23	11	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:60:CYS:HB2	0.63	2.24	12	2
1:A:75:ARG:CG	1:A:83:VAL:HG11	0.63	2.23	16	1
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:CG2	0.63	2.23	13	7
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:HG13	0.63	1.69	8	2
1:A:62:LYS:HZ2	1:A:102:VAL:HG12	0.63	1.52	20	2
1:A:101:LEU:HD22	1:A:101:LEU:C	0.63	2.19	14	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:11:TRP:HZ3	0.63	1.51	17	1
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:CG2	0.63	2.17	18	1
1:A:30:LYS:CA	1:A:30:LYS:HE2	0.63	2.23	19	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:107:TYR:CD2	0.63	2.29	4	2
1:A:66:ILE:HG21	1:A:76:TYR:CB	0.63	2.24	10	2
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CG	0.63	2.82	11	4
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:HB	0.63	2.24	9	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:83:VAL:CG2	0.63	2.73	12	1
1:A:75:ARG:HD3	1:A:83:VAL:HG13	0.63	1.71	12	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:28:THR:HG22	0.63	2.23	16	1
1:A:94:HIS:O	1:A:95:GLN:CG	0.63	2.46	20	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:HB2	0.62	1.93	1	8
1:A:12:TYR:CE1	1:A:37:ARG:HA	0.62	2.29	1	6
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:OG	0.62	1.94	3	3
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:N	0.62	2.08	8	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:16:ILE:HD13	0.62	2.09	10	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:90:LEU:CD1	0.62	2.72	14	1
1:A:49:VAL:O	1:A:61:ILE:HG13	0.62	1.93	19	12
1:A:62:LYS:HD2	1:A:64:TYR:CE1	0.62	2.28	1	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CE1	0.62	2.83	1	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:CB	0.62	2.77	4	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:H	0.62	1.53	10	2
1:A:104:ARG:CZ	1:A:104:ARG:HB2	0.62	2.23	18	1
1:A:67:LYS:HD3	1:A:77:TYR:CD2	0.62	2.29	19	1
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:CD1	0.62	2.53	1	2
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:OG1	0.62	2.16	1	4
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CG	0.62	2.29	7	15
1:A:12:TYR:CA	1:A:36:VAL:CG2	0.62	2.77	2	7
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:HE2	0.62	1.95	15	3
1:A:62:LYS:HB3	1:A:102:VAL:CG2	0.62	2.23	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CD1	0.62	2.29	6	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:110:CYS:SG	0.62	2.57	8	2
1:A:20:LYS:HG3	1:A:24:LEU:HD11	0.62	1.71	16	2
1:A:24:LEU:HD11	1:A:111:GLY:C	0.62	2.19	1	2
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CD1	0.62	2.69	13	6
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.62	2.08	13	5
1:A:19:ASP:CA	1:A:22:GLU:HG2	0.62	2.24	9	2
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:HB2	0.62	2.09	4	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:36:VAL:CG2	0.62	2.24	7	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CG2	0.62	2.24	8	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:35:MET:SD	0.62	2.35	15	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:111:GLY:H	0.62	1.53	1	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:OG1	0.62	2.18	3	6
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CE2	0.62	2.29	12	3
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HG3	0.62	1.72	8	1
1:A:92:GLN:HG3	1:A:93:TYR:N	0.62	2.09	13	2
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG12	0.62	1.72	10	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HB2	0.62	2.24	11	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG22	0.62	1.72	16	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:CE	0.62	2.23	19	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:20:LYS:HB2	0.62	1.71	3	2
1:A:16:ILE:CA	1:A:20:LYS:HE3	0.62	2.24	17	5
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.62	2.10	6	2
1:A:80:GLU:C	1:A:81:LYS:HE2	0.62	2.19	6	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:CE	0.62	2.77	7	1
1:A:76:TYR:CB	1:A:90:LEU:HD23	0.62	2.25	15	1
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG23	0.62	2.19	16	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:104:ARG:O	0.62	2.16	18	1
1:A:16:ILE:C	1:A:37:ARG:NE	0.62	2.58	20	1
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:HD2	0.62	2.03	18	13
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CB	0.62	2.24	4	2
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:HG2	0.62	1.95	11	6
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG2	0.62	2.20	19	6
1:A:25:LEU:CG	1:A:61:ILE:CD1	0.62	2.77	10	2
1:A:16:ILE:CD1	1:A:17:SER:N	0.62	2.63	8	4
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:HG13	0.62	1.94	8	1
1:A:23:LYS:HE3	1:A:24:LEU:CB	0.62	2.24	14	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:16:ILE:C	0.62	2.18	16	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:83:VAL:HG12	0.62	1.70	16	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:47:VAL:HA	0.62	1.71	4	12
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CB	0.62	2.24	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CA	1:A:110:CYS:HB3	0.62	2.25	16	7
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:OG	0.62	2.18	2	4
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:HD22	0.62	2.24	5	6
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.62	2.67	17	2
1:A:47:VAL:HG21	1:A:64:TYR:HE1	0.62	1.54	10	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:HH22	0.62	1.53	16	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:HD2	0.62	2.20	20	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CG1	0.62	2.06	19	11
1:A:14:LYS:O	1:A:37:ARG:HG3	0.62	1.94	1	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG12	0.62	2.25	2	5
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:CG	0.62	2.48	4	3
1:A:77:TYR:CB	1:A:82:TYR:C	0.62	2.73	13	4
1:A:93:TYR:CE2	1:A:97:ASN:HB3	0.62	2.29	8	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:31:GLU:O	0.62	2.18	13	1
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:CG	0.62	2.25	20	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:CZ	0.62	2.48	15	2
1:A:75:ARG:CB	1:A:83:VAL:HG11	0.62	2.25	16	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CE	0.62	2.25	19	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:HA	0.61	1.71	3	15
1:A:92:GLN:CA	1:A:95:GLN:HG2	0.61	2.25	2	3
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CE	0.61	2.48	3	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HG2	0.61	1.72	6	3
1:A:11:TRP:C	1:A:110:CYS:SG	0.61	2.83	7	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:14:LYS:HD3	0.61	2.29	7	1
1:A:37:ARG:HD2	1:A:38:ASP:N	0.61	2.10	18	2
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:HG23	0.61	1.69	13	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:HD3	0.61	2.09	13	2
1:A:94:HIS:HA	1:A:104:ARG:NE	0.61	2.10	18	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HB2	0.61	2.21	20	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HB	0.61	1.71	20	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:CD	0.61	2.72	20	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG13	0.61	1.73	2	1
1:A:33:ALA:C	1:A:109:VAL:HG23	0.61	2.20	5	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HB	0.61	1.52	6	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:38:ASP:OD1	0.61	2.52	7	1
1:A:67:LYS:H	1:A:77:TYR:CB	0.61	2.07	14	1
1:A:11:TRP:N	1:A:110:CYS:HB2	0.61	2.10	5	5
1:A:45:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD11	0.61	1.54	3	1
1:A:77:TYR:CE1	1:A:83:VAL:HG13	0.61	2.30	14	1
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HG22	0.61	1.94	18	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:THR:CG2	0.61	2.25	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NH1	0.61	2.32	19	1
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:CG1	0.61	2.71	8	4
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:CA	0.61	2.24	5	3
1:A:23:LYS:CE	1:A:24:LEU:CA	0.61	2.78	8	3
1:A:10:GLU:CG	1:A:110:CYS:SG	0.61	2.88	10	2
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:HG3	0.61	2.20	15	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:11:TRP:CH2	0.61	2.28	13	1
1:A:14:LYS:C	1:A:37:ARG:HE	0.61	2.03	16	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE2	0.61	1.55	20	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HB3	0.61	1.95	20	9
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:NZ	0.61	2.52	3	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG1	0.61	2.25	3	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE2	0.61	2.17	8	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:97:ASN:CB	0.61	2.84	8	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:CE2	0.61	2.84	11	1
1:A:15:SER:O	1:A:15:SER:OG	0.61	2.18	16	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:12:TYR:CE1	0.61	2.83	17	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HB3	0.61	1.96	1	2
1:A:79:ALA:HB3	1:A:82:TYR:HD1	0.61	1.51	15	6
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HA	0.61	2.11	4	4
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:N	0.61	2.33	17	3
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CG	0.61	2.89	4	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CD	0.61	2.25	19	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HG2	0.61	1.73	20	3
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:CD	0.61	2.79	4	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:CB	0.61	2.25	10	3
1:A:21:ALA:HB2	1:A:35:MET:CE	0.61	2.25	7	1
1:A:9:TYR:HE2	1:A:88:PRO:CG	0.61	2.08	9	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HG2	0.61	1.95	13	4
1:A:76:TYR:CB	1:A:90:LEU:CD2	0.61	2.78	15	1
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:ND1	0.61	2.27	19	3
1:A:94:HIS:ND1	1:A:101:LEU:CD1	0.61	2.50	18	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:CA	0.61	2.25	6	4
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:CE	0.61	2.26	20	4
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HB	0.61	1.96	4	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HB2	0.61	2.26	4	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CG2	0.61	2.79	14	3
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:HD3	0.61	1.94	6	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:25:LEU:N	0.61	2.10	19	2
1:A:34:PHE:N	1:A:35:MET:HE2	0.61	2.09	9	1
1:A:36:VAL:CB	1:A:47:VAL:HG23	0.61	2.25	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HB3	0.61	2.30	17	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:NH1	0.61	1.90	20	1
1:A:14:LYS:N	1:A:16:ILE:HD11	0.61	2.10	1	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:N	0.61	2.34	2	16
1:A:52:LYS:HD2	1:A:59:PRO:CG	0.61	2.26	2	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:5:ASN:C	0.61	2.57	4	6
1:A:51:THR:O	1:A:59:PRO:HG2	0.61	1.95	4	1
1:A:67:LYS:HD2	1:A:77:TYR:CD2	0.61	2.31	8	3
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HG	0.61	2.22	14	3
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD13	0.61	2.30	10	3
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CE1	0.61	2.89	9	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:ILE:CG1	0.61	2.25	12	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HB3	0.61	1.72	14	1
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:HD2	0.61	2.21	19	1
1:A:75:ARG:CB	1:A:76:TYR:CE1	0.61	2.83	17	3
1:A:52:LYS:C	1:A:59:PRO:CG	0.61	2.73	4	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:96:TYR:N	0.61	2.11	8	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG11	0.61	2.26	10	1
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:CZ	0.61	2.26	11	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:85:ASP:HA	0.61	2.30	13	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HB2	0.61	1.94	5	7
1:A:32:GLY:CA	1:A:50:PHE:O	0.61	2.49	1	3
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:HB2	0.61	1.95	16	8
1:A:19:ASP:C	1:A:22:GLU:HG2	0.61	2.21	9	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG2	0.61	1.95	9	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HG3	0.61	2.09	12	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:26:LEU:HD21	0.61	2.21	15	1
1:A:63:HIS:C	1:A:64:TYR:CD1	0.60	2.79	6	5
1:A:89:LEU:O	1:A:93:TYR:N	0.60	2.34	11	18
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HB2	0.60	1.73	5	5
1:A:20:LYS:HE3	1:A:23:LYS:CE	0.60	2.26	2	1
1:A:86:SER:O	1:A:90:LEU:HB3	0.60	1.95	4	9
1:A:68:GLU:CB	1:A:75:ARG:NH2	0.60	2.64	3	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:111:GLY:CA	0.60	2.77	14	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:97:ASN:CG	0.60	2.80	13	3
1:A:101:LEU:HD12	1:A:101:LEU:H	0.60	1.51	7	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CE2	0.60	2.83	9	6
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE1	0.60	2.84	14	3
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CE2	0.60	2.54	14	3
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:CA	0.60	2.26	17	3
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CG1	0.60	2.84	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CD1	0.60	2.68	8	7
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:HG13	0.60	1.95	11	6
1:A:6:LEU:HD12	1:A:9:TYR:CG	0.60	2.31	9	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HG	0.60	2.20	9	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:HG22	0.60	1.73	14	2
1:A:104:ARG:HB2	1:A:104:ARG:CZ	0.60	2.26	14	1
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:HE3	0.60	2.11	20	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:12:TYR:CE2	0.60	2.30	16	4
1:A:99:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD3	0.60	2.25	2	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:23:LYS:NZ	0.60	2.10	7	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:62:LYS:C	0.60	2.21	13	1
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:CD2	0.60	2.79	18	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:CD	0.60	2.26	7	3
1:A:24:LEU:HB2	1:A:35:MET:CE	0.60	2.26	2	2
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:CD1	0.60	2.27	5	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:HG12	0.60	2.31	6	1
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:30:LYS:HB3	0.60	1.54	7	1
1:A:67:LYS:HD3	1:A:77:TYR:O	0.60	1.95	12	4
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:H	0.60	1.54	11	2
1:A:6:LEU:CD2	1:A:88:PRO:HD3	0.60	2.27	12	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:84:PHE:HA	0.60	1.73	13	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG23	0.60	2.31	14	1
1:A:37:ARG:HA	1:A:37:ARG:CZ	0.60	2.27	14	1
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:HB2	0.60	1.74	14	1
1:A:34:PHE:C	1:A:35:MET:HG2	0.60	2.21	17	2
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD1	0.60	2.45	19	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:12:TYR:C	0.60	2.78	7	15
1:A:76:TYR:CE2	1:A:87:ILE:HG12	0.60	2.31	18	5
1:A:79:ALA:HB3	1:A:82:TYR:CB	0.60	2.27	8	3
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:HG2	0.60	1.97	18	3
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:HH12	0.60	1.57	16	1
1:A:37:ARG:CB	1:A:37:ARG:NH1	0.60	2.64	20	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:HB3	0.60	2.26	4	12
1:A:96:TYR:C	1:A:96:TYR:HD1	0.60	2.05	2	3
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HG11	0.60	2.30	5	8
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.60	2.23	10	4
1:A:62:LYS:CE	1:A:102:VAL:HB	0.60	2.25	10	3
1:A:80:GLU:CA	1:A:81:LYS:HE2	0.60	2.27	6	1
1:A:36:VAL:HG13	1:A:47:VAL:CB	0.60	2.26	11	2
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:CG2	0.60	2.27	14	1
1:A:104:ARG:HB2	1:A:104:ARG:NH1	0.60	2.10	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG11	0.60	2.25	15	1
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.60	2.71	15	5
1:A:16:ILE:CB	1:A:20:LYS:CE	0.60	2.79	8	3
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:HD22	0.60	2.22	8	6
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HG23	0.60	1.96	5	3
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:CD2	0.60	2.21	10	2
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CB	0.60	2.72	11	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:HD2	0.60	1.96	20	1
1:A:75:ARG:HH22	1:A:83:VAL:HG13	0.60	1.53	20	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:26:LEU:C	0.60	2.74	6	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:HD22	0.60	2.25	4	2
1:A:18:ARG:HD2	1:A:63:HIS:CE1	0.60	2.31	5	1
1:A:47:VAL:HG11	1:A:105:LEU:HD21	0.60	1.74	6	1
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HD2	0.60	1.96	8	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:20:LYS:HD2	0.60	2.22	13	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:CG	0.60	2.80	17	4
1:A:16:ILE:O	1:A:16:ILE:HG12	0.60	1.96	10	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:11:TRP:HZ3	0.60	1.56	11	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:88:PRO:HD3	0.60	1.72	12	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:CB	0.60	2.27	14	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:28:THR:HG22	0.60	1.73	16	1
1:A:69:THR:CA	1:A:75:ARG:NE	0.60	2.65	20	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:111:GLY:HA2	0.60	2.27	20	4
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:C	0.60	2.22	9	3
1:A:107:TYR:C	1:A:107:TYR:CD1	0.60	2.80	2	1
1:A:35:MET:CE	1:A:37:ARG:HD3	0.60	2.25	3	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:HB2	0.60	1.74	7	4
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:HB3	0.60	1.97	18	4
1:A:47:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE1	0.60	2.32	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HG3	0.60	2.26	11	1
1:A:38:ASP:HB2	1:A:45:TYR:CD2	0.60	2.31	11	1
1:A:23:LYS:NZ	1:A:24:LEU:HA	0.60	2.12	14	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:45:TYR:CD1	0.60	2.32	16	1
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:HE	0.60	1.56	16	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:N	0.60	2.12	19	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:NE	0.60	2.35	20	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:HB2	0.59	1.72	9	5
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:CD1	0.59	2.79	17	3
