



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 07:59 PM UTC

PDB ID : 1J5H / pdb_00001j5h
Title : Solution Structure of Apo-Neocarzinostatin
Authors : Urbaniak, M.D.; Muskett, F.W.; Finucane, M.D.; Caddick, S.; Woolfson, D.N.
Deposited on : 2002-05-02

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

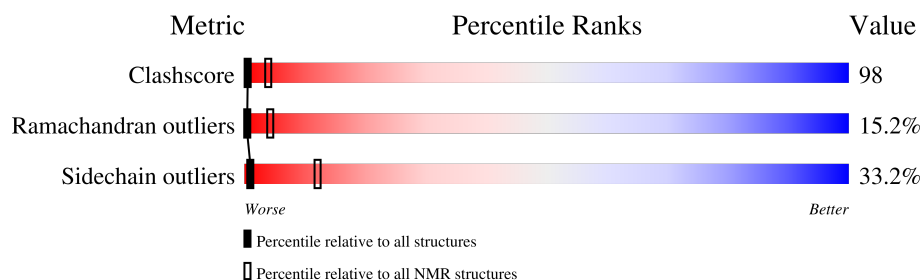
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	122	12% 54% 19% 7% 7%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 44 models. Model 14 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:4-A:78, A:82-A:99, A:103-A:113 (104)	1.00	14

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 7 clusters and 6 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 11, 12, 16, 19, 21, 22, 24, 25, 29, 37, 40
2	8, 14, 18, 23, 33, 36, 39
3	6, 7, 15, 28, 38, 41
4	10, 20, 26
5	13, 17
6	35, 43
7	9, 31
Single-model clusters	27; 30; 32; 34; 42; 44

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1515 atoms, of which 738 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Apo-Neocarzinostatin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	113	Total	C	H	N	O	S	0
			1515	476	738	132	165	4	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

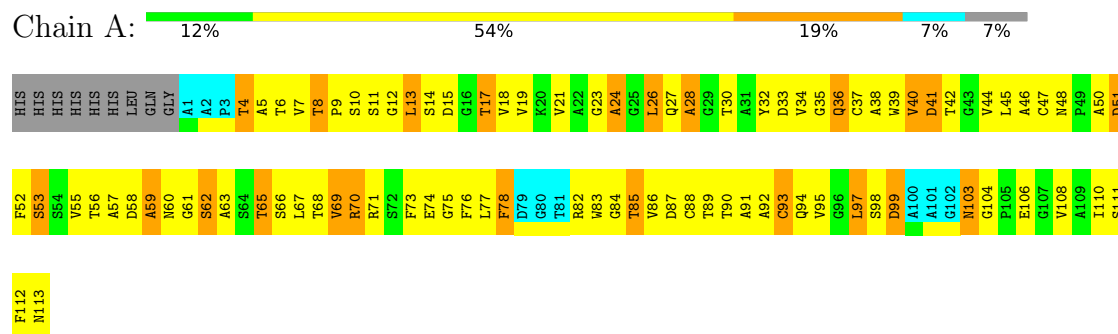
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-8	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-7	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-6	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-5	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-4	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-3	HIS	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-2	LEU	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	-1	GLN	-	expression tag	UNP P0A3R9
A	0	GLY	-	expression tag	UNP P0A3R9

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: Apo-Neocarzinostatin

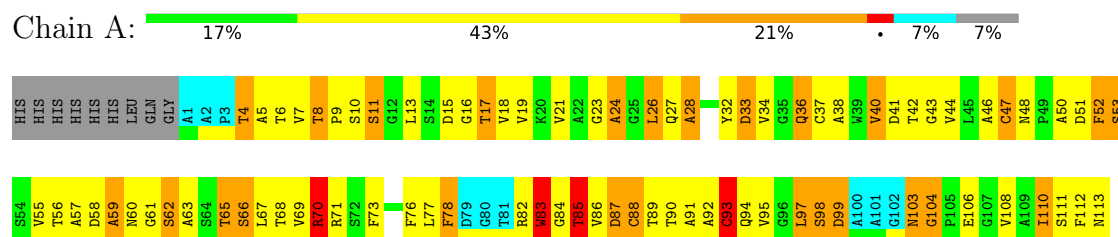


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

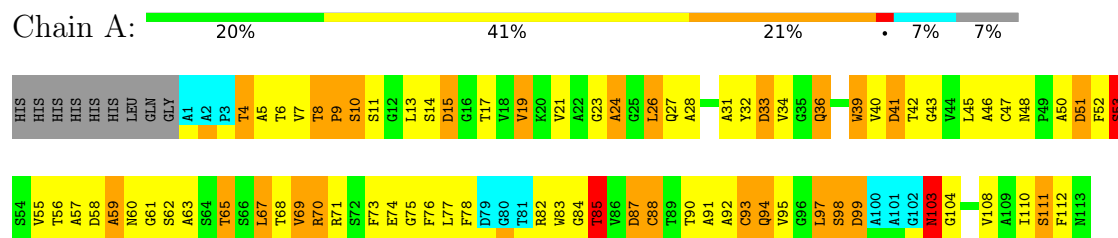
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



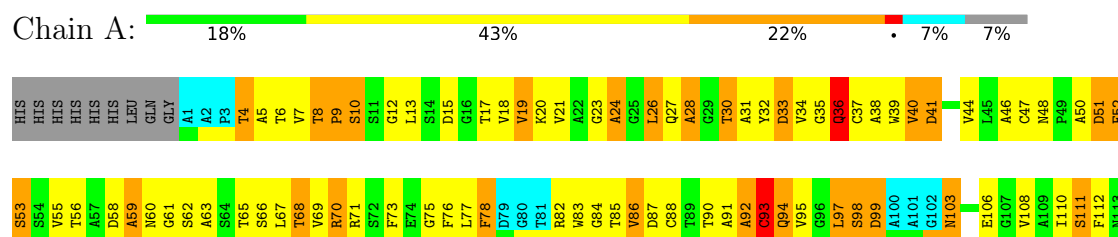
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



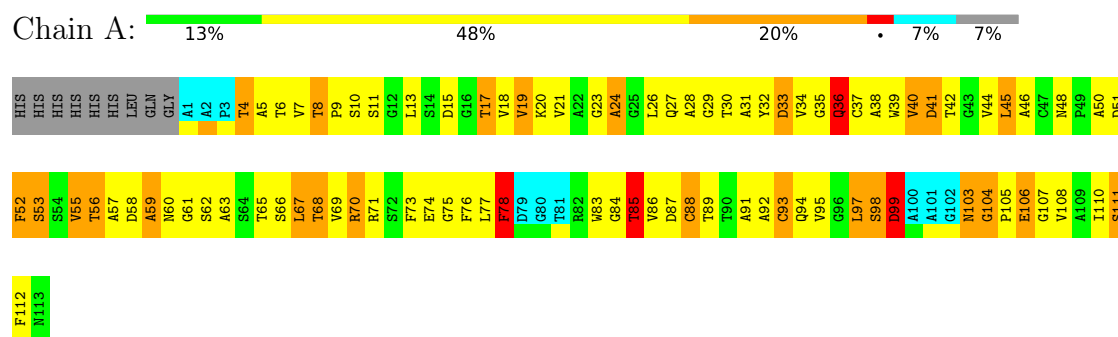
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



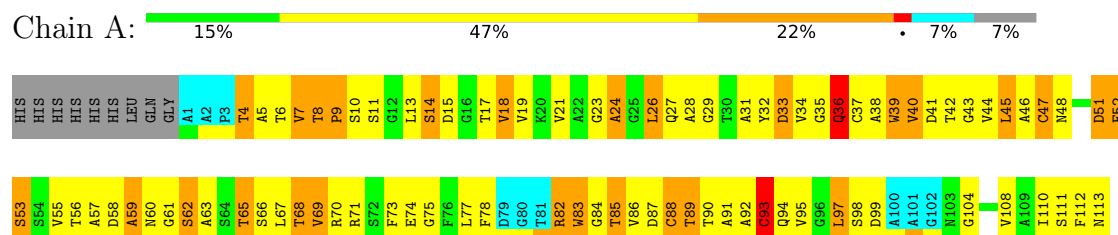
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



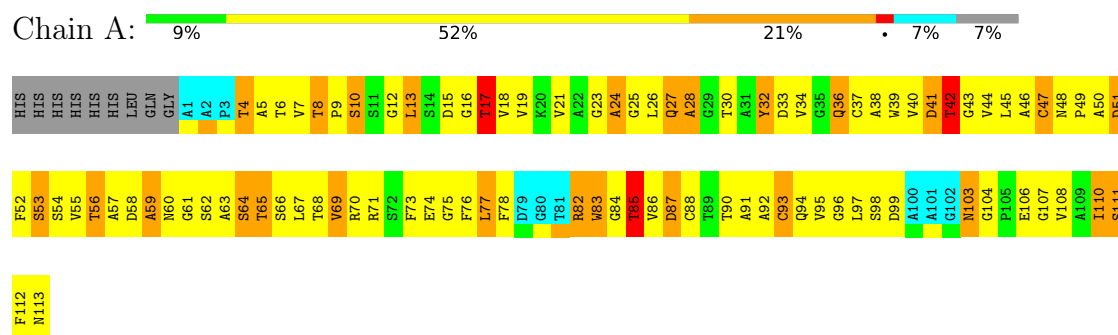
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



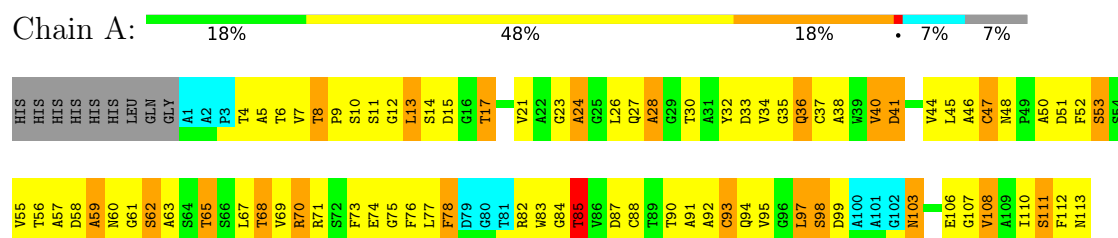
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



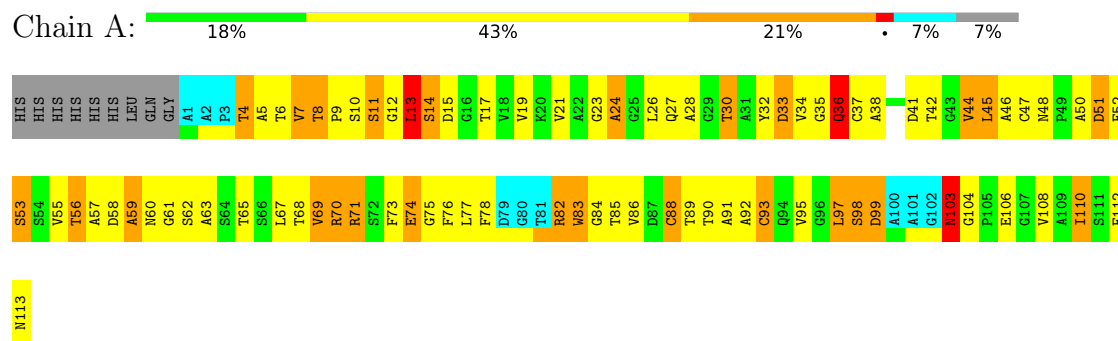
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



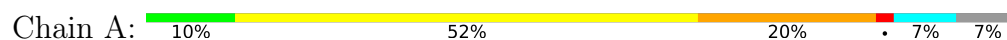
4.2.8 Score per residue for model 8

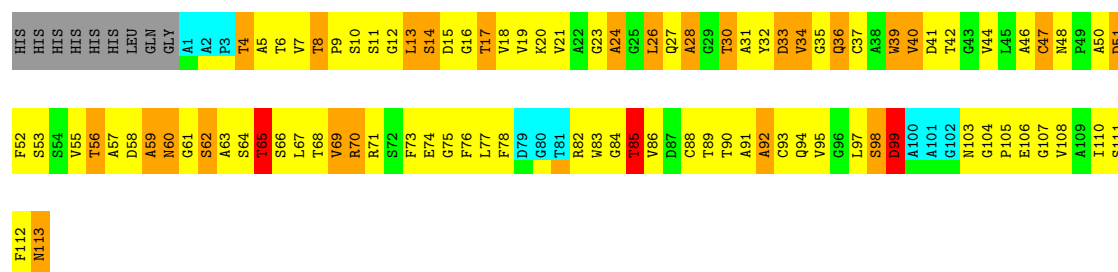
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.9 Score per residue for model 9

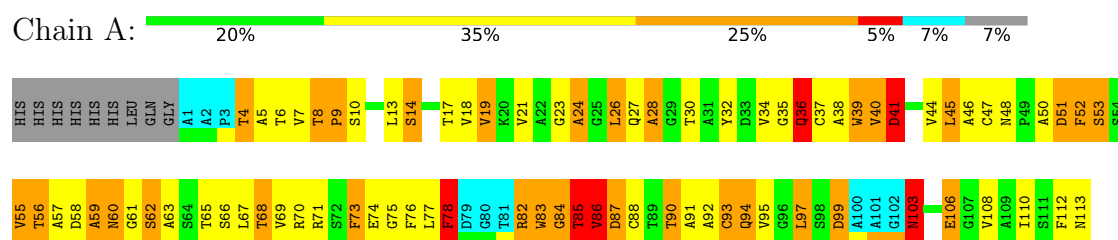
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin





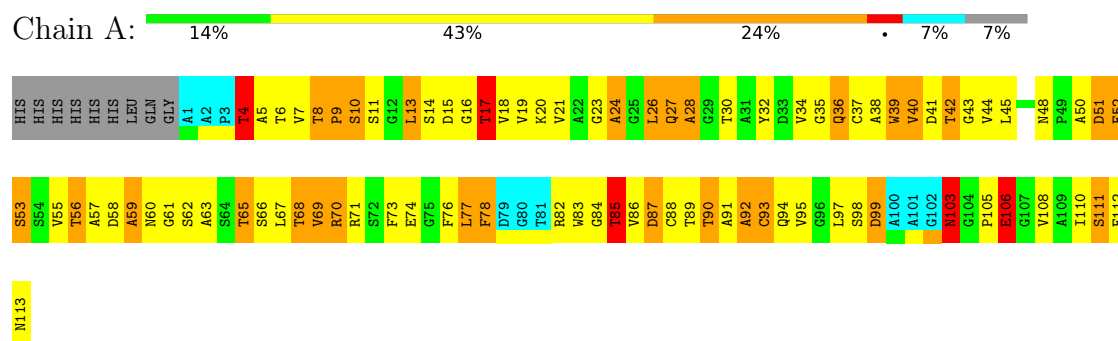
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



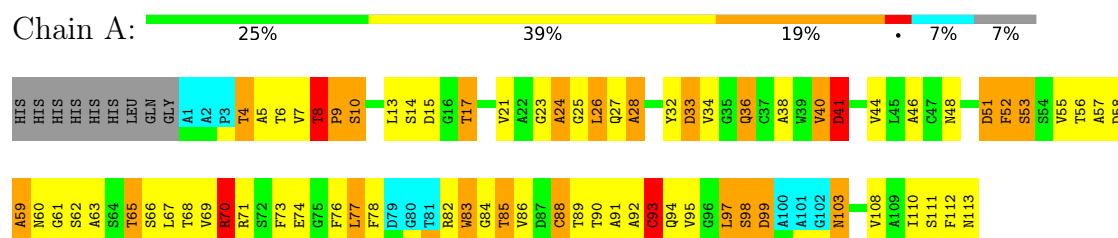
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.12 Score per residue for model 12

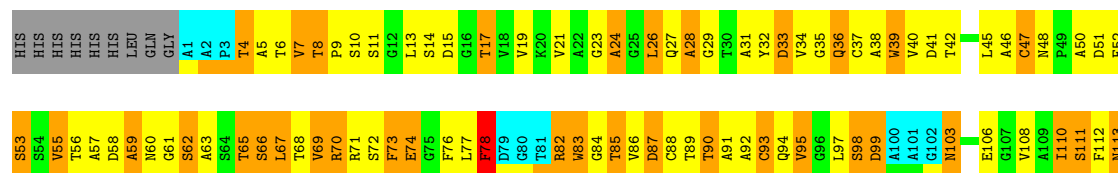
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.13 Score per residue for model 13