1:A:27:ASP:OD1	1:A:28:THR:N	0.59	2.35	4	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.59	2.85	5	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:13:ASN:N	0.59	2.70	14	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HG13	0.59	2.28	11	2
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:CD	0.59	2.65	13	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:89:LEU:CD1	0.59	2.84	13	2
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:HG2	0.59	1.96	15	1
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:CZ	0.59	2.80	20	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:23:LYS:CE	0.59	2.27	1	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:CG	0.59	2.27	1	2
1:A:10:GLU:CA	1:A:110:CYS:SG	0.59	2.90	10	8
1:A:13:ASN:ND2	1:A:110:CYS:C	0.59	2.60	8	3
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:C	0.59	2.44	4	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:HD2	0.59	2.27	5	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD23	0.59	2.27	11	1
1:A:17:SER:N	1:A:37:ARG:HG3	0.59	2.11	12	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:OH	0.59	2.32	12	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:104:ARG:HD2	0.59	2.12	20	1
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:HG12	0.59	1.97	1	6
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:SG	0.59	2.38	10	9
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:HG2	0.59	1.73	2	3
1:A:92:GLN:HG3	1:A:96:TYR:CD2	0.59	2.32	3	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:88:PRO:HB3	0.59	2.32	10	11
1:A:25:LEU:HB2	1:A:109:VAL:CG1	0.59	2.27	7	1
1:A:76:TYR:CB	1:A:84:PHE:O	0.59	2.50	15	5
1:A:16:ILE:HD12	1:A:24:LEU:HD11	0.59	1.73	10	1
1:A:51:THR:CB	1:A:102:VAL:HG22	0.59	2.27	1	4
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HG2	0.59	1.98	3	3
1:A:25:LEU:HB3	1:A:109:VAL:CB	0.59	2.27	5	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CG	0.59	2.27	6	2
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG2	0.59	1.95	16	4
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CZ2	0.59	2.32	9	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:33:ALA:CB	0.59	2.26	9	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:105:LEU:C	0.59	2.22	15	2
1:A:24:LEU:HG	1:A:111:GLY:CA	0.59	2.27	2	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:CG2	0.59	2.65	3	1
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:HE3	0.59	2.22	4	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CG	0.59	2.27	10	3
1:A:37:ARG:HB3	1:A:37:ARG:CZ	0.59	2.28	6	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:N	0.59	2.10	16	2
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG3	0.59	2.23	10	1
1:A:19:ASP:OD2	1:A:20:LYS:CD	0.59	2.50	11	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:CD2	0.59	2.81	11	1
1:A:11:TRP:CA	1:A:110:CYS:HB2	0.59	2.28	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:HE3	0.59	1.97	5	3
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:HB	0.59	1.75	5	3
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:NH2	0.59	2.61	5	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:CD2	0.59	2.85	15	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HB3	0.59	2.27	7	1
1:A:62:LYS:HD2	1:A:63:HIS:N	0.59	2.12	13	1
1:A:78:VAL:O	1:A:101:LEU:HD23	0.59	1.97	13	3
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:HG22	0.59	2.27	17	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:22:GLU:OE2	0.59	1.98	16	1
1:A:10:GLU:HB3	1:A:108:PRO:HB2	0.59	1.75	12	10
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:NE	0.59	2.11	1	1
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:CG1	0.59	2.28	1	2
1:A:66:ILE:HG21	1:A:76:TYR:HB3	0.59	1.75	20	3
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:N	0.59	2.59	11	6
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:N	0.59	2.12	10	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CD	0.59	2.28	15	1
1:A:35:MET:CE	1:A:110:CYS:HA	0.59	2.27	17	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:HA	0.59	2.32	8	7
1:A:92:GLN:CG	1:A:96:TYR:CE2	0.59	2.86	9	2
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:OD1	0.59	2.21	7	3
1:A:7:GLU:HG2	1:A:8:THR:N	0.59	2.12	9	1
1:A:17:SER:HG	1:A:19:ASP:CG	0.59	2.05	11	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG2	0.59	2.28	14	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:HA2	0.59	2.22	16	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:HB2	0.59	2.27	17	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:CB	0.59	2.28	19	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HB	0.59	1.73	9	5
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:HG3	0.59	1.75	1	1
1:A:92:GLN:C	1:A:95:GLN:HG2	0.59	2.23	2	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HG	0.59	2.28	13	6
1:A:76:TYR:CZ	1:A:85:ASP:C	0.59	2.80	13	4
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HD11	0.59	1.97	7	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CG	0.59	2.67	17	4
1:A:10:GLU:HG3	1:A:110:CYS:SG	0.59	2.38	10	3
1:A:75:ARG:HB2	1:A:83:VAL:C	0.59	2.21	13	1
1:A:5:ASN:HB2	1:A:8:THR:CG2	0.59	2.28	14	2
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:NH1	0.59	2.13	20	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:35:MET:HA	0.59	1.74	11	9
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:N	0.59	2.63	7	6
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD1	0.59	2.33	4	1
1:A:90:LEU:HD23	1:A:91:ILE:HD13	0.59	1.74	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:HG12	0.59	1.74	16	3
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:HE1	0.59	1.56	12	3
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:CG	0.59	2.26	13	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:83:VAL:CB	0.59	2.28	13	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:33:ALA:CB	0.59	2.27	16	1
1:A:5:ASN:HD22	1:A:6:LEU:HD22	0.59	1.55	17	1
1:A:75:ARG:HE	1:A:83:VAL:HG21	0.59	1.56	19	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:HB3	0.58	2.33	4	2
1:A:86:SER:C	1:A:88:PRO:HD2	0.58	2.23	13	8
1:A:107:TYR:CD2	1:A:109:VAL:HG23	0.58	2.33	8	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:101:LEU:HD23	0.58	2.28	9	2
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CA	0.58	2.27	14	6
1:A:47:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE1	0.58	2.86	10	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG3	0.58	1.98	15	4
1:A:18:ARG:CG	1:A:22:GLU:OE2	0.58	2.51	16	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD3	0.58	1.97	16	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:104:ARG:CD	0.58	2.66	20	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG13	0.58	1.96	1	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HD2	0.58	2.23	2	1
1:A:107:TYR:CZ	1:A:109:VAL:HG22	0.58	2.33	2	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:6:LEU:N	0.58	2.51	9	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:C	0.58	2.46	4	2
1:A:62:LYS:O	1:A:62:LYS:NZ	0.58	2.35	5	1
1:A:20:LYS:HE2	1:A:20:LYS:CA	0.58	2.27	6	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CZ	0.58	2.85	8	1
1:A:92:GLN:OE1	1:A:96:TYR:OH	0.58	2.12	9	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CD2	0.58	2.67	13	1
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:C	0.58	2.60	13	1
1:A:37:ARG:HB3	1:A:37:ARG:NH1	0.58	2.12	14	1
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:CD1	0.58	2.77	16	1
1:A:22:GLU:CB	1:A:63:HIS:CE1	0.58	2.85	18	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:88:PRO:CA	0.58	2.86	5	5
1:A:102:VAL:C	1:A:104:ARG:N	0.58	2.61	13	15
1:A:51:THR:C	1:A:59:PRO:HG2	0.58	2.23	4	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HB3	0.58	1.75	14	4
1:A:75:ARG:C	1:A:75:ARG:CD	0.58	2.76	5	1
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:HG22	0.58	1.56	6	3
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HG	0.58	1.98	11	4
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CB	0.58	2.27	9	2
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD11	0.58	2.33	15	2
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD11	0.58	1.74	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:HB2	1:A:105:LEU:HB2	0.58	1.75	12	1
1:A:84:PHE:HB2	1:A:90:LEU:HB2	0.58	1.76	14	1
1:A:67:LYS:C	1:A:77:TYR:CE1	0.58	2.81	17	8
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:HD2	0.58	2.23	5	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:HG12	0.58	1.74	10	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:102:VAL:HB	0.58	2.29	17	3
1:A:90:LEU:C	1:A:94:HIS:CD2	0.58	2.80	15	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE2	0.58	2.25	1	1
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:HD11	0.58	1.72	1	3
1:A:87:ILE:HG22	1:A:88:PRO:CD	0.58	2.27	7	4
1:A:11:TRP:N	1:A:110:CYS:HB3	0.58	2.13	10	8
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:CG	0.58	2.77	2	2
1:A:106:ARG:HG3	1:A:107:TYR:N	0.58	2.12	6	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:49:VAL:N	0.58	2.67	18	1
1:A:15:SER:CA	1:A:37:ARG:NH2	0.58	2.66	19	1
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:CE	0.58	2.81	19	2
1:A:33:ALA:N	1:A:50:PHE:O	0.58	2.36	16	17
1:A:62:LYS:HE2	1:A:101:LEU:HB3	0.58	1.76	1	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:HB2	0.58	1.98	12	6
1:A:107:TYR:HD1	1:A:108:PRO:CD	0.58	2.12	2	5
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HG3	0.58	1.99	4	1
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:CG	0.58	2.52	6	1
1:A:38:ASP:HB3	1:A:45:TYR:CE1	0.58	2.32	18	4
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:CD	0.58	2.51	8	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HZ2	0.58	2.12	10	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:OH	0.58	2.36	11	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:CE	0.58	2.29	13	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:CD2	0.58	2.56	13	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD22	0.58	2.23	13	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:CB	0.58	2.87	13	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HG	0.58	1.75	16	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:LEU:H	0.58	1.51	16	1
1:A:96:TYR:CD1	1:A:96:TYR:O	0.58	2.56	18	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:CZ	0.58	2.71	1	4
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:CG	0.58	2.33	5	7
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD22	0.58	2.23	3	5
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HE3	0.58	1.99	3	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:37:ARG:C	0.58	2.23	4	2
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG2	0.58	2.29	10	3
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:CD	0.58	2.29	13	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:CA	0.58	2.28	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:H	0.58	2.11	14	1
1:A:94:HIS:CA	1:A:104:ARG:HB3	0.58	2.29	18	1
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:CG	0.58	2.34	14	4
1:A:99:GLY:CA	1:A:104:ARG:HG2	0.58	2.28	6	2
1:A:30:LYS:HB3	1:A:30:LYS:NZ	0.58	2.14	7	1
1:A:9:TYR:HD2	1:A:11:TRP:CZ2	0.58	2.16	9	1
1:A:18:ARG:NH2	1:A:19:ASP:HB2	0.58	2.14	17	1
1:A:48:SER:HG	1:A:63:HIS:CG	0.58	2.14	19	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CG	0.58	2.28	7	6
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CE	0.58	2.28	3	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:101:LEU:HD21	0.58	1.76	16	2
1:A:68:GLU:CG	1:A:75:ARG:CZ	0.58	2.81	6	2
1:A:31:GLU:N	1:A:52:LYS:HG3	0.58	2.14	8	3
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:NE	0.58	2.37	8	1
1:A:21:ALA:O	1:A:35:MET:CE	0.58	2.38	16	1
1:A:51:THR:OG1	1:A:102:VAL:O	0.58	2.19	16	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NE	0.58	2.37	19	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:111:GLY:CA	0.58	2.67	16	3
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:HB3	0.58	1.75	5	4
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:HG21	0.58	2.13	3	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:78:VAL:HG21	0.58	2.34	4	4
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CZ	0.58	2.34	9	9
1:A:25:LEU:HB3	1:A:109:VAL:CG1	0.58	2.29	5	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	0.58	2.12	9	3
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD2	0.58	1.74	19	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:102:VAL:HG12	0.58	2.34	19	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD2	0.57	2.29	1	2
1:A:62:LYS:HD2	1:A:64:TYR:CD1	0.57	2.34	1	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:CD	0.57	2.47	4	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:HB2	0.57	2.14	2	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:33:ALA:CB	0.57	2.27	8	2
1:A:94:HIS:HB3	1:A:101:LEU:CD1	0.57	2.28	3	2
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:HD11	0.57	1.75	5	1
1:A:16:ILE:O	1:A:16:ILE:CD1	0.57	2.49	6	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HB	0.57	1.76	20	5
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:CA	0.57	2.52	8	1
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:HD2	0.57	2.24	8	1
1:A:62:LYS:HD2	1:A:63:HIS:O	0.57	1.99	13	1
1:A:22:GLU:HB3	1:A:23:LYS:CE	0.57	2.29	17	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE2	0.57	1.99	17	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:49:VAL:CA	0.57	2.81	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:HG3	0.57	2.24	15	3
1:A:17:SER:HB3	1:A:18:ARG:NH2	0.57	2.13	2	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:CG1	0.57	2.82	8	2
1:A:75:ARG:CG	1:A:85:ASP:CG	0.57	2.77	11	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:NE2	0.57	2.14	14	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:NE	0.57	2.14	17	2
1:A:37:ARG:HD3	1:A:38:ASP:H	0.57	1.58	16	1
1:A:94:HIS:C	1:A:105:LEU:H	0.57	2.07	18	2
1:A:52:LYS:HE3	1:A:53:ALA:O	0.57	2.00	2	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:76:TYR:CE1	0.57	2.88	2	2
1:A:68:GLU:CB	1:A:75:ARG:HH21	0.57	2.12	11	3
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HG3	0.57	2.24	5	1
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HG	0.57	1.99	6	1
1:A:25:LEU:HB2	1:A:109:VAL:HG13	0.57	1.75	7	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:9:TYR:CD2	0.57	2.33	9	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:HG2	0.57	1.74	9	2
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HG2	0.57	2.13	16	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE3	0.57	2.28	20	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE3	0.57	1.74	1	4
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:NE	0.57	2.63	1	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:CA	0.57	2.82	16	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:TYR:CG	0.57	2.73	12	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD2	0.57	2.00	18	2
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:CD1	0.57	2.77	4	3
1:A:51:THR:HG22	1:A:102:VAL:HG11	0.57	1.75	2	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CG1	0.57	2.28	19	4
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HA	0.57	2.34	4	2
1:A:17:SER:HB2	1:A:18:ARG:NH2	0.57	2.15	4	1
1:A:17:SER:O	1:A:20:LYS:HG2	0.57	1.99	6	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:109:VAL:CB	0.57	2.29	8	3
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:HD11	0.57	1.75	20	1
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:NE	0.57	2.63	3	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:CG	0.57	2.29	15	3
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:CG1	0.57	2.52	5	2
1:A:66:ILE:HD12	1:A:66:ILE:N	0.57	2.14	6	2
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CD2	0.57	2.67	17	3
1:A:62:LYS:CE	1:A:102:VAL:HG12	0.57	2.30	10	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD23	0.57	1.77	11	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:CG1	0.57	2.27	15	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:C	0.57	2.47	17	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:CG1	0.57	2.74	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE1	0.57	1.74	17	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:33:ALA:CB	0.57	2.72	1	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:CE1	0.57	2.35	13	2
1:A:14:LYS:N	1:A:16:ILE:HD12	0.57	2.14	20	2
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:HB2	0.57	2.00	9	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HB	0.57	1.76	10	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:62:LYS:HZ2	0.57	1.57	10	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:HD1	0.57	1.56	11	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CD1	0.57	2.28	16	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:CB	0.57	2.81	16	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD2	0.57	1.99	17	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE1	0.57	2.93	1	3
1:A:96:TYR:O	1:A:96:TYR:CG	0.57	2.57	4	6
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CE2	0.57	2.71	2	2
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:O	0.57	2.23	2	3
1:A:18:ARG:N	1:A:18:ARG:HD2	0.57	2.15	3	1
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:HA	0.57	2.29	4	3
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:CD	0.57	2.29	5	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA2	0.57	1.76	7	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:88:PRO:HB3	0.57	2.35	14	1
1:A:20:LYS:HG3	1:A:24:LEU:HD21	0.57	1.74	16	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:96:TYR:CE2	0.57	2.73	20	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ARG:CA	0.57	2.53	20	1
1:A:25:LEU:HB2	1:A:35:MET:SD	0.57	2.40	6	1
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:CG2	0.57	2.83	15	3
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:CZ	0.57	2.53	8	2
1:A:14:LYS:HD3	1:A:16:ILE:HG12	0.57	1.76	13	1
1:A:5:ASN:CG	1:A:9:TYR:HH	0.57	2.07	9	2
1:A:30:LYS:N	1:A:50:PHE:CE2	0.57	2.73	19	3
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:HE1	0.57	2.18	9	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:N	0.57	2.68	11	1
1:A:62:LYS:C	1:A:62:LYS:CE	0.57	2.78	13	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:HA	0.56	1.75	15	6
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:C	0.56	2.24	5	1
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LYS:HG3	0.56	2.00	6	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:NE	0.56	2.15	9	1
1:A:17:SER:OG	1:A:19:ASP:OD1	0.56	2.23	11	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:HB2	0.56	1.76	11	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:ND1	0.56	2.68	13	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:C	0.56	2.74	16	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:12:TYR:CZ	0.56	2.35	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LYS:CG	1:A:24:LEU:HD21	0.56	2.30	18	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:20:LYS:HD2	0.56	1.76	1	1
1:A:23:LYS:CG	1:A:24:LEU:N	0.56	2.68	1	4
1:A:50:PHE:CZ	1:A:59:PRO:CB	0.56	2.88	1	3
1:A:12:TYR:HE1	1:A:45:TYR:CD1	0.56	2.18	4	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.56	2.88	5	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:88:PRO:HD3	0.56	1.77	7	3
1:A:12:TYR:HH	1:A:45:TYR:HE1	0.56	1.33	9	1
1:A:29:GLY:C	1:A:50:PHE:CE2	0.56	2.84	9	2
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:HG2	0.56	1.77	13	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG2	0.56	1.98	13	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:90:LEU:HD21	0.56	2.30	14	1
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:CB	0.56	2.83	5	2
1:A:90:LEU:CD1	1:A:94:HIS:HE1	0.56	2.14	19	11
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	1.99	5	3
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:CG2	0.56	2.49	4	4
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:HB3	0.56	1.77	14	3
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HG	0.56	2.24	11	5
1:A:6:LEU:CD2	1:A:36:VAL:HG11	0.56	2.30	6	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CZ2	0.56	2.88	9	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:75:ARG:NH2	0.56	2.38	9	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HD2	0.56	1.99	10	1
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:CD	0.56	2.30	11	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:HB3	0.56	2.15	14	1
1:A:68:GLU:HG2	1:A:75:ARG:O	0.56	1.99	17	3
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE2	0.56	1.78	19	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:CB	0.56	2.13	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HB2	0.56	2.30	1	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:CB	0.56	2.30	14	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:O	0.56	2.00	11	5
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.26	2	1
1:A:75:ARG:C	1:A:75:ARG:HD3	0.56	2.22	12	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:102:VAL:CG1	0.56	2.62	13	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:84:PHE:CA	0.56	2.30	13	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:CB	0.56	2.83	15	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:NH1	0.56	2.38	18	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:HA	0.56	2.00	1	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HB3	0.56	2.01	11	4
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:NE	0.56	2.16	4	2
1:A:38:ASP:CG	1:A:38:ASP:O	0.56	2.48	20	4
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HD3	0.56	2.26	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:NE	0.56	2.16	11	2
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:HD2	0.56	2.25	14	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:30:LYS:HB3	0.56	2.16	18	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:C	0.56	2.47	16	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG13	0.56	2.31	16	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HG3	0.56	2.00	16	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD13	0.56	2.25	18	1
1:A:101:LEU:CG	1:A:104:ARG:HA	0.56	2.30	18	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:109:VAL:HB	0.56	2.36	19	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:CD	0.56	2.31	1	1
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LYS:HG3	0.56	2.01	2	2
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:OG1	0.56	2.21	13	5
1:A:78:VAL:O	1:A:101:LEU:HD21	0.56	2.00	5	3
1:A:37:ARG:CZ	1:A:37:ARG:CB	0.56	2.84	6	2
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:CB	0.56	2.88	18	4
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD11	0.56	2.31	17	3
1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:O	0.56	2.54	13	1
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:HE	0.56	2.11	15	1
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:N	0.56	2.64	17	4
1:A:11:TRP:CH2	1:A:91:ILE:HG13	0.56	2.36	9	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:HG3	0.56	2.30	12	1
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB2	0.56	1.78	1	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:33:ALA:C	0.56	2.25	3	1
1:A:51:THR:HB	1:A:103:THR:CG2	0.56	2.31	4	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG21	0.56	1.78	20	2
1:A:50:PHE:CZ	1:A:59:PRO:HB3	0.56	2.36	20	4
1:A:52:LYS:C	1:A:52:LYS:HD2	0.56	2.26	7	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:97:ASN:O	0.56	2.48	7	1
1:A:5:ASN:CG	1:A:9:TYR:OH	0.56	2.48	9	1
1:A:67:LYS:C	1:A:77:TYR:HB2	0.56	2.26	14	1
1:A:61:ILE:HD11	1:A:63:HIS:HE1	0.56	1.60	16	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:CD2	0.56	2.79	18	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:CA	0.56	2.89	8	7
1:A:60:CYS:O	1:A:60:CYS:SG	0.56	2.64	18	2
1:A:75:ARG:CB	1:A:76:TYR:CD1	0.56	2.88	5	3
1:A:51:THR:HG23	1:A:59:PRO:CB	0.56	2.22	4	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:51:THR:N	0.56	2.74	9	5
1:A:81:LYS:HE3	1:A:82:TYR:HD1	0.56	1.61	6	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE2	0.56	2.94	6	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:16:ILE:HG12	0.56	2.30	13	1
1:A:87:ILE:C	1:A:90:LEU:CD2	0.56	2.79	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ARG:CB	1:A:37:ARG:HH11	0.56	2.14	16	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:11:TRP:CZ3	0.56	2.85	17	1
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:CD1	0.56	2.31	20	1
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:HB3	0.56	1.76	5	5
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CG	0.56	2.66	16	2
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:O	0.56	1.99	16	5
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG11	0.56	1.78	11	1
1:A:5:ASN:HB2	1:A:8:THR:HG21	0.56	1.77	14	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:33:ALA:CB	0.56	2.30	14	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HB2	0.55	1.75	3	6
1:A:80:GLU:C	1:A:81:LYS:CG	0.55	2.79	19	5
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HG21	0.55	2.36	2	2
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD12	0.55	2.30	5	7
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HD11	0.55	1.78	17	3
1:A:24:LEU:HD11	1:A:111:GLY:N	0.55	2.16	5	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:CG1	0.55	2.31	9	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HB3	0.55	2.16	9	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HA	0.55	2.01	10	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:85:ASP:OD1	0.55	2.39	13	1
1:A:67:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CB	0.55	2.30	14	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:H	0.55	1.60	20	1
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG3	0.55	2.27	4	3
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:CB	0.55	2.53	18	4
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HE3	0.55	2.16	6	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CE1	0.55	2.35	6	2
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:HE1	0.55	2.14	6	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:HD13	0.55	2.26	7	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:N	0.55	2.16	7	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HD2	0.55	1.78	8	2
1:A:75:ARG:NH1	1:A:85:ASP:CG	0.55	2.63	13	1
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:HE3	0.55	2.27	17	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:111:GLY:O	0.55	2.38	16	1
1:A:47:VAL:HG11	1:A:91:ILE:HD11	0.55	1.76	18	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE1	0.55	2.25	1	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CD2	0.55	2.36	1	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:HB2	0.55	1.76	6	4
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:HB3	0.55	2.01	8	4
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:CB	0.55	2.14	17	3
1:A:75:ARG:NE	1:A:75:ARG:N	0.55	2.54	7	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:O	0.55	2.01	15	2
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:HB2	0.55	2.01	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ARG:CB	1:A:104:ARG:CZ	0.55	2.84	18	2
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:CD2	0.55	2.85	19	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:CB	0.55	2.70	16	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HD12	0.55	2.36	14	4
1:A:94:HIS:CB	1:A:101:LEU:HD11	0.55	2.31	3	1
1:A:32:GLY:O	1:A:107:TYR:C	0.55	2.49	5	4
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CG	0.55	2.55	19	5
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:O	0.55	2.00	16	3
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.55	2.17	7	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG13	0.55	2.31	11	2
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CD1	0.55	2.36	7	1
1:A:23:LYS:CE	1:A:24:LEU:CB	0.55	2.84	8	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE1	0.55	2.37	14	3
1:A:109:VAL:HG13	1:A:109:VAL:O	0.55	2.01	9	1
1:A:51:THR:CA	1:A:60:CYS:O	0.55	2.55	10	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:75:ARG:CB	0.55	2.54	16	2
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:NZ	0.55	2.16	18	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB2	0.55	2.17	14	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG12	0.55	1.78	2	3
1:A:53:ALA:N	1:A:59:PRO:CD	0.55	2.70	4	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:14:LYS:HE3	0.55	2.27	5	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HG21	0.55	2.01	6	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:CG2	0.55	2.77	16	3
1:A:47:VAL:HG12	1:A:64:TYR:HE1	0.55	1.59	14	2
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:CG1	0.55	2.32	17	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:C	0.55	2.24	3	2
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:CG	0.55	2.31	9	1
1:A:16:ILE:O	1:A:16:ILE:HG13	0.55	1.98	10	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:HG23	0.55	2.37	13	3
1:A:75:ARG:CD	1:A:83:VAL:HG11	0.55	2.31	12	2
1:A:77:TYR:CE1	1:A:83:VAL:HG21	0.55	2.36	14	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:N	0.55	2.17	14	4
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG13	0.55	2.27	8	1
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LYS:HB3	0.55	2.01	14	4
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CB	0.55	2.85	14	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:CA	0.55	2.80	16	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD23	0.55	2.02	9	2
1:A:52:LYS:HE2	1:A:52:LYS:C	0.55	2.27	2	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.55	2.60	2	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG3	0.55	2.01	3	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:108:PRO:CD	0.55	2.89	15	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CE1	0.55	2.89	4	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:NE2	0.55	2.68	4	1
1:A:12:TYR:N	1:A:110:CYS:SG	0.55	2.79	7	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:109:VAL:HG21	0.55	1.79	8	1
1:A:19:ASP:O	1:A:22:GLU:HG3	0.55	2.01	9	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:16:ILE:CG1	0.55	2.84	13	1
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:HG2	0.55	2.27	15	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:106:ARG:N	0.55	2.74	8	6
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:HE2	0.55	1.37	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:C	0.55	2.80	4	3
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:CB	0.55	2.32	13	6
1:A:78:VAL:HG21	1:A:101:LEU:HD22	0.55	1.78	4	1
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:O	0.55	2.02	19	2
1:A:66:ILE:HG12	1:A:87:ILE:HG13	0.55	1.79	6	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:76:TYR:HB2	0.55	1.78	10	2
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG23	0.55	2.36	14	2
1:A:23:LYS:HA	1:A:26:LEU:HD21	0.55	1.76	18	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:C	0.55	2.23	1	2
1:A:35:MET:HE3	1:A:111:GLY:N	0.55	2.16	1	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:48:SER:OG	0.55	2.02	2	2
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG22	0.55	1.60	5	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HB	0.55	1.72	18	3
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:CD2	0.55	2.85	9	7
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:HD1	0.55	1.80	17	3
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HG22	0.55	1.79	8	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:78:VAL:CG2	0.55	2.28	8	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:CD	0.55	2.27	9	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:CG1	0.55	2.31	10	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:OG	0.55	2.02	14	1
1:A:76:TYR:HB2	1:A:84:PHE:O	0.55	2.02	15	2
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CD1	0.55	2.37	16	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:38:ASP:N	0.55	2.70	18	1
1:A:35:MET:SD	1:A:110:CYS:HA	0.55	2.42	19	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD12	0.54	2.02	1	2
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:CD2	0.54	2.29	6	2
1:A:52:LYS:HG3	1:A:52:LYS:O	0.54	2.01	1	1
1:A:88:PRO:O	1:A:91:ILE:HB	0.54	2.02	20	11
1:A:25:LEU:HD21	1:A:61:ILE:CD1	0.54	2.26	6	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:H	0.54	1.62	6	2
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:CB	0.54	2.31	9	2
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:HG22	0.54	2.02	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:SER:OG	1:A:20:LYS:HE2	0.54	2.01	15	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD21	0.54	2.32	15	1
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:C	0.54	2.27	17	2
1:A:10:GLU:HB3	1:A:108:PRO:CB	0.54	2.31	8	9
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG12	0.54	1.78	11	3
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:HD2	0.54	1.80	7	4
1:A:18:ARG:HB3	1:A:63:HIS:CD2	0.54	2.37	2	1
1:A:89:LEU:O	1:A:92:GLN:CG	0.54	2.56	8	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:25:LEU:N	0.54	2.16	9	1
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:CD1	0.54	2.85	11	1
1:A:11:TRP:HA	1:A:110:CYS:HB3	0.54	1.78	12	3
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:HG21	0.54	1.79	12	1
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:H	0.54	1.98	13	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:CD	0.54	2.71	13	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:33:ALA:HB3	0.54	1.77	14	1
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG22	0.54	2.02	14	1
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:HG22	0.54	2.27	18	2
1:A:13:ASN:HB3	1:A:37:ARG:HH21	0.54	1.62	19	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:HB3	0.54	1.62	19	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:O	0.54	2.02	1	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:85:ASP:CG	0.54	2.27	2	2
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CG	0.54	2.20	4	5
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HD12	0.54	1.75	3	2
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:HG13	0.54	2.02	4	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG3	0.54	2.02	6	3
1:A:47:VAL:HG12	1:A:64:TYR:CD2	0.54	2.38	5	2
1:A:6:LEU:O	1:A:6:LEU:CD1	0.54	2.43	6	1
1:A:23:LYS:HE3	1:A:24:LEU:CA	0.54	2.33	14	2
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CE1	0.54	2.38	9	1
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CD2	0.54	2.60	9	1
1:A:101:LEU:HD11	1:A:105:LEU:HD23	0.54	1.79	15	2
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:N	0.54	2.15	19	3
1:A:90:LEU:HD12	1:A:94:HIS:HD2	0.54	1.60	15	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG11	0.54	2.37	19	7
1:A:13:ASN:ND2	1:A:111:GLY:HA3	0.54	2.17	1	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:111:GLY:HA3	0.54	2.27	1	1
1:A:38:ASP:CG	1:A:45:TYR:CZ	0.54	2.86	5	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:111:GLY:O	0.54	2.03	11	1
1:A:23:LYS:HE3	1:A:24:LEU:N	0.54	2.18	14	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HB2	0.54	2.32	14	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HE2	0.54	1.78	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CG	0.54	2.86	16	1
1:A:101:LEU:HD23	1:A:101:LEU:N	0.54	2.16	18	1
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:O	0.54	2.02	8	5
1:A:18:ARG:HB2	1:A:22:GLU:OE1	0.54	2.01	1	1
1:A:67:LYS:HE2	1:A:77:TYR:CD2	0.54	2.37	2	2
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:HE3	0.54	1.79	20	5
1:A:35:MET:CE	1:A:37:ARG:HG3	0.54	2.33	3	1
1:A:52:LYS:C	1:A:59:PRO:HG2	0.54	2.28	4	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:14:LYS:HE3	0.54	2.32	5	1
1:A:35:MET:CE	1:A:37:ARG:HB2	0.54	2.31	5	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:CG1	0.54	2.32	6	1
1:A:22:GLU:HB3	1:A:23:LYS:HE3	0.54	1.78	17	2
1:A:52:LYS:C	1:A:52:LYS:CD	0.54	2.80	7	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:102:VAL:CB	0.54	2.86	10	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HD3	0.54	2.02	10	2
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HB2	0.54	2.18	17	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:16:ILE:H	0.54	1.62	1	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HE3	0.54	2.33	1	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:48:SER:CB	0.54	2.56	1	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HB3	0.54	1.80	15	6
1:A:48:SER:HB3	1:A:63:HIS:ND1	0.54	2.17	4	1
1:A:92:GLN:HB2	1:A:96:TYR:OH	0.54	2.02	9	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:63:HIS:ND1	0.54	2.17	6	2
1:A:93:TYR:CG	1:A:97:ASN:HB2	0.54	2.37	8	1