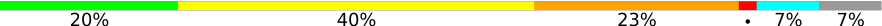
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

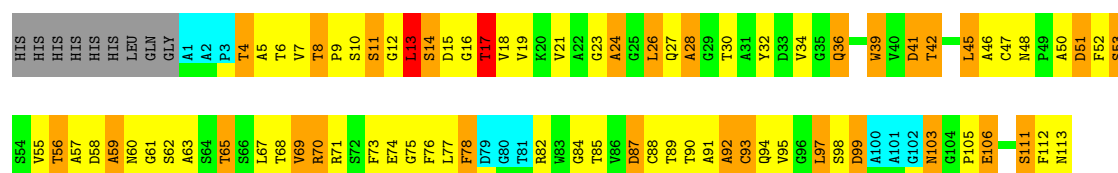
Chain A: 



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

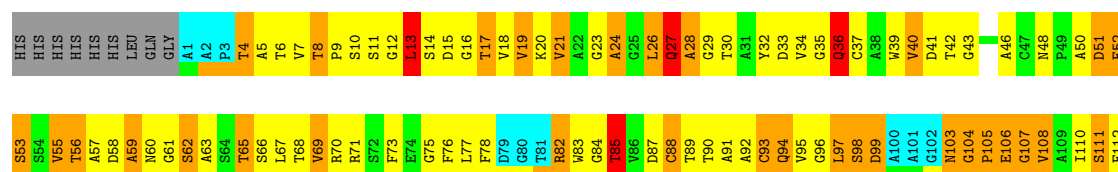
Chain A: 



4.2.15 Score per residue for model 15

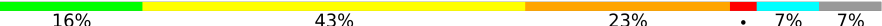
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A: 

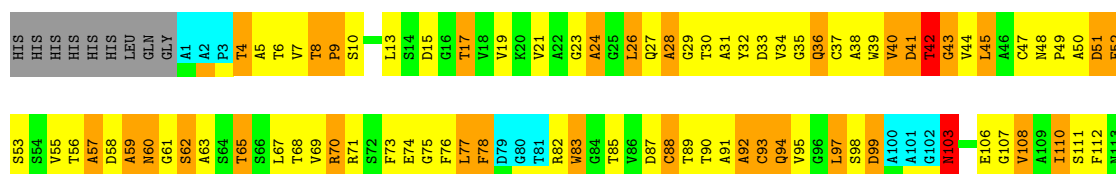


4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A: 

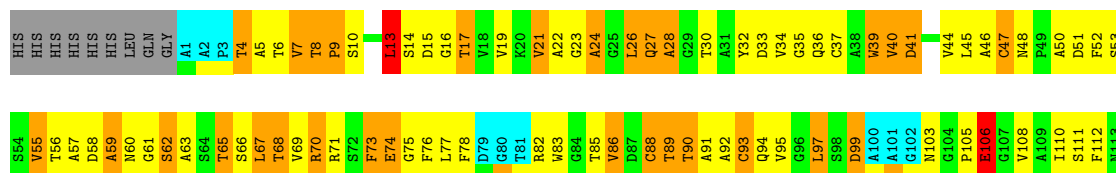




4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

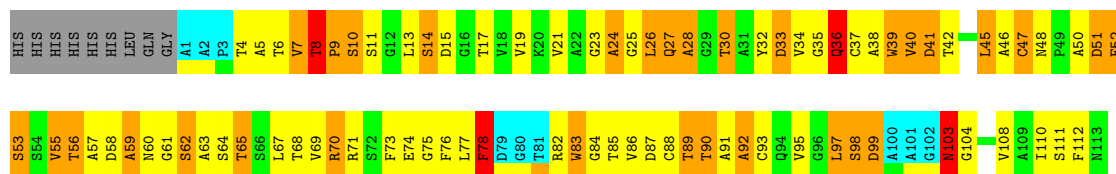
Chain A: 18% 41% 25% 7% 7%



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

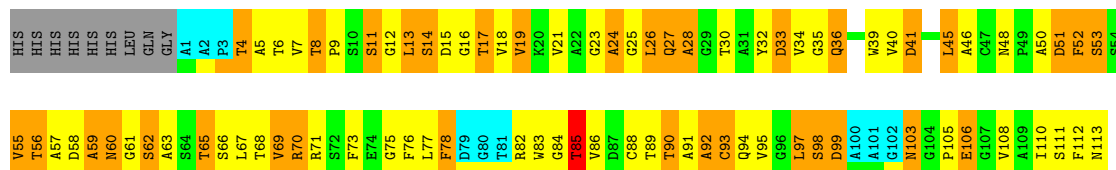
Chain A: 16% 40% 25% 7% 7%



4.2.23 Score per residue for model 23

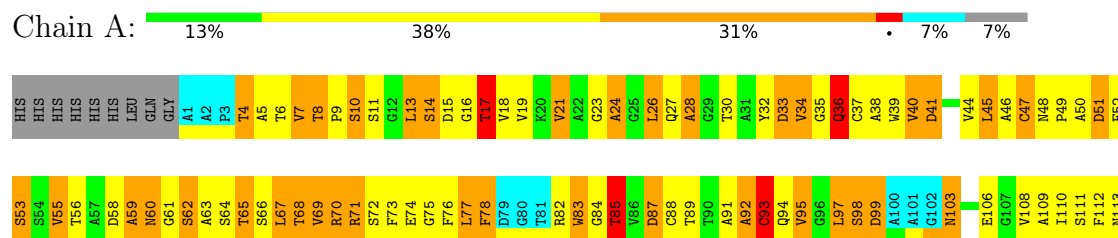
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A: 17% 39% 29% 7% 7%



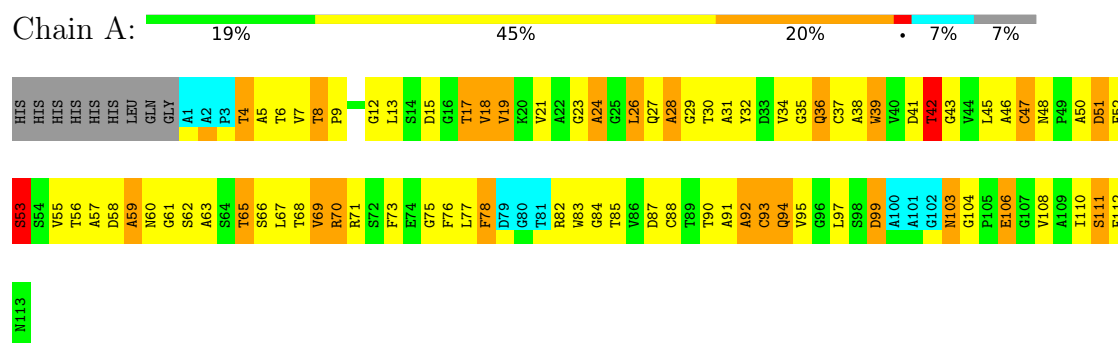
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



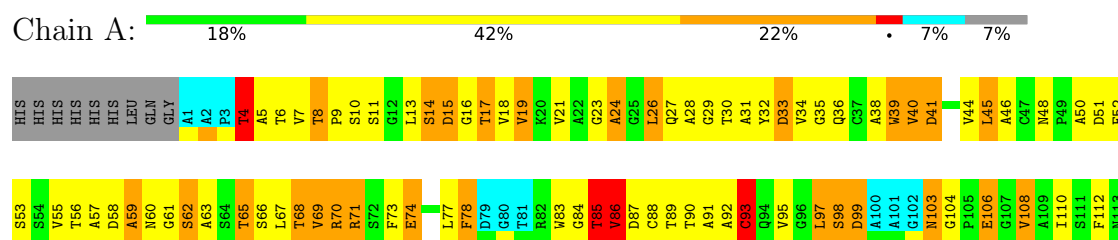
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



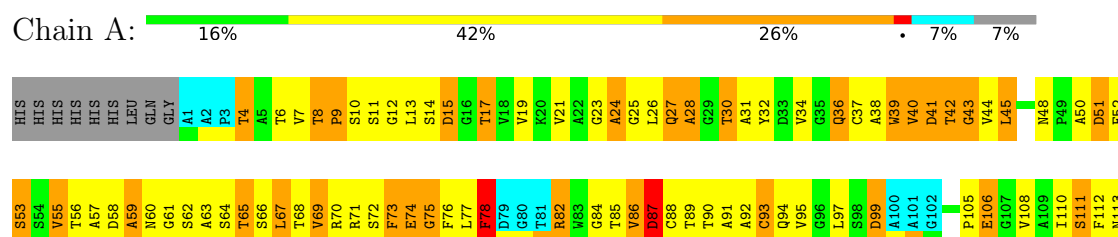
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



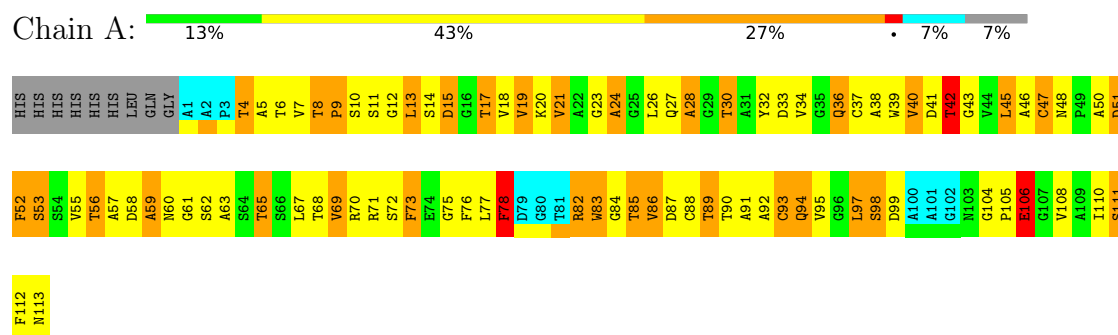
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



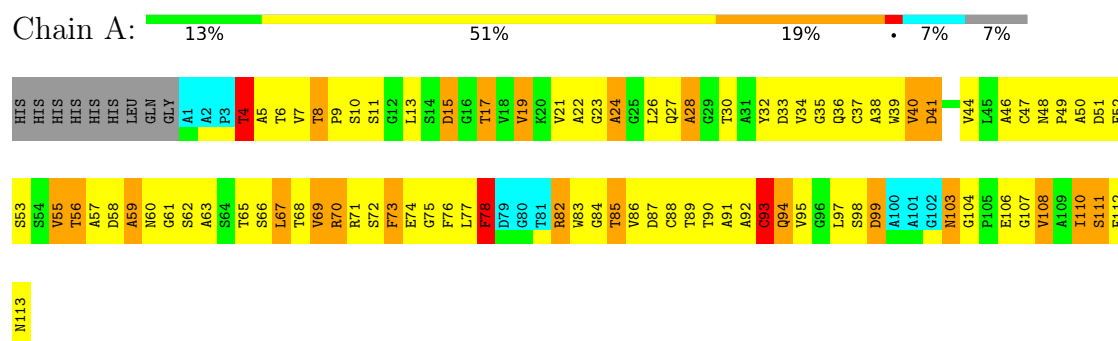
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



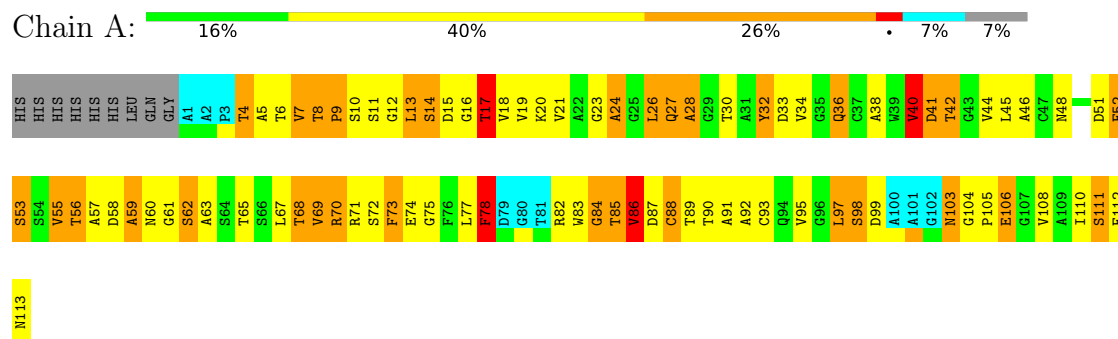
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.30 Score per residue for model 30

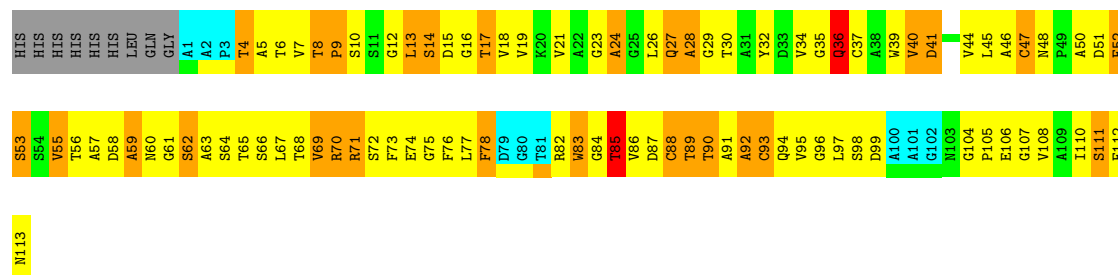
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

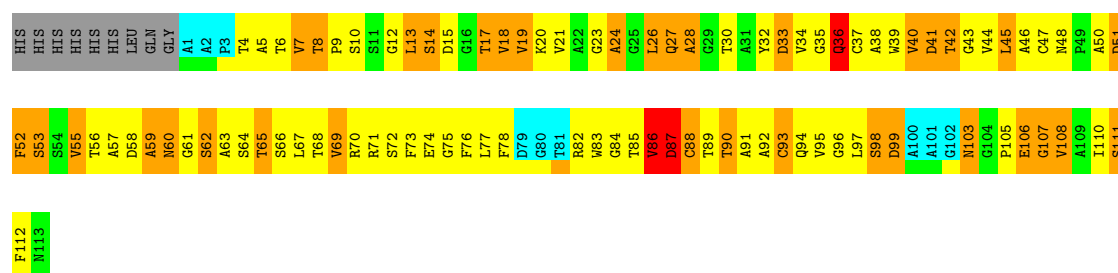
Chain A: 11% 50% 23% 7% 7%



4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

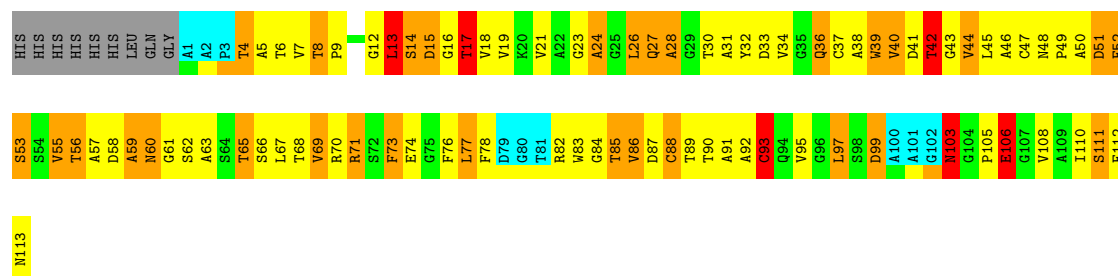
Chain A: 9% 45% 29% 7% 7%



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

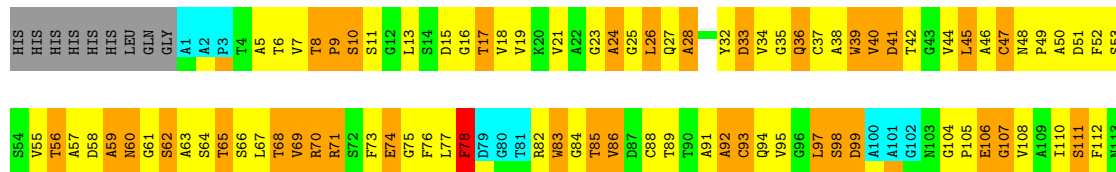
Chain A: 14% 42% 25% 5% 7% 7%



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

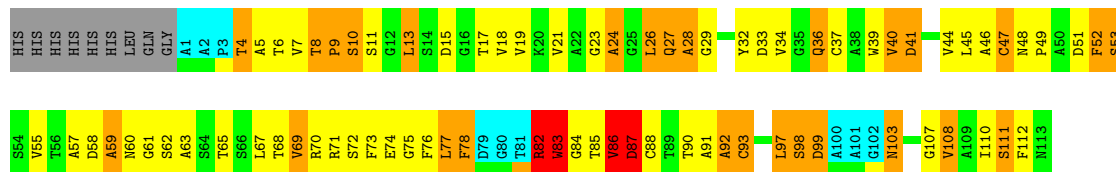
Chain A:  14% 42% 29% 7% 7%



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

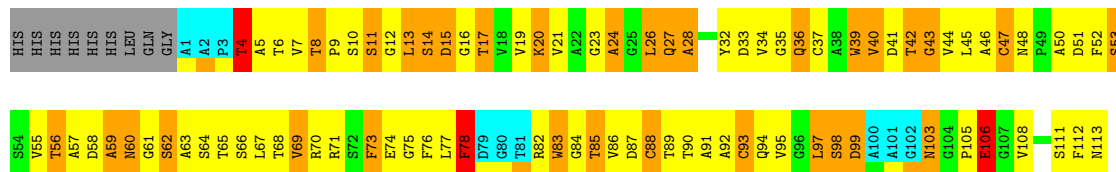
Chain A:  21% 39% 22% 7% 7%



4.2.36 Score per residue for model 36

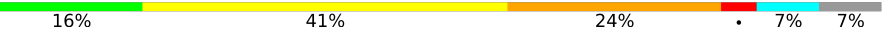
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