1:A:76:TYR:CE2	1:A:87:ILE:HD11	0.54	2.38	9	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HD2	0.54	2.27	9	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HB2	0.54	1.79	10	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HB2	0.54	2.03	20	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:111:GLY:H	0.54	1.63	20	1
1:A:34:PHE:HA	1:A:49:VAL:HA	0.54	1.80	11	20
1:A:62:LYS:HG2	1:A:102:VAL:HB	0.54	1.78	1	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HB3	0.54	1.77	13	5
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:CD1	0.54	2.75	2	2
1:A:23:LYS:HE3	1:A:24:LEU:HA	0.54	1.80	8	2
1:A:11:TRP:HA	1:A:110:CYS:HB2	0.54	1.79	7	2
1:A:26:LEU:O	1:A:50:PHE:CE2	0.54	2.61	7	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE2	0.54	2.33	12	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:75:ARG:NH1	0.54	2.18	12	1
1:A:23:LYS:O	1:A:26:LEU:HD13	0.54	2.01	14	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:26:LEU:CD1	0.54	2.29	15	1
1:A:11:TRP:C	1:A:110:CYS:HB3	0.54	2.28	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:ARG:HD3	1:A:106:ARG:C	0.54	2.28	16	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:49:VAL:C	0.54	2.80	19	2
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CD	0.54	2.33	19	1
1:A:12:TYR:C	1:A:12:TYR:HD1	0.54	2.11	9	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CG	0.54	2.84	4	4
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:HB2	0.54	1.79	7	5
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:N	0.54	2.33	6	3
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:HG12	0.54	2.28	6	2
1:A:49:VAL:CG1	1:A:105:LEU:CD2	0.54	2.79	6	1
1:A:86:SER:C	1:A:88:PRO:CD	0.54	2.81	13	5
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:CD1	0.54	2.80	10	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:105:LEU:CD2	0.54	2.90	20	3
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CB	0.54	2.91	20	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:33:ALA:C	0.54	2.28	16	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:NH2	0.54	2.17	17	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:LYS:N	0.54	2.18	20	2
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:CB	0.54	2.71	1	3
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CD2	0.54	2.21	14	7
1:A:14:LYS:HG2	1:A:16:ILE:CG2	0.54	2.33	3	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:ASP:OD1	0.54	2.03	3	1
1:A:52:LYS:HE3	1:A:53:ALA:C	0.54	2.28	3	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:HD23	0.54	2.32	5	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:HH11	0.54	2.11	7	1
1:A:12:TYR:HH	1:A:38:ASP:HB2	0.54	1.63	8	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HE3	0.54	2.33	14	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HB	0.54	1.75	18	2
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HG13	0.54	2.02	13	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CB	0.54	2.55	16	1
1:A:7:GLU:OE2	1:A:12:TYR:CD2	0.54	2.61	18	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CE	0.54	2.70	20	1
1:A:69:THR:CA	1:A:75:ARG:CZ	0.54	2.85	20	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:O	0.54	2.56	1	4
1:A:88:PRO:HA	1:A:91:ILE:HB	0.54	1.79	18	7
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HD3	0.54	1.79	2	2
1:A:16:ILE:HG12	1:A:37:ARG:HD2	0.54	1.78	3	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CD2	0.54	2.91	8	2
1:A:6:LEU:HD23	1:A:45:TYR:HB2	0.54	1.80	4	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:HG	0.54	2.27	6	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:81:LYS:N	0.54	2.18	6	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HG3	0.54	1.79	9	1
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:CG1	0.54	2.65	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:HA	1:A:110:CYS:N	0.54	2.18	16	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:HD12	0.53	2.28	1	2
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:HD3	0.53	2.02	1	1
1:A:51:THR:HB	1:A:102:VAL:HG13	0.53	1.80	1	3
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HG23	0.53	2.29	10	4
1:A:5:ASN:C	1:A:9:TYR:CE1	0.53	2.86	5	3
1:A:10:GLU:O	1:A:108:PRO:HB3	0.53	2.02	13	2
1:A:23:LYS:C	1:A:23:LYS:CD	0.53	2.81	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:N	0.53	2.18	10	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:TYR:HB3	0.53	2.17	19	2
1:A:5:ASN:C	1:A:8:THR:HG23	0.53	2.29	19	5
1:A:5:ASN:CG	1:A:9:TYR:CE2	0.53	2.86	1	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CB	0.53	2.56	7	2
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HB	0.53	2.36	6	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:CD	0.53	2.86	8	4
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:O	0.53	2.03	9	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:CB	0.53	2.72	9	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:75:ARG:N	0.53	2.17	13	2
1:A:6:LEU:H	1:A:6:LEU:CD2	0.53	2.16	20	2
1:A:14:LYS:HE3	1:A:14:LYS:CA	0.53	2.34	20	1
1:A:81:LYS:HD2	1:A:81:LYS:O	0.53	2.03	5	1
1:A:92:GLN:OE1	1:A:96:TYR:CE2	0.53	2.61	9	1
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:HD22	0.53	2.28	15	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:12:TYR:CD1	0.53	2.38	17	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CD1	0.53	2.83	20	1
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:HD3	0.53	2.27	1	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:91:ILE:HD13	0.53	2.33	9	4
1:A:6:LEU:HD23	1:A:45:TYR:CB	0.53	2.34	4	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:59:PRO:HB2	0.53	2.24	4	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:CB	0.53	2.82	6	1
1:A:18:ARG:HB3	1:A:46:THR:HG21	0.53	1.81	6	1
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:HG23	0.53	2.01	10	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:30:LYS:O	0.53	2.04	8	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CE2	0.53	2.39	11	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:11:TRP:CZ3	0.53	2.38	11	1
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:HD3	0.53	1.79	11	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:83:VAL:CG1	0.53	2.86	12	1
1:A:75:ARG:HA	1:A:85:ASP:N	0.53	2.19	13	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:65:HIS:C	0.53	2.86	15	1
1:A:10:GLU:O	1:A:10:GLU:CG	0.53	2.57	16	5
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:HE3	0.53	1.81	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLN:CA	1:A:95:GLN:NE2	0.53	2.71	12	3
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD2	0.53	2.90	10	8
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:HD2	0.53	1.80	8	5
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:OE1	0.53	2.04	11	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG12	0.53	1.81	11	2
1:A:47:VAL:HG21	1:A:66:ILE:HD11	0.53	1.77	19	3
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HG3	0.53	2.03	10	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:CG2	0.53	2.92	13	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:CG	0.53	2.33	1	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG13	0.53	1.81	16	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:HB3	0.53	2.03	3	3
1:A:76:TYR:HD1	1:A:84:PHE:O	0.53	1.83	9	5
1:A:76:TYR:C	1:A:83:VAL:HG13	0.53	2.29	11	1
1:A:47:VAL:HG13	1:A:66:ILE:CD1	0.53	2.32	18	1
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:CE	0.53	2.72	20	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:61:ILE:CG1	0.53	2.33	7	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:CD	0.53	2.87	1	1
1:A:16:ILE:CA	1:A:20:LYS:HG3	0.53	2.34	15	2
1:A:31:GLU:CB	1:A:52:LYS:H	0.53	2.17	4	13
1:A:46:THR:HA	1:A:64:TYR:O	0.53	2.03	8	2
1:A:45:TYR:CB	1:A:66:ILE:HD13	0.53	2.33	10	1
1:A:31:GLU:N	1:A:52:LYS:HB2	0.53	2.18	14	1
1:A:16:ILE:CB	1:A:20:LYS:HD2	0.53	2.34	18	3
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:OG	0.53	2.57	1	2
1:A:12:TYR:CA	1:A:36:VAL:HG22	0.53	2.34	16	6
1:A:7:GLU:HB3	1:A:12:TYR:CD2	0.53	2.39	4	1
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD12	0.53	1.79	8	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HD2	0.53	1.80	1	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CA	0.53	2.56	1	1
1:A:36:VAL:CG1	1:A:47:VAL:HG12	0.53	2.34	4	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:105:LEU:CD2	0.53	2.17	16	7
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HG2	0.53	2.34	6	3
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG2	0.53	2.04	20	5
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LYS:HB2	0.53	2.03	16	3
1:A:79:ALA:O	1:A:80:GLU:C	0.53	2.52	8	1
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:HB2	0.53	2.03	18	4
1:A:25:LEU:C	1:A:28:THR:HG22	0.53	2.29	16	3
1:A:62:LYS:CE	1:A:102:VAL:CG1	0.53	2.87	10	2
1:A:75:ARG:N	1:A:75:ARG:CD	0.53	2.71	13	1
1:A:46:THR:CA	1:A:66:ILE:HD12	0.53	2.34	14	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:17:SER:O	0.53	2.56	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HA	0.53	2.03	15	2
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:CB	0.53	2.30	19	2
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:CE1	0.53	2.92	15	4
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HG	0.53	1.80	13	2
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HD13	0.53	1.80	10	1
1:A:75:ARG:CB	1:A:83:VAL:HG12	0.53	2.32	13	1
1:A:5:ASN:CG	1:A:6:LEU:HD22	0.53	2.26	17	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG2	0.52	2.05	1	2
1:A:62:LYS:HZ2	1:A:102:VAL:HB	0.52	1.63	1	1
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:CZ	0.52	2.81	3	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:CG2	0.52	2.72	3	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:HD2	0.52	1.81	12	2
1:A:53:ALA:HB2	1:A:59:PRO:HG3	0.52	1.81	4	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CG1	0.52	2.92	9	2
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HB3	0.52	2.04	20	2
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:C	0.52	2.30	8	2
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HB	0.52	2.34	9	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:HD2	0.52	1.63	18	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD22	0.52	1.81	11	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:37:ARG:HG3	0.52	1.81	15	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:OD1	0.52	2.04	1	1
1:A:75:ARG:HE	1:A:75:ARG:CA	0.52	2.18	3	2
1:A:52:LYS:HE3	1:A:52:LYS:O	0.52	2.04	7	2
1:A:19:ASP:OD2	1:A:20:LYS:HD3	0.52	2.03	11	1
1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:CD1	0.52	2.17	11	1
1:A:101:LEU:CD2	1:A:104:ARG:CA	0.52	2.82	14	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:CZ	0.52	2.33	17	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD11	0.52	2.34	18	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CB	0.52	2.58	19	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:61:ILE:HB	0.52	2.34	1	6
1:A:12:TYR:HE2	1:A:45:TYR:CE1	0.52	2.22	9	4
1:A:22:GLU:HG2	1:A:26:LEU:HD21	0.52	1.78	19	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HE3	0.52	1.80	2	1
1:A:45:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD11	0.52	2.39	3	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CD2	0.52	2.39	9	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HB2	0.52	2.33	16	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:22:GLU:CD	0.52	2.30	16	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CG	0.52	2.86	4	1
1:A:14:LYS:C	1:A:14:LYS:HD2	0.52	2.29	6	2
1:A:31:GLU:CD	1:A:103:THR:HG21	0.52	2.29	11	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG23	0.52	2.19	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG23	0.52	2.05	16	1
1:A:92:GLN:C	1:A:95:GLN:OE1	0.52	2.53	17	1
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:OE2	0.52	2.26	1	1
1:A:95:GLN:N	1:A:104:ARG:HD2	0.52	2.19	2	1
1:A:47:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CE2	0.52	2.39	4	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:35:MET:HB3	0.52	1.81	5	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.52	2.28	12	2
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CG	0.52	2.58	13	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HG22	0.52	1.81	20	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CE	0.52	2.87	19	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:NE	0.52	2.73	1	1
1:A:90:LEU:CG	1:A:94:HIS:HE1	0.52	2.14	17	10
1:A:62:LYS:HZ2	1:A:62:LYS:C	0.52	2.12	5	1
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:SG	0.52	2.67	10	3
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:HD3	0.52	2.19	11	6
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:HB3	0.52	1.80	8	1
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:HE2	0.52	2.29	19	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CD1	0.52	2.39	20	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:111:GLY:HA3	0.52	2.05	1	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CG	0.52	2.58	3	2
1:A:90:LEU:CD1	1:A:94:HIS:CE1	0.52	2.92	1	7
1:A:90:LEU:HD11	1:A:94:HIS:HE1	0.52	1.64	1	2
1:A:102:VAL:CG1	1:A:102:VAL:O	0.52	2.57	2	1
1:A:51:THR:HB	1:A:103:THR:OG1	0.52	2.05	8	2
1:A:12:TYR:CE2	1:A:45:TYR:CD1	0.52	2.97	9	1
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:HB	0.52	1.81	9	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:36:VAL:N	0.52	2.20	11	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:16:ILE:CG1	0.52	2.35	13	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:HB2	0.52	1.81	19	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:23:LYS:N	0.52	2.71	20	1
1:A:38:ASP:O	1:A:38:ASP:OD1	0.52	2.28	14	2
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CB	0.52	2.88	6	1
1:A:18:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CD	0.52	2.73	8	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:82:TYR:CB	0.52	2.35	11	1
1:A:25:LEU:N	1:A:35:MET:CE	0.52	2.72	16	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:33:ALA:HB2	0.52	1.80	16	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HB3	0.52	2.05	18	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:THR:OG1	0.52	2.05	19	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:30:LYS:HA	0.52	1.81	19	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CD2	0.52	2.23	8	7
1:A:75:ARG:H	1:A:85:ASP:N	0.52	2.03	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:HD1	0.52	2.18	9	5
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CD1	0.52	2.22	8	6
1:A:19:ASP:HB3	1:A:20:LYS:HE3	0.52	1.81	6	1
1:A:51:THR:CB	1:A:102:VAL:HG23	0.52	2.34	13	1
1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CD	0.52	2.73	14	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:52:LYS:O	0.52	2.05	18	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:35:MET:HA	0.52	2.35	18	6
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG13	0.52	1.81	2	1
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:NH2	0.52	2.20	3	2
1:A:13:ASN:N	1:A:36:VAL:O	0.52	2.36	4	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:CD2	0.52	2.40	9	3
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:HE3	0.52	1.80	5	1
1:A:62:LYS:HG2	1:A:63:HIS:N	0.52	2.20	7	2
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG12	0.52	2.04	20	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:91:ILE:HG12	0.52	2.39	9	1
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA2	0.52	2.05	9	2
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CD1	0.52	2.92	17	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:12:TYR:CD2	0.52	2.87	18	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:104:ARG:HB2	0.52	2.20	20	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:HB	0.51	2.45	2	1
1:A:47:VAL:HG13	1:A:49:VAL:HG22	0.51	1.81	5	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:CD1	0.51	2.71	7	1
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB3	0.51	2.05	11	2
1:A:52:LYS:HE2	1:A:53:ALA:O	0.51	2.04	12	1
1:A:90:LEU:CD1	1:A:94:HIS:CD2	0.51	2.89	15	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:105:LEU:HD23	0.51	2.35	15	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG21	0.51	2.34	16	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:105:LEU:HD13	0.51	1.81	17	1
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:HE3	0.51	2.35	1	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:26:LEU:CD2	0.51	2.35	2	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD12	0.51	2.35	12	3
1:A:78:VAL:CG2	1:A:90:LEU:HD11	0.51	2.30	8	1
1:A:6:LEU:O	1:A:6:LEU:HD12	0.51	2.04	9	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG21	0.51	1.82	11	2
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HB	0.51	1.80	12	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:HG2	0.51	1.82	13	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG21	0.51	1.82	14	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:CA	0.51	2.88	16	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:66:ILE:HD13	0.51	1.82	18	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:CB	0.51	2.34	1	3
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HB2	0.51	1.82	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:N	0.51	2.40	9	4
1:A:22:GLU:CD	1:A:26:LEU:HD11	0.51	2.30	10	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:CE1	0.51	2.94	13	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CD	0.51	2.53	13	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HG2	0.51	2.03	17	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CG2	0.51	2.34	18	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:61:ILE:HG21	0.51	1.83	19	1
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:O	0.51	2.27	20	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG22	0.51	1.80	3	1
1:A:92:GLN:HG2	1:A:93:TYR:N	0.51	2.20	10	3
1:A:12:TYR:CG	1:A:36:VAL:O	0.51	2.62	20	3
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:HE1	0.51	2.02	18	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HD2	0.51	2.05	5	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE1	0.51	2.17	6	1
1:A:95:GLN:O	1:A:95:GLN:HG2	0.51	2.06	7	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:HB3	0.51	2.38	8	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG3	0.51	2.05	9	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:N	0.51	2.20	13	2
1:A:84:PHE:CB	1:A:90:LEU:HB2	0.51	2.35	14	1
1:A:5:ASN:HA	1:A:8:THR:HG23	0.51	1.81	7	2
1:A:21:ALA:HA	1:A:35:MET:HG3	0.51	1.83	2	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.51	2.84	8	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CD1	0.51	2.98	9	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:59:PRO:HG3	0.51	2.20	10	1
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:C	0.51	2.50	12	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:HB2	0.51	2.40	13	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG21	0.51	2.36	14	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:28:THR:OG1	0.51	2.58	15	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:TYR:CB	0.51	2.73	19	2
1:A:12:TYR:HE1	1:A:45:TYR:CG	0.51	2.23	4	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HB2	0.51	1.82	6	2
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HG12	0.51	2.05	7	2
1:A:62:LYS:NZ	1:A:101:LEU:HA	0.51	2.21	18	2
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HE3	0.51	2.05	11	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:CD2	0.51	2.88	13	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:85:ASP:CA	0.51	2.77	13	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:HG21	0.51	1.78	15	1
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HD2	0.51	1.81	17	2
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:HA	0.51	2.06	18	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:NH2	0.51	2.43	18	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:104:ARG:HB2	0.51	1.82	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HG3	0.51	1.83	20	3
1:A:104:ARG:O	1:A:105:LEU:C	0.51	2.53	5	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:CB	0.51	2.59	9	2
1:A:52:LYS:HE2	1:A:59:PRO:HG3	0.51	1.83	10	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:75:ARG:N	0.51	2.72	15	1
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:H	0.51	2.14	17	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:CB	0.51	2.19	19	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CE	0.51	2.83	20	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:45:TYR:CE1	0.51	2.93	1	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:48:SER:HB3	0.51	2.06	1	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:LEU:HG	0.51	1.82	5	3
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:HG21	0.51	1.64	2	3
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD21	0.51	2.31	5	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:111:GLY:H	0.51	1.66	5	1
1:A:18:ARG:HG2	1:A:19:ASP:N	0.51	2.19	6	1
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HG2	0.51	2.04	8	1
1:A:53:ALA:O	1:A:59:PRO:HD3	0.51	2.05	8	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:97:ASN:HB2	0.51	2.40	8	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:23:LYS:HD2	0.51	2.06	17	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:102:VAL:CG1	0.51	2.89	17	1
1:A:94:HIS:O	1:A:95:GLN:NE2	0.51	2.44	20	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG12	0.51	2.36	1	2
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HD2	0.51	2.06	2	2
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.51	2.59	11	2
1:A:14:LYS:HD2	1:A:16:ILE:HG13	0.51	1.81	13	1
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:HD21	0.51	1.82	15	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:94:HIS:CE1	0.51	2.40	17	1
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:CD	0.51	2.36	18	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HD2	0.51	2.19	20	1
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG13	0.51	2.41	5	5
1:A:10:GLU:OE1	1:A:110:CYS:SG	0.51	2.69	2	2
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CZ2	0.51	2.94	11	2
1:A:95:GLN:CB	1:A:105:LEU:HB2	0.51	2.36	15	3
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:HB2	0.51	2.06	14	1
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:N	0.51	2.69	16	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:101:LEU:HB2	0.50	2.21	1	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.50	2.89	17	3
1:A:34:PHE:HE2	1:A:105:LEU:C	0.50	2.13	12	2
1:A:52:LYS:HD2	1:A:59:PRO:HG3	0.50	1.83	2	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:78:VAL:HG13	0.50	1.82	2	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:CD1	0.50	2.58	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HD2	0.50	2.06	6	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:101:LEU:HB3	0.50	2.21	8	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HB3	0.50	2.21	11	1
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:CG	0.50	2.86	12	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CG	0.50	2.56	16	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:95:GLN:H	0.50	2.00	17	1
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:NH2	0.50	2.74	20	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:CD	0.50	2.31	14	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HB	0.50	2.37	20	1
1:A:5:ASN:CA	1:A:8:THR:HG23	0.50	2.36	7	3
1:A:26:LEU:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.50	2.32	5	2
1:A:33:ALA:C	1:A:109:VAL:CG2	0.50	2.83	5	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:CA	0.50	2.36	6	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:33:ALA:CB	0.50	2.86	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:H	0.50	1.67	10	1
1:A:66:ILE:C	1:A:77:TYR:O	0.50	2.55	14	1
1:A:76:TYR:HB3	1:A:90:LEU:HD23	0.50	1.76	15	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:47:VAL:CA	0.50	2.35	15	8
1:A:22:GLU:CA	1:A:25:LEU:HG	0.50	2.37	5	2
1:A:26:LEU:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.50	2.90	7	1
1:A:95:GLN:HA	1:A:104:ARG:CB	0.50	2.36	7	2
1:A:107:TYR:HD1	1:A:108:PRO:N	0.50	2.03	9	1
1:A:7:GLU:O	1:A:7:GLU:HG3	0.50	2.05	13	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:105:LEU:HD21	0.50	2.41	10	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HE2	0.50	2.06	11	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CB	0.50	2.37	12	1
1:A:13:ASN:C	1:A:37:ARG:CZ	0.50	2.85	16	1
1:A:14:LYS:HE3	1:A:14:LYS:N	0.50	2.21	16	1
1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:HE3	0.50	2.34	18	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:66:ILE:CD1	0.50	2.37	18	1
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.50	2.72	20	1
1:A:53:ALA:HB3	1:A:59:PRO:CA	0.50	2.31	19	3
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HG2	0.50	1.84	2	4
1:A:34:PHE:HB3	1:A:49:VAL:CB	0.50	2.37	7	6
1:A:52:LYS:CE	1:A:53:ALA:O	0.50	2.60	2	1
1:A:107:TYR:HD1	1:A:108:PRO:HD2	0.50	1.65	2	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:CG	0.50	2.74	6	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:102:VAL:CB	0.50	2.37	20	2
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HB	0.50	1.83	6	1
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:CG2	0.50	2.19	7	2
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:HB	0.50	1.66	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD1	0.50	2.95	14	2
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:O	0.50	2.64	10	1
1:A:90:LEU:HD12	1:A:94:HIS:HE1	0.50	1.67	19	2
1:A:62:LYS:CD	1:A:63:HIS:N	0.50	2.74	13	1
1:A:23:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE2	0.50	1.81	18	1
1:A:97:ASN:C	1:A:104:ARG:CZ	0.50	2.85	18	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:LEU:CA	0.50	2.37	13	5
1:A:37:ARG:HG2	1:A:38:ASP:N	0.50	2.21	2	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:HD1	0.50	2.03	2	1
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:HG21	0.50	2.31	8	2
1:A:51:THR:HG22	1:A:60:CYS:N	0.50	2.22	6	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:35:MET:HG3	0.50	1.84	15	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HB2	0.50	2.06	15	2
1:A:51:THR:HB	1:A:103:THR:CB	0.50	2.36	9	1
1:A:5:ASN:HA	1:A:8:THR:CG2	0.50	2.37	7	2
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:C	0.50	2.55	11	1
1:A:33:ALA:CA	1:A:107:TYR:O	0.50	2.59	11	4
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CB	0.50	2.58	18	2
1:A:97:ASN:OD1	1:A:98:GLY:N	0.50	2.45	14	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:35:MET:SD	0.50	3.00	20	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HG13	0.50	2.35	16	1
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:CD2	0.50	2.64	16	1
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:CE1	0.50	2.42	18	1
1:A:11:TRP:O	1:A:36:VAL:HG22	0.50	2.07	4	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:104:ARG:N	0.50	2.21	9	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:38:ASP:HB2	0.50	2.22	10	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:75:ARG:HE	0.50	2.20	11	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:HD1	0.50	1.62	4	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HD3	0.50	1.82	4	2
1:A:51:THR:CB	1:A:102:VAL:CG2	0.50	2.90	10	2
1:A:62:LYS:CD	1:A:102:VAL:H	0.50	2.19	10	2
1:A:31:GLU:HG2	1:A:51:THR:OG1	0.50	2.06	11	1
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:HB3	0.50	1.83	15	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:HG3	0.50	2.06	17	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:HD2	0.49	2.20	2	10
1:A:23:LYS:HE2	1:A:24:LEU:HB3	0.49	1.83	8	2
1:A:30:LYS:N	1:A:50:PHE:HE2	0.49	2.04	9	3
1:A:20:LYS:CE	1:A:20:LYS:H	0.49	2.16	6	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:11:TRP:N	0.49	2.79	9	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:O	0.49	2.07	11	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:N	0.49	2.19	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:CG	0.49	2.35	12	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HG23	0.49	2.36	14	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:83:VAL:HG21	0.49	2.38	14	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD1	0.49	2.94	14	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:33:ALA:HB2	0.49	2.36	16	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HD3	0.49	2.37	19	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:48:SER:HB3	0.49	2.07	1	1
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CE1	0.49	2.23	1	2
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:HD1	0.49	1.64	4	8
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:O	0.49	2.29	4	2
1:A:51:THR:O	1:A:59:PRO:CA	0.49	2.60	3	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HH21	0.49	2.06	3	2
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HB2	0.49	2.32	10	3
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD2	0.49	1.84	5	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:26:LEU:HB3	0.49	2.07	6	1
1:A:53:ALA:N	1:A:59:PRO:HA	0.49	2.22	6	2
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CB	0.49	2.37	6	1
1:A:100:GLY:N	1:A:104:ARG:HG2	0.49	2.22	6	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:85:ASP:CA	0.49	2.96	13	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:HG12	0.49	2.47	14	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE3	0.49	1.84	19	1
1:A:75:ARG:HH22	1:A:83:VAL:CG1	0.49	2.19	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:HZ3	0.49	2.21	1	5
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:HD1	0.49	1.64	1	2
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:HG22	0.49	1.84	16	3
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:CA	0.49	2.37	4	6
1:A:7:GLU:O	1:A:7:GLU:OE1	0.49	2.29	3	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG3	0.49	2.37	4	2
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:HD3	0.49	2.07	4	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HD13	0.49	1.85	6	1
1:A:31:GLU:CA	1:A:52:LYS:CB	0.49	2.90	14	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD2	0.49	2.20	14	1
1:A:91:ILE:HD12	1:A:105:LEU:CD2	0.49	2.37	14	1
1:A:95:GLN:CG	1:A:104:ARG:HB2	0.49	2.36	20	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:111:GLY:HA2	0.49	1.82	2	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HB	0.49	1.83	3	1
1:A:53:ALA:HB2	1:A:59:PRO:HA	0.49	1.84	5	2
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:HA	0.49	2.06	8	1
1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:OE2	0.49	2.45	9	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HG3	0.49	1.78	9	1
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:HG12	0.49	2.08	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HG2	0.49	1.85	15	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HA	0.49	1.67	17	1
1:A:11:TRP:HZ3	1:A:87:ILE:CG2	0.49	2.17	14	4
1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CD	0.49	2.70	6	4
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD21	0.49	2.41	7	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HG2	0.49	1.82	9	2
1:A:64:TYR:CD1	1:A:101:LEU:HB3	0.49	2.42	16	1
1:A:101:LEU:HG	1:A:104:ARG:HA	0.49	1.85	18	1
1:A:46:THR:N	1:A:65:HIS:HD2	0.49	2.05	19	1
1:A:16:ILE:CA	1:A:20:LYS:CE	0.49	2.91	3	1
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:HD2	0.49	1.83	5	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:20:LYS:HE3	0.49	1.83	16	2
1:A:34:PHE:N	1:A:35:MET:CE	0.49	2.75	9	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:87:ILE:HG13	0.49	2.38	12	1
1:A:87:ILE:C	1:A:90:LEU:HD23	0.49	2.25	13	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:66:ILE:HD13	0.49	2.37	18	1
1:A:47:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CD2	0.49	2.43	18	1
1:A:50:PHE:HD1	1:A:61:ILE:HB	0.49	1.67	19	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:75:ARG:O	0.49	2.58	20	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CD1	0.49	2.24	10	4
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:CG2	0.49	2.37	4	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HD1	0.49	1.68	5	2
1:A:75:ARG:CB	1:A:85:ASP:CA	0.49	2.74	11	2
1:A:52:LYS:HD2	1:A:53:ALA:O	0.49	2.06	7	1
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD22	0.49	2.37	10	1
1:A:101:LEU:CD2	1:A:101:LEU:C	0.49	2.85	14	1
1:A:52:LYS:HA	1:A:59:PRO:HB3	0.49	1.84	14	3
1:A:79:ALA:C	1:A:80:GLU:OE1	0.49	2.55	1	1
1:A:64:TYR:HH	1:A:101:LEU:HD13	0.49	1.68	2	2
1:A:53:ALA:H	1:A:59:PRO:HD3	0.49	1.67	4	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.49	2.76	6	1
1:A:30:LYS:HA	1:A:52:LYS:CD	0.49	2.38	8	1
1:A:30:LYS:HA	1:A:52:LYS:HD2	0.49	1.85	8	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:CD2	0.49	2.73	8	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:36:VAL:CB	0.49	2.29	11	1
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:HD2	0.49	1.86	13	1
1:A:62:LYS:C	1:A:62:LYS:CD	0.49	2.85	13	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CB	0.49	2.20	18	2
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CG2	0.49	2.60	18	2
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:N	0.49	2.38	16	5
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:CZ	0.49	2.86	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:N	0.49	2.45	1	3
1:A:52:LYS:CE	1:A:59:PRO:HG3	0.49	2.37	10	2
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:HD12	0.49	1.68	12	1
1:A:20:LYS:NZ	1:A:23:LYS:HD2	0.49	2.23	2	1
1:A:51:THR:O	1:A:59:PRO:C	0.49	2.56	3	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:12:TYR:CD2	0.49	2.96	4	2
1:A:12:TYR:OH	1:A:45:TYR:CE1	0.49	2.55	9	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HG	0.49	2.42	14	2
1:A:16:ILE:HD11	1:A:17:SER:O	0.49	2.07	14	2
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CG	0.49	2.81	17	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HG2	0.49	2.37	18	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:CZ	0.49	2.86	18	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:111:GLY:O	0.49	2.08	19	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:111:GLY:CA	0.48	2.21	16	6
1:A:91:ILE:HG22	1:A:92:GLN:N	0.48	2.22	16	4
1:A:16:ILE:CG1	1:A:17:SER:H	0.48	2.21	3	3
1:A:45:TYR:CB	1:A:66:ILE:HG13	0.48	2.38	2	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:109:VAL:O	0.48	2.62	10	3
1:A:53:ALA:N	1:A:59:PRO:HD3	0.48	2.23	4	1
1:A:53:ALA:H	1:A:59:PRO:CD	0.48	2.20	4	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG12	0.48	2.23	4	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HB	0.48	2.22	9	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD13	0.48	2.29	10	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:HB	0.48	2.07	13	1
1:A:90:LEU:HD23	1:A:91:ILE:H	0.48	1.64	13	1
1:A:46:THR:HA	1:A:66:ILE:HD12	0.48	1.84	14	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HG2	0.48	1.84	18	2
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:CB	0.48	2.96	17	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HB	0.48	2.26	18	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:NH2	0.48	2.71	18	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.38	11	2
1:A:80:GLU:CD	1:A:80:GLU:H	0.48	2.16	17	2
1:A:20:LYS:CE	1:A:23:LYS:HE3	0.48	2.37	2	1
1:A:13:ASN:CA	1:A:16:ILE:CD1	0.48	2.91	4	1
1:A:38:ASP:HB3	1:A:45:TYR:CD1	0.48	2.43	19	3
1:A:46:THR:CB	1:A:65:HIS:HA	0.48	2.38	4	2
1:A:48:SER:CB	1:A:63:HIS:ND1	0.48	2.77	4	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:64:TYR:CE1	0.48	2.42	7	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:105:LEU:HD23	0.48	2.08	7	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HD11	0.48	2.09	8	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LYS:HE3	0.48	1.85	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HB2	0.48	2.08	17	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:48:SER:HB3	0.48	2.33	1	1
1:A:46:THR:O	1:A:46:THR:HG22	0.48	2.07	2	3
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CB	0.48	2.38	3	2
1:A:51:THR:HB	1:A:103:THR:HG21	0.48	1.84	4	1
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:HG3	0.48	1.84	12	2
1:A:62:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HG23	0.48	1.85	15	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CB	0.48	2.37	17	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:HG11	0.48	1.85	18	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CD2	0.48	2.42	20	1
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:HD2	0.48	1.85	7	4
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE2	0.48	1.84	6	3
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CD2	0.48	2.97	5	2
1:A:62:LYS:HZ3	1:A:101:LEU:CB	0.48	2.22	7	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:29:GLY:N	0.48	2.77	8	2