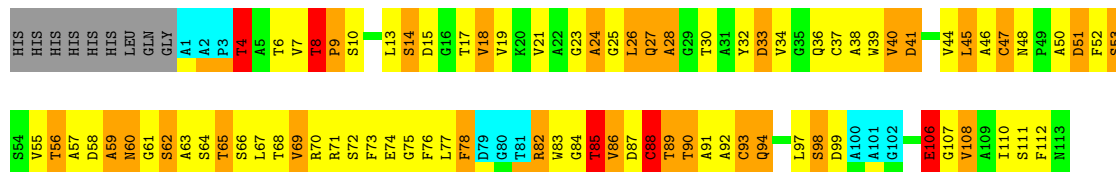
Chain A:  12% 44% 26% 7% 7%



4.2.37 Score per residue for model 37

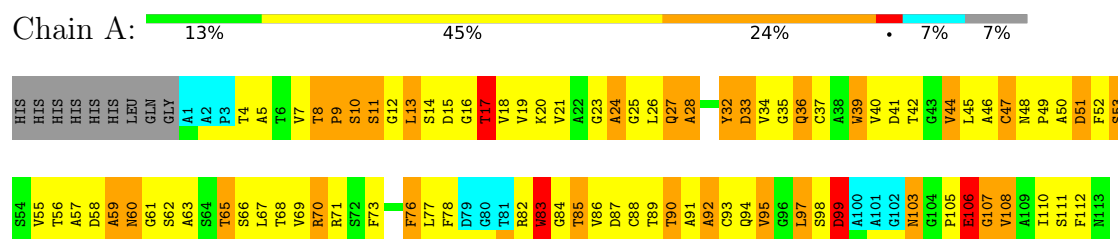
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A:  16% 41% 24% 7% 7%



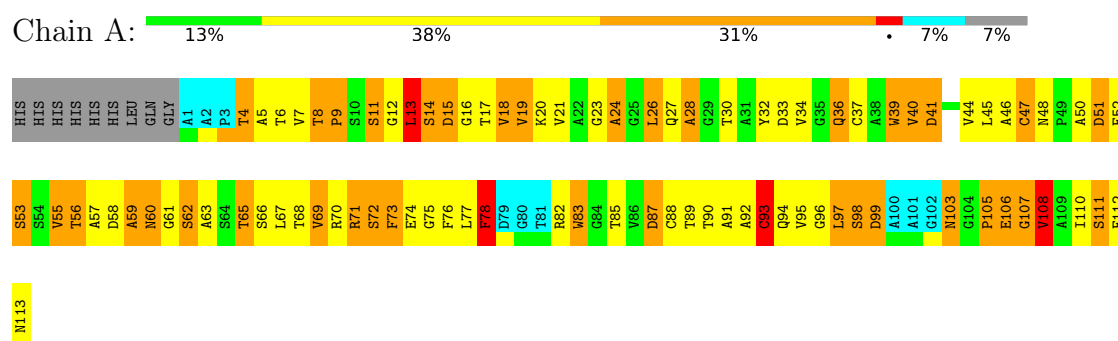
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



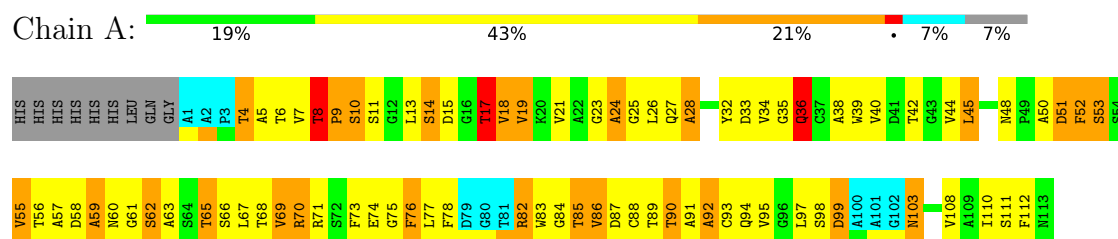
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



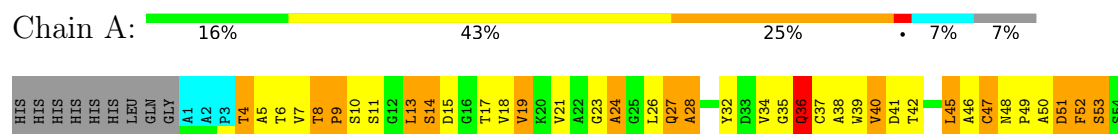
4.2.40 Score per residue for model 40

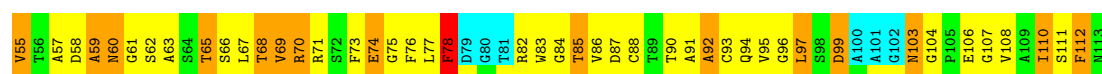
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.41 Score per residue for model 41

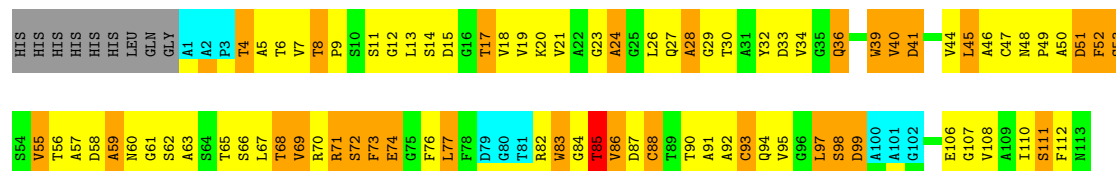
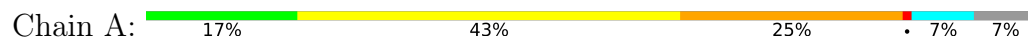
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin





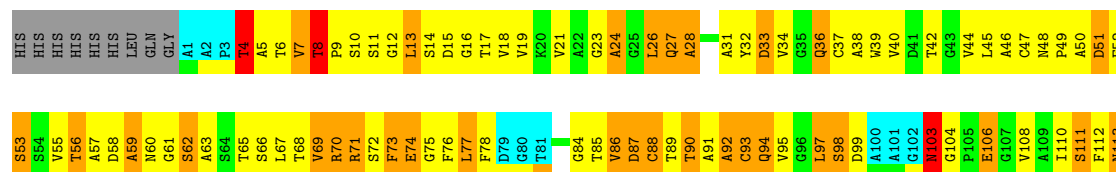
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



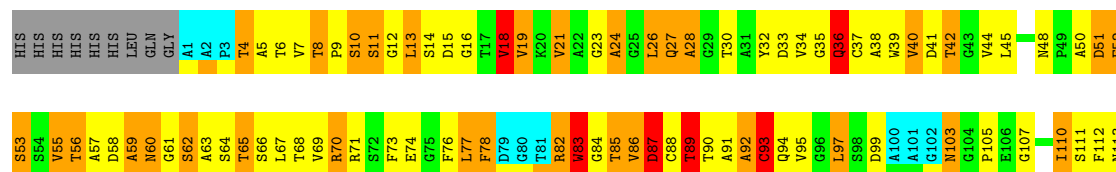
4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 44 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.58±0.01	0±0/739 (0.0± 0.0%)	1.13±0.01	0±0/1011 (0.0± 0.0%)
All	All	0.58	0/32516 (0.0%)	1.13	2/44484 (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	8	THR	O-C-N	5.19	124.48	120.38	43	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	727	693	684	138±14
All	All	31988	30492	30100	6080

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 98.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CE2	1.08	1.83	44	35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD21	1.05	1.21	28	3
1:A:83:TRP:CZ3	1:A:86:VAL:HG21	1.04	1.86	42	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD22	1.03	1.23	34	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD21	1.02	1.89	4	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HG21	1.01	1.32	35	20
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG11	1.01	1.33	16	17
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:HG21	0.99	1.32	32	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD13	0.96	1.34	31	6
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:HG23	0.96	1.60	27	3
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:NE	0.95	1.74	3	25
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:SER:N	0.94	1.78	26	8
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:HG22	0.94	1.35	22	10
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:HB1	0.93	1.37	13	8
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG22	0.93	1.93	33	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:CG2	0.93	1.94	34	24
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HG12	0.92	1.65	23	15
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:HB1	0.92	1.65	24	15
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:CD1	0.92	1.99	5	20
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD11	0.91	1.37	9	4
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:SG	0.91	2.06	12	15
1:A:42:THR:HG22	1:A:44:VAL:HG23	0.91	1.41	44	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG22	0.91	1.43	7	23
1:A:10:SER:C	1:A:110:ILE:HG23	0.90	1.92	16	12
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG11	0.90	1.43	38	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:NE1	0.89	1.82	32	4
1:A:38:ALA:HB3	1:A:73:PHE:CE2	0.88	2.03	37	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG13	0.88	1.69	35	29
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD13	0.88	2.03	12	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PRO:HD2	0.88	1.45	18	28
1:A:21:VAL:HG12	1:A:65:THR:O	0.88	1.68	16	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CG2	0.87	2.00	44	9
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ2	0.87	2.05	7	3
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD11	0.87	2.00	29	4
1:A:12:GLY:CA	1:A:17:THR:HG21	0.86	2.01	8	3
1:A:95:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD12	0.86	2.00	3	4
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD11	0.86	2.00	2	11
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CH2	0.86	2.04	20	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD12	0.86	1.48	25	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG21	0.86	1.48	30	9
1:A:23:GLY:O	1:A:63:ALA:HB3	0.86	1.71	8	42
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.86	2.00	19	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HB	0.85	1.48	26	13
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG21	0.85	1.47	36	2
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG21	0.85	2.02	6	17
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:O	0.84	1.72	40	2
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:CG2	0.84	2.02	43	7
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:HG21	0.84	1.47	6	13
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD21	0.84	1.49	35	5
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:HB1	0.84	2.02	43	3
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CZ2	0.84	2.07	22	8
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:CG2	0.84	2.02	22	8
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:HG22	0.84	1.87	34	6
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG11	0.83	2.01	16	7
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:CD1	0.83	2.07	32	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD11	0.83	1.49	2	8
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:HG22	0.83	1.72	21	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD22	0.83	1.49	1	17
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CZ	0.82	2.08	35	13
1:A:45:LEU:O	1:A:77:LEU:HD23	0.82	1.73	10	2
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG13	0.82	2.04	36	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:C	0.82	2.00	26	8
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD13	0.82	1.74	35	8
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD23	0.81	1.75	17	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:CG2	0.81	2.03	32	2
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ2	0.81	2.11	30	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HB	0.81	1.53	23	14
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:CZ	0.81	2.05	37	29
1:A:86:VAL:HG13	1:A:87:ASP:N	0.81	1.90	32	8
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:CG2	0.81	2.05	12	7
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD13	0.81	1.52	39	2
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:HD12	0.81	1.75	9	10
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CZ	0.80	2.34	42	1
1:A:38:ALA:HB2	1:A:88:CYS:SG	0.80	2.16	33	6
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:CZ2	0.80	2.10	44	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD12	0.80	1.52	19	1
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD12	0.80	1.51	3	8
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:HA2	0.80	1.53	11	20
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG13	0.80	1.53	36	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HG	0.79	1.54	16	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:CG1	0.79	2.07	16	8
1:A:12:GLY:HA3	1:A:17:THR:HG21	0.79	1.54	36	3
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:HB	0.79	1.55	42	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG21	0.78	1.54	36	6
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:HG23	0.78	1.78	15	4
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CZ	0.78	2.13	16	3
1:A:13:LEU:HB3	1:A:17:THR:HG21	0.78	1.53	12	15
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:CD2	0.78	2.07	34	1
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG23	0.78	1.78	35	17
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG23	0.78	2.08	16	15
1:A:36:GLN:CD	1:A:95:VAL:HG22	0.78	2.03	28	7
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CZ2	0.78	2.14	41	4
1:A:14:SER:CB	1:A:112:PHE:CD1	0.78	2.67	41	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:57:ALA:HB2	0.77	2.14	42	24
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.77	2.08	15	2
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD21	0.77	2.08	4	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:110:ILE:HD11	0.77	1.55	42	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD13	0.77	2.08	31	6
1:A:5:ALA:HB2	1:A:24:ALA:HA	0.77	1.55	40	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:CG1	0.77	2.10	42	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:HG21	0.77	1.56	6	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CD2	0.77	2.63	36	7
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:HG21	0.77	1.56	19	14
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:HB3	0.77	1.57	40	4
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:HG23	0.77	1.57	21	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD1	0.77	2.78	36	5
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HG21	0.76	2.10	29	9
1:A:13:LEU:CB	1:A:17:THR:HG21	0.76	2.10	35	2
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CE2	0.76	2.63	13	6
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:HG11	0.76	1.56	28	2
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CD1	0.76	2.11	39	4
1:A:17:THR:HG23	1:A:19:VAL:HG13	0.76	1.58	24	3
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:HG13	0.76	1.58	20	7
1:A:13:LEU:HB2	1:A:17:THR:HG21	0.76	1.57	35	2
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ALA:C	0.76	2.29	41	44
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:THR:HG21	0.76	1.57	29	5
1:A:5:ALA:HB2	1:A:23:GLY:O	0.76	1.81	36	4
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:SER:N	0.76	1.95	24	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:110:ILE:HG23	0.76	1.56	28	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CD1	0.75	2.12	2	6
1:A:88:CYS:O	1:A:92:ALA:N	0.75	2.19	44	25
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CD2	0.75	2.16	10	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CG2	0.75	2.12	13	5
1:A:44:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CZ2	0.75	2.16	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG23	0.75	1.58	16	14
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:CB	0.75	2.12	6	6
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:C	0.75	2.05	43	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD21	0.75	2.11	32	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:CG1	0.74	2.12	5	3
1:A:23:GLY:O	1:A:24:ALA:HB2	0.74	1.83	11	44
1:A:88:CYS:C	1:A:89:THR:HG23	0.74	2.05	37	1
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:HG12	0.74	1.82	34	7
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:C	0.74	2.30	18	6
1:A:85:THR:HG22	1:A:85:THR:O	0.74	1.83	4	19
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD22	0.74	2.13	37	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD23	0.74	1.60	19	5
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.74	1.81	31	22
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HG22	0.74	1.59	12	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CE2	0.74	2.18	22	4
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:CB	0.74	2.76	29	3
1:A:23:GLY:O	1:A:24:ALA:CB	0.74	2.36	37	44
1:A:9:PRO:HD3	1:A:19:VAL:HG21	0.74	1.59	11	1
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD22	0.74	1.60	37	1
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG11	0.73	1.58	21	5
1:A:108:VAL:HG12	1:A:108:VAL:O	0.73	1.82	26	5
1:A:107:GLY:C	1:A:108:VAL:HG23	0.73	2.08	29	3
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CB	0.73	2.36	35	40
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CB	0.73	2.13	42	14
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:C	0.73	2.09	37	5
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD22	0.73	2.11	34	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD13	0.73	1.60	5	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:C	0.73	2.32	18	37
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:C	0.73	2.08	8	2
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CE1	0.72	2.19	1	4
1:A:39:TRP:CB	1:A:45:LEU:HD12	0.72	2.14	38	3
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:HB2	0.72	1.61	32	4
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:HD3	0.72	2.14	22	42
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG21	0.72	2.15	5	3
1:A:44:VAL:CG1	1:A:83:TRP:CZ2	0.72	2.72	10	3
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:CG2	0.72	2.14	21	1
1:A:39:TRP:HB2	1:A:45:LEU:HD12	0.72	1.58	39	9
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.72	2.19	35	5
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:C	0.72	2.33	6	28
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:CD1	0.72	2.73	8	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:111:SER:O	0.72	1.84	35	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HB2	0.72	1.61	31	28
1:A:58:ASP:O	1:A:60:ASN:N	0.72	2.23	24	44
1:A:13:LEU:HD23	1:A:17:THR:HG21	0.72	1.60	28	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:CG2	0.72	2.15	36	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:17:THR:O	0.71	1.85	16	22
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:O	0.71	1.85	33	2
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:HB3	0.71	1.84	44	3
1:A:36:GLN:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.71	1.61	5	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:HG23	0.71	1.60	11	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD13	0.71	1.62	42	2
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:HD3	0.71	1.62	22	32
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD21	0.71	1.60	37	20
1:A:46:ALA:HB3	1:A:83:TRP:CD1	0.71	2.20	38	3
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:CB	0.71	2.15	9	5
1:A:108:VAL:O	1:A:110:ILE:HD12	0.71	1.85	20	2
1:A:27:GLN:OE1	1:A:30:THR:HG21	0.71	1.85	16	1
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:HE	0.71	1.46	33	6
1:A:74:GLU:HG2	1:A:86:VAL:HG12	0.71	1.61	21	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:HG23	0.71	2.14	24	6
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD23	0.71	1.61	36	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CH2	0.71	2.21	10	1
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CD1	0.71	2.44	16	6
1:A:106:GLU:HG3	1:A:108:VAL:HG23	0.70	1.63	13	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.70	1.60	26	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:23:GLY:C	0.70	2.11	36	2
1:A:24:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.70	2.15	5	1
1:A:89:THR:HG22	1:A:112:PHE:HB2	0.70	1.62	37	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CE2	0.70	2.59	21	3
1:A:9:PRO:CD	1:A:19:VAL:HG21	0.70	2.16	11	7
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD11	0.70	2.17	28	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:CD1	0.70	2.15	24	4
1:A:14:SER:OG	1:A:112:PHE:CD1	0.70	2.44	41	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.70	2.21	4	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CD1	0.70	2.45	27	4
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:HG11	0.70	1.63	38	5
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD1	0.70	2.85	26	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:HD2	0.69	1.64	16	8
1:A:38:ALA:HB3	1:A:46:ALA:HB3	0.69	1.64	13	3
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:CB	0.69	2.17	19	9
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD2	0.69	2.17	36	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:HB2	0.69	1.86	10	38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:N	0.69	2.03	20	28
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CE2	0.69	2.74	26	23
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:HA3	0.69	1.64	31	8
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:CD1	0.69	2.16	28	3
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HG21	0.69	2.17	42	10
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD22	0.69	1.61	38	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:HG23	0.69	1.64	44	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:N	0.69	2.25	43	19
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD22	0.69	1.64	10	6
1:A:63:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.69	1.62	30	1
1:A:87:ASP:HB2	1:A:89:THR:HG22	0.69	1.62	40	2
1:A:71:ARG:HA	1:A:112:PHE:CD2	0.69	2.22	12	8
1:A:73:PHE:C	1:A:73:PHE:CD1	0.69	2.71	25	7
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:CB	0.69	2.40	39	11
1:A:11:SER:OG	1:A:13:LEU:HD21	0.69	1.88	44	1
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.68	2.18	6	7
1:A:12:GLY:O	1:A:14:SER:N	0.68	2.26	39	11
1:A:13:LEU:HD23	1:A:13:LEU:N	0.68	2.01	16	12
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:HB2	0.68	1.65	6	8
1:A:5:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HB2	0.68	1.64	13	1
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CZ	0.68	2.24	44	2
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:HG11	0.68	1.63	25	5
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CE2	0.68	2.76	34	1
1:A:47:CYS:CB	1:A:76:PHE:CZ	0.68	2.77	35	3
1:A:32:TYR:CD2	1:A:63:ALA:HB2	0.68	2.24	9	3
1:A:42:THR:CG2	1:A:44:VAL:HG23	0.68	2.18	30	2
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG22	0.68	1.66	32	2
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:NE	0.67	2.27	35	33
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.67	2.19	23	4
1:A:7:VAL:HG11	1:A:69:VAL:HG21	0.67	1.64	30	5
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:CG1	0.67	2.20	32	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:HG21	0.67	2.20	7	11
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:HB3	0.67	1.66	40	4
1:A:36:GLN:HG3	1:A:95:VAL:HG23	0.67	1.65	12	4
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE1	0.67	2.88	2	5
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CZ	0.67	2.88	40	16
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:HG23	0.67	1.65	13	5
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD13	0.67	1.67	17	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:CD1	0.67	2.19	42	2
1:A:70:ARG:O	1:A:112:PHE:CD2	0.66	2.48	5	6
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG23	0.66	1.90	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD11	0.66	2.20	24	1
1:A:88:CYS:C	1:A:90:THR:H	0.66	1.97	21	2
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.66	2.20	30	1
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:HB3	0.66	1.67	14	3
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD22	0.66	1.66	17	2
1:A:110:ILE:O	1:A:112:PHE:CE1	0.66	2.48	17	5
1:A:66:SER:C	1:A:67:LEU:HD23	0.66	2.15	39	3
1:A:36:GLN:HE22	1:A:95:VAL:HG22	0.66	1.50	34	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CD2	0.66	2.63	34	7
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:CG1	0.66	2.20	5	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:63:ALA:HB1	0.66	2.20	5	8
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CG	0.66	2.89	39	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CD1	0.66	2.64	8	5
1:A:82:ARG:C	1:A:83:TRP:CG	0.66	2.72	44	2
1:A:87:ASP:HB3	1:A:89:THR:HG22	0.66	1.68	39	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CD1	0.66	2.26	4	2
1:A:86:VAL:O	1:A:87:ASP:C	0.66	2.39	44	3
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:C	0.66	2.16	6	32
1:A:73:PHE:CG	1:A:74:GLU:N	0.66	2.62	10	4
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:CD1	0.66	2.77	12	1
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:HG21	0.66	1.66	28	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:SG	0.65	2.88	43	6
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:HG23	0.65	1.66	21	16
1:A:73:PHE:CE1	1:A:88:CYS:SG	0.65	2.89	24	5
1:A:73:PHE:CD2	1:A:74:GLU:N	0.65	2.63	19	4
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE1	0.65	2.89	9	14
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG22	0.65	1.67	43	3
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD13	0.65	1.68	12	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:95:VAL:HG11	0.65	2.20	38	1
1:A:70:ARG:O	1:A:112:PHE:CE2	0.65	2.50	1	18
1:A:55:VAL:CB	1:A:65:THR:HG21	0.65	2.22	9	8
1:A:48:ASN:HD21	1:A:50:ALA:HB3	0.65	1.51	28	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:21:VAL:HG22	0.65	1.68	19	10
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:N	0.65	2.29	13	21
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLY:N	0.65	2.55	18	11
1:A:26:LEU:HD11	1:A:60:ASN:OD1	0.65	1.92	36	11
1:A:63:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD13	0.65	1.69	23	3
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD22	0.65	2.22	37	2
1:A:65:THR:HG23	1:A:66:SER:N	0.64	2.07	34	17
1:A:88:CYS:O	1:A:91:ALA:N	0.64	2.26	44	20
1:A:13:LEU:HD22	1:A:17:THR:HG21	0.64	1.68	40	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD11	0.64	1.69	29	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HG	0.64	1.68	3	7
1:A:112:PHE:CD1	1:A:112:PHE:N	0.64	2.62	41	10
1:A:76:PHE:O	1:A:77:LEU:C	0.64	2.39	43	23
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD11	0.64	1.68	24	2
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:CB	0.64	2.80	8	2
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD13	0.64	1.70	17	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CE1	0.64	2.66	28	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD21	0.64	1.69	44	3
1:A:55:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	0.64	1.67	24	8
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HG21	0.64	1.69	44	6
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:HD21	0.64	1.68	36	2
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:CG2	0.64	2.46	35	32
1:A:38:ALA:O	1:A:40:VAL:HG23	0.64	1.92	7	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:56:THR:N	0.64	2.08	15	14
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD11	0.64	2.23	13	1
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:HG21	0.64	1.93	20	2
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:CB	0.64	2.45	6	12
1:A:7:VAL:HG21	1:A:19:VAL:HG23	0.64	1.69	16	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:CB	0.64	2.46	44	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CE2	0.63	2.28	34	2
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD12	0.63	1.69	5	4
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD23	0.63	1.67	6	1
1:A:10:SER:H	1:A:13:LEU:HD11	0.63	1.53	41	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:HZ2	0.63	1.53	44	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:HD1	0.63	1.51	2	17
1:A:39:TRP:CE3	1:A:94:GLN:NE2	0.63	2.66	21	2
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:HG22	0.63	1.93	30	2
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:HG23	0.63	1.92	11	1
1:A:14:SER:OG	1:A:112:PHE:CE1	0.63	2.50	41	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:HB3	0.63	1.70	9	10
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD12	0.63	2.24	19	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CD1	0.63	2.52	28	2
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:C	0.63	2.76	39	8
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CZ	0.63	2.81	24	2
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CD2	0.63	2.52	14	13
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD12	0.63	2.24	25	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:CD2	0.63	2.22	10	5
1:A:38:ALA:CB	1:A:73:PHE:CE2	0.63	2.81	37	1
1:A:17:THR:HG23	1:A:69:VAL:HB	0.63	1.70	12	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:CD2	0.63	2.23	22	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:TRP:CG	1:A:45:LEU:HD12	0.63	2.29	24	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG11	0.63	1.71	32	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:86:VAL:HG21	0.63	2.29	36	2
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CE2	0.62	2.52	43	7
1:A:7:VAL:HG22	1:A:9:PRO:HD2	0.62	1.70	27	4
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:HG12	0.62	1.69	5	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:CG2	0.62	2.25	36	5
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:CG2	0.62	2.76	8	8
1:A:9:PRO:O	1:A:110:ILE:HD13	0.62	1.94	16	1
1:A:95:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HD13	0.62	1.71	20	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:C	0.62	2.43	27	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD11	0.62	1.71	13	2
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:CD2	0.62	2.25	42	2
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:CB	0.62	2.48	25	36
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CE1	0.62	2.29	25	4
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CD1	0.62	2.30	44	3
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:HG22	0.62	1.94	27	3
1:A:7:VAL:O	1:A:8:THR:C	0.62	2.41	22	40
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:CB	0.62	2.47	39	14
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:CG2	0.62	2.77	23	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.29	34	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:108:VAL:HG11	0.62	2.23	30	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:99:ASP:OD2	0.62	2.52	27	5
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CE1	0.62	2.30	29	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.93	16	2
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.29	5	3
1:A:72:SER:HB2	1:A:86:VAL:HG22	0.61	1.72	32	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CE2	0.61	2.30	34	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CG	0.61	2.53	2	7
1:A:73:PHE:CE2	1:A:88:CYS:SG	0.61	2.93	33	5
1:A:37:CYS:C	1:A:73:PHE:CE1	0.61	2.78	37	1
1:A:38:ALA:N	1:A:73:PHE:CZ	0.61	2.68	37	1
1:A:17:THR:O	1:A:17:THR:HG22	0.61	1.94	4	2
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD21	0.61	1.73	4	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CG	0.61	2.68	9	3
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CE1	0.61	2.54	27	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD13	0.61	2.25	42	2
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:SG	0.61	2.89	41	9
1:A:6:THR:C	1:A:21:VAL:HG13	0.61	2.20	26	5
1:A:25:GLY:N	1:A:97:LEU:HD22	0.61	2.10	12	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:87:ASP:N	0.61	2.62	32	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:CD1	0.61	2.25	38	1
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:CZ	0.61	2.77	15	18
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:HG23	0.61	2.24	42	15
1:A:103:ASN:OD1	1:A:103:ASN:C	0.61	2.44	15	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CD2	0.61	2.53	44	2
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:CD	0.61	2.78	22	26
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG11	0.61	2.25	25	4
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CD2	0.61	2.54	20	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:95:VAL:CG1	0.61	2.78	43	6
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ3	0.61	2.30	20	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CD1	0.60	2.54	2	2
1:A:73:PHE:CD1	1:A:88:CYS:SG	0.60	2.94	6	4
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:CG2	0.60	2.79	35	6
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:CA	0.60	2.26	14	16
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.71	38	2
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CE2	0.60	2.31	41	4
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:CB	0.60	2.85	17	3
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HD23	0.60	1.96	40	10
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HE2	0.60	1.52	7	8
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CE2	0.60	2.31	30	2
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:O	0.60	1.96	35	1
1:A:47:CYS:HB2	1:A:76:PHE:CZ	0.60	2.31	35	3
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.60	2.27	26	1
1:A:86:VAL:HG13	1:A:87:ASP:H	0.60	1.56	32	4
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD11	0.60	2.26	17	5
1:A:44:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.73	32	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:CG2	0.60	2.26	2	7
1:A:31:ALA:O	1:A:32:TYR:CD1	0.60	2.54	4	8
1:A:51:ASP:O	1:A:53:SER:N	0.60	2.33	8	27
1:A:88:CYS:C	1:A:90:THR:N	0.60	2.60	21	14
1:A:73:PHE:CE2	1:A:74:GLU:O	0.60	2.54	10	2
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CE3	0.60	2.54	11	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:113:ASN:C	0.60	2.21	36	1
1:A:14:SER:O	1:A:112:PHE:CE2	0.60	2.54	42	1
1:A:16:GLY:O	1:A:18:VAL:HG23	0.60	1.97	11	14
1:A:48:ASN:CB	1:A:73:PHE:CE2	0.60	2.85	41	3
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CZ	0.60	2.32	16	8
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:CA	0.60	2.27	40	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD21	0.60	2.27	13	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CZ	0.60	2.32	13	2
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:CE2	0.60	2.32	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:NE1	0.59	2.12	15	7
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CG	0.59	2.55	44	5
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:CG2	0.59	2.27	13	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD22	0.59	1.73	23	2
1:A:51:ASP:OD2	1:A:53:SER:N	0.59	2.36	38	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:63:ALA:HB1	0.59	1.74	5	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:CG1	0.59	2.26	34	4
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CE1	0.59	2.55	34	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:CB	0.59	2.51	17	12
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:CD2	0.59	2.28	14	1
1:A:110:ILE:O	1:A:112:PHE:CD1	0.59	2.56	41	15
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:NE	0.59	2.66	15	2
1:A:5:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.71	29	1
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:HD21	0.59	1.75	39	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:CB	0.59	2.50	10	26
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:CG2	0.59	2.50	21	1
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:CD1	0.59	2.27	27	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:O	0.59	1.96	37	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:CG2	0.59	2.81	31	8
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.74	28	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:C	0.59	2.23	43	20
1:A:39:TRP:HB3	1:A:45:LEU:HD12	0.59	1.74	28	3
1:A:5:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.75	14	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CZ	0.59	2.70	28	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:93:CYS:SG	0.58	2.91	27	3
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CD1	0.58	2.56	34	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:50:ALA:HB3	0.58	1.98	36	2
1:A:46:ALA:HB3	1:A:83:TRP:HD1	0.58	1.56	38	3
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD21	0.58	1.73	25	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:HG13	0.58	1.73	38	1
1:A:65:THR:OG1	1:A:66:SER:N	0.58	2.36	9	9
1:A:83:TRP:CD2	1:A:86:VAL:HG11	0.58	2.33	42	2
1:A:52:PHE:O	1:A:53:SER:C	0.58	2.45	6	37
1:A:51:ASP:C	1:A:53:SER:H	0.58	2.06	21	10
1:A:49:PRO:HD2	1:A:76:PHE:CD1	0.58	2.34	33	3
1:A:15:ASP:CG	1:A:15:ASP:O	0.58	2.46	32	11
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG23	0.58	1.75	34	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:112:PHE:CD1	0.58	2.86	32	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.58	2.28	34	1
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CE1	0.58	2.56	38	1