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:CD1	0.48	2.21	18	2
1:A:23:LYS:HZ2	1:A:24:LEU:HA	0.48	1.66	14	1
1:A:90:LEU:CD1	1:A:94:HIS:NE2	0.48	2.77	15	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD2	0.48	2.38	19	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:23:LYS:HE2	0.48	1.83	1	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HD2	0.48	1.85	1	1
1:A:89:LEU:C	1:A:92:GLN:HG2	0.48	2.33	5	1
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG12	0.48	2.33	8	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:CB	0.48	2.91	10	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HB3	0.48	2.32	18	2
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HG22	0.48	2.40	18	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:CG	0.48	2.37	3	3
1:A:29:GLY:C	1:A:50:PHE:HE2	0.48	2.16	9	3
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG13	0.48	1.80	10	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:C	0.48	2.33	13	1
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:HD1	0.48	1.86	13	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:37:ARG:HH22	0.48	2.21	16	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:35:MET:CG	0.48	2.88	20	2
1:A:95:GLN:C	1:A:104:ARG:NH1	0.48	2.72	19	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:HE1	0.48	2.22	1	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:HD1	0.48	2.19	14	5
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CG	0.48	2.95	3	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HG3	0.48	1.84	3	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:48:SER:HB2	0.48	1.86	4	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CZ	0.48	2.81	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:HD2	0.48	2.39	18	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CG1	0.48	2.92	10	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:O	0.48	2.61	11	1
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:CG1	0.48	2.39	12	1
1:A:67:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HA	0.48	1.86	12	1
1:A:14:LYS:C	1:A:37:ARG:HH22	0.48	2.17	19	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ARG:HA	0.48	2.09	20	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:SER:C	0.48	2.55	20	2
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HE3	0.48	2.39	2	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:61:ILE:CD1	0.48	2.86	6	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE2	0.48	2.26	6	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:CE1	0.48	2.97	8	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HB3	0.48	2.38	9	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:34:PHE:HA	0.48	1.84	11	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:26:LEU:HD21	0.48	1.86	18	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:CE	0.48	2.21	20	1
1:A:51:THR:CB	1:A:60:CYS:O	0.48	2.62	16	3
1:A:51:THR:CG2	1:A:102:VAL:CG1	0.48	2.91	2	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:108:PRO:N	0.48	2.82	2	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HG13	0.48	1.86	3	2
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:88:PRO:CA	0.48	2.96	10	7
1:A:12:TYR:OH	1:A:45:TYR:CE2	0.48	2.63	5	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:24:LEU:HD21	0.48	2.38	6	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:ND1	0.48	2.77	13	3
1:A:23:LYS:HE3	1:A:23:LYS:H	0.48	1.68	7	1
1:A:13:ASN:C	1:A:16:ILE:HG13	0.48	2.34	11	1
1:A:20:LYS:HG3	1:A:24:LEU:CD1	0.48	2.38	16	1
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:CE1	0.48	2.67	16	1
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HD21	0.47	2.34	2	2
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD1	0.47	2.39	2	2
1:A:5:ASN:C	1:A:5:ASN:HD22	0.47	2.17	4	2
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:CB	0.47	2.76	14	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:HG2	0.47	1.87	1	1
1:A:46:THR:O	1:A:46:THR:CG2	0.47	2.62	1	4
1:A:50:PHE:HA	1:A:61:ILE:CA	0.47	2.39	1	2
1:A:16:ILE:HG13	1:A:17:SER:O	0.47	2.08	2	1
1:A:91:ILE:C	1:A:95:GLN:HE21	0.47	2.17	5	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:HB3	0.47	2.44	6	3
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CA	0.47	2.98	7	2
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:N	0.47	2.75	7	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:CZ	0.47	2.39	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG13	0.47	2.39	10	1
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:ND2	0.47	2.46	12	1
1:A:82:TYR:CA	1:A:84:PHE:CZ	0.47	2.96	20	2
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:HB2	0.47	2.22	14	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HH21	0.47	2.21	15	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:O	0.47	2.61	16	1
1:A:18:ARG:O	1:A:21:ALA:HB3	0.47	2.09	17	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:111:GLY:CA	0.47	2.39	1	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:HB2	0.47	2.39	4	2
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:HG22	0.47	2.33	5	2
1:A:19:ASP:C	1:A:23:LYS:HG2	0.47	2.31	17	2
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CG	0.47	2.98	11	2
1:A:15:SER:CA	1:A:37:ARG:HE	0.47	2.22	16	1
1:A:95:GLN:N	1:A:95:GLN:CD	0.47	2.72	17	1
1:A:95:GLN:C	1:A:104:ARG:NH2	0.47	2.72	18	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:HE	0.47	2.21	3	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:HD2	0.47	1.68	4	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:CD	0.47	2.40	5	1
1:A:23:LYS:CE	1:A:24:LEU:HA	0.47	2.40	5	1
1:A:94:HIS:CA	1:A:104:ARG:HB2	0.47	2.39	5	1
1:A:19:ASP:CB	1:A:20:LYS:HE3	0.47	2.39	6	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:NZ	0.47	2.76	10	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:OG1	0.47	2.27	13	3
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG23	0.47	1.70	14	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:37:ARG:NH2	0.47	2.75	16	1
1:A:101:LEU:HD11	1:A:104:ARG:HA	0.47	1.84	19	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:90:LEU:CA	0.47	2.36	20	1
1:A:13:ASN:C	1:A:14:LYS:O	0.47	2.58	3	6
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HD11	0.47	2.35	1	1
1:A:16:ILE:CB	1:A:20:LYS:CD	0.47	2.93	1	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CD2	0.47	2.68	2	1
1:A:52:LYS:HE3	1:A:59:PRO:HG3	0.47	1.86	2	2
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:HG12	0.47	2.07	17	3
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:HE1	0.47	1.67	5	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:21:ALA:HB3	0.47	1.86	13	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:75:ARG:HH21	0.47	1.69	15	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG22	0.47	2.06	19	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CB	0.47	2.98	8	3
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:HH21	0.47	2.17	5	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:16:ILE:HD12	0.47	2.25	12	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:17:SER:H	0.47	2.18	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:NE	0.47	2.72	18	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:38:ASP:C	0.47	2.35	15	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:87:ILE:HG22	0.47	2.36	5	2
1:A:50:PHE:CE1	1:A:51:THR:O	0.47	2.68	5	2
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD11	0.47	1.86	7	1
1:A:68:GLU:HG2	1:A:75:ARG:NE	0.47	2.23	8	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HB	0.47	2.44	9	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	0.47	1.67	15	3
1:A:49:VAL:CA	1:A:62:LYS:O	0.47	2.62	10	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CB	0.47	2.63	11	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:105:LEU:CA	0.47	2.40	15	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:102:VAL:CB	0.47	2.93	17	1
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:HB2	0.47	2.10	19	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD22	0.47	2.10	20	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:HE3	0.47	2.40	1	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:O	0.47	2.57	17	17
1:A:24:LEU:HB2	1:A:35:MET:HE3	0.47	1.85	2	1
1:A:18:ARG:H	1:A:37:ARG:CZ	0.47	2.21	3	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.47	2.33	4	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:HD2	0.47	2.23	6	2
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HD2	0.47	2.23	8	1
1:A:34:PHE:CA	1:A:35:MET:HE3	0.47	2.40	8	1
1:A:51:THR:HG21	1:A:103:THR:OG1	0.47	2.09	9	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:HG13	0.47	2.10	14	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:CG2	0.47	2.40	16	1
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:HG	0.47	2.33	16	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:HD23	0.47	1.85	5	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:85:ASP:OD1	0.47	2.10	6	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CD1	0.47	2.40	7	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HG	0.47	1.87	12	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:CG1	0.47	2.88	13	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:13:ASN:O	0.47	2.68	16	1
1:A:38:ASP:N	1:A:38:ASP:OD1	0.47	2.36	18	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:104:ARG:HB3	0.47	2.40	18	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:104:ARG:HB3	0.47	1.86	18	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG12	0.47	1.86	20	1
1:A:13:ASN:CA	1:A:16:ILE:HD11	0.47	2.40	1	1
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:HD2	0.47	1.86	5	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:104:ARG:HB2	0.47	2.40	7	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:106:ARG:HB2	0.47	1.86	8	1
1:A:90:LEU:C	1:A:94:HIS:HD1	0.47	2.18	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HB3	0.47	2.09	12	1
1:A:20:LYS:HG3	1:A:24:LEU:CD2	0.47	2.40	16	1
1:A:64:TYR:O	1:A:66:ILE:HD13	0.47	2.10	17	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:37:ARG:HE	0.47	1.68	19	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:104:ARG:CB	0.47	2.78	20	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:104:ARG:CD	0.47	2.22	20	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD22	0.46	2.45	2	2
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:HD22	0.46	2.45	2	1
1:A:35:MET:CE	1:A:37:ARG:CG	0.46	2.93	3	1
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:OG	0.46	2.27	20	2
1:A:68:GLU:HG3	1:A:75:ARG:O	0.46	2.10	14	1
1:A:20:LYS:HG3	1:A:24:LEU:CG	0.46	2.40	16	1
1:A:31:GLU:OE1	1:A:106:ARG:HG3	0.46	2.10	16	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:HB2	0.46	2.40	18	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CB	0.46	2.79	6	2
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CD2	0.46	2.98	8	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:33:ALA:CA	0.46	2.40	8	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CG	0.46	2.45	9	1
1:A:64:TYR:HD2	1:A:101:LEU:HB2	0.46	1.68	14	1
1:A:11:TRP:HA	1:A:110:CYS:CA	0.46	2.40	16	1
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:CG1	0.46	2.94	16	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:64:TYR:CZ	0.46	2.44	17	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:N	0.46	2.26	18	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:101:LEU:CD2	0.46	2.40	19	1
1:A:16:ILE:C	1:A:17:SER:O	0.46	2.58	20	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:105:LEU:HD22	0.46	2.40	4	1
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:O	0.46	2.34	5	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:CE1	0.46	2.98	8	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CG	0.46	2.97	11	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD3	0.46	1.88	15	2
1:A:9:TYR:CD1	1:A:88:PRO:HG3	0.46	2.45	17	2
1:A:99:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD2	0.46	2.40	20	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:111:GLY:HA3	0.46	1.87	3	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CA	0.46	2.79	2	3
1:A:34:PHE:C	1:A:48:SER:O	0.46	2.59	5	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG12	0.46	2.40	17	1
1:A:68:GLU:HB2	1:A:75:ARG:HH21	0.46	1.70	17	1
1:A:22:GLU:CA	1:A:61:ILE:HD11	0.46	2.41	18	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:38:ASP:O	0.46	2.49	18	1
1:A:53:ALA:H	1:A:59:PRO:HA	0.46	1.70	19	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG23	0.46	2.10	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:THR:CB	1:A:102:VAL:HG13	0.46	2.40	1	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:CB	0.46	2.39	3	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CD1	0.46	2.97	9	3
1:A:49:VAL:CG1	1:A:105:LEU:CD1	0.46	2.93	8	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG21	0.46	1.87	15	1
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CB	0.46	2.79	17	1
1:A:7:GLU:OE1	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.69	17	1
1:A:18:ARG:CD	1:A:63:HIS:NE2	0.46	2.74	1	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:102:VAL:HB	0.46	2.25	1	2
1:A:18:ARG:NH1	1:A:18:ARG:HB3	0.46	2.26	8	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:69:THR:O	0.46	2.33	19	1
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:HD1	0.46	1.93	4	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HG	0.46	2.41	12	2
1:A:92:GLN:CD	1:A:96:TYR:CE2	0.46	2.94	5	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:45:TYR:CD1	0.46	2.66	9	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:84:PHE:CA	0.46	2.94	13	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:33:ALA:C	0.46	2.89	15	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE2	0.46	0.75	16	1
1:A:93:TYR:C	1:A:95:GLN:H	0.46	2.18	1	5
1:A:75:ARG:H	1:A:85:ASP:CA	0.46	2.24	5	2
1:A:76:TYR:OH	1:A:85:ASP:O	0.46	2.22	8	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:103:THR:OG1	0.46	2.64	9	1
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:HG3	0.46	1.87	10	1
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:CG2	0.46	2.83	11	1
1:A:17:SER:H	1:A:37:ARG:HG3	0.46	1.71	15	1
1:A:50:PHE:HE2	1:A:52:LYS:CE	0.46	2.24	19	1
1:A:92:GLN:CA	1:A:95:GLN:HG3	0.46	2.41	19	1
1:A:30:LYS:O	1:A:50:PHE:HD1	0.46	1.92	1	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:82:TYR:HA	0.46	1.71	2	2
1:A:80:GLU:H	1:A:80:GLU:CD	0.46	2.19	6	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:CB	0.46	2.89	8	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:111:GLY:N	0.46	2.09	10	1
1:A:47:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CE1	0.46	2.45	10	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG11	0.46	1.87	13	1
1:A:17:SER:H	1:A:37:ARG:NH1	0.46	2.09	14	1
1:A:36:VAL:O	1:A:37:ARG:NE	0.46	2.44	14	1
1:A:92:GLN:C	1:A:95:GLN:HG3	0.46	2.36	19	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:HE3	0.46	1.87	1	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CE2	0.46	2.99	9	2
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:O	0.46	2.59	10	6
1:A:14:LYS:CE	1:A:14:LYS:H	0.46	2.24	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HB	0.46	1.85	15	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HE	0.46	2.24	15	1
1:A:75:ARG:CB	1:A:76:TYR:HE1	0.46	2.24	17	1
1:A:94:HIS:CA	1:A:104:ARG:NE	0.46	2.79	18	1
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:HH11	0.46	2.21	20	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:HB3	0.45	2.25	4	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:10:GLU:H	0.45	2.18	6	4
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:N	0.45	2.72	6	1
1:A:64:TYR:HD2	1:A:101:LEU:CB	0.45	2.24	20	2
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.45	2.92	16	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:12:TYR:CZ	0.45	2.94	17	1
1:A:5:ASN:HB2	1:A:8:THR:HG22	0.45	1.87	18	1
1:A:7:GLU:OE1	1:A:7:GLU:O	0.45	2.33	19	1
1:A:5:ASN:HD22	1:A:6:LEU:N	0.45	2.08	9	3
1:A:10:GLU:C	1:A:108:PRO:HB2	0.45	2.36	19	6
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:HB3	0.45	2.37	3	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:NE2	0.45	2.60	5	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HG	0.45	1.88	5	2
1:A:37:ARG:NH2	1:A:38:ASP:OD1	0.45	2.49	6	1
1:A:79:ALA:HB1	1:A:81:LYS:CE	0.45	2.40	6	1
1:A:52:LYS:HD2	1:A:53:ALA:N	0.45	2.26	7	1
1:A:94:HIS:O	1:A:99:GLY:HA3	0.45	2.10	8	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CB	0.45	2.94	14	1
1:A:62:LYS:HE3	1:A:102:VAL:HB	0.45	1.88	16	2
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:N	0.45	2.74	16	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:CG	0.45	2.46	17	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:105:LEU:HB2	0.45	1.70	17	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CA	0.45	2.64	18	1
1:A:69:THR:C	1:A:75:ARG:HB3	0.45	2.36	18	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:45:TYR:CZ	0.45	2.45	1	1
1:A:14:LYS:CA	1:A:16:ILE:HD13	0.45	2.42	1	1
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:HE3	0.45	2.40	17	2
1:A:50:PHE:HD1	1:A:51:THR:N	0.45	2.09	7	3
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HG3	0.45	2.39	8	1
1:A:15:SER:C	1:A:37:ARG:NH1	0.45	2.75	9	1
1:A:5:ASN:N	1:A:5:ASN:ND2	0.45	2.63	13	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:CZ	0.45	2.93	17	1
1:A:23:LYS:C	1:A:26:LEU:CD1	0.45	2.90	12	2
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:H	0.45	1.72	14	3
1:A:7:GLU:HG2	1:A:12:TYR:CD2	0.45	2.46	6	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CA	0.45	2.95	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD12	1:A:9:TYR:CD2	0.45	2.47	9	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:87:ILE:HG13	0.45	1.87	12	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:20:LYS:CE	0.45	2.94	14	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:36:VAL:HB	0.45	1.88	17	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:23:LYS:HE2	0.45	2.41	19	1
1:A:14:LYS:O	1:A:37:ARG:HG2	0.45	2.11	1	1
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:HA	0.45	1.89	9	7
1:A:51:THR:O	1:A:59:PRO:HA	0.45	2.11	3	1
1:A:99:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HG2	0.45	1.89	6	2