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:CB	0.58	2.28	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CZ	0.58	2.87	36	12
1:A:12:GLY:N	1:A:110:ILE:CG2	0.58	2.66	31	3
1:A:39:TRP:C	1:A:39:TRP:CD1	0.58	2.81	9	4
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD23	0.58	1.74	34	1
1:A:17:THR:O	1:A:17:THR:CG2	0.58	2.51	16	16
1:A:83:TRP:O	1:A:84:GLY:C	0.58	2.47	10	2
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:CB	0.58	2.86	18	2
1:A:16:GLY:N	1:A:70:ARG:HA	0.58	2.14	39	5
1:A:89:THR:CB	1:A:112:PHE:O	0.58	2.51	30	9
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:NH2	0.58	2.67	21	2
1:A:71:ARG:HD3	1:A:89:THR:HG22	0.58	1.74	36	1
1:A:112:PHE:O	1:A:113:ASN:C	0.58	2.47	14	12
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:HA	0.58	2.34	16	3
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:HG13	0.58	1.76	24	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CD2	0.58	2.56	29	2
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:CG	0.57	2.52	19	12
1:A:66:SER:C	1:A:67:LEU:HD12	0.57	2.24	5	4
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD2	0.57	2.82	30	3
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:CB	0.57	2.28	20	8
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:SER:H	0.57	1.56	24	1
1:A:32:TYR:HD2	1:A:63:ALA:HB2	0.57	1.58	25	3
1:A:36:GLN:HG2	1:A:73:PHE:CE2	0.57	2.35	29	2
1:A:74:GLU:CG	1:A:86:VAL:HG12	0.57	2.30	21	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CG	0.57	2.98	36	5
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:O	0.57	1.99	7	9
1:A:40:VAL:HB	1:A:44:VAL:HG12	0.57	1.76	36	3
1:A:47:CYS:C	1:A:49:PRO:HD3	0.57	2.25	34	5
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CE2	0.57	2.58	32	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:OD2	0.57	1.99	2	3
1:A:95:VAL:O	1:A:95:VAL:HG13	0.57	1.99	7	9
1:A:73:PHE:CE2	1:A:74:GLU:C	0.57	2.83	10	2
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD21	0.57	1.77	17	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD21	0.57	2.29	44	3
1:A:65:THR:CG2	1:A:67:LEU:HD21	0.57	2.29	42	2
1:A:4:THR:HG22	1:A:106:GLU:CD	0.57	2.23	37	1
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:CB	0.57	2.53	38	16
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HG21	0.57	1.74	5	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:CB	0.57	2.82	9	3
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CD2	0.57	2.52	41	5
1:A:76:PHE:CZ	1:A:78:PHE:HA	0.57	2.35	22	2
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD12	0.57	1.77	38	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ASP:CG	1:A:62:SER:O	0.57	2.47	10	44
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.57	2.53	26	7
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD11	0.57	1.75	28	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD21	0.57	1.77	30	9
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:CB	0.57	2.52	13	7
1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:HD1	0.57	1.98	41	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:HB3	0.57	2.00	36	11
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CZ	0.57	2.35	24	6
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HD12	0.57	2.00	8	6
1:A:35:GLY:O	1:A:95:VAL:HG23	0.57	1.99	41	2
1:A:83:TRP:CE3	1:A:83:TRP:C	0.57	2.83	20	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:NE	0.56	2.38	34	17
1:A:55:VAL:CG2	1:A:56:THR:N	0.56	2.68	27	11
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:HD13	0.56	1.76	8	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CZ	0.56	2.98	37	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CD1	0.56	2.87	6	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD22	0.56	2.30	4	1
1:A:30:THR:H	1:A:57:ALA:HB3	0.56	1.59	14	8
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.56	2.00	30	6
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:OD2	0.56	2.00	29	1
1:A:107:GLY:C	1:A:108:VAL:CG2	0.56	2.78	29	2
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD12	0.56	1.77	37	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:HB2	0.56	1.99	1	8
1:A:9:PRO:CB	1:A:13:LEU:HD21	0.56	2.30	37	3
1:A:50:ALA:HA	1:A:52:PHE:CE1	0.56	2.35	34	8
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:SG	0.56	2.62	11	23
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD11	0.56	1.75	6	3
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CD1	0.56	2.54	23	6
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CZ	0.56	2.35	35	2
1:A:5:ALA:C	1:A:6:THR:CG2	0.56	2.78	18	37
1:A:83:TRP:N	1:A:83:TRP:CD1	0.56	2.74	10	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD21	0.56	2.30	13	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:NE1	0.56	2.16	26	1
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD2	0.56	2.78	42	5
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD13	0.56	2.31	34	2
1:A:10:SER:N	1:A:13:LEU:HD11	0.56	2.16	41	1
1:A:17:THR:O	1:A:19:VAL:HG22	0.56	2.00	39	10
1:A:33:ASP:CB	1:A:98:SER:O	0.56	2.54	12	1
1:A:68:THR:HG23	1:A:68:THR:O	0.56	2.01	33	10
1:A:32:TYR:HE2	1:A:57:ALA:HB2	0.56	1.61	31	14
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:HG23	0.56	2.00	30	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG21	1:A:91:ALA:HB1	0.56	1.77	35	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:CD1	0.56	2.84	26	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:HG22	0.56	2.30	43	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CE3	0.56	2.36	10	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:57:ALA:HB2	0.56	2.36	30	5
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD11	0.56	1.78	6	3
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:C	0.56	2.79	8	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:113:ASN:C	0.56	2.79	8	2
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:CG2	0.56	2.54	22	5
1:A:7:VAL:CB	1:A:110:ILE:HD11	0.56	2.31	33	2
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:HA	0.56	2.01	5	18
1:A:26:LEU:HA	1:A:61:GLY:C	0.56	2.26	27	40
1:A:12:GLY:HA2	1:A:17:THR:HG21	0.56	1.78	14	2
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE2	0.56	2.99	16	2
1:A:83:TRP:CG	1:A:84:GLY:N	0.56	2.74	18	2
1:A:13:LEU:CB	1:A:69:VAL:HG11	0.56	2.31	32	1
1:A:40:VAL:CB	1:A:44:VAL:HG12	0.56	2.30	36	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HG21	0.56	1.78	41	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB3	0.55	2.37	17	6
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.84	20	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:50:ALA:HB3	0.55	2.15	28	1
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:OH	0.55	2.55	12	11
1:A:71:ARG:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.55	2.37	25	2
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:N	0.55	2.38	25	7
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE1	0.55	2.36	33	3
1:A:42:THR:HG22	1:A:43:GLY:N	0.55	2.15	25	6
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.31	25	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.80	4	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:41:ASP:O	0.55	2.59	23	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:NE1	0.55	2.17	10	2
1:A:4:THR:OG1	1:A:5:ALA:N	0.55	2.38	36	5
1:A:5:ALA:HB3	1:A:96:GLY:HA2	0.55	1.79	32	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG21	0.55	1.76	40	2
1:A:8:THR:CG2	1:A:9:PRO:HD3	0.55	2.32	22	9
1:A:86:VAL:O	1:A:88:CYS:N	0.55	2.39	27	2
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:HB2	0.55	2.02	43	17
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:O	0.55	2.25	4	7
1:A:27:GLN:CD	1:A:27:GLN:C	0.55	2.74	7	2
1:A:39:TRP:CG	1:A:39:TRP:O	0.55	2.59	28	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.32	41	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PRO:CD	0.55	2.27	34	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:CD2	0.55	2.60	44	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.79	1	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CE2	0.55	2.35	16	3
1:A:39:TRP:CE2	1:A:41:ASP:O	0.55	2.60	14	1
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:CB	0.55	2.32	35	7
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE1	0.55	2.37	3	6
1:A:10:SER:C	1:A:110:ILE:CG2	0.55	2.80	32	2
1:A:94:GLN:HE21	1:A:94:GLN:N	0.55	2.00	10	1
1:A:6:THR:C	1:A:21:VAL:HG23	0.55	2.26	13	1
1:A:12:GLY:C	1:A:17:THR:HG21	0.54	2.27	8	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:CB	0.54	2.89	17	2
1:A:13:LEU:O	1:A:14:SER:O	0.54	2.25	32	1
1:A:48:ASN:CB	1:A:73:PHE:CD2	0.54	2.90	36	2
1:A:23:GLY:O	1:A:63:ALA:CB	0.54	2.55	34	26
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:N	0.54	2.40	37	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:23:GLY:C	0.54	2.79	36	1
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:CD1	0.54	2.32	30	5
1:A:94:GLN:CB	1:A:108:VAL:C	0.54	2.81	2	4
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:HD12	0.54	2.03	12	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CE1	0.54	2.36	16	1
1:A:14:SER:C	1:A:112:PHE:CE2	0.54	2.85	42	1
1:A:12:GLY:N	1:A:111:SER:O	0.54	2.40	42	16
1:A:29:GLY:N	1:A:57:ALA:HB3	0.54	2.17	25	7
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:CG2	0.54	2.55	32	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:THR:CG2	0.54	2.32	6	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:19:VAL:HG13	0.54	2.32	17	6
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD12	0.54	1.79	15	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:N	0.54	2.41	16	4
1:A:74:GLU:CD	1:A:83:TRP:CB	0.54	2.81	21	2
1:A:74:GLU:OE1	1:A:83:TRP:CG	0.54	2.60	21	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD11	0.54	1.80	25	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE2	0.54	3.01	30	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:CA	0.54	2.56	15	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG12	0.54	2.03	32	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:112:PHE:CD1	0.54	2.91	44	1
1:A:5:ALA:O	1:A:107:GLY:CA	0.54	2.56	6	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:86:VAL:O	0.54	2.03	37	1
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD11	0.54	1.80	7	2
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB3	0.54	2.38	8	4
1:A:58:ASP:N	1:A:62:SER:O	0.54	2.41	9	14
1:A:13:LEU:CG	1:A:69:VAL:HG11	0.54	2.33	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:NH1	0.54	2.71	35	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.90	36	1
1:A:94:GLN:CB	1:A:108:VAL:O	0.54	2.56	18	7
1:A:4:THR:C	1:A:24:ALA:N	0.54	2.66	13	6
1:A:68:THR:O	1:A:68:THR:HG23	0.54	2.03	14	3
1:A:71:ARG:CZ	1:A:113:ASN:ND2	0.54	2.70	31	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG12	0.54	1.80	42	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CE1	0.53	2.60	2	2
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CE2	0.53	2.39	35	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG22	0.53	2.32	1	11
1:A:47:CYS:O	1:A:75:GLY:CA	0.53	2.55	20	4
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:HZ2	0.53	1.53	7	2
1:A:106:GLU:CG	1:A:108:VAL:HG23	0.53	2.31	13	1
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:N	0.53	2.64	14	4
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:CA	0.53	2.86	32	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:56:THR:H	0.53	1.64	23	17
1:A:16:GLY:CA	1:A:68:THR:OG1	0.53	2.56	39	2
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:HB3	0.53	2.03	35	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:21:VAL:HG22	0.53	2.21	22	1
1:A:73:PHE:O	1:A:74:GLU:CG	0.53	2.56	37	1
1:A:50:ALA:HA	1:A:52:PHE:CZ	0.53	2.38	43	1
1:A:58:ASP:O	1:A:58:ASP:OD1	0.53	2.26	38	43
1:A:74:GLU:OE2	1:A:86:VAL:CG1	0.53	2.57	19	1
1:A:42:THR:O	1:A:43:GLY:C	0.53	2.51	36	3
1:A:88:CYS:O	1:A:90:THR:N	0.53	2.42	21	2
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:HG23	0.53	2.02	29	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:44:VAL:O	0.53	2.62	31	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:ALA:HB1	0.53	1.81	27	5
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:CB	0.53	2.57	31	5
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CE1	0.53	2.87	12	2
1:A:39:TRP:CD2	1:A:45:LEU:HD12	0.53	2.39	24	2
1:A:88:CYS:C	1:A:89:THR:CG2	0.53	2.74	37	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:HB3	0.53	2.02	29	8
1:A:12:GLY:H	1:A:110:ILE:HG22	0.53	1.61	18	3
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CZ	0.53	2.62	20	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD23	0.53	1.81	31	1
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:HB	0.53	2.03	32	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:53:SER:CB	0.53	2.34	40	27
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB2	0.53	2.37	8	2
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:C	0.53	2.52	40	28
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:CB	0.53	2.57	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:GLY:H	1:A:97:LEU:HD22	0.53	1.64	12	1
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD13	0.53	2.34	20	1
1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CD	0.53	2.67	26	1
1:A:37:CYS:C	1:A:73:PHE:CZ	0.53	2.87	37	1
1:A:99:ASP:CG	1:A:103:ASN:CG	0.53	2.77	13	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:56:THR:N	0.53	2.72	6	9
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:HA3	0.53	1.81	40	1
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE2	0.53	2.39	41	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB2	0.52	2.39	17	2
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HG	0.52	2.04	23	5
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE1	0.52	2.92	17	4
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:CB	0.52	2.34	1	20
1:A:41:ASP:O	1:A:43:GLY:N	0.52	2.42	33	10
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CD1	0.52	2.63	40	2
1:A:103:ASN:O	1:A:104:GLY:C	0.52	2.51	15	2
1:A:103:ASN:OD1	1:A:104:GLY:N	0.52	2.43	41	5
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:HB3	0.52	2.44	29	3
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CG	0.52	2.34	44	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:CD1	0.52	2.31	5	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:HG2	0.52	2.04	13	7
1:A:72:SER:CB	1:A:87:ASP:N	0.52	2.72	32	1
1:A:51:ASP:CG	1:A:52:PHE:N	0.52	2.68	34	1
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE2	0.52	2.40	12	1
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD2	0.52	2.72	16	1
1:A:14:SER:OG	1:A:15:ASP:N	0.52	2.42	40	2
1:A:37:CYS:HB3	1:A:45:LEU:HD21	0.52	1.79	33	3
1:A:51:ASP:CB	1:A:70:ARG:NH1	0.52	2.72	34	2
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CE1	0.52	2.39	6	2
1:A:47:CYS:CB	1:A:76:PHE:CE1	0.52	2.93	6	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB3	0.52	2.39	8	3
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CD1	0.52	2.35	12	2
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD23	0.52	2.05	22	1
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD12	0.52	1.82	38	1
1:A:73:PHE:HB3	1:A:84:GLY:O	0.52	2.05	44	1
1:A:71:ARG:HB2	1:A:112:PHE:CG	0.52	2.40	10	3
1:A:13:LEU:O	1:A:14:SER:C	0.52	2.53	8	4
1:A:74:GLU:CG	1:A:74:GLU:O	0.52	2.58	13	3
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:NH2	0.52	2.72	17	1
1:A:67:LEU:HD23	1:A:67:LEU:N	0.52	2.19	39	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HB	0.52	1.81	41	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:98:SER:N	0.52	2.68	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:OG1	0.52	2.56	39	4
1:A:83:TRP:O	1:A:85:THR:N	0.52	2.42	30	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:C	0.52	2.88	11	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:83:TRP:CZ2	0.52	2.91	30	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:HB3	0.52	2.40	35	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:51:ASP:OD2	0.52	2.58	2	2
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:CG2	0.52	2.87	3	4
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:CA	0.52	2.35	7	7
1:A:14:SER:OG	1:A:71:ARG:CB	0.52	2.58	24	1
1:A:4:THR:CG2	1:A:106:GLU:O	0.52	2.58	32	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:ASP:H	0.52	1.65	27	3
1:A:88:CYS:C	1:A:93:CYS:SG	0.52	2.93	39	3
1:A:21:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD22	0.51	2.35	18	3
1:A:10:SER:CA	1:A:110:ILE:HG23	0.51	2.35	26	5
1:A:65:THR:CG2	1:A:67:LEU:CD1	0.51	2.88	30	5
1:A:73:PHE:O	1:A:85:THR:N	0.51	2.44	26	3
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:CB	0.51	2.35	25	3
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:CB	0.51	2.57	30	2
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:CB	0.51	2.58	1	4
1:A:95:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.51	2.83	3	5
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD13	0.51	1.82	4	1
1:A:37:CYS:C	1:A:94:GLN:NE2	0.51	2.69	6	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:86:VAL:HG11	0.51	1.80	17	1
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:CD2	0.51	2.59	23	1
1:A:39:TRP:HE1	1:A:94:GLN:NE2	0.51	2.02	44	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:56:THR:N	0.51	2.21	19	12
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:C	0.51	2.30	8	2
1:A:56:THR:CG2	1:A:57:ALA:N	0.51	2.73	22	9
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CZ	0.51	2.40	35	5
1:A:34:VAL:HA	1:A:97:LEU:HD23	0.51	1.82	25	1
1:A:38:ALA:CA	1:A:94:GLN:OE1	0.51	2.58	43	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:O	0.51	2.29	9	42
1:A:108:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.51	2.35	13	2
1:A:27:GLN:C	1:A:61:GLY:HA3	0.51	2.31	22	40
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:CG	0.51	2.53	21	24
1:A:52:PHE:O	1:A:53:SER:O	0.51	2.28	38	25
1:A:103:ASN:ND2	1:A:104:GLY:N	0.51	2.59	18	5
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG12	0.51	1.83	6	1
1:A:17:THR:O	1:A:17:THR:HG23	0.51	2.06	8	2
1:A:11:SER:CA	1:A:111:SER:O	0.51	2.59	9	2
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CE2	0.51	2.63	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CE1	0.51	2.40	35	3
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.51	2.59	33	1
1:A:92:ALA:O	1:A:93:CYS:O	0.51	2.29	14	27
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:HB2	0.51	2.06	31	8
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD22	0.51	2.05	40	2
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:CB	0.51	2.58	29	3
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:CD2	0.51	2.89	22	1
1:A:5:ALA:C	1:A:6:THR:HG23	0.51	2.31	22	9
1:A:18:VAL:HA	1:A:67:LEU:O	0.51	2.06	41	12
1:A:33:ASP:N	1:A:98:SER:O	0.51	2.44	34	14
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:O	0.51	2.28	35	5
1:A:27:GLN:CD	1:A:30:THR:HG21	0.51	2.31	11	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:95:VAL:HG11	0.51	1.82	42	2
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:CG2	0.51	2.59	30	2
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CD1	0.51	2.64	42	2
1:A:13:LEU:HA	1:A:113:ASN:N	0.51	2.21	8	5
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:CG	0.51	2.59	33	6
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG1	0.51	2.59	41	3
1:A:71:ARG:HB3	1:A:112:PHE:CD2	0.51	2.41	43	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.51	1.81	41	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CZ	0.50	2.65	2	2
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ASP:C	0.50	2.54	44	23
1:A:24:ALA:CB	1:A:32:TYR:CD2	0.50	2.94	5	3
1:A:63:ALA:HB2	1:A:97:LEU:CD2	0.50	2.36	6	2
1:A:6:THR:CA	1:A:108:VAL:HG21	0.50	2.31	36	1
1:A:46:ALA:CA	1:A:77:LEU:HD12	0.50	2.35	38	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:CG	0.50	2.94	8	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CE1	0.50	2.65	20	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:CD1	0.50	2.95	26	2
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:CA	0.50	2.60	24	1
1:A:37:CYS:CB	1:A:45:LEU:HD21	0.50	2.36	39	2
1:A:21:VAL:N	1:A:65:THR:O	0.50	2.45	31	11
1:A:16:GLY:HA2	1:A:68:THR:OG1	0.50	2.07	39	2
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:CB	0.50	2.60	38	1
1:A:65:THR:CG2	1:A:66:SER:N	0.50	2.74	1	6
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CD	0.50	2.70	6	7
1:A:38:ALA:CB	1:A:88:CYS:SG	0.50	2.98	12	5
1:A:84:GLY:C	1:A:86:VAL:N	0.50	2.69	44	7
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:TRP:CD1	0.50	2.94	21	1
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:O	0.50	2.29	40	2
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG13	0.50	2.07	33	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:N	1:A:32:TYR:OH	0.50	2.44	38	1
1:A:27:GLN:CB	1:A:32:TYR:OH	0.50	2.60	24	7
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CE2	0.50	2.41	1	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HB3	0.50	2.42	30	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:45:LEU:HB2	0.50	2.42	23	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:103:ASN:N	0.50	2.44	10	5
1:A:74:GLU:HG3	1:A:76:PHE:CE1	0.50	2.41	42	2
1:A:13:LEU:HB2	1:A:112:PHE:CE1	0.50	2.42	42	1
1:A:71:ARG:HB2	1:A:112:PHE:CD2	0.50	2.42	19	4
1:A:75:GLY:N	1:A:83:TRP:O	0.50	2.44	30	2
1:A:98:SER:CB	1:A:103:ASN:O	0.50	2.60	30	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:CB	0.50	2.85	43	1
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE2	0.49	2.95	12	2
1:A:13:LEU:HB3	1:A:17:THR:CG2	0.49	2.33	12	4
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG2	0.49	2.60	16	5
1:A:71:ARG:CD	1:A:89:THR:CG2	0.49	2.90	11	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:89:THR:CG2	0.49	2.37	23	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:44:VAL:HG12	0.49	2.37	20	1
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CE2	0.49	2.42	35	2
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:HB3	0.49	1.84	42	1
1:A:83:TRP:HA	1:A:83:TRP:CE3	0.49	2.42	38	4
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CD2	0.49	2.41	6	1
1:A:50:ALA:C	1:A:52:PHE:N	0.49	2.69	25	3
1:A:39:TRP:CE3	1:A:45:LEU:CD1	0.49	2.95	24	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:113:ASN:C	0.49	2.69	30	2
1:A:25:GLY:C	1:A:32:TYR:OH	0.49	2.54	6	5
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HG11	0.49	2.07	12	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:CD1	0.49	2.84	29	3
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CE1	0.49	2.43	36	2
1:A:51:ASP:OD2	1:A:70:ARG:NH1	0.49	2.46	19	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:87:ASP:CG	0.49	2.70	26	1
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:HZ2	0.49	1.58	22	3
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:CG1	0.49	2.60	43	4
1:A:64:SER:O	1:A:65:THR:HB	0.49	2.07	9	11
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:CZ	0.49	2.90	21	3
1:A:74:GLU:CB	1:A:84:GLY:O	0.49	2.60	33	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:N	0.49	2.46	11	25
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CD1	0.49	2.89	14	2
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:HB2	0.49	2.07	36	14
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:CG1	0.49	2.37	31	8
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CG	0.49	2.61	23	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ARG:CG	1:A:72:SER:H	0.49	2.20	42	3
1:A:13:LEU:CD1	1:A:111:SER:O	0.49	2.58	35	1
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CD2	0.49	2.42	35	2
1:A:87:ASP:CB	1:A:89:THR:HG22	0.49	2.36	40	2
1:A:14:SER:N	1:A:17:THR:OG1	0.49	2.45	10	11
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:CD2	0.49	2.90	14	2
1:A:36:GLN:CD	1:A:70:ARG:NE	0.49	2.71	17	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:39:TRP:O	0.49	2.66	25	1
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CE2	0.49	2.43	28	2
1:A:38:ALA:HB1	1:A:88:CYS:SG	0.49	2.48	32	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CD2	0.49	2.33	35	2
1:A:14:SER:CB	1:A:112:PHE:CG	0.49	2.96	41	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:87:ASP:OD2	0.49	2.59	26	2
1:A:75:GLY:H	1:A:84:GLY:HA3	0.49	1.67	32	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:73:PHE:CZ	0.49	2.96	37	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:70:ARG:NH2	0.48	2.46	2	3
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:N	0.48	2.46	20	2
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:HG23	0.48	2.08	37	1
1:A:14:SER:C	1:A:112:PHE:CD2	0.48	2.91	42	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HG	0.48	1.84	1	5
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:N	0.48	2.46	25	7
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:SG	0.48	2.48	25	3
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:HB3	0.48	2.37	34	8
1:A:89:THR:CB	1:A:112:PHE:HB2	0.48	2.37	18	2
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:HB3	0.48	2.42	32	2
1:A:71:ARG:CZ	1:A:87:ASP:CG	0.48	2.86	26	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CD1	0.48	2.44	29	1
1:A:51:ASP:O	1:A:70:ARG:NH1	0.48	2.46	42	5
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:CD2	0.48	2.94	35	3
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CD1	0.48	2.43	19	2
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:GLY:N	0.48	2.76	17	6
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:HB2	0.48	2.43	38	3
1:A:13:LEU:O	1:A:113:ASN:CB	0.48	2.62	27	1
1:A:38:ALA:N	1:A:94:GLN:OE1	0.48	2.46	43	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.48	2.78	43	1
1:A:7:VAL:O	1:A:9:PRO:O	0.48	2.32	17	10
1:A:20:LYS:HA	1:A:65:THR:O	0.48	2.08	9	3
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:CD2	0.48	2.38	18	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:94:GLN:NE2	0.48	2.81	28	1
1:A:47:CYS:O	1:A:76:PHE:CD2	0.48	2.66	36	2
1:A:14:SER:OG	1:A:69:VAL:O	0.48	2.31	41	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ILE:HB	1:A:112:PHE:CE1	0.48	2.44	5	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:83:TRP:CD1	0.48	2.44	6	1
1:A:87:ASP:C	1:A:89:THR:N	0.48	2.69	40	6
1:A:36:GLN:OE1	1:A:69:VAL:HA	0.48	2.08	12	1
1:A:99:ASP:O	1:A:103:ASN:CG	0.48	2.57	36	6
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:HB2	0.48	2.08	43	10
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:CD	0.48	2.39	25	5
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:OD1	0.48	2.31	15	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB2	0.48	2.43	17	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CG	0.48	2.43	19	2
1:A:45:LEU:HB3	1:A:78:PHE:CZ	0.48	2.44	34	1
1:A:98:SER:OG	1:A:103:ASN:CB	0.48	2.62	36	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:HB2	0.48	2.08	38	1
1:A:92:ALA:C	1:A:93:CYS:O	0.48	2.57	14	27
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:HD2	0.48	2.31	34	9
1:A:73:PHE:O	1:A:84:GLY:O	0.48	2.31	38	6
1:A:5:ALA:O	1:A:6:THR:CG2	0.48	2.61	22	5
1:A:20:LYS:CG	1:A:65:THR:O	0.48	2.61	38	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE2	0.48	2.97	41	1
1:A:37:CYS:CB	1:A:47:CYS:HA	0.48	2.39	7	20
1:A:51:ASP:C	1:A:53:SER:N	0.48	2.71	21	4
1:A:46:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD12	0.48	2.39	38	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:CD1	0.48	2.38	15	3
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:CG	0.48	2.66	44	1
1:A:39:TRP:HA	1:A:45:LEU:HD12	0.48	1.84	5	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD21	0.48	1.86	14	2
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:CD1	0.48	2.92	44	4
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.48	1.85	17	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:10:SER:N	0.48	2.23	20	1
1:A:15:ASP:CA	1:A:71:ARG:CG	0.47	2.92	3	2
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD12	0.47	2.39	5	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:CD1	0.47	2.92	7	2
1:A:13:LEU:CB	1:A:69:VAL:CG1	0.47	2.92	32	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:87:ASP:N	0.47	2.47	2	1
1:A:16:GLY:O	1:A:18:VAL:N	0.47	2.47	33	6
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:H	0.47	2.17	32	3
1:A:32:TYR:HB2	1:A:55:VAL:HG13	0.47	1.83	17	1
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:45:LEU:HD12	0.47	2.43	44	1
1:A:69:VAL:O	1:A:70:ARG:C	0.47	2.58	1	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:TRP:CZ2	0.47	2.45	37	3
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:CG1	0.47	2.39	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:TRP:HA	1:A:45:LEU:HD22	0.47	1.85	14	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HD2	0.47	2.44	2	3
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:CB	0.47	2.63	12	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:53:SER:C	0.47	2.35	13	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:HG11	0.47	1.85	31	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:OH	0.47	2.57	31	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:111:SER:O	0.47	2.61	33	1
1:A:4:THR:HG22	1:A:106:GLU:OE2	0.47	2.10	37	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.91	11	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:47:CYS:SG	0.47	2.50	13	2
1:A:110:ILE:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.47	2.45	17	1
1:A:37:CYS:C	1:A:94:GLN:OE1	0.47	2.57	21	4
1:A:110:ILE:HG22	1:A:111:SER:N	0.47	2.25	32	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:C	0.47	2.34	37	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:HG23	0.47	2.39	11	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:46:ALA:HB2	0.47	1.85	26	1
1:A:51:ASP:HB2	1:A:70:ARG:NH1	0.47	2.24	38	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD23	0.47	2.37	36	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD22	0.47	2.40	37	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:CYS:O	0.47	2.33	37	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD23	0.47	1.85	38	1
1:A:39:TRP:N	1:A:94:GLN:OE1	0.47	2.47	43	1
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:CD2	0.47	2.39	34	7
1:A:51:ASP:HA	1:A:70:ARG:NH1	0.47	2.25	32	15
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:OE1	0.47	2.48	4	13
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HG	0.47	2.40	4	5
1:A:73:PHE:O	1:A:86:VAL:HG12	0.47	2.09	4	3
1:A:36:GLN:HA	1:A:94:GLN:O	0.47	2.10	5	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HB3	0.47	2.39	11	5
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:HB2	0.47	1.82	9	2
1:A:74:GLU:HA	1:A:85:THR:H	0.47	1.70	30	3
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:O	0.47	2.63	13	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:47:CYS:SG	0.47	3.03	13	1
1:A:47:CYS:O	1:A:76:PHE:CD1	0.47	2.67	13	1
1:A:8:THR:N	1:A:9:PRO:CD	0.47	2.77	34	8
1:A:28:ALA:O	1:A:29:GLY:C	0.47	2.58	15	3
1:A:29:GLY:H	1:A:57:ALA:HB3	0.47	1.69	20	2
1:A:14:SER:O	1:A:16:GLY:N	0.47	2.47	21	4
1:A:39:TRP:CD2	1:A:45:LEU:CD1	0.47	2.97	24	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:112:PHE:HB2	0.47	2.40	30	1
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.40	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ASP:HB2	1:A:70:ARG:CZ	0.47	2.39	38	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:82:ARG:HB2	0.47	2.45	21	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HD11	0.47	1.83	3	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:CB	0.47	2.40	3	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:HB2	0.47	2.40	38	4
1:A:45:LEU:HD11	1:A:94:GLN:HE22	0.47	1.70	4	1
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:NH2	0.47	2.48	4	6
1:A:99:ASP:O	1:A:103:ASN:ND2	0.47	2.48	10	5
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD22	0.47	1.85	11	2
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:HB3	0.47	2.08	44	2
1:A:77:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CD1	0.47	2.45	39	2
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:CG2	0.47	2.63	27	2
1:A:36:GLN:OE1	1:A:68:THR:O	0.47	2.32	21	1
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:HD23	0.47	2.10	41	2
1:A:13:LEU:HD22	1:A:113:ASN:C	0.47	2.34	33	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CD2	0.47	2.98	34	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CE1	0.47	2.95	1	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:N	0.47	2.48	19	3
1:A:68:THR:OG1	1:A:70:ARG:HG3	0.47	2.10	3	1
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:HB2	0.47	1.87	7	7
1:A:45:LEU:O	1:A:77:LEU:O	0.47	2.33	22	10
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:CZ	0.47	2.40	9	3
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:HE1	0.47	1.70	12	2
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG12	0.47	2.09	12	1
1:A:74:GLU:HB2	1:A:84:GLY:C	0.47	2.34	19	1
1:A:56:THR:HG22	1:A:57:ALA:N	0.47	2.25	31	4
1:A:24:ALA:C	1:A:26:LEU:N	0.47	2.73	1	24
1:A:30:THR:CG2	1:A:31:ALA:N	0.47	2.77	26	4
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASP:O	0.47	2.33	4	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.92	5	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CD2	0.47	2.45	31	2
1:A:87:ASP:O	1:A:88:CYS:C	0.47	2.58	40	6
1:A:34:VAL:HA	1:A:97:LEU:HD13	0.47	1.87	14	2
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:C	0.47	2.58	34	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:32:TYR:CD2	0.46	2.44	5	1
1:A:12:GLY:C	1:A:113:ASN:OD1	0.46	2.58	30	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:CG	0.46	2.58	1	3
1:A:99:ASP:OD2	1:A:103:ASN:CG	0.46	2.58	13	2
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:CG2	0.46	2.41	3	5
1:A:13:LEU:O	1:A:113:ASN:N	0.46	2.48	39	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HB	0.46	2.39	41	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:N	0.46	2.24	15	4
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:C	0.46	2.58	16	2
1:A:42:THR:C	1:A:44:VAL:N	0.46	2.72	20	2
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:CB	0.46	2.40	21	1
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:HB	0.46	2.09	20	2
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:CG	0.46	2.93	39	2
1:A:4:THR:CB	1:A:24:ALA:O	0.46	2.63	40	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:107:GLY:CA	0.46	2.41	32	5
1:A:74:GLU:CD	1:A:83:TRP:HB2	0.46	2.36	19	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:113:ASN:CG	0.46	2.89	31	1
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:NH1	0.46	2.26	34	3
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:CB	0.46	2.40	40	5
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:N	0.46	2.49	4	5
1:A:26:LEU:CD1	1:A:60:ASN:OD1	0.46	2.63	10	3
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:O	0.46	2.33	27	1
1:A:17:THR:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.46	2.46	42	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:41:ASP:N	0.46	2.75	28	5
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:SER:CA	0.46	2.41	16	4
1:A:7:VAL:HG11	1:A:19:VAL:HG23	0.46	1.86	4	1
1:A:27:GLN:C	1:A:61:GLY:CA	0.46	2.88	38	4
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:CG2	0.46	2.64	28	2
1:A:12:GLY:O	1:A:17:THR:HG21	0.46	2.11	8	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:O	0.46	2.11	13	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:76:PHE:CZ	0.46	2.45	42	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:74:GLU:O	0.46	2.48	8	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD22	0.46	1.87	4	1
1:A:28:ALA:C	1:A:30:THR:N	0.46	2.73	16	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:N	0.46	2.49	20	6
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LEU:C	0.46	2.59	38	4
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:C	0.46	2.93	41	3
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:HB3	0.46	2.40	31	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:HA2	0.46	2.41	32	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:73:PHE:CD2	0.46	2.45	37	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:CB	0.46	2.41	43	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:HB2	0.46	2.41	3	6
1:A:11:SER:C	1:A:13:LEU:N	0.46	2.72	23	2
1:A:104:GLY:N	1:A:105:PRO:HD3	0.46	2.26	31	2
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:HB2	0.46	2.10	13	1
1:A:103:ASN:N	1:A:103:ASN:OD1	0.46	2.48	20	1
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:CB	0.46	2.64	24	1
1:A:4:THR:O	1:A:24:ALA:N	0.46	2.49	43	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:CG1	0.46	2.88	38	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:60:ASN:ND2	0.46	2.79	36	1
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:CD2	0.46	2.39	39	1
1:A:69:VAL:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.46	2.45	42	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:CD	0.46	2.39	16	3
1:A:76:PHE:CG	1:A:82:ARG:HB3	0.46	2.46	23	3
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD11	0.46	1.87	21	2
1:A:14:SER:CB	1:A:71:ARG:HB2	0.46	2.40	24	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:C	0.46	2.59	30	1
1:A:51:ASP:HB3	1:A:70:ARG:NH1	0.46	2.26	34	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:OG	0.46	2.33	38	1
1:A:48:ASN:C	1:A:50:ALA:H	0.45	2.19	2	35
1:A:89:THR:OG1	1:A:112:PHE:O	0.45	2.34	20	7
1:A:33:ASP:O	1:A:34:VAL:C	0.45	2.58	9	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:HB2	0.45	2.41	9	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:HG23	0.45	1.87	9	3
1:A:63:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.45	1.87	6	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:N	0.45	2.89	14	1
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:NH2	0.45	2.26	20	3
1:A:74:GLU:CD	1:A:74:GLU:O	0.45	2.59	22	1
1:A:48:ASN:O	1:A:51:ASP:CG	0.45	2.59	31	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:HB3	0.45	2.41	32	1
1:A:88:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CG	0.45	2.46	44	1
1:A:93:CYS:SG	1:A:94:GLN:N	0.45	2.89	3	2
1:A:39:TRP:CH2	1:A:42:THR:HA	0.45	2.46	14	1
1:A:22:ALA:HA	1:A:63:ALA:O	0.45	2.11	21	2
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:CB	0.45	2.91	6	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD13	0.45	1.89	6	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HG	0.45	2.42	21	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:TRP:NE1	0.45	2.26	21	1
1:A:75:GLY:N	1:A:84:GLY:O	0.45	2.50	35	1
1:A:11:SER:OG	1:A:13:LEU:CD2	0.45	2.64	44	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:52:PHE:N	0.45	2.50	7	4
1:A:94:GLN:HA	1:A:108:VAL:O	0.45	2.12	1	8
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD13	0.45	2.37	1	5
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HG	0.45	1.88	25	3
1:A:36:GLN:HG3	1:A:95:VAL:CG2	0.45	2.41	12	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:112:PHE:C	0.45	2.59	33	2
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:GLY:N	0.45	2.45	21	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG22	0.45	2.11	24	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CD1	0.45	2.46	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:O	0.45	2.34	32	1
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:OD1	0.45	2.35	28	9
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.45	2.60	4	3
1:A:12:GLY:N	1:A:110:ILE:HG22	0.45	2.26	18	3
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:N	0.45	2.49	25	2
1:A:73:PHE:O	1:A:86:VAL:O	0.45	2.35	19	2
1:A:71:ARG:HG3	1:A:89:THR:HG22	0.45	1.88	23	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:73:PHE:CD2	0.45	2.46	29	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HA	0.45	2.12	33	1
1:A:87:ASP:C	1:A:88:CYS:O	0.45	2.59	37	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:83:TRP:HA	0.45	2.46	42	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:113:ASN:OD1	0.45	2.50	43	1
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:OD2	0.45	2.34	42	6
1:A:36:GLN:CD	1:A:95:VAL:CG2	0.45	2.89	5	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:70:ARG:CZ	0.45	2.42	21	1
1:A:4:THR:N	1:A:24:ALA:O	0.45	2.50	5	3
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CG	0.45	2.69	25	3
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:86:VAL:O	1:A:86:VAL:CG1	0.45	2.65	3	2
1:A:76:PHE:CD1	1:A:82:ARG:HB3	0.45	2.47	23	2
1:A:30:THR:HG22	1:A:31:ALA:N	0.45	2.26	20	4
1:A:94:GLN:OE1	1:A:94:GLN:N	0.45	2.50	21	2
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:CB	0.45	2.95	31	1
1:A:71:ARG:HA	1:A:112:PHE:CE2	0.45	2.47	41	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CB	0.45	2.42	17	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HG	0.45	2.41	17	1
1:A:69:VAL:HA	1:A:95:VAL:HG21	0.45	1.89	40	2
1:A:39:TRP:NE1	1:A:41:ASP:O	0.45	2.50	23	2
1:A:7:VAL:C	1:A:9:PRO:HD2	0.45	2.37	34	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HG3	0.45	2.47	1	2
1:A:24:ALA:CB	1:A:32:TYR:CE2	0.45	2.99	25	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:42:THR:HA	0.45	2.47	11	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:83:TRP:CA	0.45	3.00	20	1
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CD2	0.45	2.70	35	2
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD13	0.45	1.89	34	1
1:A:41:ASP:HB3	1:A:44:VAL:CG2	0.44	2.42	4	3
1:A:5:ALA:O	1:A:107:GLY:C	0.44	2.60	6	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:CG	0.44	2.94	15	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:HG22	0.44	2.43	23	1
1:A:51:ASP:C	1:A:51:ASP:OD1	0.44	2.60	25	1
1:A:83:TRP:CG	1:A:84:GLY:H	0.44	2.31	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:THR:HG22	1:A:44:VAL:CG2	0.44	2.35	30	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:112:PHE:HB3	0.44	2.42	38	3
1:A:35:GLY:O	1:A:51:ASP:OD1	0.44	2.35	7	3
1:A:87:ASP:N	1:A:87:ASP:OD1	0.44	2.49	28	2
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HG2	0.44	1.89	39	2
1:A:40:VAL:O	1:A:41:ASP:O	0.44	2.35	37	5
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:SG	0.44	2.75	5	2
1:A:71:ARG:HD2	1:A:89:THR:CG2	0.44	2.43	11	3
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:PHE:N	0.44	2.50	13	1
1:A:47:CYS:HB2	1:A:78:PHE:CG	0.44	2.47	43	2
1:A:46:ALA:CB	1:A:76:PHE:C	0.44	2.91	37	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CD2	0.44	2.46	43	1
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:C	0.44	2.61	44	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:70:ARG:NH2	0.44	2.27	12	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:23:GLY:O	0.44	2.62	36	2
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HB2	0.44	1.89	5	1
1:A:13:LEU:O	1:A:113:ASN:C	0.44	2.60	12	1
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:CD1	0.44	2.65	42	5
1:A:11:SER:OG	1:A:111:SER:CB	0.44	2.65	18	1
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:HB3	0.44	2.13	41	2
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:CG2	0.44	2.65	29	1
1:A:24:ALA:C	1:A:26:LEU:H	0.44	2.19	2	21
1:A:5:ALA:O	1:A:6:THR:HG22	0.44	2.13	18	3
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:OE2	0.44	2.50	7	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:69:VAL:CG2	0.44	2.40	30	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:94:GLN:NE2	0.44	2.27	32	1
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HG	0.44	1.88	37	2
1:A:14:SER:O	1:A:17:THR:CB	0.44	2.65	41	1
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD11	0.44	1.87	1	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.43	4	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HD3	0.44	2.47	10	2
1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CD1	0.44	2.85	38	3
1:A:4:THR:HB	1:A:24:ALA:O	0.44	2.13	38	3
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HB2	0.44	1.90	23	1
1:A:72:SER:HA	1:A:86:VAL:C	0.44	2.38	27	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:97:LEU:HB2	0.44	2.43	40	2
1:A:71:ARG:CZ	1:A:89:THR:HG21	0.44	2.43	34	1
1:A:5:ALA:N	1:A:24:ALA:HA	0.44	2.27	36	1
1:A:94:GLN:HB2	1:A:108:VAL:C	0.44	2.38	20	7
1:A:36:GLN:HB2	1:A:70:ARG:NH2	0.44	2.27	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ALA:O	1:A:93:CYS:C	0.44	2.61	39	3
1:A:74:GLU:HB3	1:A:84:GLY:O	0.44	2.12	33	1
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CE2	0.44	2.71	35	2
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:HB3	0.44	2.12	19	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:C	0.44	2.61	9	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:CB	0.44	2.96	11	2
1:A:89:THR:HG22	1:A:112:PHE:O	0.44	2.13	11	1
1:A:71:ARG:CA	1:A:88:CYS:HB2	0.44	2.43	25	2
1:A:83:TRP:CZ2	1:A:91:ALA:HB2	0.44	2.48	42	1
1:A:93:CYS:N	1:A:112:PHE:CE1	0.44	2.86	43	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:75:GLY:CA	0.44	3.01	10	1
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.44	2.41	17	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:C	0.44	2.95	20	3
1:A:10:SER:HB2	1:A:110:ILE:CG1	0.43	2.43	41	2
1:A:15:ASP:OD2	1:A:71:ARG:N	0.43	2.50	14	1
1:A:7:VAL:CA	1:A:21:VAL:HG22	0.43	2.41	19	1
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:O	0.43	2.35	19	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:HB2	0.43	2.11	39	2
1:A:15:ASP:HB2	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	42	1
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ALA:HB3	0.43	1.89	44	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:CB	0.43	2.66	1	3
1:A:73:PHE:CD2	1:A:88:CYS:SG	0.43	3.11	3	1
1:A:95:VAL:H	1:A:110:ILE:HD12	0.43	1.73	5	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:HA3	0.43	2.43	32	3
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD11	0.43	2.43	12	2
1:A:36:GLN:CG	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.96	21	1
1:A:12:GLY:O	1:A:17:THR:OG1	0.43	2.36	23	1
1:A:95:VAL:O	1:A:95:VAL:CG1	0.43	2.66	7	1
1:A:65:THR:HG23	1:A:66:SER:H	0.43	1.73	9	2
1:A:34:VAL:CG1	1:A:51:ASP:HB2	0.43	2.43	21	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:CD	0.43	2.60	21	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HB2	0.43	1.91	28	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:CZ2	0.43	3.01	38	1
1:A:15:ASP:HB3	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	39	1
1:A:98:SER:C	1:A:99:ASP:O	0.43	2.61	4	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:CG2	0.43	2.93	24	2
1:A:99:ASP:CG	1:A:103:ASN:OD1	0.43	2.61	13	1
1:A:70:ARG:CD	1:A:73:PHE:CZ	0.43	3.00	16	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	31	2
1:A:14:SER:HB3	1:A:17:THR:CB	0.43	2.43	32	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.44	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:CE2	1:A:93:CYS:SG	0.43	3.12	5	2
1:A:34:VAL:CB	1:A:53:SER:HB2	0.43	2.44	38	2
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:OG	0.43	2.37	12	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD11	0.43	1.90	21	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:19:VAL:HG13	0.43	2.13	43	1
1:A:48:ASN:O	1:A:51:ASP:OD1	0.43	2.36	5	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:39:TRP:C	0.43	2.96	13	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:24:ALA:CA	0.43	2.43	28	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:17:THR:HG21	0.43	2.39	28	1
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:CB	0.43	2.66	32	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:O	0.43	2.65	35	1
1:A:27:GLN:N	1:A:61:GLY:HA3	0.43	2.29	10	7
1:A:36:GLN:HB2	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.44	12	2
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:NH2	0.43	2.28	17	1
1:A:69:VAL:HG12	1:A:69:VAL:O	0.43	2.13	37	2
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:N	0.43	2.52	23	1
1:A:12:GLY:C	1:A:13:LEU:HD23	0.43	2.38	25	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CZ	0.43	3.02	28	1
1:A:72:SER:HB2	1:A:87:ASP:N	0.43	2.29	32	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:93:CYS:SG	0.43	2.92	34	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:74:GLU:O	0.43	2.36	40	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:69:VAL:O	0.43	2.13	12	1
1:A:15:ASP:O	1:A:15:ASP:CG	0.43	2.61	13	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:53:SER:HB2	0.43	2.43	24	1
1:A:69:VAL:C	1:A:112:PHE:CE2	0.43	2.97	39	1
1:A:37:CYS:O	1:A:94:GLN:OE1	0.43	2.37	24	4
1:A:27:GLN:CG	1:A:28:ALA:N	0.43	2.81	8	6
1:A:27:GLN:OE1	1:A:30:THR:OG1	0.43	2.37	25	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:42:THR:O	0.43	2.67	44	2
1:A:36:GLN:NE2	1:A:112:PHE:CZ	0.43	2.87	39	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:72:SER:H	0.43	1.74	42	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CG	0.43	2.48	44	1
1:A:32:TYR:N	1:A:55:VAL:O	0.43	2.52	6	2
1:A:13:LEU:N	1:A:112:PHE:HA	0.43	2.28	9	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:60:ASN:C	0.43	2.60	10	3
1:A:88:CYS:O	1:A:93:CYS:SG	0.43	2.77	18	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CA	0.43	3.01	22	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:O	0.43	2.37	28	1
1:A:72:SER:C	1:A:73:PHE:CD2	0.43	2.97	30	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HB3	0.43	1.90	34	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:83:TRP:CE2	0.43	2.49	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:GLY:HA3	1:A:112:PHE:CD2	0.42	2.49	9	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:GLY:N	0.42	2.29	17	2
1:A:40:VAL:HG23	1:A:44:VAL:O	0.42	2.14	38	1
1:A:15:ASP:CA	1:A:71:ARG:HG2	0.42	2.44	42	2
1:A:12:GLY:H	1:A:110:ILE:CG2	0.42	2.26	44	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:93:CYS:SG	0.42	3.12	5	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD13	0.42	2.13	10	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:60:ASN:O	0.42	2.37	10	3
1:A:106:GLU:C	1:A:106:GLU:OE1	0.42	2.62	25	1
1:A:26:LEU:HA	1:A:61:GLY:O	0.42	2.14	6	4
1:A:12:GLY:C	1:A:112:PHE:HA	0.42	2.38	33	3
1:A:21:VAL:HG12	1:A:65:THR:C	0.42	2.36	16	1
1:A:110:ILE:HG21	1:A:112:PHE:CE2	0.42	2.49	28	1
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:CD	0.42	2.67	29	1
1:A:14:SER:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.42	2.49	41	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG21	0.42	1.88	5	2
1:A:47:CYS:N	1:A:76:PHE:O	0.42	2.53	10	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:24:ALA:HA	0.42	2.43	38	2
1:A:74:GLU:O	1:A:75:GLY:C	0.42	2.62	27	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD1	0.42	2.43	30	1
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:HG22	0.42	1.91	30	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:CB	0.42	3.02	32	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:O	0.42	2.38	38	1
1:A:37:CYS:HA	1:A:73:PHE:CZ	0.42	2.50	44	1
1:A:47:CYS:O	1:A:75:GLY:HA2	0.42	2.14	6	1
1:A:97:LEU:O	1:A:106:GLU:CD	0.42	2.62	20	1
1:A:39:TRP:CG	1:A:45:LEU:HG	0.42	2.50	23	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:94:GLN:HE22	0.42	1.74	32	1
1:A:38:ALA:HA	1:A:93:CYS:HA	0.42	1.90	6	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.42	2.91	15	1
1:A:74:GLU:CB	1:A:84:GLY:HA2	0.42	2.45	41	3
1:A:40:VAL:HG21	1:A:44:VAL:CG1	0.42	2.44	20	1
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:HD23	0.42	2.13	23	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:N	0.42	2.47	24	1
1:A:106:GLU:O	1:A:107:GLY:O	0.42	2.38	34	2
1:A:14:SER:O	1:A:15:ASP:C	0.42	2.63	42	1
1:A:103:ASN:O	1:A:104:GLY:O	0.42	2.36	1	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:54:SER:CA	0.42	2.45	6	1
1:A:44:VAL:C	1:A:77:LEU:CD2	0.42	2.93	8	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HD2	0.42	2.50	9	1
1:A:40:VAL:HB	1:A:44:VAL:CG1	0.42	2.44	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG21	1:A:44:VAL:HG12	0.42	1.92	20	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:97:LEU:HD21	0.42	1.90	24	1
1:A:37:CYS:O	1:A:94:GLN:N	0.42	2.50	28	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:110:ILE:CG1	0.42	2.45	32	1
1:A:4:THR:C	1:A:24:ALA:CA	0.42	2.93	36	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HA	0.42	2.14	41	1
1:A:34:VAL:N	1:A:53:SER:O	0.42	2.53	1	2
1:A:25:GLY:CA	1:A:32:TYR:OH	0.42	2.68	6	1
1:A:5:ALA:O	1:A:107:GLY:O	0.42	2.38	39	2
1:A:4:THR:HA	1:A:97:LEU:HD12	0.42	1.91	8	1
1:A:112:PHE:O	1:A:113:ASN:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:H	0.42	1.75	30	3
1:A:13:LEU:CD2	1:A:113:ASN:C	0.42	2.91	36	1
1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLU:CG	0.42	2.92	37	1
1:A:51:ASP:O	1:A:70:ARG:NH2	0.42	2.51	39	1
1:A:83:TRP:NE1	1:A:86:VAL:HG11	0.42	2.29	40	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HB2	0.42	2.45	5	1
1:A:88:CYS:HB3	1:A:93:CYS:SG	0.42	2.55	27	3
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:CB	0.42	2.98	32	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:65:THR:CG2	0.42	2.44	24	3
1:A:11:SER:N	1:A:110:ILE:HG23	0.42	2.29	18	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:N	0.42	2.52	32	1
1:A:68:THR:O	1:A:68:THR:CG2	0.42	2.68	33	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:89:THR:CG2	0.42	2.83	34	1
1:A:113:ASN:O	1:A:113:ASN:CG	0.42	2.63	44	1
1:A:76:PHE:CG	1:A:82:ARG:HB2	0.41	2.50	2	1
1:A:12:GLY:HA3	1:A:17:THR:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:HG23	0.41	2.40	11	1
1:A:104:GLY:O	1:A:106:GLU:OE2	0.41	2.37	26	1
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:HB	0.41	2.15	27	1
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:CD2	0.41	2.45	37	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HG	0.41	2.45	4	4
1:A:32:TYR:O	1:A:33:ASP:C	0.41	2.61	24	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.91	6	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:89:THR:HG23	0.41	2.45	11	1
1:A:38:ALA:N	1:A:46:ALA:O	0.41	2.52	19	3
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:N	0.41	2.88	19	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:HA	0.41	1.78	33	2
1:A:33:ASP:OD1	1:A:53:SER:O	0.41	2.38	40	1
1:A:14:SER:HB2	1:A:112:PHE:CD1	0.41	2.47	41	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:GLN:HB2	1:A:107:GLY:C	0.41	2.40	37	2
1:A:64:SER:O	1:A:65:THR:CB	0.41	2.67	9	1
1:A:40:VAL:C	1:A:41:ASP:O	0.41	2.63	10	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.92	13	1
1:A:27:GLN:HB2	1:A:32:TYR:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:CB	0.41	2.97	44	3
1:A:50:ALA:HB1	1:A:52:PHE:CZ	0.41	2.50	24	1
1:A:104:GLY:O	1:A:106:GLU:OE1	0.41	2.38	26	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:HG11	0.41	2.45	32	1
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:C	0.41	2.63	40	1
1:A:10:SER:OG	1:A:110:ILE:HA	0.41	2.14	41	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:O	0.41	2.38	43	1
1:A:41:ASP:CB	1:A:44:VAL:CG2	0.41	2.99	4	2
1:A:37:CYS:HB3	1:A:45:LEU:CD2	0.41	2.45	21	2
1:A:74:GLU:CD	1:A:83:TRP:HB3	0.41	2.40	21	1
1:A:41:ASP:HB3	1:A:44:VAL:HG23	0.41	1.91	3	3
1:A:17:THR:O	1:A:19:VAL:N	0.41	2.53	5	1
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:HG22	0.41	2.15	40	2
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:HB2	0.41	2.14	25	1
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.41	1.92	27	1
1:A:27:GLN:N	1:A:32:TYR:OH	0.41	2.53	29	2
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CB	0.41	2.69	30	1
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:C	0.41	2.40	33	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:111:SER:N	0.41	2.84	39	1
1:A:87:ASP:O	1:A:89:THR:N	0.41	2.53	40	1
1:A:69:VAL:HB	1:A:112:PHE:CE1	0.41	2.51	42	1
1:A:36:GLN:CD	1:A:95:VAL:HB	0.41	2.40	2	2
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD12	0.41	2.51	5	1
1:A:11:SER:C	1:A:13:LEU:HD23	0.41	2.41	11	1
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:CD	0.41	2.45	22	3
1:A:32:TYR:CD1	1:A:99:ASP:OD2	0.41	2.73	21	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:28:ALA:N	0.41	2.54	25	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD13	0.41	1.92	28	1
1:A:98:SER:OG	1:A:103:ASN:O	0.41	2.38	38	1
1:A:71:ARG:HD2	1:A:113:ASN:CB	0.41	2.46	14	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.98	25	1
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:CB	0.41	2.68	25	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:CG2	0.41	2.80	29	1
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.46	32	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:51:ASP:OD2	0.41	2.15	38	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CG	0.41	2.51	43	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ASN:O	1:A:60:ASN:OD1	0.41	2.38	9	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD11	0.41	2.51	13	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:CG2	0.41	2.44	17	1
1:A:16:GLY:N	1:A:69:VAL:O	0.41	2.53	34	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HE2	0.41	1.75	34	1
1:A:94:GLN:HB2	1:A:108:VAL:N	0.41	2.30	34	2
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:ASP:N	0.41	2.30	1	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HG	0.41	2.46	36	3
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HB	0.41	2.16	5	1
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:HD3	0.41	1.92	22	2
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.95	13	1
1:A:13:LEU:HA	1:A:112:PHE:C	0.41	2.41	18	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:19:VAL:CG1	0.41	2.99	20	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.46	28	1
1:A:41:ASP:HB2	1:A:44:VAL:CG2	0.41	2.46	31	1
1:A:20:LYS:C	1:A:21:VAL:CG2	0.41	2.93	36	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:NE1	0.41	2.84	38	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:CB	0.41	2.67	39	1
1:A:39:TRP:NE1	1:A:94:GLN:NE2	0.41	2.68	44	1
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:HB	0.41	2.16	3	3
1:A:10:SER:CA	1:A:110:ILE:HD13	0.41	2.44	8	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:67:LEU:HA	0.41	1.80	13	1
1:A:87:ASP:CG	1:A:90:THR:OG1	0.41	2.64	28	1
1:A:44:VAL:O	1:A:44:VAL:HG12	0.41	2.16	37	1
1:A:94:GLN:HB3	1:A:108:VAL:C	0.40	2.40	2	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CE2	0.40	2.51	13	1
1:A:21:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD21	0.40	2.46	34	1
1:A:36:GLN:HB2	1:A:95:VAL:HG13	0.40	1.92	34	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:76:PHE:CE1	0.40	3.04	42	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:CD1	0.40	2.50	2	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:HG23	0.40	2.32	5	1
1:A:27:GLN:O	1:A:60:ASN:O	0.40	2.40	11	1
1:A:71:ARG:HD3	1:A:87:ASP:CB	0.40	2.46	26	1
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:HB	0.40	2.46	32	1
1:A:49:PRO:HD2	1:A:76:PHE:CE1	0.40	2.51	33	1
1:A:74:GLU:OE1	1:A:74:GLU:N	0.40	2.54	35	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:CD1	0.40	2.57	40	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:75:GLY:CA	0.40	3.04	2	1
1:A:58:ASP:O	1:A:61:GLY:N	0.40	2.48	13	1
1:A:27:GLN:HG2	1:A:30:THR:CG2	0.40	2.46	22	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:93:CYS:HB3	0.40	2.46	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HG	0.40	1.93	29	2
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:O	0.40	2.39	31	1
1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLU:HG3	0.40	2.42	37	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:74:GLU:O	0.40	2.74	41	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HG2	0.40	2.47	42	1
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CE1	0.40	2.74	42	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:104:GLY:H	0.40	2.15	43	1
1:A:98:SER:CA	1:A:103:ASN:HB3	0.40	2.46	3	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:CD1	0.40	2.45	4	1
1:A:67:LEU:HD23	1:A:67:LEU:HA	0.40	1.80	6	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CD1	0.40	3.09	6	1
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.40	2.51	11	1
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:CG2	0.40	2.63	15	1
1:A:39:TRP:HE1	1:A:92:ALA:HB3	0.40	1.77	16	1
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CG	0.40	2.72	16	1
1:A:48:ASN:O	1:A:51:ASP:OD2	0.40	2.39	17	1
1:A:71:ARG:HG2	1:A:89:THR:CG2	0.40	2.45	23	1
1:A:4:THR:O	1:A:23:GLY:HA3	0.40	2.17	40	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:CD2	0.40	2.70	40	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:28:ALA:N	0.40	2.31	44	1
1:A:97:LEU:O	1:A:106:GLU:OE1	0.40	2.40	1	1
1:A:97:LEU:HG	1:A:98:SER:N	0.40	2.31	5	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:CG2	0.40	2.37	6	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:86:VAL:CG1	0.40	2.47	17	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CH2	0.40	2.51	19	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CE1	0.40	2.52	28	1
1:A:42:THR:C	1:A:44:VAL:H	0.40	2.24	33	1
1:A:19:VAL:O	1:A:21:VAL:HG23	0.40	2.16	41	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	103/122 (84%)	66±3 (64±3%)	22±3 (21±3%)	16±3 (15±3%)	0 4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	4532/5368 (84%)	2886 (64%)	957 (21%)	689 (15%)	0 4