1:A:22:GLU:CG	1:A:23:LYS:NZ	0.45	2.79	7	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:96:TYR:CD2	0.45	2.84	13	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:17:SER:CA	0.45	2.42	16	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:95:GLN:H	0.45	2.19	17	1
1:A:35:MET:SD	1:A:36:VAL:C	0.45	3.00	18	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:102:VAL:CG1	0.45	2.42	18	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG2	0.45	2.10	2	1
1:A:35:MET:HE1	1:A:37:ARG:HG3	0.45	1.88	3	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:CB	0.45	2.64	9	2
1:A:31:GLU:CA	1:A:52:LYS:H	0.45	2.24	8	2
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:HG2	0.45	1.87	5	3
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:HB	0.45	2.12	6	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:CD1	0.45	2.89	7	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:22:GLU:OE2	0.45	2.11	8	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:85:ASP:OD2	0.45	2.10	11	1
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:N	0.45	2.50	12	1
1:A:84:PHE:C	1:A:86:SER:H	0.45	2.20	13	1
1:A:18:ARG:NE	1:A:19:ASP:H	0.45	2.08	20	2
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CG	0.45	2.24	14	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CB	0.45	2.79	14	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:CE1	0.45	2.70	17	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:HG12	0.45	1.88	17	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:49:VAL:CA	0.45	2.41	18	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:105:LEU:HD22	0.45	1.88	4	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:102:VAL:CG2	0.45	2.95	5	1
1:A:16:ILE:C	1:A:37:ARG:HH11	0.45	2.14	6	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CG2	0.45	2.99	6	2
1:A:69:THR:CB	1:A:75:ARG:HH12	0.45	2.25	7	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:H	0.45	2.23	10	1
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HD2	0.45	2.27	11	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:83:VAL:HG22	0.45	2.45	14	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:HB	0.45	1.89	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLU:OE2	1:A:80:GLU:N	0.45	2.49	17	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CB	0.45	2.80	19	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:TYR:N	0.45	2.65	19	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:59:PRO:HG3	0.45	2.42	4	1
1:A:53:ALA:HB2	1:A:59:PRO:CG	0.45	2.42	4	1
1:A:92:GLN:CD	1:A:96:TYR:HE2	0.45	2.20	5	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:N	0.45	2.48	8	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CD2	0.45	2.84	10	1
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CD1	0.45	2.29	13	2
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:HG3	0.45	2.11	15	1
1:A:15:SER:N	1:A:37:ARG:HH21	0.45	2.10	16	1
1:A:68:GLU:C	1:A:75:ARG:HH21	0.45	2.20	17	1
1:A:95:GLN:N	1:A:95:GLN:HE21	0.45	2.06	17	1
1:A:7:GLU:OE2	1:A:7:GLU:N	0.45	2.50	18	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:75:ARG:NE	0.45	2.80	3	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CE1	0.45	3.02	5	2
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HG13	0.45	2.42	9	1
1:A:64:TYR:HH	1:A:105:LEU:HG	0.45	1.72	10	1
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:CA	0.45	2.65	10	1
1:A:35:MET:C	1:A:35:MET:HE2	0.45	2.36	11	1
1:A:96:TYR:CE1	1:A:97:ASN:CG	0.45	2.94	12	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:CB	0.45	2.42	17	1
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:CD	0.45	2.60	18	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:24:LEU:N	0.45	2.80	8	1
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:HD12	0.45	2.12	9	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:104:ARG:CA	0.45	2.89	9	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:15:SER:HB3	0.45	1.88	10	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:60:CYS:CB	0.45	2.95	12	1
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:HB2	0.45	2.42	12	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:9:TYR:HE2	0.45	2.07	14	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG22	0.45	1.89	20	2
1:A:46:THR:HG23	1:A:64:TYR:O	0.45	2.02	18	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD11	0.44	1.87	1	1
1:A:46:THR:CB	1:A:65:HIS:HD2	0.44	2.25	8	4
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:CD1	0.44	2.42	3	1
1:A:38:ASP:OD2	1:A:45:TYR:CE2	0.44	2.71	5	1
1:A:45:TYR:C	1:A:66:ILE:CD1	0.44	2.88	10	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:CB	0.44	2.65	11	2
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD13	0.44	1.88	12	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:HB	0.44	1.88	17	1
1:A:34:PHE:HB2	1:A:105:LEU:CD1	0.44	2.42	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:O	0.44	2.65	3	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CG1	0.44	2.43	7	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:59:PRO:CB	0.44	3.00	7	2
1:A:24:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG13	0.44	1.87	8	1
1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:CZ	0.44	2.93	14	1
1:A:14:LYS:C	1:A:37:ARG:HH21	0.44	2.21	16	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:C	0.44	2.61	18	1
1:A:47:VAL:HG22	1:A:47:VAL:O	0.44	2.12	18	1
1:A:30:LYS:O	1:A:31:GLU:C	0.44	2.60	1	3
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:HE1	0.44	2.19	7	2
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:CG2	0.44	2.42	2	1
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:C	0.44	2.90	3	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CD1	0.44	3.00	4	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:111:GLY:C	0.44	2.37	17	2
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:HD2	0.44	1.93	5	2
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:OG	0.44	2.32	6	1
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD12	0.44	2.48	9	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:HD3	0.44	1.89	10	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:75:ARG:HH21	0.44	2.25	11	1
1:A:15:SER:HA	1:A:37:ARG:NH2	0.44	2.26	19	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:HD2	0.44	1.72	20	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:NH1	0.44	2.65	3	1
1:A:52:LYS:C	1:A:59:PRO:HG3	0.44	2.37	4	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:9:TYR:HB2	0.44	1.88	9	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:78:VAL:CG2	0.44	3.01	9	1
1:A:37:ARG:CB	1:A:46:THR:CG2	0.44	2.92	10	1
1:A:19:ASP:OD2	1:A:20:LYS:HD2	0.44	2.12	11	1
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:CD1	0.44	2.86	11	1
1:A:12:TYR:HE1	1:A:13:ASN:O	0.44	1.92	16	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:35:MET:CG	0.44	2.42	18	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:27:ASP:CA	0.44	2.34	20	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:CD	0.44	2.40	20	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CZ2	0.44	3.05	1	1
1:A:92:GLN:HG2	1:A:96:TYR:CE2	0.44	2.48	2	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:109:VAL:CG2	0.44	3.00	8	1
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:HD22	0.44	2.26	9	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:14:LYS:H	0.44	2.24	13	1
1:A:93:TYR:CZ	1:A:97:ASN:OD1	0.44	2.71	13	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HE2	0.44	2.12	5	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:ND1	0.44	2.21	5	1
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:CG2	0.44	2.90	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:SER:OG	1:A:19:ASP:CG	0.44	2.60	11	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CG	0.44	2.65	11	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:75:ARG:C	0.44	2.91	12	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:H	0.44	1.73	13	2
1:A:104:ARG:CG	1:A:104:ARG:HH11	0.44	2.26	17	1
1:A:24:LEU:H	1:A:24:LEU:CD1	0.44	2.16	18	1
1:A:35:MET:HG3	1:A:48:SER:HB2	0.44	1.89	20	1
1:A:96:TYR:CD2	1:A:97:ASN:ND2	0.44	2.85	10	2
1:A:12:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CE1	0.44	3.05	9	2
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD12	0.44	2.13	4	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:105:LEU:CD2	0.44	2.43	4	2
1:A:16:ILE:HG23	1:A:37:ARG:HD3	0.44	1.89	6	1
1:A:47:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CE2	0.44	2.48	11	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:52:LYS:HB3	0.44	1.88	16	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:90:LEU:HD21	0.44	1.88	17	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:CG2	0.44	2.78	17	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:CD	0.44	2.95	1	2
1:A:18:ARG:CB	1:A:22:GLU:OE1	0.44	2.66	1	1
1:A:90:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CE1	0.44	2.45	1	2
1:A:14:LYS:HG2	1:A:16:ILE:HG22	0.44	1.88	3	1
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:HB3	0.44	2.13	13	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG21	0.44	2.43	6	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.44	2.80	6	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:CD1	0.44	2.96	7	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:CZ	0.44	2.79	9	1
1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:HD2	0.44	2.38	14	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:HB2	0.44	1.89	16	1
1:A:47:VAL:HG11	1:A:66:ILE:HD11	0.44	1.88	18	1
1:A:101:LEU:HG	1:A:104:ARG:HG2	0.44	1.89	18	1
1:A:102:VAL:C	1:A:104:ARG:H	0.44	2.20	20	1
1:A:21:ALA:O	1:A:35:MET:HE2	0.44	2.13	2	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:85:ASP:O	0.44	2.71	5	3
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:HB2	0.44	1.90	14	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:CB	0.44	2.43	16	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:45:TYR:CD1	0.44	2.31	17	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:31:GLU:O	0.44	2.66	17	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:CG1	0.44	2.43	18	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:89:LEU:C	0.44	2.91	20	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CG	0.43	2.66	4	6
1:A:37:ARG:CD	1:A:37:ARG:C	0.43	2.89	4	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:12:TYR:CB	0.43	2.40	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD22	0.43	2.27	10	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.43	18	1
1:A:93:TYR:C	1:A:95:GLN:N	0.43	2.75	14	3
1:A:37:ARG:O	1:A:45:TYR:HA	0.43	2.13	5	2
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:CG2	0.43	2.42	5	1
1:A:14:LYS:C	1:A:14:LYS:CD	0.43	2.92	6	1
1:A:26:LEU:CA	1:A:61:ILE:HD12	0.43	2.44	7	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:76:TYR:CE1	0.43	2.86	8	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HB2	0.43	1.89	9	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:76:TYR:OH	0.43	2.65	9	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:C	0.43	2.76	9	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:104:ARG:CB	0.43	2.96	9	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:63:HIS:HE1	0.43	2.23	13	1
1:A:75:ARG:HE	1:A:83:VAL:CG2	0.43	2.18	19	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE1	0.43	2.30	1	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:CG	0.43	2.96	6	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:23:LYS:HZ1	0.43	1.72	7	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:59:PRO:HB3	0.43	1.89	10	1
1:A:61:ILE:HG13	1:A:62:LYS:N	0.43	2.27	10	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CB	0.43	2.96	11	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:CA	0.43	2.44	14	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:16:ILE:C	0.43	2.86	16	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CG	0.43	2.43	16	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:110:CYS:HA	0.43	1.88	17	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:94:HIS:CE1	0.43	3.07	2	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:105:LEU:HD22	0.43	1.73	5	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HD2	0.43	1.89	6	1
1:A:23:LYS:CA	1:A:26:LEU:HG	0.43	2.44	6	1
1:A:37:ARG:CZ	1:A:37:ARG:HB2	0.43	2.41	8	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:11:TRP:HZ3	0.43	2.24	11	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CG	0.43	2.44	11	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:61:ILE:CG2	0.43	2.93	13	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:63:HIS:N	0.43	2.81	18	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE3	0.43	1.90	19	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:C	0.43	2.39	1	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:52:LYS:CG	0.43	2.43	1	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HG13	0.43	1.85	20	3
1:A:5:ASN:O	1:A:9:TYR:HE1	0.43	1.91	2	3
1:A:92:GLN:C	1:A:96:TYR:CE1	0.43	2.97	2	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:CD	0.43	2.89	2	1
1:A:96:TYR:CE2	1:A:97:ASN:ND2	0.43	2.87	20	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:CG2	0.43	2.25	4	2
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:CB	0.43	2.67	9	1
1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:NE	0.43	2.76	14	1
1:A:5:ASN:CA	1:A:8:THR:HG22	0.43	2.44	15	1
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:HB3	0.43	2.39	17	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:HE1	0.43	1.73	20	2
1:A:23:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE3	0.43	1.83	18	1
1:A:62:LYS:HZ3	1:A:101:LEU:HA	0.43	1.71	18	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:O	0.43	2.36	20	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:88:PRO:N	0.43	2.29	1	1
1:A:20:LYS:HE3	1:A:23:LYS:HE3	0.43	1.89	2	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD3	0.43	2.42	7	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:9:TYR:CB	0.43	2.42	9	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:HB2	0.43	1.91	11	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:83:VAL:HB	0.43	1.90	13	1
1:A:90:LEU:C	1:A:94:HIS:HD2	0.43	2.20	15	1
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:HB	0.43	2.13	20	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD1	0.43	2.24	20	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:104:ARG:NE	0.43	2.11	20	1
1:A:45:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CD1	0.43	3.01	3	1
1:A:89:LEU:CA	1:A:92:GLN:HG2	0.43	2.43	5	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:C	0.43	2.92	6	1
1:A:80:GLU:H	1:A:81:LYS:CE	0.43	2.27	6	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:96:TYR:CE1	0.43	2.49	6	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:35:MET:HE3	0.43	2.31	11	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD3	0.43	1.91	11	1
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CG	0.43	2.97	14	4
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:C	0.43	2.31	20	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CE	0.43	2.44	2	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.43	2.38	5	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:97:ASN:HB3	0.43	2.47	8	1
1:A:22:GLU:HB2	1:A:26:LEU:HD21	0.43	1.90	9	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:33:ALA:HB2	0.43	2.28	9	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:THR:HG22	0.43	1.90	14	1
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:HE1	0.43	2.27	15	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:87:ILE:HB	0.43	1.89	19	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:CG	0.43	2.82	4	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:CG1	0.43	2.67	6	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:LYS:HD2	0.43	1.91	7	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HE22	0.43	1.73	9	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:C	0.43	2.61	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LYS:HE2	1:A:59:PRO:CG	0.43	2.44	10	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HG3	0.43	2.43	12	1
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CB	0.43	2.67	5	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:CD1	0.43	2.43	6	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:HD3	0.43	2.13	7	1
1:A:18:ARG:HH12	1:A:37:ARG:NE	0.43	2.12	8	1
1:A:9:TYR:HE2	1:A:88:PRO:HG3	0.43	1.68	9	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:61:ILE:HD12	0.43	2.43	10	1
1:A:11:TRP:C	1:A:35:MET:HA	0.43	2.37	11	1
1:A:64:TYR:HH	1:A:105:LEU:HD22	0.43	1.70	14	1
1:A:32:GLY:C	1:A:107:TYR:H	0.43	2.17	20	1
1:A:16:ILE:C	1:A:17:SER:OG	0.42	2.61	2	1
1:A:35:MET:CE	1:A:37:ARG:CD	0.42	2.97	3	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:HD1	0.42	2.27	3	1
1:A:34:PHE:CA	1:A:49:VAL:HA	0.42	2.44	15	4
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:HE1	0.42	1.70	6	1
1:A:48:SER:CB	1:A:63:HIS:HB3	0.42	2.44	7	1
1:A:76:TYR:CE2	1:A:87:ILE:CD1	0.42	2.99	9	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:94:HIS:HE1	0.42	1.59	11	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:26:LEU:N	0.42	2.29	12	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:NH1	0.42	2.82	12	1
1:A:14:LYS:HD3	1:A:16:ILE:CG1	0.42	2.44	13	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CB	0.42	2.95	13	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CB	0.42	2.44	13	1
1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:CD	0.42	2.92	14	1
1:A:90:LEU:CG	1:A:94:HIS:NE2	0.42	2.81	18	1
1:A:5:ASN:HB3	1:A:6:LEU:HD23	0.42	1.90	20	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG13	0.42	2.41	2	1
1:A:10:GLU:C	1:A:11:TRP:CD1	0.42	2.97	5	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:35:MET:SD	0.42	2.50	6	1
1:A:80:GLU:C	1:A:81:LYS:CE	0.42	2.88	6	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:HE1	0.42	1.73	20	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:CE	0.42	2.97	1	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LYS:CE	0.42	2.43	1	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE2	0.42	3.03	4	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:HE1	0.42	2.27	5	1
1:A:50:PHE:HE1	1:A:59:PRO:CB	0.42	2.27	7	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:29:GLY:N	0.42	2.29	8	2
1:A:79:ALA:CB	1:A:82:TYR:CG	0.42	2.95	8	1