All 53 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	24	ALA	44
1	A	59	ALA	44
1	A	28	ALA	43
1	A	53	SER	38
1	A	103	ASN	33
1	A	40	VAL	32
1	A	93	CYS	32
1	A	85	THR	31
1	A	78	PHE	28
1	A	69	VAL	25
1	A	106	GLU	25
1	A	9	PRO	20
1	A	13	LEU	19
1	A	92	ALA	18
1	A	15	ASP	17
1	A	10	SER	16
1	A	36	GLN	16
1	A	27	GLN	15
1	A	83	TRP	14
1	A	60	ASN	14
1	A	42	THR	13
1	A	41	ASP	12
1	A	17	THR	12
1	A	65	THR	11
1	A	108	VAL	10
1	A	107	GLY	9
1	A	104	GLY	8
1	A	86	VAL	8
1	A	4	THR	8
1	A	55	VAL	8
1	A	11	SER	7
1	A	18	VAL	7
1	A	87	ASP	5
1	A	84	GLY	4
1	A	8	THR	4
1	A	72	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	105	PRO	4
1	A	70	ARG	3
1	A	99	ASP	3
1	A	44	VAL	3
1	A	43	GLY	3
1	A	14	SER	3
1	A	77	LEU	3
1	A	88	CYS	2
1	A	89	THR	2
1	A	73	PHE	2
1	A	64	SER	1
1	A	34	VAL	1
1	A	35	GLY	1
1	A	57	ALA	1
1	A	109	ALA	1
1	A	75	GLY	1
1	A	82	ARG	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	77/88 (88%)	51±3 (67±4%)	26±3 (33±4%)	1	12
All	All	3388/3872 (88%)	2262 (67%)	1126 (33%)	1	12