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:HD3	0.42	2.39	20	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NH1	0.42	2.52	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:CA	1:A:92:GLN:OE1	0.42	2.67	3	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:HD1	0.42	2.28	5	2
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HE	0.42	1.58	5	1
1:A:62:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	0.42	1.74	9	1
1:A:94:HIS:O	1:A:97:ASN:O	0.42	2.37	9	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:107:TYR:C	0.42	2.97	9	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:52:LYS:H	0.42	2.27	11	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:63:HIS:N	0.42	2.29	18	1
1:A:30:LYS:N	1:A:50:PHE:CD2	0.42	2.87	19	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CD1	0.42	3.02	3	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:64:TYR:C	0.42	2.62	4	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:HD1	0.42	1.97	6	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:94:HIS:CE1	0.42	3.02	17	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HZ1	0.42	1.98	3	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:96:TYR:HB3	0.42	1.91	7	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CZ	0.42	2.99	9	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HG2	0.42	1.90	10	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:85:ASP:CG	0.42	2.40	11	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:84:PHE:CA	0.42	2.44	13	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:50:PHE:HB2	0.42	2.44	16	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HE	0.42	2.12	17	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:52:LYS:HG2	0.42	1.92	1	1
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:HH11	0.42	2.26	4	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:110:CYS:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:HG2	0.42	2.29	5	1
1:A:14:LYS:HD3	1:A:15:SER:HB3	0.42	1.89	6	1
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CG	0.42	2.73	9	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CB	0.42	2.68	11	1
1:A:99:GLY:H	1:A:104:ARG:CD	0.42	2.26	13	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:25:LEU:HD12	0.42	2.44	14	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:HG3	0.42	2.50	18	1
1:A:99:GLY:N	1:A:104:ARG:HH11	0.42	2.13	20	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:CG2	0.42	2.68	1	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:CG2	0.42	2.88	2	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HG13	0.42	1.91	7	1
1:A:31:GLU:HB3	1:A:52:LYS:H	0.42	1.75	8	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:99:GLY:HA2	0.42	2.50	9	2
1:A:16:ILE:CB	1:A:20:LYS:HG3	0.42	2.45	11	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:89:LEU:O	0.42	2.59	14	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:102:VAL:CG2	0.42	2.45	16	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:81:LYS:HB3	0.42	1.70	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ALA:C	1:A:109:VAL:HG12	0.42	2.40	1	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:OH	0.42	2.53	2	1
1:A:98:GLY:C	1:A:99:GLY:O	0.42	2.61	8	2
1:A:16:ILE:CG1	1:A:24:LEU:CD2	0.42	2.95	6	1
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HG13	0.42	2.14	7	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CZ	0.42	2.44	9	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:HB3	0.42	1.91	12	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:45:TYR:HE1	0.42	1.97	13	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CG	0.42	2.47	17	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:35:MET:HG3	0.42	2.38	17	1
1:A:75:ARG:HE	1:A:75:ARG:C	0.42	2.23	2	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CG	0.42	2.44	3	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:15:SER:OG	0.42	2.15	6	1
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG1	0.42	2.68	7	2
1:A:81:LYS:C	1:A:82:TYR:HD1	0.42	2.21	11	1
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:CD2	0.42	3.02	11	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:OD1	0.42	2.14	12	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:HB2	0.42	2.45	14	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:10:GLU:N	0.42	2.78	17	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:46:THR:C	0.42	2.40	20	1
1:A:90:LEU:HD21	1:A:94:HIS:HE1	0.41	1.75	17	1
1:A:18:ARG:CD	1:A:63:HIS:HD2	0.41	2.28	18	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:C	0.41	2.98	20	2
1:A:75:ARG:HE	1:A:85:ASP:HA	0.41	1.75	4	1
1:A:66:ILE:CA	1:A:78:VAL:CG1	0.41	2.94	6	1
1:A:75:ARG:CA	1:A:83:VAL:HG12	0.41	2.43	13	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:110:CYS:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:98:GLY:N	1:A:104:ARG:HH11	0.41	2.13	15	1
1:A:14:LYS:C	1:A:37:ARG:NE	0.41	2.74	16	1
1:A:16:ILE:H	1:A:37:ARG:CZ	0.41	2.28	16	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:105:LEU:HA	0.41	1.91	17	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:HB2	0.41	1.91	18	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:49:VAL:CA	0.41	2.43	18	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CG	0.41	2.78	19	1
1:A:38:ASP:CB	1:A:45:TYR:CD1	0.41	3.03	20	1
1:A:95:GLN:HE22	1:A:104:ARG:HD2	0.41	1.75	20	1
1:A:68:GLU:C	1:A:75:ARG:O	0.41	2.63	1	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:109:VAL:CG2	0.41	3.00	2	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG13	0.41	2.30	3	1
1:A:75:ARG:H	1:A:84:PHE:C	0.41	2.23	5	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:11:TRP:CE2	0.41	2.48	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CG	0.41	3.02	7	1
1:A:35:MET:O	1:A:35:MET:HE3	0.41	2.15	13	1
1:A:63:HIS:ND1	1:A:63:HIS:N	0.41	2.69	15	1
1:A:102:VAL:O	1:A:104:ARG:O	0.41	2.37	15	1
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:CG2	0.41	2.65	18	1
1:A:67:LYS:HD2	1:A:77:TYR:O	0.41	2.12	19	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:26:LEU:N	0.41	2.30	1	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:101:LEU:HB2	0.41	1.85	1	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:37:ARG:HD2	0.41	2.45	3	1
1:A:104:ARG:HH21	1:A:106:ARG:NH1	0.41	2.13	5	1
1:A:95:GLN:CG	1:A:96:TYR:N	0.41	2.81	8	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HG12	0.41	2.45	10	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:12:TYR:HE2	0.41	2.22	11	1
1:A:47:VAL:HG23	1:A:49:VAL:HG22	0.41	1.91	18	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:59:PRO:CG	0.41	3.04	19	1
1:A:20:LYS:HZ1	1:A:23:LYS:HD2	0.41	1.75	2	1
1:A:11:TRP:HH2	1:A:88:PRO:CA	0.41	2.27	5	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HG22	0.41	2.46	7	1
1:A:18:ARG:CZ	1:A:18:ARG:H	0.41	2.28	8	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:HD2	0.41	2.28	8	1
1:A:52:LYS:HD2	1:A:59:PRO:HB3	0.41	1.93	9	1
1:A:35:MET:CE	1:A:111:GLY:H	0.41	2.28	10	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CE2	0.41	3.03	11	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:38:ASP:OD1	0.41	2.74	12	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HG3	0.41	1.72	12	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:91:ILE:HB	0.41	2.44	18	2
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CD2	0.41	2.50	14	1
1:A:62:LYS:C	1:A:63:HIS:HD1	0.41	2.24	16	1
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NE	0.41	2.53	16	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:94:HIS:HE1	0.41	2.28	17	1
1:A:92:GLN:CA	1:A:95:GLN:CD	0.41	2.87	18	1
1:A:7:GLU:HG3	1:A:12:TYR:CD2	0.41	2.50	5	1
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:O	0.41	2.38	5	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:CG	0.41	2.66	10	2
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.41	2.36	7	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:NZ	0.41	2.29	8	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:35:MET:HE1	0.41	2.27	16	1
1:A:34:PHE:HE1	1:A:108:PRO:HB3	0.41	1.71	17	1
1:A:5:ASN:ND2	1:A:5:ASN:N	0.41	2.69	18	1
1:A:48:SER:HA	1:A:63:HIS:ND1	0.41	2.31	19	1
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:NH1	0.41	2.83	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ARG:HE	1:A:38:ASP:C	0.41	2.22	2	1
1:A:34:PHE:C	1:A:34:PHE:CD1	0.41	2.99	8	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:H	0.41	1.75	9	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.41	2.99	10	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:CB	0.41	2.44	15	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:109:VAL:HG21	0.41	1.91	16	1
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:NE2	0.41	2.52	16	1
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:CD1	0.41	2.45	17	1
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:CZ	0.41	2.99	3	1
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:CG	0.41	2.28	6	1
1:A:62:LYS:HZ3	1:A:101:LEU:CA	0.41	2.28	7	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:20:LYS:HZ2	0.41	1.74	8	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:11:TRP:CD2	0.41	2.50	9	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:102:VAL:H	0.41	1.76	10	1
1:A:109:VAL:HG12	1:A:111:GLY:O	0.41	2.16	10	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:101:LEU:HG	0.41	2.50	11	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:CG	0.41	2.98	12	1
1:A:17:SER:N	1:A:37:ARG:NH1	0.41	2.69	14	1
1:A:90:LEU:HD13	1:A:94:HIS:NE2	0.41	2.31	15	1
1:A:104:ARG:CG	1:A:104:ARG:NH1	0.41	2.82	17	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HB2	0.41	2.45	18	1
1:A:104:ARG:CB	1:A:104:ARG:NH1	0.41	2.84	18	1
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CD2	0.41	3.04	1	1
1:A:34:PHE:N	1:A:109:VAL:HG12	0.41	2.31	1	1
1:A:52:LYS:CD	1:A:59:PRO:HG3	0.41	2.45	2	1
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HG	0.41	2.40	3	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HD2	0.41	1.93	3	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:33:ALA:CB	0.41	2.99	3	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:N	0.41	2.54	4	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:94:HIS:HE1	0.41	1.68	5	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:HB2	0.41	1.91	6	1
1:A:30:LYS:O	1:A:33:ALA:N	0.41	2.54	6	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:48:SER:HB3	0.41	1.93	7	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HE1	0.41	2.11	8	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:CB	0.41	3.04	9	1
1:A:68:GLU:C	1:A:69:THR:HG22	0.41	2.41	10	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE2	0.41	1.92	12	1
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:CB	0.41	2.46	12	1
1:A:5:ASN:N	1:A:5:ASN:HD22	0.41	2.13	13	1
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:HB2	0.41	2.15	14	1
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HE2	0.41	1.93	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HB3	0.41	1.93	16	1
1:A:62:LYS:HE3	1:A:102:VAL:CB	0.41	2.46	16	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:12:TYR:CD1	0.41	3.03	17	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:17:SER:H	0.41	1.75	17	1
1:A:92:GLN:O	1:A:95:GLN:OE1	0.41	2.39	17	1
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HB2	0.41	2.31	19	1
1:A:34:PHE:O	1:A:35:MET:SD	0.41	2.79	2	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:94:HIS:CE1	0.41	2.43	6	1
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:O	0.41	2.30	6	1
1:A:9:TYR:HE2	1:A:88:PRO:CB	0.41	2.29	9	1
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:C	0.41	2.64	10	1
1:A:91:ILE:CG1	1:A:105:LEU:CD1	0.41	2.99	10	1
1:A:14:LYS:HD2	1:A:14:LYS:O	0.41	2.15	12	1
1:A:51:THR:CG2	1:A:102:VAL:HG23	0.41	2.45	17	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:95:GLN:HE21	0.41	2.26	20	1
1:A:34:PHE:HE2	1:A:106:ARG:N	0.40	2.13	1	2
1:A:62:LYS:CE	1:A:101:LEU:HB3	0.40	2.39	1	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:C	0.40	3.04	2	1
1:A:18:ARG:NH1	1:A:19:ASP:HB2	0.40	2.30	4	1
1:A:94:HIS:C	1:A:95:GLN:HG3	0.40	2.41	4	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:CA	0.40	2.39	4	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:59:PRO:HB3	0.40	2.51	7	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:104:ARG:H	0.40	1.76	9	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:66:ILE:N	0.40	2.90	15	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:111:GLY:HA3	0.40	1.76	16	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:108:PRO:HG3	0.40	2.51	18	1
1:A:94:HIS:HA	1:A:104:ARG:HE	0.40	1.72	18	1
1:A:68:GLU:HB3	1:A:75:ARG:CZ	0.40	2.46	2	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD22	0.40	2.16	3	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:85:ASP:OD1	0.40	2.75	6	1
1:A:49:VAL:C	1:A:61:ILE:HG13	0.40	2.41	7	1
1:A:18:ARG:HH12	1:A:37:ARG:CD	0.40	2.28	8	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:HD1	0.40	2.24	13	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:89:LEU:HD12	0.40	2.52	13	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:SER:H	0.40	2.20	16	1
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:HD2	0.40	2.23	16	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:49:VAL:N	0.40	2.27	18	1
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:HG23	0.40	2.16	2	1
1:A:14:LYS:CE	1:A:15:SER:H	0.40	2.29	2	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CD2	0.40	2.93	4	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:HE1	0.40	2.12	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HD13	0.40	2.16	6	1
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:HE1	0.40	1.63	6	1
1:A:101:LEU:HD11	1:A:104:ARG:CB	0.40	2.47	9	1
1:A:12:TYR:HH	1:A:38:ASP:CB	0.40	2.30	12	1
1:A:16:ILE:HG12	1:A:20:LYS:HE3	0.40	1.92	14	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:12:TYR:CG	0.40	2.42	15	1
1:A:98:GLY:H	1:A:104:ARG:NH1	0.40	2.14	15	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:95:GLN:C	1:A:104:ARG:HH21	0.40	2.24	18	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:HD2	0.40	2.46	1	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HD12	0.40	1.92	3	1
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:NH2	0.40	2.69	3	1
1:A:51:THR:O	1:A:59:PRO:CG	0.40	2.67	4	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:35:MET:HB3	0.40	2.45	5	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:64:TYR:CE1	0.40	3.04	7	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HG2	0.40	2.16	9	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:96:TYR:HD2	0.40	2.15	13	1
1:A:75:ARG:HE	1:A:85:ASP:HB3	0.40	1.76	14	1
1:A:20:LYS:HG2	1:A:24:LEU:HD11	0.40	1.88	16	1
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CD2	0.40	2.83	18	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CG	0.40	2.70	19	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CD	0.40	2.99	20	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:51:THR:CA	0.40	2.40	2	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:75:ARG:C	0.40	2.79	2	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:HB2	0.40	1.85	3	1
1:A:19:ASP:HB3	1:A:20:LYS:CE	0.40	2.45	6	1
1:A:107:TYR:HA	1:A:108:PRO:HD3	0.40	1.80	7	1
1:A:92:GLN:OE1	1:A:96:TYR:CZ	0.40	2.73	9	1
1:A:31:GLU:HB2	1:A:52:LYS:H	0.40	1.77	10	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:110:CYS:N	0.40	2.29	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LYS:CG	0.40	2.96	11	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:HA	0.40	1.77	13	1
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:CD1	0.40	2.96	16	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:108:PRO:CG	0.40	3.04	18	1
1:A:12:TYR:CB	1:A:36:VAL:HG22	0.40	2.45	19	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:N	0.40	2.83	19	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	90/109 (83%)	67±2 (74±2%)	14±3 (15±3%)	9±2 (10±2%)	1 9
2	B	0	-	-	-	-
All	All	1800/2340 (77%)	1338 (74%)	278 (15%)	184 (10%)	1 9

All 26 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	81	LYS	19
1	A	17	SER	18
1	A	104	ARG	18
1	A	110	CYS	16
1	A	103	THR	15
1	A	102	VAL	13
1	A	5	ASN	11
1	A	14	LYS	9
1	A	99	GLY	9
1	A	15	SER	8
1	A	101	LEU	8
1	A	98	GLY	7
1	A	100	GLY	6
1	A	16	ILE	5
1	A	109	VAL	4
1	A	7	GLU	3
1	A	59	PRO	3
1	A	79	ALA	2
1	A	80	GLU	2
1	A	82	TYR	2
1	A	11	TRP	1
1	A	108	PRO	1
1	A	78	VAL	1
1	A	95	GLN	1
1	A	96	TYR	1
1	A	105	LEU	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	81/97 (84%)	36±3 (44±4%)	45±3 (56±4%)	0 0
2	B	0	-	-	-
All	All	1620/2020 (80%)	720 (44%)	900 (56%)	0 0

All 70 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	16	ILE	20
1	A	30	LYS	20
1	A	76	TYR	20
1	A	81	LYS	20
1	A	89	LEU	20
1	A	26	LEU	19
1	A	35	MET	19
1	A	64	TYR	19
1	A	75	ARG	19
1	A	87	ILE	19
1	A	90	LEU	19
1	A	101	LEU	19
1	A	61	ILE	18
1	A	69	THR	18
1	A	82	TYR	18
1	A	13	ASN	17
1	A	14	LYS	17
1	A	18	ARG	17
1	A	23	LYS	17
1	A	51	THR	17
1	A	80	GLU	17
1	A	84	PHE	17
1	A	24	LEU	16
1	A	49	VAL	16
1	A	52	LYS	16
1	A	66	ILE	15
1	A	95	GLN	15
1	A	102	VAL	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	5	ASN	15
1	A	63	HIS	15
1	A	106	ARG	15
1	A	46	THR	14
1	A	62	LYS	14
1	A	86	SER	14
1	A	78	VAL	13
1	A	91	ILE	13
1	A	105	LEU	13
1	A	7	GLU	13
1	A	37	ARG	13
1	A	92	GLN	13
1	A	20	LYS	11
1	A	38	ASP	11
1	A	85	ASP	11
1	A	104	ARG	11
1	A	10	GLU	10
1	A	28	THR	10
1	A	83	VAL	10
1	A	48	SER	9
1	A	68	GLU	9
1	A	60	CYS	9
1	A	67	LYS	9
1	A	6	LEU	9
1	A	103	THR	9
1	A	25	LEU	9
1	A	97	ASN	9
1	A	8	THR	8
1	A	15	SER	8
1	A	36	VAL	8
1	A	31	GLU	8
1	A	96	TYR	7
1	A	47	VAL	7
1	A	50	PHE	6
1	A	65	HIS	6
1	A	110	CYS	6
1	A	27	ASP	6
1	A	22	GLU	6
1	A	11	TRP	5
1	A	17	SER	4
1	A	19	ASP	4
1	A	34	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

1 non-standard protein/DNA/RNA residue is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	PTR	B	121	2	15,16,17	1.22±0.01	1±0 (6±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	PTR	B	121	2	17,22,24	1.11±0.01	1±0 (5±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	PTR	B	121	2	-	0±0,10,11,13	0±0,1,1,1

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	B	121	PTR	P-O1P	3.60	1.61	1.50	20	20

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	B	121	PTR	P-OH-CZ	4.07	109.38	123.88	3	20

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

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

No chemical shift data were provided