All 66 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	8	THR	44
1	A	99	ASP	44
1	A	4	THR	38
1	A	36	GLN	38
1	A	111	SER	36
1	A	98	SER	35
1	A	97	LEU	34
1	A	90	THR	33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	THR	32
1	A	26	LEU	31
1	A	70	ARG	30
1	A	51	ASP	30
1	A	17	THR	29
1	A	33	ASP	29
1	A	47	CYS	29
1	A	65	THR	26
1	A	62	SER	25
1	A	87	ASP	24
1	A	74	GLU	24
1	A	14	SER	24
1	A	52	PHE	23
1	A	45	LEU	23
1	A	41	ASP	22
1	A	82	ARG	22
1	A	85	THR	21
1	A	42	THR	20
1	A	86	VAL	20
1	A	88	CYS	19
1	A	39	TRP	19
1	A	30	THR	19
1	A	19	VAL	17
1	A	68	THR	17
1	A	106	GLU	17
1	A	93	CYS	15
1	A	94	GLN	14
1	A	78	PHE	14
1	A	13	LEU	13
1	A	103	ASN	12
1	A	73	PHE	12
1	A	83	TRP	11
1	A	55	VAL	11
1	A	67	LEU	10
1	A	20	LYS	10
1	A	7	VAL	10
1	A	89	THR	10
1	A	71	ARG	10
1	A	10	SER	9
1	A	110	ILE	8
1	A	77	LEU	7
1	A	69	VAL	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	72	SER	6
1	A	113	ASN	5
1	A	21	VAL	5
1	A	11	SER	4
1	A	76	PHE	4
1	A	27	GLN	4
1	A	32	TYR	3
1	A	95	VAL	3
1	A	44	VAL	3
1	A	18	VAL	3
1	A	66	SER	2
1	A	53	SER	2
1	A	108	VAL	2
1	A	34	VAL	1
1	A	40	VAL	1
1	A	112	PHE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided