



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 19, 2026 – 08:06 PM UTC

PDB ID : 2JRC / pdb_00002jrc
Title : Solution structure of Peptidyl-tRNA Hydrolase from Mycobacterium tuberculosis H37Rv.
Authors : Pulavarti, S.V.S.R.K.; Jain, A.; Pathak, P.P.; Arora, A.
Deposited on : 2007-06-22

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

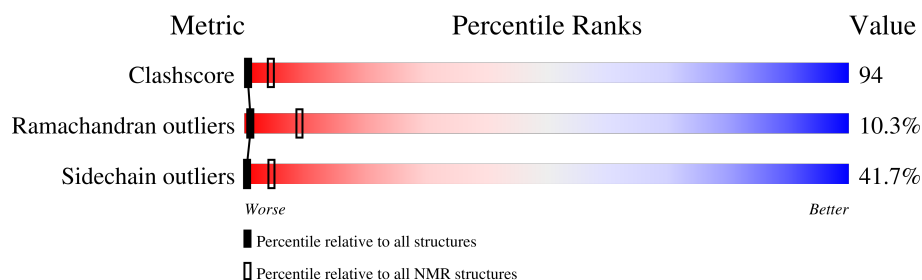
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	204	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 40 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: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:138, A:147-A:191 (181)	1.05	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 6 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2681 atoms, of which 1241 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptidyl-tRNA hydrolase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	191	Total	C	H	N	O	S	0
			2681	904	1241	274	257	5	

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

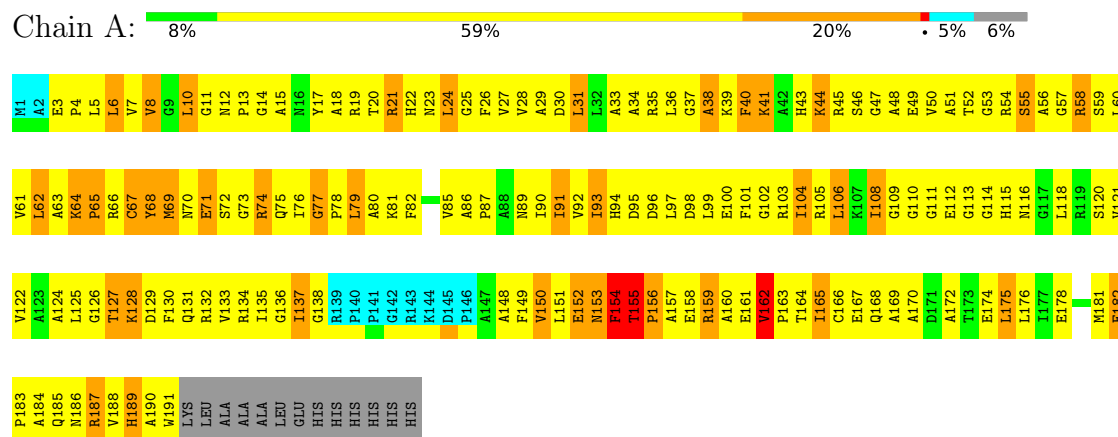
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	192	LYS	-	expression tag	UNP P65865
A	193	LEU	-	expression tag	UNP P65865
A	194	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	195	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	196	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	197	LEU	-	expression tag	UNP P65865
A	198	GLU	-	expression tag	UNP P65865
A	199	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	200	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	201	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	202	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	203	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	204	HIS	-	expression tag	UNP P65865

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: Peptidyl-tRNA hydrolase



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: Peptidyl-tRNA hydrolase



A184
Q185
N186
R187
V188
H189
A190
W191
LYS
LEU
ALA
ALA
LEU
GLU
HIS
HIS
HIS
HIS
HIS

4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 16% 47% 24% 5% 6%

V1 A2 E3 P4 L5 L6 V7 V8 G9 L10 G11 N12 N13 P13 G14 A15 N16 I17 Y17 R19 R20 T21 R22 H22 N23 G24 L24 G25 F26 V27 V28 V29 A29 D30 L31 L32 A33 A34 R35 L36 G37 G38 A38 K39 F40 K41 K42 H43 H44 K45 R46 S46 G47 G48 E49 V50 A51 T52 G53 H54 R55 S55 A56 G57 R58 S59 L60

V61 L62 K64 P65 R66 C67 Q68 M69 E71 G72 S73 T73 R74 Q75 I76 G77 P78 L79 A80 R81 H82 Y83 S84 V85 N89 I90 N91 V92 I93 H94 D95 D96 L97 D98 L99 E100 A101 G102 I103 I104 R105 L106 K107 I108 G109 G110 E111 G112 G113 G114 H115 N116 S117 V121 V122 A123 L124

L125 G126 T127 K128 D129 F130 Q131 R132 V133 R134 I135 G136 T137 G138 A139 P140 P141 G142 R143 K144 D145 P146 A147 S148 F149 V150 L151 E152 N153 D154 T155 P156 A157 E158 R159 A160 E161 V162 P163 T164 C166 E167 Q168 A169 D171 A172 T173 E174 L175 L176 I177 E178 M181 E182 P183 A184 Q185

N186 R187 V188 H189 A190 W191 LYS
LEU
ALA
ALA
LEU
GLU
HIS
HIS
HIS

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 11% 53% 23% 5% 6%

V1 A2 E3 P4 L5 L6 V7 V8 G9 L10 G11 N12 N13 P13 G14 A15 N16 I17 Y17 R19 R20 T21 R22 H22 N23 G24 L24 G25 F26 V27 V28 V29 A29 D30 L31 L32 A33 A34 R35 L36 G37 G38 A38 K39 F40 K41 K42 H43 H44 K45 R46 S46 G47 G48 E49 V50 A51 T52 G53 H54 R55 S55 A56 G57 R58 S59 L60

V61 L62 K64 P65 R66 C67 Q68 M69 E71 G72 S73 T73 R74 Q75 I76 G77 P78 L79 A80 R81 H82 Y83 S84 V85 N89 I90 N91 V92 I93 H94 D95 D96 L97 D98 L99 E100 A101 G102 I103 I104 R105 L106 K107 I108 G109 G110 E111 G112 G113 G114 H115 N116 S117 V121 V122 A123 L124

V121 V122 A123 L124 G126 T127 K128 D129 F130 Q131 R132 V133 R134 I135 G136 T137 G138 A139 P140 P141 G142 R143 K144 D145 P146 A147 S148 F149 V150 L151 E152 N153 D154 T155 P156 A157 E158 R159 A160 E161 V162 P163 T164 C166 E167 Q168 A169 D171 A172 T173 E174 L175 L176 I177 E178 M181 E182 P183 A184 Q185

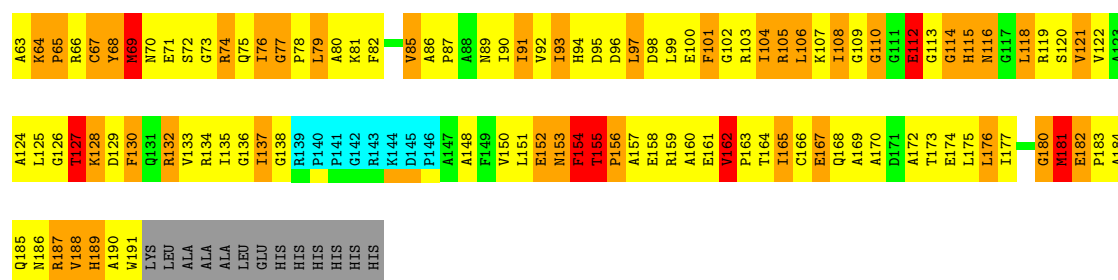
M181 E182 P183 A184 Q185 N186 R187 V188 H189 A190 W191 LYS
LEU
ALA
ALA
LEU
GLU
HIS
HIS
HIS

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 13% 45% 27% 5% 6%

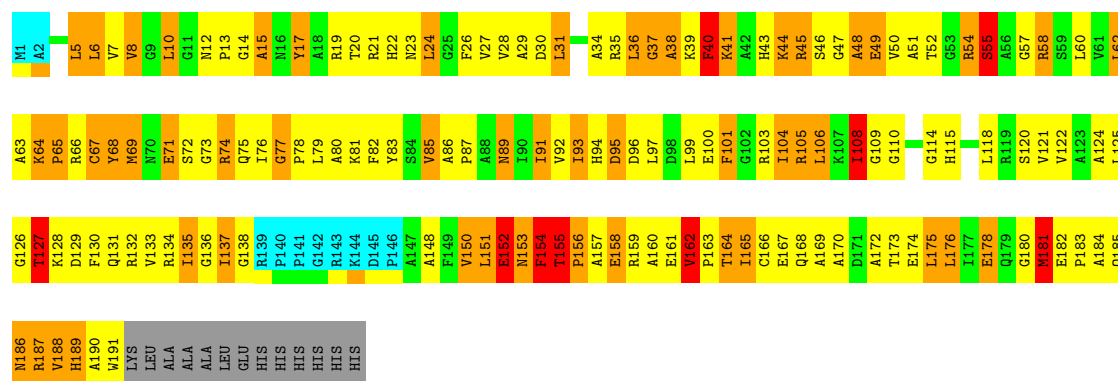
V1 A2 E3 P4 L5 L6 V7 V8 G9 L10 G11 N12 N13 P13 G14 A15 N16 I17 Y17 R19 R20 T21 R22 H22 N23 G24 L24 G25 F26 V27 V28 V29 A29 D30 L31 L32 A33 A34 R35 L36 G37 G38 A38 K39 F40 K41 K42 H43 H44 K45 R46 S46 G47 G48 E49 V50 A51 T52 G53 H54 R55 S55 A56 G57 R58 S59 L60 L62



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

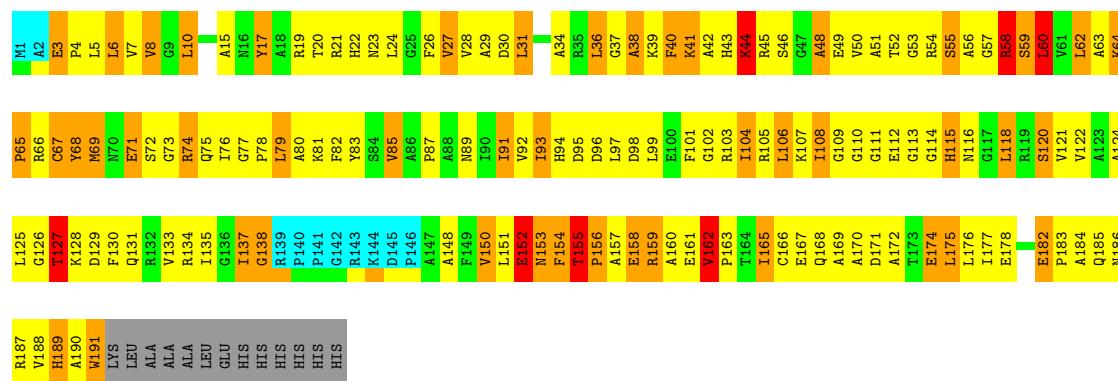
Chain A: 16% 43% 25% 5% 6%



4.2.6 Score per residue for model 6

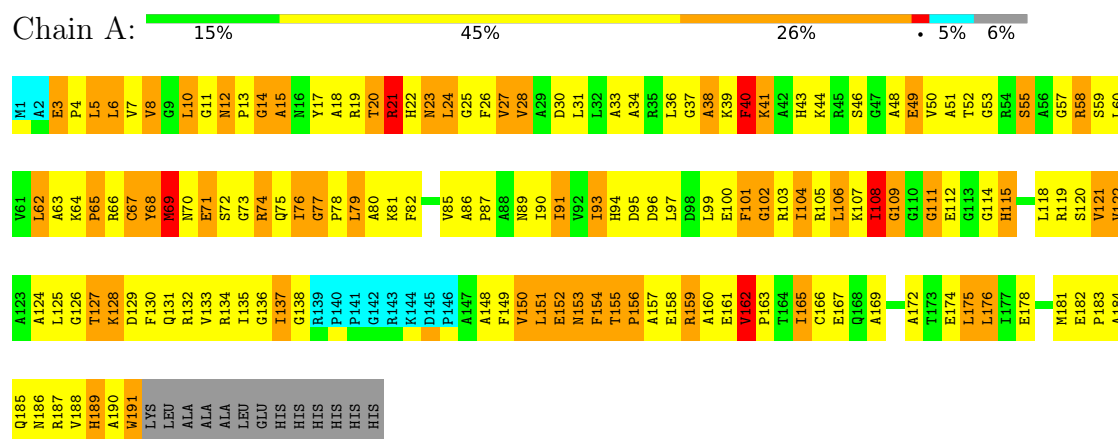
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 15% 48% 23% 5% 6%



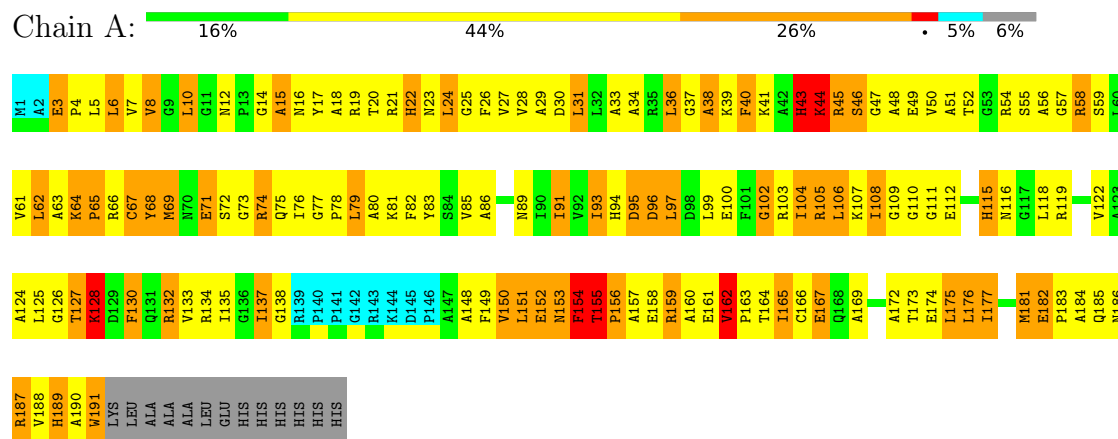
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



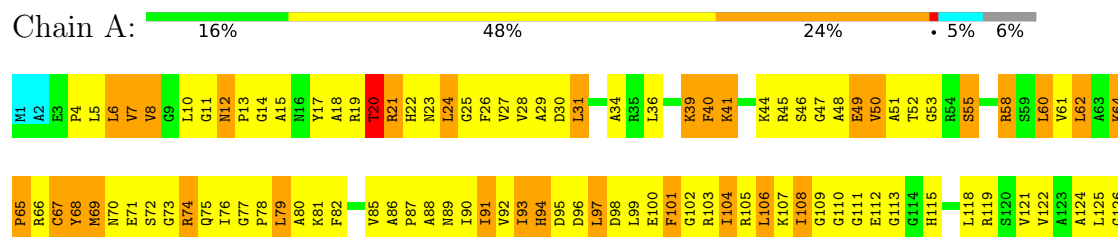
4.2.8 Score per residue for model 8

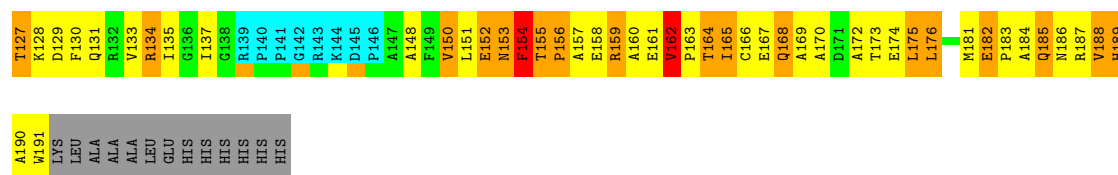
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.9 Score per residue for model 9

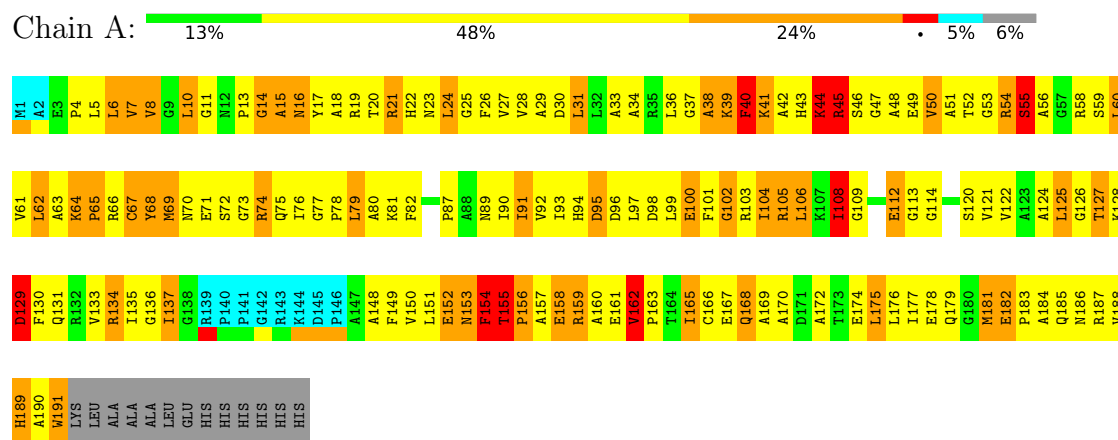
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





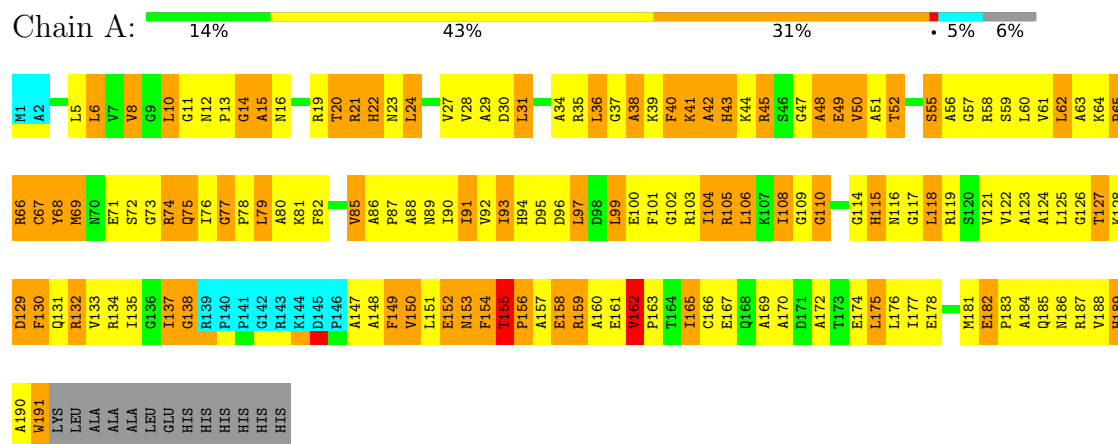
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



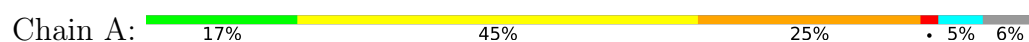
4.2.11 Score per residue for model 11

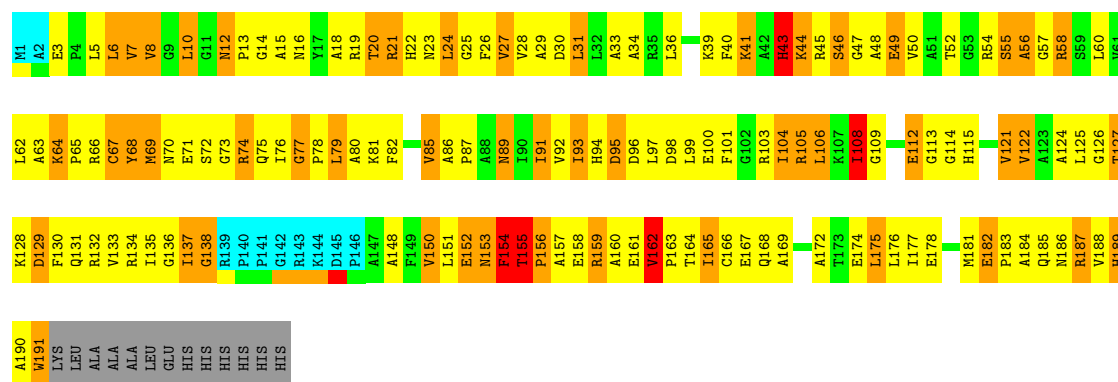
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

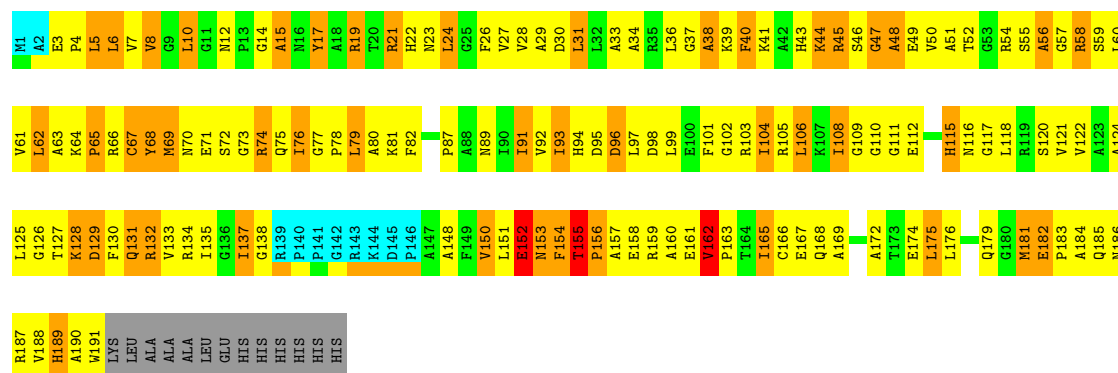




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

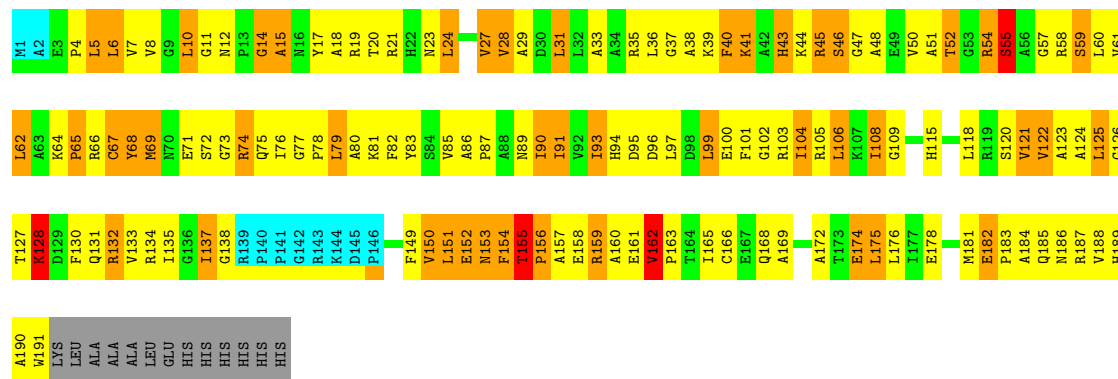
Chain A: 16% 48% 23% 5% 6%



4.2.14 Score per residue for model 14

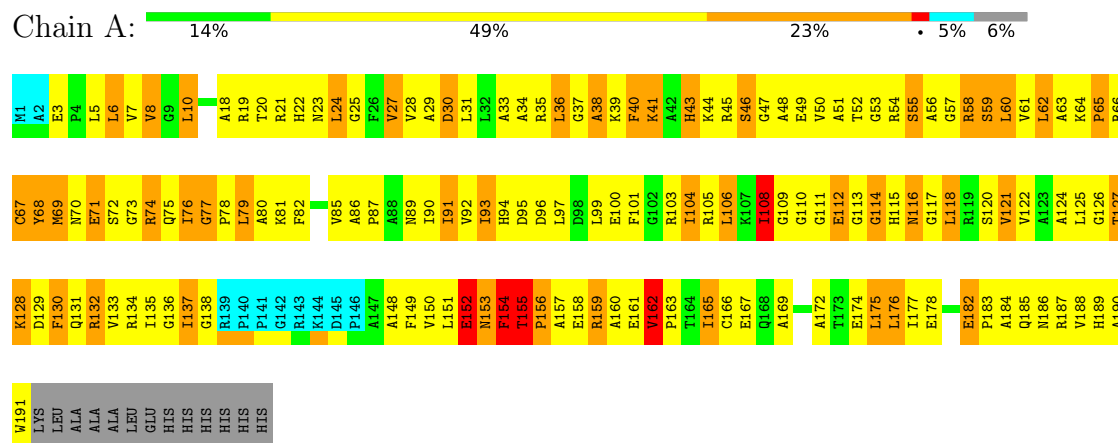
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 20% 44% 23% 5% 6%



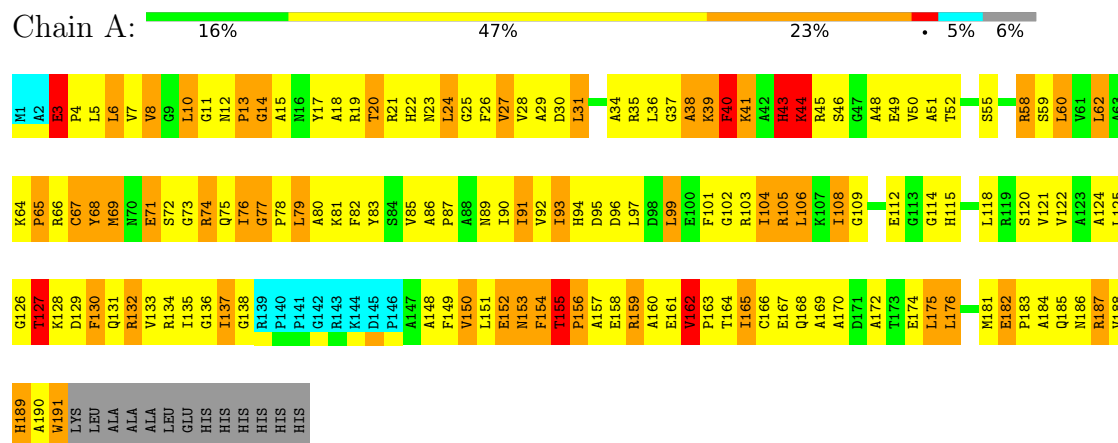
4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



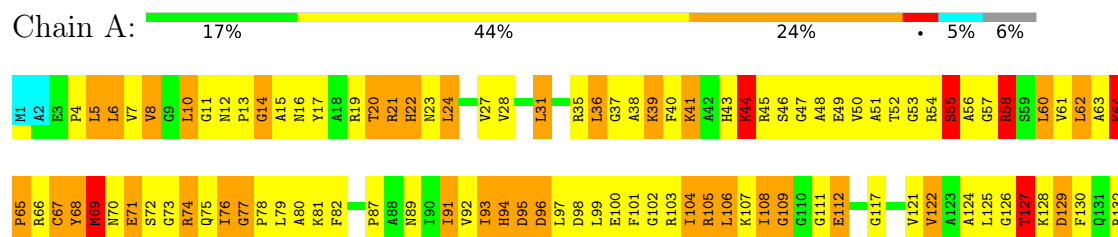
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

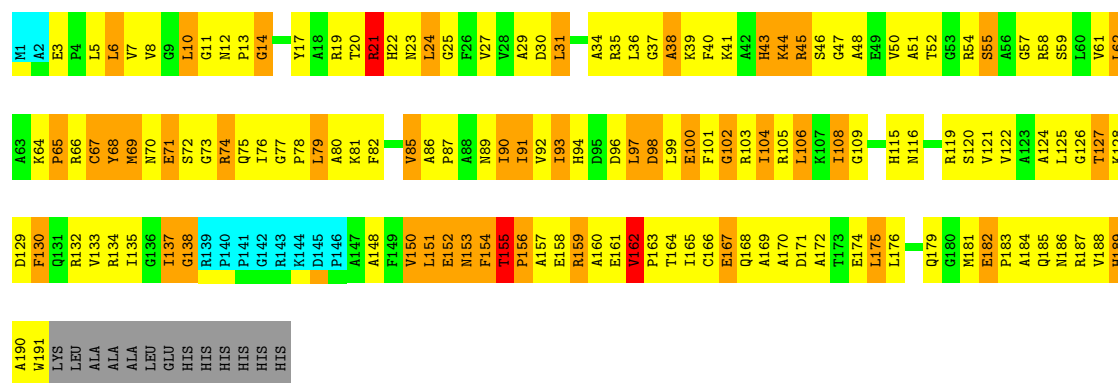




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

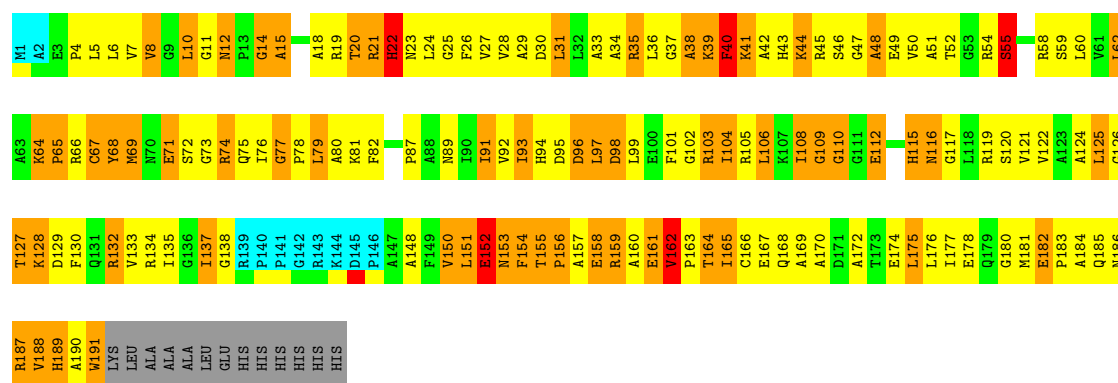
Chain A: 18% 48% 22% 5% 6%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

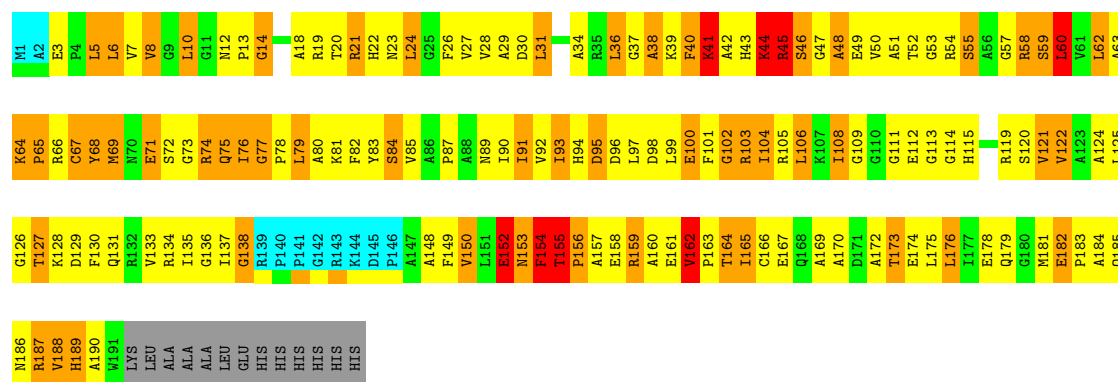
Chain A: 16% 41% 29% 5% 6%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

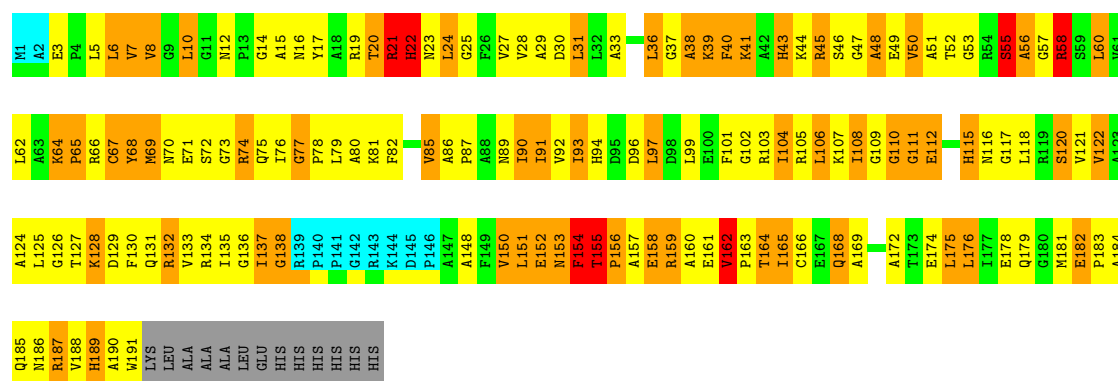
Chain A: 14% 44% 26% 5% 6%



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

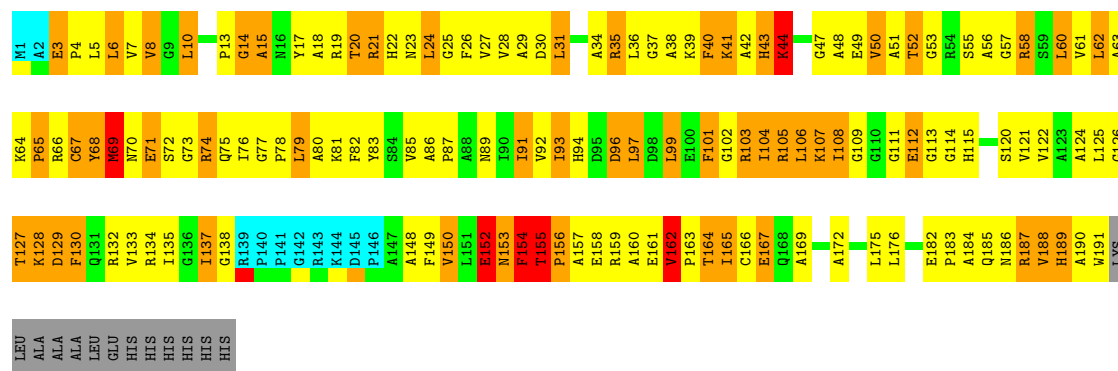
Chain A: 16% 41% 28% 5% 6%



4.2.22 Score per residue for model 22

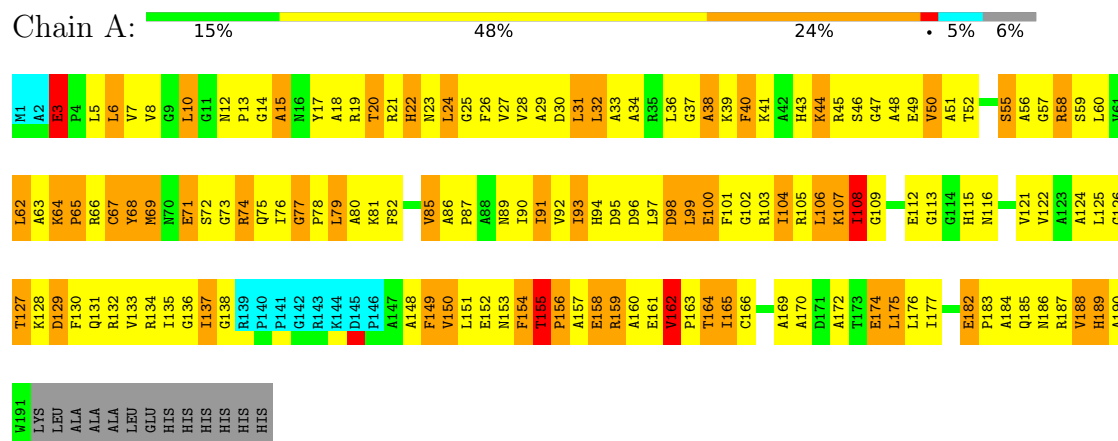
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 18% 43% 25% 5% 6%



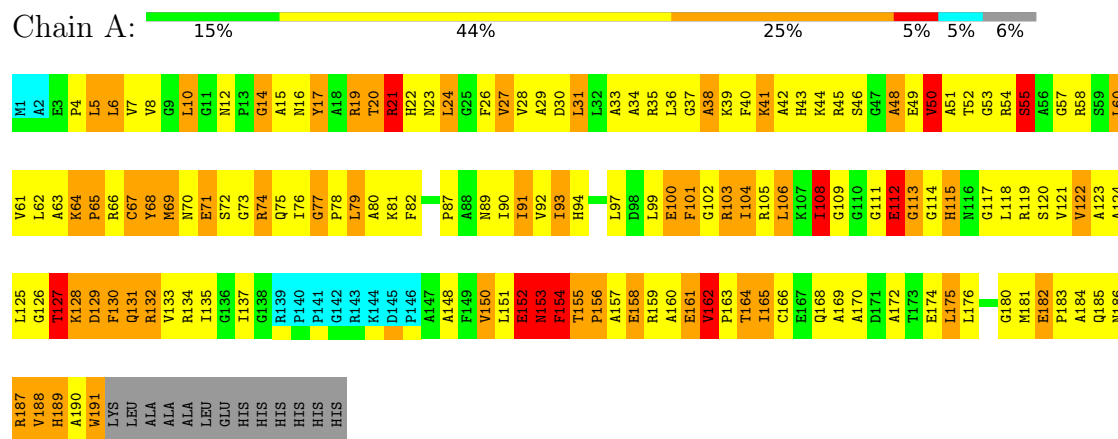
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



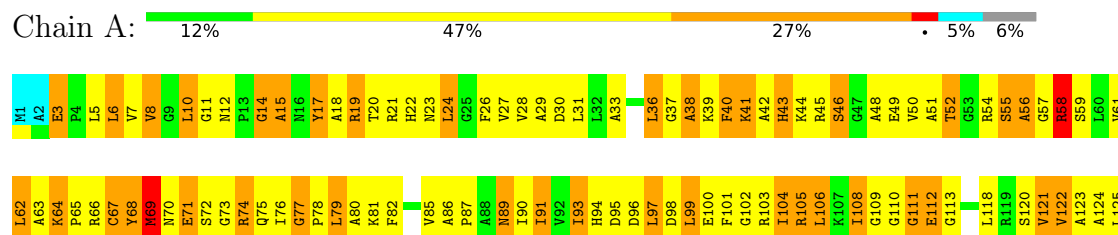
4.2.24 Score per residue for model 24

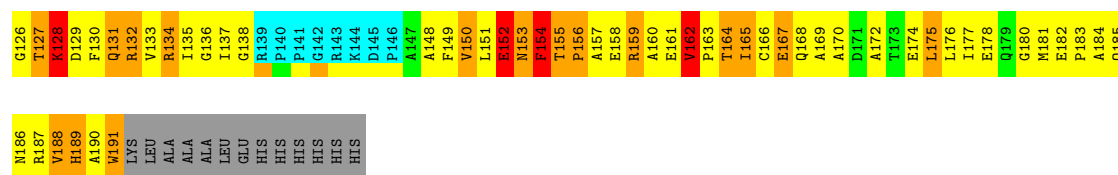
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.25 Score per residue for model 25

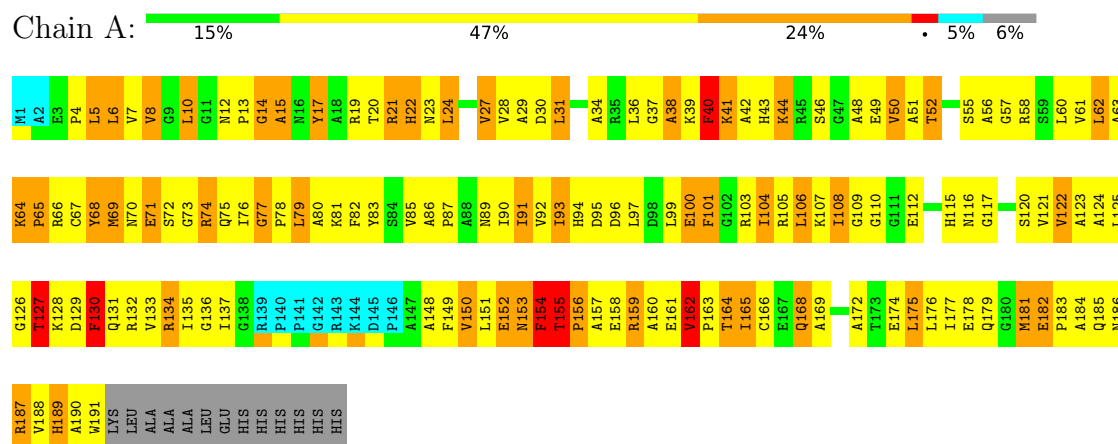
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase





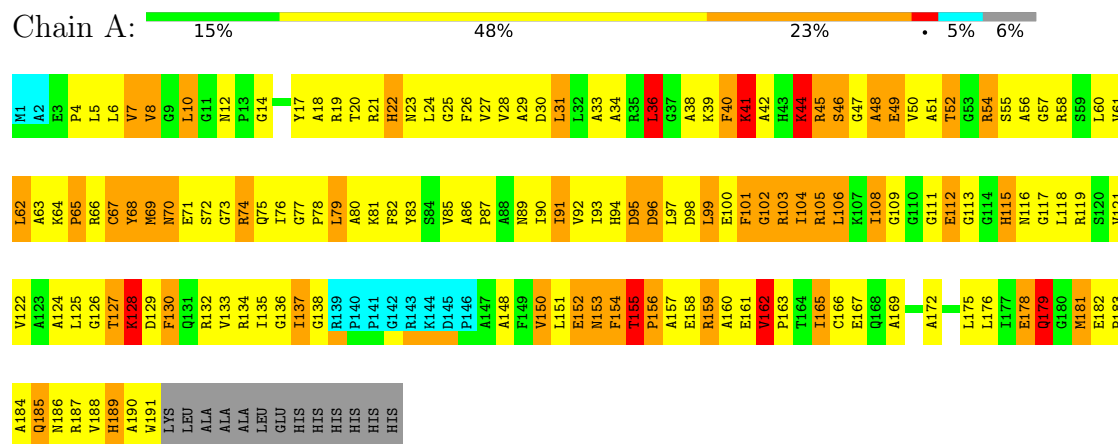
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



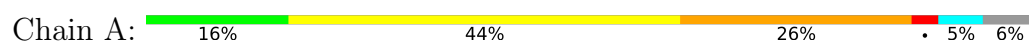
4.2.27 Score per residue for model 27

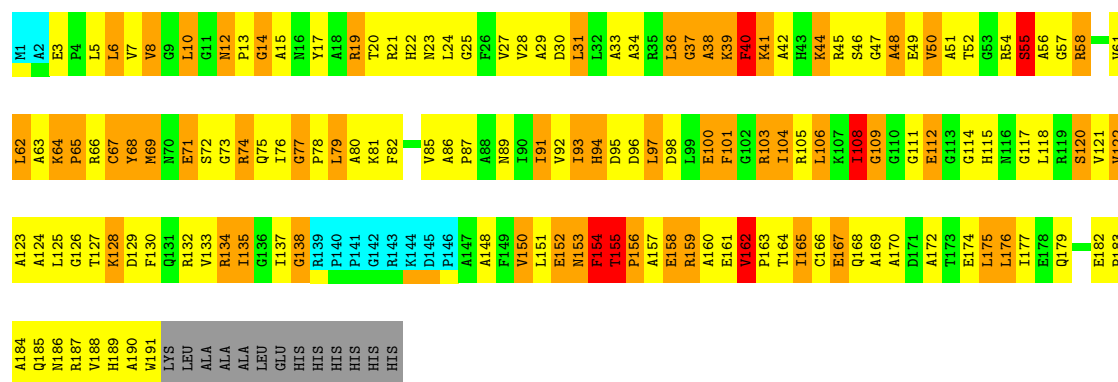
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

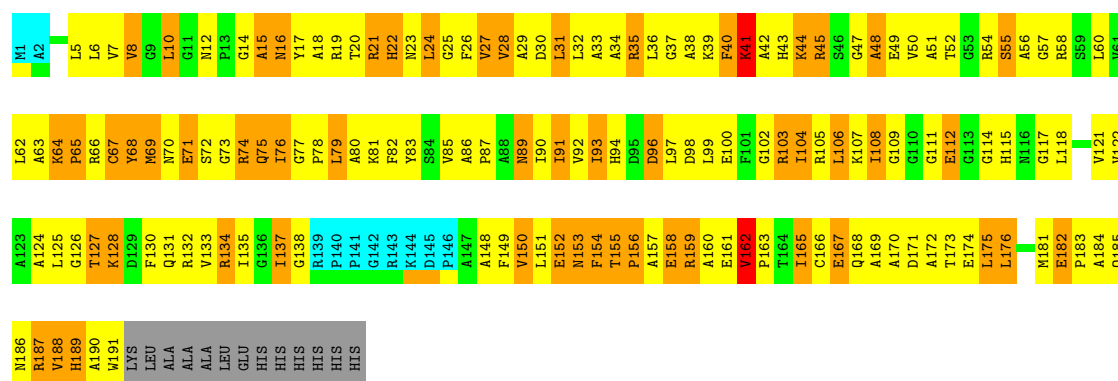




4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

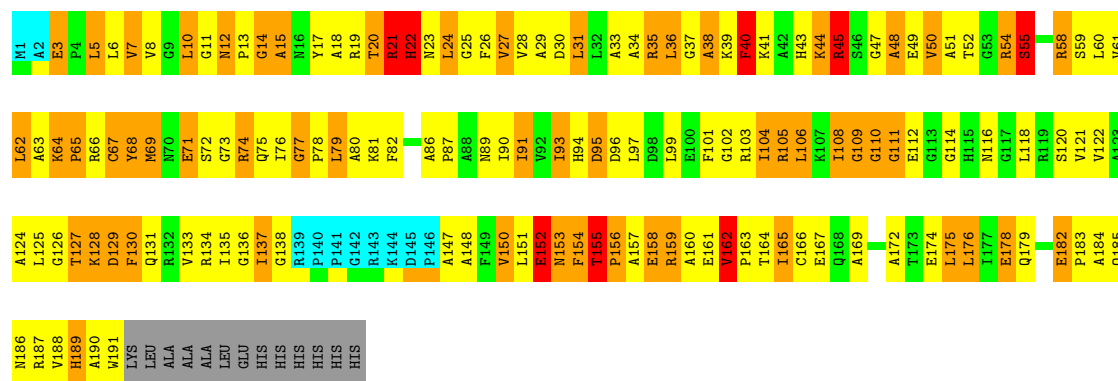
Chain A: 13% 48% 27% 5% 6%



4.2.30 Score per residue for model 30

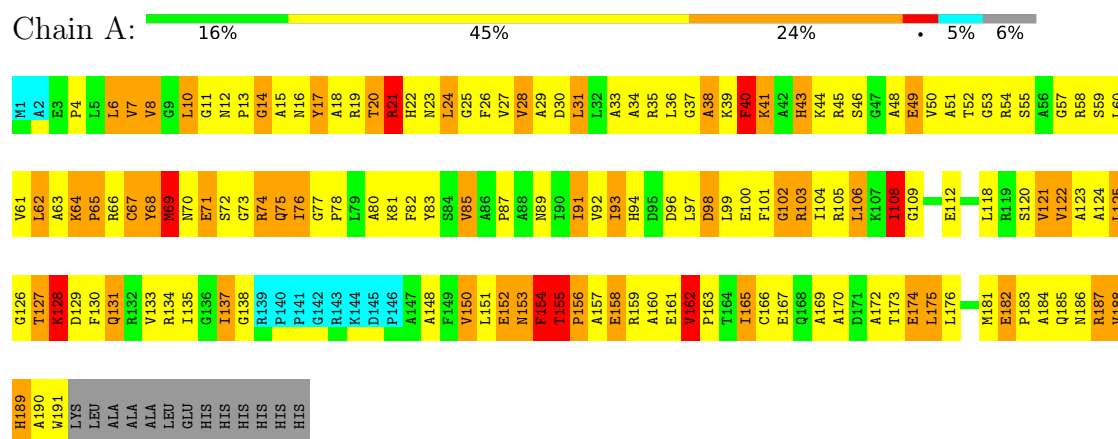
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 16% 42% 27% 5% 6%



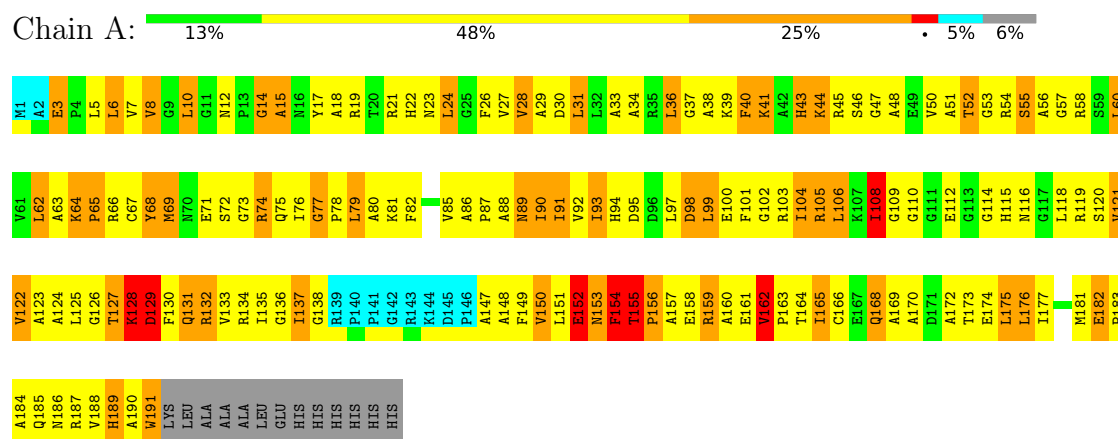
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



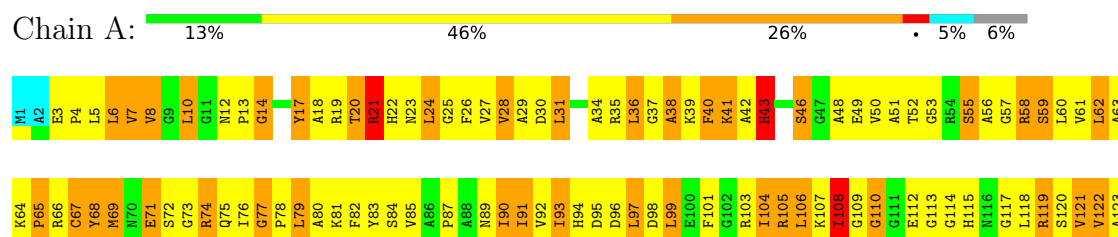
4.2.32 Score per residue for model 32

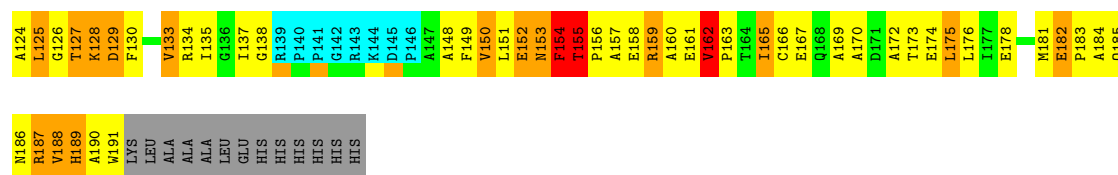
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

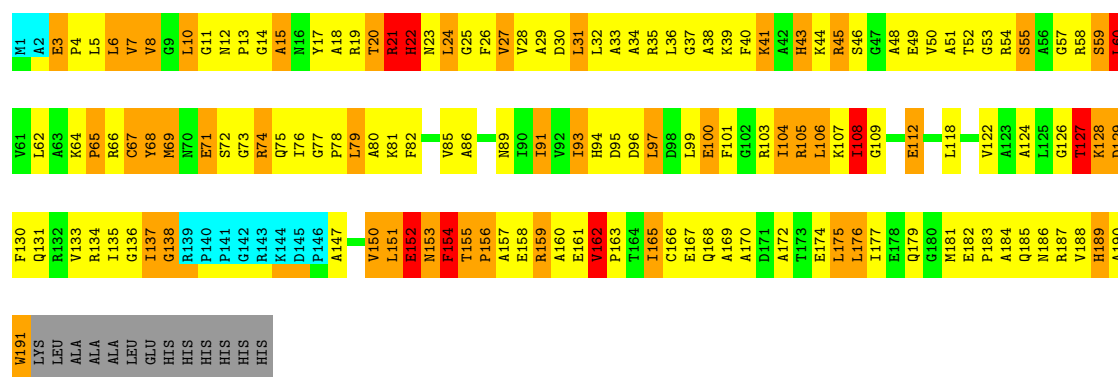




4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

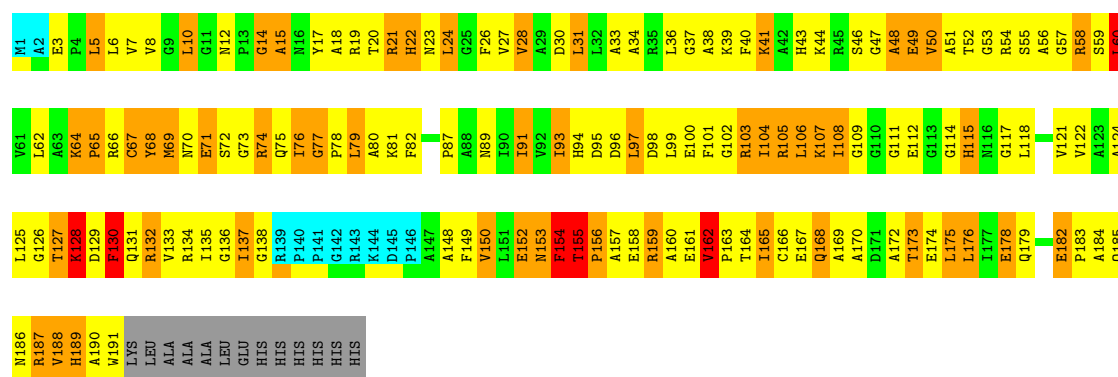
Chain A: 18% 45% 22% 5% 6%



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

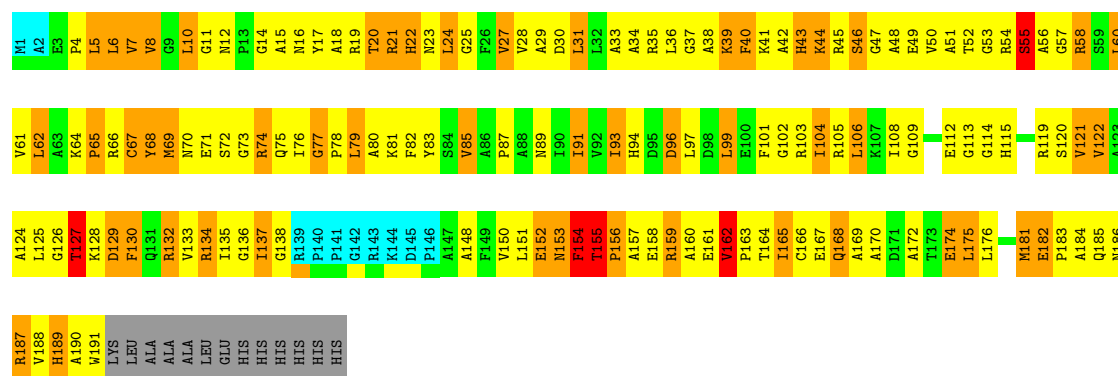
Chain A: 16% 45% 25% 5% 6%



4.2.36 Score per residue for model 36

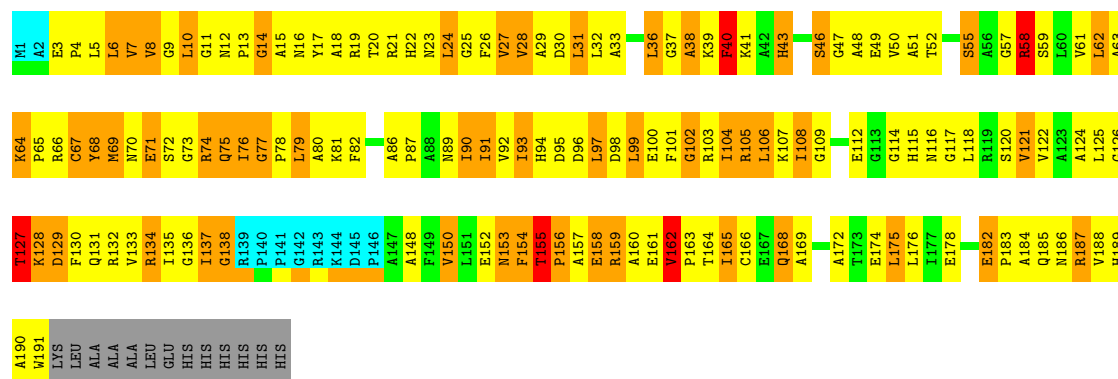
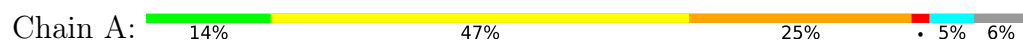
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 15% 46% 25% 5% 6%



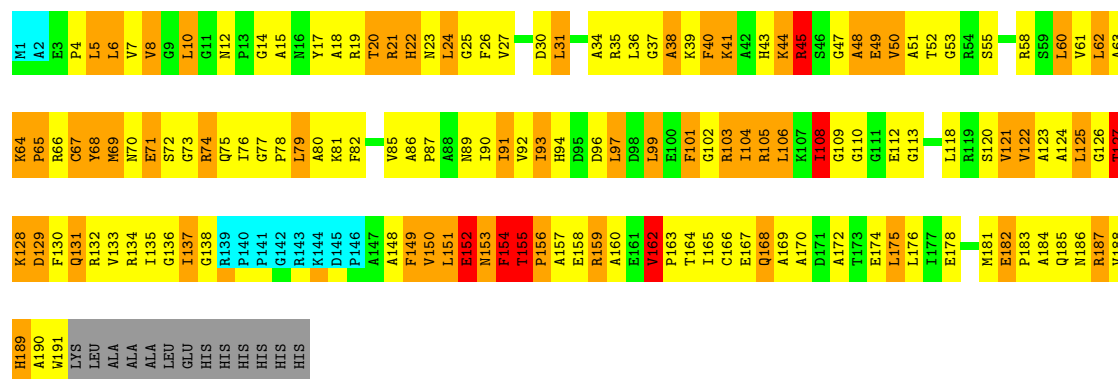
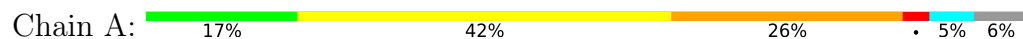
4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



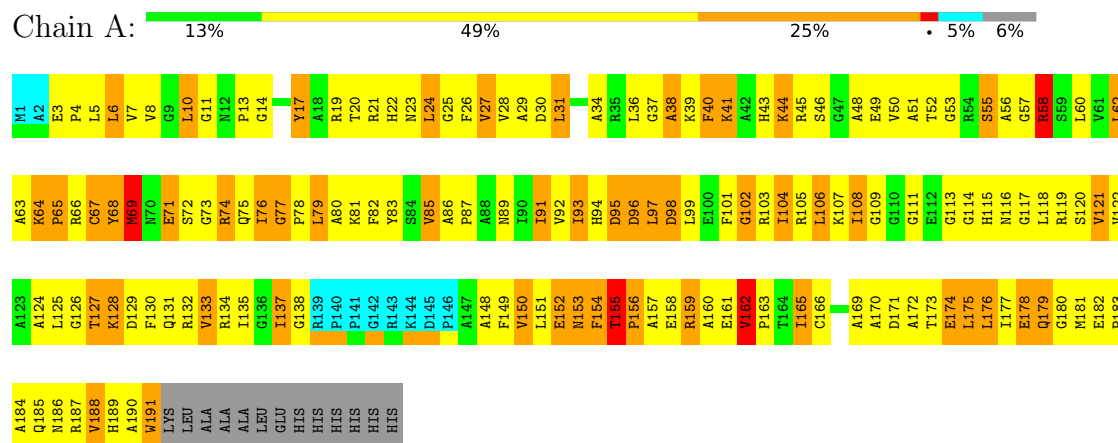
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



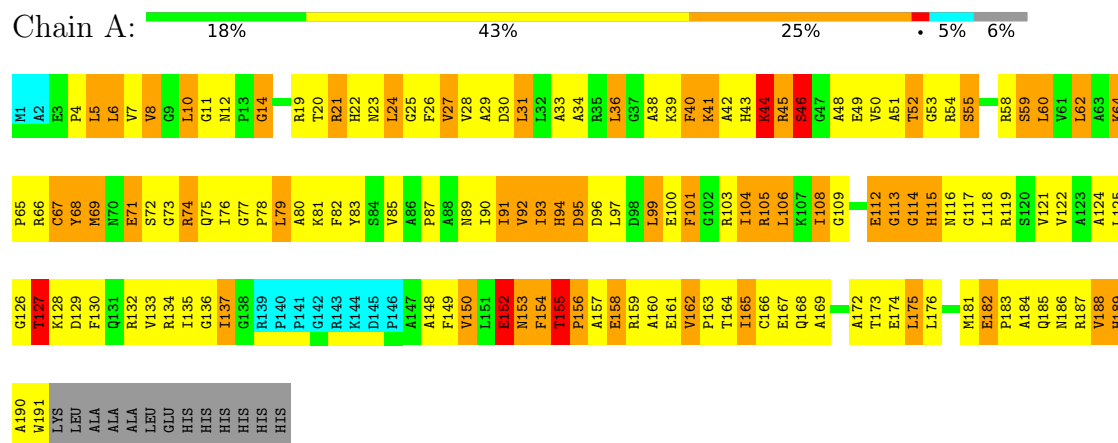
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 135 calculated structures, 40 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	1.0.5

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	0.71±0.00	0±0/1387 (0.0± 0.0%)	1.07±0.01	1±0/1874 (0.1± 0.0%)
All	All	0.71	0/55480 (0.0%)	1.07	41/74960 (0.1%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	162	VAL	O-C-N	6.51	124.58	120.42	3	40
1	A	45	ARG	CB-CA-C	-6.37	109.21	116.54	9	1

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	1363	1182	1383	257±15
All	All	54520	47280	55320	10275

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 94.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CD	1.12	1.95	18	40
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD11	1.11	1.19	3	27
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HD13	1.10	1.23	19	4
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG21	1.07	1.22	27	22
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HB2	1.06	1.79	6	16
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG22	1.06	1.20	32	1
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CD	1.04	2.05	38	40
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG13	1.04	1.52	40	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG21	1.04	1.08	8	2
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE2	1.01	1.90	18	9
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD11	1.01	1.91	23	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:HD13	1.00	1.32	40	2
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG12	1.00	1.30	3	1
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:HG22	1.00	1.29	11	7
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE1	0.99	1.92	27	9
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HD3	0.99	1.58	19	40
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG23	0.99	1.35	13	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB2	0.98	1.93	31	18
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD11	0.97	1.94	27	2
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HD11	0.96	1.32	22	31
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG21	0.96	1.89	4	2
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG22	0.96	1.61	15	38
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD2	0.96	1.59	24	40
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB3	0.95	1.60	33	15
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CG2	0.94	1.92	27	26
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD21	0.94	1.61	21	1
1:A:52:THR:CG2	1:A:61:VAL:HG22	0.94	1.91	11	5
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD13	0.94	1.38	5	2
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:HD12	0.94	1.62	13	38
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:HD13	0.94	1.36	35	3
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB2	0.94	1.63	9	25
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HB2	0.93	1.37	6	12
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:O	0.93	1.62	6	4
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD12	0.93	1.64	9	9
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:N	0.93	1.76	1	2
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG22	0.92	1.64	10	8
1:A:154:PHE:CG	1:A:157:ALA:HB3	0.92	1.98	37	33
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG23	0.92	1.93	5	12
1:A:106:LEU:HD12	1:A:107:LYS:N	0.92	1.80	22	2
1:A:87:PRO:O	1:A:90:ILE:HG22	0.92	1.65	32	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CG1	0.91	1.95	39	17
1:A:12:ASN:OD1	1:A:18:ALA:HB2	0.91	1.64	35	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:HG23	0.91	1.66	21	13
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD2	0.91	1.99	9	5
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:CD1	0.91	1.96	3	14
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG23	0.91	1.39	39	8
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:HD13	0.91	1.40	17	8
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG21	0.90	1.96	21	25
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD11	0.90	2.02	5	1
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:N	0.90	2.03	12	40
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD11	0.90	1.95	2	18
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:HD2	0.90	1.91	40	40
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD21	0.90	1.95	10	34
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD11	0.90	1.97	26	16
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:N	0.90	1.82	30	34
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD3	0.90	1.66	18	40
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:HD12	0.89	1.67	32	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD22	0.89	1.92	32	23
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CG	0.89	1.93	9	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:HB3	0.89	1.41	21	1
1:A:108:ILE:HD11	1:A:129:ASP:O	0.89	1.66	23	14
1:A:43:HIS:HE2	1:A:48:ALA:HB3	0.89	1.25	19	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CG1	0.88	1.97	12	21
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:HD21	0.88	1.40	2	18
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CG1	0.88	1.98	10	18
1:A:106:LEU:HB3	1:A:133:VAL:HG22	0.88	1.43	35	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:O	0.88	1.69	34	1
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:PRO:HD3	0.88	1.45	40	1
1:A:19:ARG:O	1:A:21:ARG:N	0.87	2.06	9	17
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HD11	0.87	1.43	22	10
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG1	0.87	1.98	21	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD11	0.87	1.98	31	11
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:HB3	0.87	1.85	19	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:NE2	0.87	1.84	16	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:27:VAL:HG21	0.86	1.85	29	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE2	0.86	2.04	34	4
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:OD1	0.86	1.71	39	3
1:A:121:VAL:HG13	1:A:125:LEU:HD12	0.86	1.48	12	12
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CB	0.86	2.01	16	9
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG23	0.86	1.70	9	38
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG22	0.85	1.47	26	15
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:N	0.85	2.08	33	37
1:A:5:LEU:HD12	1:A:89:ASN:O	0.85	1.72	40	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:HG23	0.85	1.46	12	8
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD11	0.85	1.69	9	2
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE1	0.85	1.69	10	5
1:A:92:VAL:C	1:A:93:ILE:HD13	0.85	1.96	1	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB2	0.85	1.48	16	6
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB3	0.85	2.06	35	5
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:HD13	0.84	1.49	24	16
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CZ	0.84	2.06	40	7
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	3	7
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD21	0.84	2.06	16	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG13	0.84	1.49	39	8
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.84	2.07	31	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HD13	0.84	2.02	26	3
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:N	0.84	2.11	32	40
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:HB	0.83	1.47	3	17
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.48	27	24
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.47	21	1
1:A:106:LEU:HB2	1:A:133:VAL:HG22	0.83	1.49	34	25
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:O	0.83	1.74	29	6
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.83	2.04	5	3
1:A:40:PHE:HB2	1:A:50:VAL:O	0.82	1.73	16	26
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:CG2	0.82	2.04	30	4
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG12	0.82	1.51	21	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:ND2	0.82	1.90	23	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG12	0.81	1.52	34	15
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:HB3	0.81	2.10	35	38
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:CG2	0.81	2.02	8	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD22	0.81	1.52	29	7
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.81	2.01	13	34
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG22	0.81	2.05	5	18
1:A:97:LEU:HB2	1:A:150:VAL:HG22	0.81	1.50	25	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:HD12	0.81	1.51	26	4
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:O	0.81	1.75	13	33
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG22	0.81	1.53	22	16
1:A:20:THR:HG22	1:A:153:ASN:OD1	0.81	1.75	18	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:CD1	0.81	2.04	19	4
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB3	0.80	1.74	11	13
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:HD11	0.80	2.06	11	30
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HB2	0.80	1.51	6	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:HD12	0.80	1.76	8	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:27:VAL:HG23	0.80	1.75	16	3
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HG3	0.80	1.77	40	31
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG22	0.80	1.52	38	9
1:A:151:LEU:HD23	1:A:151:LEU:O	0.80	1.75	9	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	35	1
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:N	0.79	2.15	26	40
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:HD2	0.79	2.03	26	40
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD22	0.79	2.11	36	5
1:A:6:LEU:N	1:A:89:ASN:O	0.79	2.14	25	37
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HA	0.79	1.55	23	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG21	0.79	1.78	20	4
1:A:118:LEU:O	1:A:122:VAL:HG23	0.79	1.76	11	11
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD11	0.79	1.53	8	11
1:A:69:MET:HE3	1:A:70:ASN:OD1	0.79	1.76	36	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HA	0.79	1.54	38	9
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG12	0.79	1.52	16	15
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CG	0.78	2.31	38	40
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CD1	0.78	2.08	23	25
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG21	0.78	1.55	1	6
1:A:17:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD13	0.78	1.78	36	1
1:A:76:ILE:HG23	1:A:125:LEU:HD21	0.78	1.52	37	2
1:A:24:LEU:CG	1:A:135:ILE:HD13	0.78	2.09	5	18
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CE1	0.78	2.37	11	40
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG13	0.78	1.78	3	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:N	0.78	2.16	35	40
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.54	19	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.78	2.13	27	1
1:A:14:GLY:O	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.78	9	3
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:C	0.78	2.04	30	3
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:HD12	0.77	2.05	26	10
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:CD	0.77	2.47	40	40
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CA	0.77	2.09	38	19
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD22	0.77	2.14	31	3
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:C	0.77	2.04	31	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD22	0.77	1.56	19	7
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:O	0.77	1.79	25	4
1:A:28:VAL:HG22	1:A:166:CYS:SG	0.77	2.18	16	4
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG13	0.77	1.57	35	13
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD23	0.77	1.53	12	1
1:A:172:ALA:HB1	1:A:184:ALA:HB1	0.77	1.56	28	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG23	0.77	1.78	2	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD11	0.77	2.14	5	2
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:N	0.76	1.96	35	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CB	0.76	2.68	35	12
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:HD11	0.76	1.57	37	11
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HA	0.76	1.57	6	28
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HB	0.76	1.55	1	2
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:N	0.76	2.18	37	37
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG2	0.76	2.07	32	3
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:N	0.76	2.18	2	35
1:A:168:GLN:HG2	1:A:188:VAL:HG13	0.76	1.57	13	1
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE2	0.76	2.16	33	2
1:A:165:ILE:HD13	1:A:165:ILE:C	0.76	2.05	17	29
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG21	0.76	1.80	17	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HA	0.76	1.56	18	23
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:HG23	0.76	2.11	32	11
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:O	0.76	1.81	16	9
1:A:80:ALA:HB1	1:A:125:LEU:HD21	0.76	1.56	10	6
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:C	0.76	2.05	16	9
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:OD1	0.76	1.81	26	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:135:ILE:HD13	0.75	2.10	19	9
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG23	0.75	1.59	15	13
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:N	0.75	1.96	29	5
1:A:40:PHE:HD2	1:A:51:ALA:HB2	0.75	1.41	31	3
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:O	0.75	1.82	38	8
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CD1	0.74	2.12	22	7
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:HD13	0.74	1.59	14	7
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG2	0.74	2.35	32	2
1:A:69:MET:HE2	1:A:70:ASN:HB2	0.74	1.56	35	2
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD21	0.74	1.59	25	5
1:A:21:ARG:CZ	1:A:24:LEU:HD21	0.74	2.12	20	2
1:A:93:ILE:N	1:A:93:ILE:CD1	0.74	2.50	1	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:C	0.74	2.08	28	12
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:C	0.74	2.07	6	9
1:A:112:GLU:CD	1:A:122:VAL:HG21	0.74	2.08	15	3
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:HD13	0.74	1.59	10	3
1:A:175:LEU:HD21	1:A:183:PRO:HG2	0.74	1.59	39	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG21	0.73	1.97	25	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD21	0.73	1.97	8	2
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD11	0.73	1.59	36	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD12	0.73	2.19	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:N	0.73	2.20	13	30
1:A:191:TRP:CE3	1:A:191:TRP:C	0.73	2.67	10	7
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD2	0.73	2.18	10	3
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.73	1.61	35	1
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD11	0.73	1.59	23	12
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG22	0.73	1.99	18	2
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.73	2.13	19	2
1:A:154:PHE:O	1:A:155:THR:C	0.73	2.32	37	40
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:O	0.73	1.84	2	36
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:CE1	0.73	2.19	9	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:HG21	0.73	1.83	16	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CB	0.73	2.36	27	33
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:C	0.73	2.65	6	20
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:C	0.72	2.66	33	9
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG13	0.72	1.61	30	11
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CB	0.72	2.37	18	16
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:O	0.72	1.85	35	4
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:CD	0.72	2.08	40	2
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CB	0.72	2.38	36	24
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:CD	0.72	2.52	27	40
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG22	0.72	2.14	32	2
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:HB2	0.72	1.59	35	6
1:A:20:THR:HG22	1:A:152:GLU:O	0.72	1.84	34	4
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:HD23	0.72	1.85	38	3
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:CD1	0.71	2.15	1	4
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HG3	0.71	1.86	39	6
1:A:158:GLU:HG2	1:A:162:VAL:HG23	0.71	1.59	34	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HE3	0.71	1.60	31	2
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:CB	0.71	2.38	27	40
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE3	0.71	2.44	11	7
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:CG2	0.71	2.13	11	2
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:CD2	0.71	2.16	29	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG13	0.71	1.62	3	7
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CD1	0.71	2.15	37	9
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:NZ	0.71	2.01	39	4
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CE2	0.70	2.74	5	6
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:HB3	0.70	1.61	27	1
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD22	0.70	2.16	29	2
1:A:17:TYR:CG	1:A:151:LEU:HD11	0.70	2.21	27	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:C	0.70	2.11	8	35
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG22	0.70	1.63	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:LEU:CB	1:A:133:VAL:HG22	0.70	2.16	38	8
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:C	0.70	2.34	4	24
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:CG2	0.70	2.17	12	5
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CZ	0.70	2.22	38	5
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:HB3	0.70	1.86	29	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:92:VAL:HG13	0.70	2.16	40	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:76:ILE:HD11	0.70	2.16	22	2
1:A:118:LEU:O	1:A:121:VAL:HG12	0.70	1.87	15	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG22	0.69	2.02	14	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD1	0.69	2.21	27	5
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE2	0.69	2.75	18	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:CD1	0.69	2.16	17	5
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:CB	0.69	2.18	16	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:90:ILE:HD11	0.69	2.17	20	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CD	0.69	2.70	7	4
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:CB	0.69	2.16	16	16
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CE1	0.69	2.60	24	1
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:HB2	0.69	1.88	39	15
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:H	0.69	1.84	23	1
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:CD	0.69	2.66	40	1
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:CB	0.69	2.40	24	39
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:HB2	0.69	1.87	13	3
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:CD	0.69	2.40	38	14
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB3	0.69	2.12	39	4
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:HD11	0.69	1.65	1	1
1:A:133:VAL:HG12	1:A:133:VAL:O	0.69	1.87	27	22
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG2	0.69	2.18	24	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:40:PHE:CE1	0.69	2.75	24	5
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.64	27	4
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD21	0.69	2.18	37	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:CB	0.68	2.18	25	9
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CE1	0.68	2.23	32	7
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HD13	0.68	1.87	38	3
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HD12	0.68	1.88	14	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:CB	0.68	2.77	25	37
1:A:98:ASP:HB3	1:A:99:LEU:HD12	0.68	1.63	20	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB1	0.68	1.66	24	5
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:N	0.68	2.26	19	23
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD22	0.68	2.23	13	2
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:HD3	0.68	2.18	40	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:HB2	0.68	1.89	36	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HD13	0.68	1.64	17	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD1	0.68	2.62	22	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.68	2.24	24	4
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:C	0.68	2.37	20	2
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:HD22	0.68	1.66	21	1
1:A:74:ARG:HG2	1:A:75:GLN:N	0.67	2.02	3	13
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:CA	0.67	2.43	34	4
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG21	0.67	1.65	32	3
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD13	0.67	2.19	23	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:62:LEU:HD23	0.67	1.67	17	2
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.75	27	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD1	0.67	2.62	37	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:HE2	0.67	1.49	35	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CH2	0.67	2.47	39	2
1:A:93:ILE:C	1:A:93:ILE:HD12	0.67	2.13	23	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HG21	0.67	1.89	32	1
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG22	0.67	1.66	24	5
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE2	0.67	2.24	16	5
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:N	0.67	2.23	14	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CG	0.67	2.42	29	2
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG23	0.67	1.89	37	2
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.67	2.73	26	2
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG23	0.67	1.90	36	23
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.25	1	2
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG23	0.67	1.67	5	2
1:A:155:THR:HG23	1:A:156:PRO:HD3	0.67	1.65	26	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:68:TYR:OH	0.66	2.47	20	10
1:A:103:ARG:O	1:A:136:GLY:N	0.66	2.23	2	19
1:A:176:LEU:HD22	1:A:184:ALA:HB1	0.66	1.67	39	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CZ	0.66	2.25	16	10
1:A:13:PRO:HG3	1:A:66:ARG:C	0.66	2.15	17	6
1:A:153:ASN:CG	1:A:153:ASN:O	0.66	2.37	6	34
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CB	0.66	2.19	8	23
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:CB	0.66	2.19	6	5
1:A:165:ILE:C	1:A:165:ILE:HD13	0.66	2.16	8	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:HB3	0.66	1.66	16	2
1:A:176:LEU:HD12	1:A:180:GLY:O	0.66	1.90	39	1
1:A:96:ASP:N	1:A:135:ILE:O	0.66	2.29	34	29
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB2	0.66	1.66	15	9
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:HD21	0.66	1.48	18	5
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:C	0.66	2.39	34	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:C	0.66	2.38	17	20
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CD1	0.66	2.44	35	17
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG1	0.66	2.15	3	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CZ2	0.66	2.49	7	4
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:CE	0.66	2.20	31	2
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HD13	0.66	1.90	37	2
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:H	0.65	1.49	27	11
1:A:73:GLY:CA	1:A:121:VAL:HG22	0.65	2.21	26	7
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CD1	0.65	2.21	3	8
1:A:137:ILE:HG12	1:A:137:ILE:O	0.65	1.92	19	5
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD11	0.65	1.67	39	12
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:HD21	0.65	1.92	25	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:HG22	0.65	2.21	1	8
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:NZ	0.65	2.64	7	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CD2	0.65	2.50	17	17
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.65	2.26	12	8
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:HD3	0.65	1.67	8	2
1:A:10:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.65	2.49	32	10
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CD1	0.65	2.80	22	3
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB3	0.65	2.27	34	5
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HA	0.65	2.22	33	19
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD12	0.65	1.69	23	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE2	0.65	2.50	10	3
1:A:85:VAL:HG11	1:A:90:ILE:HD11	0.65	1.69	40	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HD13	0.65	1.91	3	11
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD22	0.65	1.67	4	1
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HG22	0.65	1.92	24	9
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NH2	0.65	2.65	24	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:80:ALA:HB2	0.65	1.66	5	11
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB2	0.65	1.92	35	14
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:CG	0.65	2.64	24	3
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CB	0.65	2.44	22	18
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:HG23	0.65	1.67	39	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:CD1	0.65	2.21	33	2
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE1	0.65	2.27	29	1
1:A:172:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG21	0.64	2.21	21	15
1:A:85:VAL:HG12	1:A:89:ASN:OD1	0.64	1.92	5	2
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:HB2	0.64	1.92	19	6
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:CE1	0.64	2.65	17	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD12	0.64	1.67	32	2
1:A:59:SER:C	1:A:60:LEU:HD23	0.64	2.17	15	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:N	0.64	2.65	4	3
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CG	0.64	2.65	22	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:90:ILE:HG12	0.64	1.68	30	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:CD2	0.64	2.76	37	13
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:CD	0.64	2.71	31	40
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:H	0.64	2.01	10	26
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CD2	0.64	2.28	16	4
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD1	0.64	2.27	9	4
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD1	0.64	2.81	5	1
1:A:69:MET:HE2	1:A:116:ASN:HB3	0.64	1.68	6	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:HG22	0.64	1.68	17	4
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:HB3	0.64	1.93	9	39
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:CG2	0.64	2.76	9	14
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB2	0.64	1.92	7	9
1:A:21:ARG:CZ	1:A:22:HIS:CE1	0.64	2.81	9	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:HB2	0.64	1.70	26	4
1:A:191:TRP:CD1	1:A:191:TRP:C	0.64	2.75	25	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:C	0.64	2.17	13	1
1:A:152:GLU:CD	1:A:154:PHE:CD1	0.64	2.76	27	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG1	0.64	2.46	3	9
1:A:99:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CD1	0.64	2.27	32	2
1:A:100:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE2	0.63	2.51	25	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.63	2.76	26	1
1:A:137:ILE:CG1	1:A:137:ILE:O	0.63	2.46	36	8
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD23	0.63	1.68	39	5
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HB1	0.63	1.93	30	10
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CG	0.63	2.46	18	3
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:HD21	0.63	2.23	1	4
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ALA:HB3	0.63	1.69	25	4
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:CA	0.63	2.47	36	22
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:C	0.63	2.41	33	14
1:A:7:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HA	0.63	1.69	36	1
1:A:105:ARG:N	1:A:134:ARG:O	0.63	2.31	22	39
1:A:172:ALA:CB	1:A:184:ALA:HB1	0.63	2.23	28	7
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD13	0.63	1.70	21	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.63	2.67	21	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE1	0.63	2.82	1	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:CG	0.63	2.18	33	1
1:A:56:ALA:HA	1:A:177:ILE:HG23	0.63	1.71	1	2
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:CD1	0.62	2.67	25	9
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.62	2.29	30	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:CB	0.62	2.24	40	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE1	0.62	2.29	37	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:CG2	0.62	2.82	22	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:135:ILE:HD11	0.62	1.71	39	2
1:A:26:PHE:CE2	1:A:30:ASP:OD2	0.62	2.51	37	1
1:A:56:ALA:CA	1:A:177:ILE:HG23	0.62	2.24	1	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD2	0.62	2.72	40	35
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:CB	0.62	2.23	21	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD22	0.62	1.93	39	2
1:A:19:ARG:HG3	1:A:155:THR:HG23	0.62	1.70	1	1
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:HD2	0.62	2.09	40	29
1:A:87:PRO:HG3	1:A:127:THR:HG21	0.62	1.69	28	2
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:N	0.62	2.32	2	40
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CG	0.62	2.82	21	2
1:A:36:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB3	0.62	2.23	21	1
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:O	0.62	2.18	10	25
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG3	0.62	1.70	6	5
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CE2	0.62	2.48	35	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CG	0.62	2.83	5	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG12	0.62	1.95	36	12
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:N	0.62	2.32	6	34
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:HE2	0.62	2.02	18	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CG	0.62	2.68	7	3
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD1	0.61	2.78	31	4
1:A:115:HIS:HB2	1:A:118:LEU:HD12	0.61	1.69	15	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.61	2.53	17	2
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:O	0.61	1.94	30	1
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG22	0.61	2.11	32	1
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:N	0.61	2.10	23	11
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CG2	0.61	2.48	34	24
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CB	0.61	2.48	39	32
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB2	0.61	1.95	33	8
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HB3	0.61	2.29	26	4
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:N	0.61	2.62	25	3
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:CD2	0.61	2.26	21	5
1:A:121:VAL:CG1	1:A:125:LEU:HD12	0.61	2.23	24	3
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CD1	0.61	2.54	10	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB1	0.61	2.25	32	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB3	0.61	1.95	24	3
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.30	5	8
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:H	0.61	2.04	35	38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CG	0.61	2.49	4	17
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.53	8	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:CG1	0.61	2.83	18	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.54	27	2
1:A:85:VAL:HG13	1:A:90:ILE:HD11	0.61	1.73	20	1
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CD1	0.61	2.54	27	26
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG23	0.61	1.70	4	2
1:A:93:ILE:HD11	1:A:135:ILE:HD11	0.61	1.73	10	3
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD2	0.61	2.84	37	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CG2	0.61	2.45	17	37
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:OD1	0.61	1.95	33	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.31	35	1
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:O	0.61	1.96	13	3
1:A:10:LEU:HD21	1:A:118:LEU:HD21	0.60	1.70	1	2
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:CB	0.60	2.49	33	14
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD1	0.60	2.74	33	30
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HD22	0.60	1.55	7	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:O	0.60	2.49	6	9
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:CG	0.60	2.44	18	15
1:A:22:HIS:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.60	2.31	13	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:92:VAL:HG22	0.60	1.72	40	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CG	0.60	2.25	30	4
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD11	0.60	1.95	2	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:OE2	0.60	2.54	5	5
1:A:186:ASN:N	1:A:186:ASN:HD22	0.60	1.92	5	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:191:TRP:CH2	0.60	2.84	38	4
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:N	0.60	2.12	40	1
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG21	0.60	1.96	34	2
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD21	0.60	1.74	5	1
1:A:112:GLU:OE2	1:A:122:VAL:HG21	0.60	1.97	15	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CE2	0.60	2.69	37	1
1:A:12:ASN:N	1:A:22:HIS:O	0.60	2.35	8	18
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CD2	0.60	2.54	28	4
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB2	0.60	2.24	16	5
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD12	0.60	2.22	17	2
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:H	0.60	2.05	34	40
1:A:50:VAL:HA	1:A:62:LEU:O	0.60	1.97	9	16
1:A:24:LEU:CB	1:A:135:ILE:HD13	0.60	2.27	14	6
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD21	0.60	2.27	5	8
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:C	0.60	2.20	11	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CG	0.60	2.80	37	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CB	0.60	2.50	26	18
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.60	2.27	39	8
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:CB	0.60	2.50	40	10
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:N	0.60	2.64	18	3
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD1	0.60	2.85	18	2
1:A:5:LEU:HD12	1:A:59:SER:O	0.60	1.97	30	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HG12	0.59	1.73	38	6
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:CD1	0.59	2.27	8	3
1:A:98:ASP:N	1:A:138:GLY:O	0.59	2.35	27	7
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.59	2.85	16	4
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:CD2	0.59	2.80	1	2
1:A:93:ILE:HA	1:A:133:VAL:O	0.59	1.98	32	38
1:A:172:ALA:HA	1:A:184:ALA:HB1	0.59	1.75	34	7
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:N	0.59	2.35	29	39
1:A:10:LEU:CD1	1:A:94:HIS:CD2	0.59	2.84	16	6
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:HB2	0.59	2.27	13	27
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG23	0.59	1.74	6	3
1:A:40:PHE:CZ	1:A:62:LEU:HD12	0.59	2.31	12	2
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB3	0.59	1.96	35	6
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.55	33	4
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD23	0.59	2.11	11	5
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD2	0.59	2.70	15	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HD13	0.59	1.96	20	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:CD2	0.59	2.75	4	36
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG22	0.59	1.97	28	5
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE1	0.59	2.32	14	2
1:A:154:PHE:O	1:A:157:ALA:N	0.59	2.35	33	1
1:A:6:LEU:O	1:A:89:ASN:O	0.59	2.21	23	15
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CG	0.59	2.51	13	10
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG21	0.59	1.98	7	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:28:VAL:HG23	0.59	1.74	29	2
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:N	0.59	2.59	16	19
1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:ALA:N	0.59	2.11	31	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE1	0.59	2.55	8	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:CD2	0.59	2.80	24	1
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:HG23	0.59	1.73	3	8
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CG	0.59	2.50	27	5
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:H	0.59	2.05	23	2
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:N	0.59	2.61	34	39
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:C	0.59	2.46	6	39
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:O	0.59	2.21	13	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:HG21	0.59	1.75	23	1
1:A:76:ILE:O	1:A:77:GLY:C	0.59	2.46	17	40
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:CB	0.59	2.51	27	15
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:N	0.59	2.13	26	8
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CG	0.59	2.51	17	4
1:A:161:GLU:C	1:A:163:PRO:HD2	0.59	2.22	40	1
1:A:11:GLY:C	1:A:68:TYR:CD2	0.58	2.81	31	15
1:A:6:LEU:HD11	1:A:61:VAL:HG11	0.58	1.74	38	14
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:H	0.58	1.57	24	21
1:A:95:ASP:O	1:A:115:HIS:CE1	0.58	2.56	23	2
1:A:20:THR:CG2	1:A:21:ARG:N	0.58	2.65	9	1
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:N	0.58	2.60	38	40
1:A:94:HIS:C	1:A:135:ILE:HD12	0.58	2.23	5	10
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CD2	0.58	2.56	22	5
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD1	0.58	2.78	23	2
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:N	0.58	2.33	15	32
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:O	0.58	1.97	36	8
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CB	0.58	2.49	22	3
1:A:188:VAL:CG1	1:A:189:HIS:N	0.58	2.66	33	15
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:CB	0.58	2.51	39	16
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:O	0.58	1.97	38	6
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:CB	0.58	2.50	11	6
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:CD	0.58	2.77	24	2
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD23	0.58	1.74	25	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:CA	0.58	2.28	25	1
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:CB	0.58	2.51	2	19
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HB2	0.58	1.98	12	20
1:A:128:LYS:HD3	1:A:128:LYS:C	0.58	2.24	13	4
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:OE2	0.58	2.56	26	5
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:CG2	0.58	2.82	35	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:180:GLY:O	0.58	2.51	39	1
1:A:154:PHE:C	1:A:158:GLU:HB2	0.58	2.24	37	8
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG23	0.58	1.97	29	11
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.58	2.67	13	8
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CE1	0.58	2.34	18	3
1:A:76:ILE:HD12	1:A:90:ILE:HD13	0.58	1.74	29	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:SG	0.58	2.62	25	36
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:C	0.58	2.46	32	2
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:CB	0.58	2.27	39	2
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD2	0.58	1.98	31	14
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:CG2	0.58	2.82	26	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:TYR:O	1:A:17:TYR:CD1	0.58	2.57	34	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:HG23	0.58	1.75	39	1
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.58	2.33	20	5
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:LEU:HD13	0.58	1.76	34	4
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE2	0.58	2.56	31	3
1:A:28:VAL:HG12	1:A:32:LEU:HD12	0.58	1.76	34	1
1:A:75:GLN:HG3	1:A:76:ILE:N	0.58	2.13	37	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:138:GLY:O	0.58	2.57	38	1
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:CD	0.58	2.67	25	39
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:CB	0.58	2.52	40	2
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:HD23	0.58	1.76	17	2
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CB	0.58	2.51	27	1
1:A:74:ARG:CG	1:A:75:GLN:N	0.57	2.66	3	23
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:C	0.57	2.45	10	8
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE2	0.57	2.33	7	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CG	0.57	2.57	40	7
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:NE2	0.57	2.14	25	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:HD2	0.57	1.57	26	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CD2	0.57	2.34	16	25
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:CB	0.57	2.53	31	34
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:ND1	0.57	2.14	16	10
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:CD1	0.57	2.78	21	6
1:A:43:HIS:CD2	1:A:50:VAL:HG21	0.57	2.33	4	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD1	0.57	2.33	18	8
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CG2	0.57	2.52	32	1
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:HD2	0.57	2.14	27	36
1:A:51:ALA:N	1:A:62:LEU:O	0.57	2.37	31	23
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:C	0.57	2.77	28	4
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:CG	0.57	2.82	16	4
1:A:21:ARG:HH11	1:A:27:VAL:HG21	0.57	1.59	29	1
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:C	0.57	2.83	21	7
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG13	0.57	2.29	3	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CB	0.57	2.53	32	16
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:HB3	0.57	1.76	36	12
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	5
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:HG23	0.57	2.29	6	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HZ3	0.57	1.60	12	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CD2	0.57	2.57	37	2
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:HB2	0.57	1.99	16	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CB	0.57	2.88	24	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HD12	0.57	1.77	26	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:N	0.57	2.68	7	16
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:HB3	0.57	1.99	32	4
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD23	0.57	1.76	10	1
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:CB	0.57	2.53	16	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:HD23	0.57	1.98	40	5
1:A:28:VAL:HG13	1:A:32:LEU:HD12	0.57	1.74	37	2
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HB2	0.57	2.00	9	25
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:CE1	0.57	2.83	5	3
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:HB2	0.57	1.99	11	1
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:HB2	0.57	2.00	40	3
1:A:22:HIS:CE1	1:A:94:HIS:NE2	0.57	2.72	37	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD2	0.57	2.83	37	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:CG2	0.57	2.30	39	1
1:A:174:GLU:HG3	1:A:175:LEU:N	0.57	2.13	2	5
1:A:10:LEU:HB3	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.34	9	4
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:CG	0.57	2.83	21	4
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:OG1	0.57	1.99	35	2
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CD	0.57	2.78	2	5
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:GLY:N	0.56	2.67	9	11
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:CD1	0.56	2.29	37	2
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CZ	0.56	2.35	26	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HG	0.56	2.00	22	25
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:N	0.56	2.14	32	9
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:CG	0.56	2.78	17	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CB	0.56	2.53	32	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:129:ASP:O	0.56	2.52	18	11
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CG	0.56	2.53	38	29
1:A:184:ALA:C	1:A:188:VAL:HG13	0.56	2.25	3	1
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:ND2	0.56	2.38	37	14
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:HD11	0.56	2.15	6	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:HB1	0.56	2.30	19	3
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CE	0.56	2.79	25	1
1:A:75:GLN:CD	1:A:75:GLN:C	0.56	2.74	37	2
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	16	6
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD23	0.56	2.15	29	10
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLU:C	0.56	2.48	23	1
1:A:158:GLU:C	1:A:162:VAL:HG13	0.56	2.24	40	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.56	1.73	5	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:HA	0.56	1.75	9	1
1:A:20:THR:O	1:A:158:GLU:CD	0.56	2.49	33	2
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:H	0.56	1.60	35	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:HB2	0.56	1.77	37	1
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:O	0.56	2.24	34	24
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB3	0.56	2.01	38	34
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HE2	0.56	1.77	28	2
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:CZ	0.56	2.54	3	3
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CB	0.56	2.54	40	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:CB	0.56	2.84	14	2
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CB	0.56	2.84	38	16
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:CB	0.56	2.53	12	6
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:CB	0.56	2.31	6	6
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:CE	0.56	2.89	7	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CD1	0.56	2.53	38	3
1:A:105:ARG:C	1:A:106:LEU:HD13	0.56	2.26	35	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:CD	0.56	2.78	32	3
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:CB	0.56	2.54	34	29
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:OD1	0.56	2.00	12	2
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:CG2	0.56	2.30	29	5
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG23	0.56	1.76	32	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CG	0.56	2.49	26	19
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:CB	0.56	2.54	26	38
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:N	0.56	2.16	39	10
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	38	2
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD2	0.56	2.87	10	2
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:OG1	0.56	2.54	17	4
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG21	0.56	2.16	16	2
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.56	2.84	8	40
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CD1	0.56	2.84	31	5
1:A:10:LEU:HD21	1:A:72:SER:HB3	0.56	1.76	9	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CE2	0.56	2.89	37	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CG1	0.56	2.81	23	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:CD2	0.56	2.54	25	1
1:A:96:ASP:CB	1:A:135:ILE:O	0.56	2.53	34	1
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:CD	0.55	2.54	35	21
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG22	0.55	2.02	3	1
1:A:128:LYS:N	1:A:130:PHE:CE2	0.55	2.74	12	7
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD22	0.55	2.31	4	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:135:ILE:HD11	0.55	2.31	12	4
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:HB3	0.55	1.77	21	3
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:HG3	0.55	2.36	13	2
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:HB3	0.55	1.77	14	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CG	0.55	2.59	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG12	0.55	1.77	21	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CB	0.55	2.55	23	36
1:A:92:VAL:O	1:A:133:VAL:N	0.55	2.39	27	16
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CZ3	0.55	2.75	7	1
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:CB	0.55	2.54	21	2
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD11	0.55	2.36	16	1
1:A:103:ARG:CZ	1:A:188:VAL:O	0.55	2.54	22	3
1:A:10:LEU:HD13	1:A:92:VAL:HG13	0.55	1.78	40	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:152:GLU:OE2	0.55	2.59	40	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD13	0.55	2.24	27	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:30:ASP:OD2	0.55	2.59	37	3
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:O	0.55	2.39	32	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CZ	0.55	2.36	34	1
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:CG2	0.55	2.54	23	6
1:A:24:LEU:CD2	1:A:95:ASP:OD1	0.55	2.54	7	2
1:A:12:ASN:CG	1:A:17:TYR:CD1	0.55	2.85	9	1
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:HD21	0.55	2.17	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:CB	0.55	2.32	14	1
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD22	0.55	2.27	31	2
1:A:105:ARG:CG	1:A:105:ARG:O	0.55	2.54	38	1
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:N	0.55	2.40	35	26
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CB	0.55	2.55	5	19
1:A:152:GLU:CD	1:A:153:ASN:N	0.55	2.65	9	1
1:A:14:GLY:C	1:A:18:ALA:HB2	0.55	2.27	12	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:HG23	0.55	2.31	14	2
1:A:36:LEU:HD23	1:A:37:GLY:N	0.55	2.16	21	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:N	0.55	2.32	9	14
1:A:26:PHE:CD2	1:A:68:TYR:OH	0.55	2.57	32	2
1:A:69:MET:HE2	1:A:116:ASN:CB	0.55	2.31	6	1
1:A:99:LEU:HB2	1:A:101:PHE:CE1	0.55	2.36	25	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB3	0.55	1.77	28	3
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:CB	0.55	2.55	16	3
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:C	0.55	2.26	22	1
1:A:157:ALA:O	1:A:161:GLU:CG	0.55	2.55	39	16
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:CD2	0.55	2.95	3	1
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:ND1	0.55	2.40	37	1
1:A:164:THR:HG22	1:A:165:ILE:N	0.54	2.17	24	8
1:A:42:ALA:HA	1:A:48:ALA:O	0.54	2.01	24	4
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:O	0.54	2.55	9	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HB	0.54	2.37	21	15
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:HD2	0.54	2.27	28	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CZ	0.54	2.75	24	1
1:A:42:ALA:HA	1:A:49:GLU:HA	0.54	1.78	40	2
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.60	26	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CB	0.54	2.55	2	23
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HD11	0.54	1.78	3	4
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:N	0.54	2.39	22	15
1:A:165:ILE:O	1:A:169:ALA:N	0.54	2.24	32	8
1:A:8:VAL:HG23	1:A:91:ILE:O	0.54	2.02	9	5
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB3	0.54	1.78	14	4
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:CB	0.54	2.29	27	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.54	2.86	32	1
1:A:21:ARG:HH21	1:A:27:VAL:HG21	0.54	1.62	33	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:HB3	0.54	1.78	39	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:65:PRO:HA	0.54	2.32	7	28
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:O	0.54	2.25	21	34
1:A:103:ARG:HG3	1:A:104:ILE:N	0.54	2.17	40	3
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HD23	0.54	2.29	12	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HG12	0.54	2.37	18	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD13	0.54	2.37	1	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CG	0.54	2.90	20	3
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.54	2.17	8	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG23	0.54	1.80	25	5
1:A:38:ALA:CB	1:A:52:THR:O	0.54	2.55	40	2
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:CG2	0.54	2.55	37	36
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HD13	0.54	1.78	4	2
1:A:45:ARG:O	1:A:47:GLY:N	0.54	2.40	20	6
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CZ	0.54	2.55	18	2
1:A:100:GLU:HB2	1:A:138:GLY:C	0.54	2.28	25	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:152:GLU:OE1	0.54	2.61	27	1
1:A:161:GLU:N	1:A:163:PRO:HD2	0.54	2.17	40	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	8	4
1:A:103:ARG:CD	1:A:104:ILE:O	0.54	2.56	23	8
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:CD2	0.54	2.85	4	1
1:A:98:ASP:CG	1:A:99:LEU:HD12	0.54	2.26	4	1
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:HG12	0.54	2.00	31	12
1:A:129:ASP:O	1:A:130:PHE:O	0.54	2.24	36	4
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	37	1
1:A:15:ALA:O	1:A:17:TYR:N	0.54	2.40	1	4
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CG2	0.54	2.30	25	21
1:A:180:GLY:C	1:A:181:MET:CG	0.54	2.78	5	2
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:CG1	0.54	2.33	23	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD1	0.54	2.91	18	2
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:CD2	0.54	2.70	13	2
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:ALA:N	0.54	2.71	35	5
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB2	0.54	2.01	2	37
1:A:59:SER:O	1:A:60:LEU:HD23	0.54	2.03	20	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:92:VAL:HG22	0.54	1.78	12	7
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD22	0.54	2.27	23	5
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:HB2	0.54	2.03	26	10
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:CB	0.54	2.55	40	5
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CD2	0.54	2.37	37	1
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CB	0.54	2.56	34	22
1:A:67:CYS:O	1:A:68:TYR:HB2	0.54	2.02	7	40
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.37	35	3
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG21	0.54	2.28	11	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:HD13	0.54	2.03	32	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:93:ILE:HD11	0.54	2.31	36	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CD	0.54	2.56	37	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CG	0.53	2.56	24	14
1:A:165:ILE:C	1:A:165:ILE:CD1	0.53	2.80	10	17
1:A:19:ARG:HG2	1:A:155:THR:HG23	0.53	1.80	11	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:61:VAL:O	0.53	2.03	30	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:HZ	0.53	1.63	34	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:115:HIS:CE1	0.53	2.96	35	1
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:CD1	0.53	2.78	19	5
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD22	0.53	1.63	3	2
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.92	5	3
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.77	30	3
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:O	0.53	2.02	20	4
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG22	0.53	1.63	8	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:22:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG3	0.53	2.38	21	2
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:NE2	0.53	2.41	31	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:181:MET:HA	0.53	1.79	40	1
1:A:191:TRP:C	1:A:191:TRP:CD2	0.53	2.84	8	7
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CG	0.53	2.38	23	28
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.57	12	2
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:CB	0.53	2.26	21	1
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CB	0.53	2.56	27	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD11	0.53	2.32	31	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:52:THR:O	0.53	2.04	40	1
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:H	0.53	2.10	12	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:GLU:CG	1:A:175:LEU:N	0.53	2.72	37	32
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HG12	0.53	1.81	27	7
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CD1	0.53	2.57	7	13
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:N	0.53	2.36	29	12
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.26	29	12
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.77	7	1
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CG	0.53	2.56	26	6
1:A:26:PHE:CG	1:A:68:TYR:OH	0.53	2.58	32	5
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:HB2	0.53	1.80	15	3
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CG1	0.53	2.86	27	3
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:CD2	0.53	2.33	21	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CA	0.53	2.32	23	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG11	0.53	1.79	40	1
1:A:11:GLY:C	1:A:22:HIS:O	0.53	2.52	37	9
1:A:53:GLY:N	1:A:60:LEU:O	0.53	2.41	40	7
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG11	0.53	2.04	1	3
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:CB	0.53	2.56	30	7
1:A:100:GLU:O	1:A:138:GLY:N	0.53	2.41	4	4
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CG2	0.53	2.33	40	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD13	0.53	2.17	18	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:O	0.53	2.57	28	2
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:O	0.53	2.27	23	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:C	0.53	2.67	31	4
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:CG	0.53	2.82	30	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD11	0.53	1.80	33	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:HD21	0.53	1.80	38	1
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:N	0.53	2.67	1	22
1:A:23:ASN:O	1:A:24:LEU:C	0.53	2.52	37	9
1:A:24:LEU:O	1:A:25:GLY:C	0.53	2.52	12	12
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HB	0.53	2.04	23	20
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB2	0.53	1.79	5	4
1:A:41:LYS:N	1:A:50:VAL:O	0.53	2.42	9	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.39	21	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CG1	0.53	2.57	28	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:N	0.53	2.72	40	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CG	0.53	2.62	1	11
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.39	37	4
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ARG:N	0.53	2.41	11	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:C	0.53	2.29	12	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:169:ALA:N	0.53	2.17	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:CB	0.53	2.34	17	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD2	0.53	2.57	30	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD11	0.53	1.80	38	4
1:A:91:ILE:C	1:A:91:ILE:CD1	0.53	2.77	6	9
1:A:168:GLN:CG	1:A:188:VAL:HG13	0.53	2.34	6	2
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:CB	0.53	2.57	11	2
1:A:29:ALA:HB1	1:A:64:LYS:HE3	0.53	1.80	21	1
1:A:172:ALA:CA	1:A:184:ALA:HB1	0.52	2.34	34	7
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:C	0.52	2.53	16	5
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:OE1	0.52	2.04	10	7
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:O	0.52	2.57	27	5
1:A:10:LEU:CD2	1:A:68:TYR:C	0.52	2.82	9	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CB	0.52	2.57	39	13
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:OE1	0.52	2.04	21	3
1:A:21:ARG:CB	1:A:95:ASP:OD2	0.52	2.57	14	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:OG1	0.52	2.27	23	1
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:NE2	0.52	2.67	6	5
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HA	0.52	1.80	13	10
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:HG22	0.52	2.05	9	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HG11	0.52	2.34	38	6
1:A:108:ILE:CD1	1:A:130:PHE:O	0.52	2.58	28	6
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HE2	0.52	1.65	18	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:C	0.52	2.29	25	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:C	0.52	2.28	38	1
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:HB2	0.52	2.04	14	9
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD13	0.52	2.05	34	8
1:A:149:PHE:O	1:A:149:PHE:CD1	0.52	2.62	17	4
1:A:98:ASP:C	1:A:138:GLY:O	0.52	2.53	32	4
1:A:122:VAL:HG23	1:A:127:THR:O	0.52	2.04	28	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:94:HIS:CD2	0.52	2.93	16	5
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:HB3	0.52	2.05	11	8
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:CD1	0.52	2.34	8	3
1:A:72:SER:O	1:A:76:ILE:HD12	0.52	2.04	5	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:HG23	0.52	2.33	5	1
1:A:31:LEU:C	1:A:31:LEU:CD1	0.52	2.79	37	3
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE1	0.52	2.62	33	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CG1	0.52	2.34	22	6
1:A:16:ASN:CG	1:A:17:TYR:N	0.52	2.67	17	1
1:A:45:ARG:C	1:A:47:GLY:N	0.52	2.67	27	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:158:GLU:OE2	0.52	2.62	36	2
1:A:7:VAL:N	1:A:61:VAL:O	0.52	2.36	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:VAL:CG2	1:A:189:HIS:N	0.52	2.72	3	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:180:GLY:O	0.52	2.58	4	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:NZ	0.52	2.20	6	2
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CZ	0.52	2.58	14	2
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:HG22	0.52	2.05	26	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:HG23	0.52	2.35	29	1
1:A:159:ARG:NE	1:A:160:ALA:HB2	0.52	2.19	33	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NH2	0.52	2.68	40	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:HB2	0.52	2.05	40	33
1:A:56:ALA:CB	1:A:174:GLU:O	0.52	2.58	29	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.52	2.92	1	3
1:A:181:MET:O	1:A:185:GLN:N	0.52	2.27	32	16
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HG21	0.52	2.05	7	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:138:GLY:HA3	0.52	2.39	19	2
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.52	2.35	21	3
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD3	0.52	2.04	22	14
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HD13	0.52	2.29	3	5
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:CB	0.52	2.88	6	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB3	0.52	2.05	37	13
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:H	0.52	2.13	16	2
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:CG	0.52	2.83	14	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:NE2	0.52	2.58	17	2
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG11	0.52	1.78	21	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HD2	0.52	2.04	40	1
1:A:108:ILE:O	1:A:130:PHE:O	0.51	2.28	39	5
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CB	0.51	2.58	5	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HG	0.51	2.41	5	3
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CB	0.51	2.36	24	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:CD	0.51	2.30	24	2
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD12	0.51	1.81	31	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HG2	0.51	2.05	40	1
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB2	0.51	2.30	34	11
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HB	0.51	1.80	26	2
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:N	0.51	2.34	24	5
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CD1	0.51	2.58	24	3
1:A:101:PHE:CZ	1:A:137:ILE:HG12	0.51	2.41	18	1
1:A:100:GLU:O	1:A:137:ILE:HA	0.51	2.06	20	2
1:A:80:ALA:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.51	1.83	37	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	18	4
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CE1	0.51	2.78	5	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CD	0.51	2.59	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:NZ	0.51	2.19	29	3
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	16	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:CG	0.51	2.93	35	3
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.93	27	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD1	0.51	2.58	30	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD3	0.51	2.05	38	9
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HB2	0.51	2.35	14	3
1:A:101:PHE:CD1	1:A:137:ILE:HB	0.51	2.41	30	12
1:A:167:GLU:CG	1:A:168:GLN:N	0.51	2.73	36	4
1:A:138:GLY:HA3	1:A:149:PHE:CE2	0.51	2.41	20	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:50:VAL:O	0.51	2.06	22	4
1:A:12:ASN:O	1:A:18:ALA:HB1	0.51	2.05	33	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HG	0.51	1.81	37	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:HB3	0.51	2.06	40	1
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLY:N	0.51	2.67	12	33
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:CB	0.51	2.59	11	9
1:A:26:PHE:CD1	1:A:64:LYS:HE3	0.51	2.41	9	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:HB3	0.51	1.82	19	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:O	0.51	2.29	25	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:80:ALA:HB2	0.51	2.35	12	12
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG1	0.51	2.59	1	4
1:A:43:HIS:N	1:A:48:ALA:O	0.51	2.44	34	13
1:A:85:VAL:CG1	1:A:89:ASN:OD1	0.51	2.59	5	4
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:CD1	0.51	2.57	8	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:OD2	0.51	2.03	9	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:CD1	0.51	2.33	36	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.40	34	3
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.51	2.40	30	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CD	0.51	2.54	21	3
1:A:15:ALA:HB1	1:A:17:TYR:CD2	0.51	2.39	2	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:CB	0.51	2.88	11	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:75:GLN:OE1	0.51	2.58	12	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:ND1	0.51	2.59	28	2
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.94	1	1
1:A:175:LEU:HD23	1:A:183:PRO:HB2	0.51	1.82	33	3
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:CB	0.51	2.58	34	4
1:A:43:HIS:O	1:A:48:ALA:N	0.51	2.44	38	6
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:CB	0.51	2.59	30	4
1:A:165:ILE:HG23	1:A:166:CYS:N	0.51	2.20	18	3
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	0.51	2.30	16	2
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE2	0.51	2.41	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HB2	0.51	2.06	29	1
1:A:99:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.51	2.59	32	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:HB2	0.51	1.83	40	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:C	0.51	2.54	27	19
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HA	0.51	1.83	37	4
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HZ1	0.51	1.65	12	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:CG2	0.51	2.89	22	3
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:C	0.51	2.53	21	2
1:A:129:ASP:CG	1:A:130:PHE:N	0.51	2.66	22	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:29:ALA:N	0.51	2.73	31	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:SG	0.51	2.99	29	1
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HB	0.51	2.05	34	12
1:A:67:CYS:O	1:A:69:MET:N	0.51	2.44	8	32
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:N	0.51	2.74	26	4
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:CB	0.51	2.31	3	5
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:O	0.51	2.64	7	2
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CD1	0.51	2.40	18	3
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:NE2	0.51	2.59	9	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.51	2.44	10	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:O	0.51	2.06	25	1
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CH2	0.51	2.41	25	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:HH21	0.51	1.64	39	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG12	0.50	2.07	19	9
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CB	0.50	2.32	6	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD2	0.50	2.74	8	1
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.40	17	3
1:A:40:PHE:CG	1:A:41:LYS:N	0.50	2.77	40	11
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:O	0.50	2.28	28	5
1:A:65:PRO:HG3	1:A:72:SER:HA	0.50	1.83	6	18
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HB	0.50	2.07	23	29
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG2	0.50	2.59	29	5
1:A:97:LEU:CG	1:A:150:VAL:HG23	0.50	2.36	6	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:HA	0.50	2.06	21	5
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:CD1	0.50	2.36	25	4
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CG	0.50	2.59	13	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:64:LYS:HE3	0.50	2.41	17	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CG	0.50	2.59	22	2
1:A:187:ARG:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.64	31	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB2	0.50	2.36	3	6
1:A:36:LEU:O	1:A:38:ALA:N	0.50	2.44	28	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:CD2	1:A:149:PHE:CZ	0.50	2.99	14	1
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG23	0.50	2.37	32	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:OG1	0.50	2.59	34	1
1:A:44:LYS:O	1:A:46:SER:N	0.50	2.44	17	3
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:CG2	0.50	2.36	39	9
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HB	0.50	1.82	34	1
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:CD	0.50	2.83	40	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:91:ILE:O	0.50	2.60	10	5
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.41	40	6
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB3	0.50	1.82	6	3
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CZ2	0.50	2.41	34	7
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CG	0.50	2.54	38	6
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:H	0.50	1.67	13	4
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:CD	0.50	2.58	37	5
1:A:164:THR:CG2	1:A:165:ILE:N	0.50	2.74	25	3
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:O	0.50	2.30	8	1
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	10	4
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:HB3	0.50	2.37	26	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD1	0.50	2.75	18	1
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:SER:N	0.50	2.73	24	2
1:A:5:LEU:CD2	1:A:89:ASN:OD1	0.50	2.58	26	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CG	0.50	2.64	27	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:CD	0.50	2.59	38	1
1:A:114:GLY:N	1:A:118:LEU:CD1	0.50	2.75	40	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:HD12	0.50	1.82	31	4
1:A:100:GLU:O	1:A:136:GLY:O	0.50	2.30	34	6
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CD	0.50	2.36	22	13
1:A:75:GLN:OE1	1:A:79:LEU:CD1	0.50	2.60	5	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:131:GLN:CG	0.50	2.36	7	2
1:A:147:ALA:O	1:A:151:LEU:HD12	0.50	2.06	11	1
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG2	0.50	2.59	34	2
1:A:28:VAL:CG1	1:A:32:LEU:HD12	0.50	2.36	29	2
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HA	0.50	1.82	36	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HG	0.50	2.36	37	1
1:A:55:SER:O	1:A:56:ALA:C	0.50	2.54	25	15
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:CG1	0.50	2.59	9	5
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:O	0.50	2.28	22	14
1:A:112:GLU:CG	1:A:112:GLU:O	0.50	2.59	16	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG2	0.50	2.60	29	3
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:H	0.50	1.67	30	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:ND2	0.50	2.45	39	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:CD1	0.50	2.60	8	2
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:CG	0.50	2.60	17	3
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.42	10	2
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:CB	0.50	2.59	36	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:HG21	0.50	2.36	23	2
1:A:93:ILE:C	1:A:93:ILE:CD1	0.50	2.83	23	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:CB	0.50	2.89	24	4
1:A:130:PHE:CZ	1:A:132:ARG:NH2	0.50	2.80	24	1
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:N	0.49	2.70	35	25
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.41	8	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CE2	0.49	2.42	33	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:N	0.49	2.75	17	2
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CD1	0.49	2.60	38	2
1:A:106:LEU:HD22	1:A:107:LYS:N	0.49	2.22	34	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:93:ILE:HD13	0.49	2.37	35	1
1:A:170:ALA:O	1:A:173:THR:HG22	0.49	2.05	39	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	31	3
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:O	0.49	2.07	38	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CA	0.49	2.36	21	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:18:ALA:HB2	0.49	2.32	25	1
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HB3	0.49	2.42	38	2
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:C	0.49	2.55	27	2
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD1	0.49	2.60	30	1
1:A:110:GLY:O	1:A:111:GLY:C	0.49	2.55	30	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CD	0.49	2.60	31	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:CD	0.49	2.76	32	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:CG	0.49	2.37	39	3
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CD	0.49	2.54	13	6
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:H	0.49	2.14	38	25
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ2	0.49	1.66	5	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG23	0.49	2.32	29	3
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:HB3	0.49	2.08	32	2
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HA	0.49	2.42	33	7
1:A:76:ILE:HG23	1:A:80:ALA:HB2	0.49	1.83	21	6
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE2	0.49	2.08	40	2
1:A:155:THR:CG2	1:A:156:PRO:HD3	0.49	2.37	26	1
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:OG1	0.49	2.28	33	2
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:N	0.49	2.45	1	32
1:A:108:ILE:HG13	1:A:109:GLY:N	0.49	2.22	36	26
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.42	35	4
1:A:113:GLY:CA	1:A:134:ARG:NH2	0.49	2.75	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ALA:O	1:A:16:ASN:C	0.49	2.55	10	5
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD23	0.49	2.37	10	1
1:A:21:ARG:HH12	1:A:27:VAL:HG21	0.49	1.68	13	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:NE	0.49	2.46	19	1
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CD	0.49	2.56	23	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:HD11	0.49	1.84	24	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:C	0.49	2.31	34	1
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.49	2.61	17	4
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:CB	0.49	2.96	4	6
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD2	0.49	2.07	35	10
1:A:31:LEU:HD11	1:A:35:ARG:NH1	0.49	2.23	19	1
1:A:31:LEU:O	1:A:35:ARG:N	0.49	2.46	22	2
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	35	2
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.49	2.91	28	2
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD13	0.49	1.67	26	3
1:A:174:GLU:CD	1:A:178:GLU:OE1	0.49	2.56	2	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:CG	0.49	2.85	7	4
1:A:24:LEU:O	1:A:27:VAL:N	0.49	2.46	21	7
1:A:105:ARG:CB	1:A:134:ARG:O	0.49	2.61	32	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HA	0.49	2.38	36	1
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:HB3	0.49	2.08	21	22
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.49	2.43	3	2
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG22	0.49	2.07	28	2
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:CB	0.49	2.38	24	2
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:188:VAL:O	0.49	2.46	22	5
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:CB	0.49	2.37	15	20
1:A:97:LEU:C	1:A:138:GLY:O	0.49	2.56	27	3
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:ND1	0.49	2.71	4	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG23	0.49	2.22	15	2
1:A:156:PRO:C	1:A:158:GLU:N	0.49	2.70	14	7
1:A:3:GLU:CG	1:A:3:GLU:O	0.49	2.61	33	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:151:LEU:CD1	0.49	2.91	34	1
1:A:11:GLY:CA	1:A:23:ASN:HA	0.48	2.38	25	5
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:C	0.48	2.33	20	2
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:CB	0.48	2.61	25	4
1:A:100:GLU:OE1	1:A:102:GLY:N	0.48	2.46	9	1
1:A:98:ASP:OD2	1:A:99:LEU:HD13	0.48	2.08	17	1
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG23	0.48	1.85	20	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:174:GLU:O	0.48	2.08	29	1
1:A:112:GLU:O	1:A:113:GLY:C	0.48	2.56	24	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PHE:HB3	1:A:158:GLU:N	0.48	2.23	37	3
1:A:6:LEU:O	1:A:91:ILE:HG23	0.48	2.08	15	5
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:OG1	0.48	2.28	30	7
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CZ3	0.48	2.43	5	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HB	0.48	1.86	6	1
1:A:119:ARG:O	1:A:123:ALA:N	0.48	2.46	11	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:CD2	0.48	2.66	18	1
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.08	22	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:62:LEU:C	0.48	2.85	36	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CB	0.48	2.61	37	2
1:A:45:ARG:NH2	1:A:83:TYR:CE2	0.48	2.82	40	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CD2	0.48	2.43	18	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB2	0.48	2.07	28	6
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:N	0.48	2.81	32	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:HB2	0.48	2.43	37	1
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:N	0.48	2.46	37	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:150:VAL:O	0.48	2.31	39	1
1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:CE	0.48	2.38	34	2
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:N	0.48	2.47	25	9
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:NH1	0.48	2.46	15	2
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG2	0.48	2.33	24	4
1:A:158:GLU:CD	1:A:162:VAL:HG23	0.48	2.33	21	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:170:ALA:HB1	0.48	1.85	23	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.42	24	1
1:A:100:GLU:CB	1:A:137:ILE:C	0.48	2.86	25	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.48	2.90	34	1
1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CD1	0.48	2.67	35	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HG12	0.48	1.85	1	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CG1	0.48	2.56	3	2
1:A:161:GLU:OE1	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.09	26	2
1:A:127:THR:O	1:A:127:THR:CG2	0.48	2.60	9	3
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:HA	0.48	2.38	29	4
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:O	0.48	2.09	23	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:129:ASP:C	0.48	2.34	31	2
1:A:36:LEU:CD1	1:A:54:ARG:O	0.48	2.61	27	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:CB	0.48	2.91	35	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:CB	0.48	2.62	4	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE2	0.48	2.67	8	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CD	0.48	2.91	21	2
1:A:92:VAL:HG12	1:A:132:ARG:CG	0.48	2.38	24	1
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.44	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:CA	0.48	2.38	1	2
1:A:127:THR:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.96	27	2
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:N	0.48	2.71	20	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG23	0.48	2.08	20	2
1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:OE1	0.48	2.61	28	1
1:A:110:GLY:C	1:A:132:ARG:NH1	0.48	2.72	32	1
1:A:36:LEU:HD12	1:A:54:ARG:N	0.48	2.23	40	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:184:ALA:CB	0.48	2.92	40	1
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:OG	0.48	2.32	27	6
1:A:7:VAL:O	1:A:62:LEU:HA	0.48	2.09	9	4
1:A:50:VAL:CA	1:A:62:LEU:O	0.48	2.61	9	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA3	0.48	2.09	36	3
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:OD1	0.48	2.61	40	3
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CE1	0.48	3.02	14	1
1:A:99:LEU:O	1:A:101:PHE:N	0.48	2.45	23	1
1:A:159:ARG:O	1:A:162:VAL:HG22	0.48	2.09	40	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:N	0.48	2.47	3	18
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:O	0.48	2.09	17	4
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HB	0.48	2.08	26	4
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD21	0.48	1.84	28	3
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CG	0.48	2.56	18	2
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:N	0.48	2.44	35	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ1	0.48	1.68	25	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE2	0.48	2.67	37	1
1:A:161:GLU:HA	1:A:164:THR:HB	0.48	1.84	20	16
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	30	5
1:A:62:LEU:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.48	2.77	5	2
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:C	0.48	2.57	6	1
1:A:128:LYS:HD2	1:A:128:LYS:C	0.48	2.34	21	3
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:C	0.48	2.82	12	1
1:A:4:PRO:HB3	1:A:59:SER:CB	0.48	2.39	14	1
1:A:94:HIS:O	1:A:134:ARG:HA	0.48	2.08	37	3
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG21	0.48	2.38	25	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:156:PRO:HD3	0.48	2.09	26	1
1:A:128:LYS:C	1:A:129:ASP:CG	0.48	2.82	30	4
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HG22	0.48	1.86	37	2
1:A:96:ASP:O	1:A:135:ILE:O	0.47	2.32	36	13
1:A:41:LYS:C	1:A:49:GLU:OE2	0.47	2.57	19	4
1:A:55:SER:O	1:A:57:GLY:N	0.47	2.46	12	10
1:A:21:ARG:NH1	1:A:137:ILE:HG22	0.47	2.24	8	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG22	0.47	2.38	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:NE	0.47	2.46	33	3
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG12	0.47	1.84	20	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:HG23	0.47	2.08	21	1
1:A:111:GLY:C	1:A:113:GLY:N	0.47	2.71	22	2
1:A:12:ASN:OD1	1:A:14:GLY:N	0.47	2.47	25	3
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:CB	0.47	2.62	28	1
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:HA3	0.47	2.39	32	1
1:A:154:PHE:HB2	1:A:158:GLU:CD	0.47	2.34	33	1
1:A:111:GLY:N	1:A:132:ARG:HH12	0.47	2.05	35	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:HG3	0.47	2.08	38	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:51:ALA:N	0.47	2.24	1	4
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG13	0.47	1.85	3	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CB	0.47	2.62	13	7
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:OD1	0.47	2.32	40	5
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HG	0.47	2.43	7	1
1:A:18:ALA:O	1:A:21:ARG:N	0.47	2.47	8	4
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:CG1	0.47	2.92	38	5
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG23	0.47	2.09	11	2
1:A:101:PHE:CD1	1:A:138:GLY:N	0.47	2.82	19	2
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB3	0.47	2.09	27	4
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.44	31	1
1:A:69:MET:HE3	1:A:117:GLY:H	0.47	1.70	33	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NE	0.47	2.73	33	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:NH2	0.47	2.72	36	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:CZ	0.47	2.87	36	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CA	0.47	2.98	3	6
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG12	0.47	2.35	9	2
1:A:98:ASP:C	1:A:98:ASP:OD1	0.47	2.56	9	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:151:LEU:CD2	0.47	2.92	11	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HA	0.47	1.85	21	1
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.43	24	1
1:A:55:SER:HB3	1:A:177:ILE:HD13	0.47	1.86	25	1
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD21	0.47	1.67	27	1
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:HB2	0.47	2.09	37	2
1:A:91:ILE:CG1	1:A:91:ILE:O	0.47	2.62	23	22
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:CG2	0.47	2.92	14	2
1:A:87:PRO:C	1:A:129:ASP:O	0.47	2.57	38	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:OG1	0.47	2.09	17	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG13	0.47	2.39	21	2
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CZ	0.47	2.63	22	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD13	0.47	1.85	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:CB	0.47	2.40	29	1
1:A:175:LEU:HA	1:A:178:GLU:HB2	0.47	1.86	39	1
1:A:76:ILE:HD12	1:A:80:ALA:HB2	0.47	1.86	2	4
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:ND1	0.47	2.47	11	2
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HA	0.47	1.85	20	1
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CE2	0.47	2.44	37	1
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:N	0.47	2.46	36	17
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:C	0.47	2.57	3	10
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB2	0.47	2.10	24	18
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.97	18	1
1:A:138:GLY:C	1:A:149:PHE:CE2	0.47	2.93	20	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB2	0.47	2.09	22	3
1:A:55:SER:CB	1:A:177:ILE:HD13	0.47	2.40	25	1
1:A:14:GLY:CA	1:A:18:ALA:HB2	0.47	2.39	33	1
1:A:159:ARG:HE	1:A:160:ALA:HB2	0.47	1.69	33	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:CYS:C	0.47	2.58	16	10
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:CB	0.47	2.93	15	14
1:A:155:THR:CB	1:A:156:PRO:HD3	0.47	2.39	37	7
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:O	0.47	2.33	38	8
1:A:21:ARG:O	1:A:23:ASN:N	0.47	2.48	21	7
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:CD1	0.47	2.62	12	3
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:O	0.47	2.62	35	6
1:A:45:ARG:HG2	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.44	17	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:N	0.47	2.46	21	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:CB	0.47	2.40	21	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD23	0.47	1.87	27	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD1	0.47	2.48	30	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:NE1	0.47	2.63	32	1
1:A:4:PRO:CB	1:A:59:SER:OG	0.47	2.62	40	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:12:ASN:C	0.47	2.57	25	3
1:A:55:SER:OG	1:A:60:LEU:CD2	0.47	2.63	27	2
1:A:36:LEU:O	1:A:37:GLY:C	0.47	2.58	28	2
1:A:91:ILE:CD1	1:A:93:ILE:HG22	0.47	2.40	14	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HG	0.47	2.08	24	4
1:A:21:ARG:NE	1:A:150:VAL:O	0.47	2.48	24	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD2	0.47	2.82	22	1
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:O	0.47	2.32	29	3
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CD1	0.47	2.63	1	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:133:VAL:O	0.47	2.63	1	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.47	2.23	20	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:GLY:O	1:A:111:GLY:N	0.47	2.47	15	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH1	0.47	2.47	18	1
1:A:176:LEU:HA	1:A:180:GLY:O	0.47	2.08	19	3
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:CG2	0.47	2.63	22	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:HB	0.47	2.10	25	2
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:CZ	0.47	2.88	33	2
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:CD1	0.47	2.62	35	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:165:ILE:C	0.47	2.87	40	1
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:HB3	0.47	2.40	13	18
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.45	5	3
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NE	0.47	2.48	23	4
1:A:18:ALA:O	1:A:19:ARG:C	0.47	2.58	7	5
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:O	0.47	2.33	22	3
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NH2	0.47	2.48	40	3
1:A:15:ALA:CA	1:A:18:ALA:HB3	0.47	2.40	31	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:123:ALA:N	0.46	2.77	31	10
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.40	31	7
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD11	0.46	1.87	8	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:CA	0.46	2.39	9	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	10	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.48	12	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.62	22	2
1:A:28:VAL:HG13	1:A:29:ALA:N	0.46	2.25	23	1
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:N	0.46	2.70	23	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CG	0.46	2.58	25	2
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD21	0.46	1.87	29	2
1:A:18:ALA:C	1:A:20:THR:N	0.46	2.73	20	7
1:A:36:LEU:C	1:A:38:ALA:N	0.46	2.69	28	3
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:C	0.46	2.58	17	9
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:CB	0.46	2.63	40	5
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG2	0.46	2.35	16	3
1:A:7:VAL:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.46	1.88	17	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:CG2	0.46	2.64	21	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.83	26	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:C	0.46	2.34	36	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:63:ALA:HB2	0.46	2.39	38	1
1:A:44:LYS:C	1:A:46:SER:N	0.46	2.72	10	3
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:HG22	0.46	2.39	35	3
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:NE2	0.46	2.25	4	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.99	8	1
1:A:112:GLU:O	1:A:115:HIS:ND1	0.46	2.48	22	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:PHE:CD1	1:A:152:GLU:HG3	0.46	2.45	15	4
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.49	21	1
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CG	0.46	2.63	27	1
1:A:64:LYS:NZ	1:A:68:TYR:OH	0.46	2.48	4	1
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:HB2	0.46	2.41	6	1
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:N	0.46	2.49	35	9
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG3	0.46	2.35	24	4
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:OE2	0.46	2.64	20	2
1:A:112:GLU:O	1:A:112:GLU:CD	0.46	2.58	16	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	29	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.41	36	2
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.26	12	5
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:HD21	0.46	1.70	12	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HB3	0.46	2.10	17	9
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG3	0.46	2.35	17	2
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:N	0.46	2.49	11	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:N	0.46	2.48	22	1
1:A:104:ILE:CG1	1:A:169:ALA:HB2	0.46	2.41	38	2
1:A:69:MET:HE2	1:A:70:ASN:CB	0.46	2.36	35	1
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CG2	0.46	2.63	11	5
1:A:26:PHE:CZ	1:A:64:LYS:NZ	0.46	2.70	7	1
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:HD3	0.46	2.26	27	3
1:A:105:ARG:O	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.49	17	1
1:A:175:LEU:CD2	1:A:183:PRO:HB2	0.46	2.41	19	4
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.64	21	2
1:A:21:ARG:HH12	1:A:150:VAL:HG22	0.46	1.71	30	1
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.41	37	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:184:ALA:CB	0.46	2.40	32	2
1:A:37:GLY:C	1:A:38:ALA:O	0.46	2.57	26	3
1:A:111:GLY:O	1:A:113:GLY:N	0.46	2.49	27	4
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:CG2	0.46	2.93	29	1
1:A:83:TYR:O	1:A:85:VAL:HG23	0.46	2.10	29	1
1:A:105:ARG:CA	1:A:134:ARG:O	0.46	2.63	34	6
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:53:GLY:HA3	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.41	9	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:O	0.46	2.59	34	2
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CB	0.46	2.41	25	3
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:H	0.46	1.70	14	4
1:A:21:ARG:CD	1:A:101:PHE:CE1	0.46	2.99	20	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:O	0.46	2.58	21	2
1:A:105:ARG:C	1:A:134:ARG:O	0.46	2.59	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:OE1	0.46	2.34	29	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:H	0.46	1.71	36	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:109:GLY:N	0.46	2.77	8	8
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CB	0.46	2.41	13	16
1:A:23:ASN:HB3	1:A:27:VAL:HG23	0.46	1.87	10	5
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB3	0.46	2.40	28	4
1:A:168:GLN:HB3	1:A:188:VAL:HG13	0.46	1.86	14	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.26	16	1
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:CG2	0.46	2.64	23	1
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:OD1	0.46	2.59	24	1
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:HB1	0.46	1.88	38	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:112:GLU:C	0.46	2.59	30	1
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD13	0.46	2.26	4	1
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:HA2	0.46	2.11	8	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.62	8	1
1:A:74:ARG:NH1	1:A:74:ARG:HB2	0.46	2.27	18	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CD	0.46	2.64	19	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:188:VAL:HG13	0.46	2.36	26	1
1:A:128:LYS:HE2	1:A:130:PHE:CE1	0.46	2.45	29	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH2	0.46	2.49	33	1
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:CD1	0.45	2.84	18	2
1:A:64:LYS:O	1:A:64:LYS:HG2	0.45	2.11	12	4
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:O	0.45	2.34	9	6
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CG1	0.45	2.64	11	1
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NE	0.45	2.84	11	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.60	18	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:NE	0.45	2.48	24	2
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:CB	0.45	2.40	21	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:CD	0.45	2.41	27	2
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HA	0.45	2.42	23	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:C	0.45	2.35	27	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:C	0.45	2.59	29	2
1:A:106:LEU:CD1	1:A:106:LEU:C	0.45	2.88	30	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:O	0.45	2.10	31	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:151:LEU:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:137:ILE:HD13	0.45	1.88	35	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HD22	0.45	1.86	36	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	40	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HA	0.45	1.88	40	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.91	40	1
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG3	0.45	2.41	13	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:CD	0.45	2.60	2	1
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:N	0.45	2.48	4	7
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:HA2	0.45	2.11	12	6
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:O	0.45	2.49	9	1
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.57	9	1
1:A:21:ARG:N	1:A:21:ARG:HD3	0.45	2.26	11	1
1:A:181:MET:O	1:A:182:GLU:C	0.45	2.60	38	3
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CZ2	0.45	2.46	21	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG2	0.45	1.87	30	1
1:A:48:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HB3	0.45	1.87	31	1
1:A:95:ASP:HB2	1:A:137:ILE:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:118:LEU:HD21	0.45	1.89	38	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:CD2	0.45	2.42	38	1
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HG13	0.45	2.36	39	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.94	39	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE3	0.45	2.41	31	4
1:A:49:GLU:O	1:A:64:LYS:N	0.45	2.48	6	2
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD11	0.45	2.12	34	2
1:A:125:LEU:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.46	10	2
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE1	0.45	3.00	19	1
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:HB2	0.45	1.88	21	4
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:HD2	0.45	2.26	25	2
1:A:115:HIS:N	1:A:118:LEU:HD12	0.45	2.26	40	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:N	0.45	2.49	10	4
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG13	0.45	2.11	9	3
1:A:10:LEU:HG	1:A:10:LEU:O	0.45	2.12	34	4
1:A:47:GLY:O	1:A:75:GLN:NE2	0.45	2.50	18	2
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	16	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:135:ILE:N	0.45	2.27	18	1
1:A:151:LEU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.34	18	1
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:CD	0.45	2.89	21	1
1:A:25:GLY:CA	1:A:93:ILE:HD11	0.45	2.42	23	1
1:A:92:VAL:CG1	1:A:132:ARG:HG2	0.45	2.42	24	1
1:A:102:GLY:N	1:A:136:GLY:O	0.45	2.45	25	1
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD22	0.45	2.46	36	1
1:A:23:ASN:O	1:A:26:PHE:N	0.45	2.49	40	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:108:ILE:C	0.45	2.89	22	4
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD2	0.45	3.00	5	1
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:N	0.45	2.73	16	2
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NE	0.45	2.49	33	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ILE:HD13	1:A:76:ILE:N	0.45	2.26	13	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:115:HIS:NE2	0.45	2.49	16	2
1:A:100:GLU:C	1:A:138:GLY:N	0.45	2.75	28	2
1:A:102:GLY:HA3	1:A:161:GLU:CG	0.45	2.42	24	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:95:ASP:OD2	0.45	2.50	30	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:45:ARG:N	0.45	2.84	34	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:HB	0.45	2.12	39	1
1:A:137:ILE:HG12	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.41	3	2
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:CB	0.45	2.42	5	2
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:CD2	0.45	2.69	5	1
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:ND2	0.45	2.27	12	2
1:A:93:ILE:HD13	1:A:135:ILE:HD11	0.45	1.88	40	2
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.48	23	3
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CA	0.45	2.42	25	4
1:A:21:ARG:HH11	1:A:22:HIS:N	0.45	2.10	17	1
1:A:138:GLY:CA	1:A:149:PHE:CE2	0.45	3.00	20	1
1:A:40:PHE:HD2	1:A:50:VAL:C	0.45	2.18	29	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.41	24	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:HA3	0.45	1.87	32	1
1:A:75:GLN:CG	1:A:76:ILE:N	0.45	2.79	37	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:CG2	0.45	2.38	39	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:117:GLY:CA	0.45	2.42	3	2
1:A:91:ILE:CD1	1:A:91:ILE:O	0.45	2.64	14	3
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.36	6	3
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:O	0.45	2.34	8	4
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG13	0.45	2.37	8	2
1:A:17:TYR:C	1:A:19:ARG:N	0.45	2.74	29	2
1:A:44:LYS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.49	10	5
1:A:87:PRO:O	1:A:130:PHE:HA	0.45	2.12	29	4
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:CB	0.45	2.65	11	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:63:ALA:CB	0.45	2.42	12	2
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:CG2	0.45	2.42	27	3
1:A:5:LEU:CD1	1:A:89:ASN:O	0.45	2.61	14	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:TYR:CD1	0.45	3.05	14	1
1:A:156:PRO:O	1:A:157:ALA:C	0.45	2.60	35	5
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.42	34	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:CE	0.45	2.42	39	3
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.93	27	2
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:OE1	0.45	2.65	37	1
1:A:103:ARG:CG	1:A:104:ILE:N	0.45	2.80	40	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:92:VAL:CG1	0.45	2.42	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:SER:C	1:A:79:LEU:HD11	0.45	2.36	6	3
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG1	0.45	2.65	8	2
1:A:74:ARG:O	1:A:75:GLN:C	0.45	2.60	27	5
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD23	0.45	2.27	17	2
1:A:12:ASN:N	1:A:23:ASN:HA	0.45	2.26	25	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HD22	0.45	2.42	27	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:18:ALA:HB2	0.45	1.88	33	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CD1	0.45	2.41	40	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:CG1	0.45	2.41	37	2
1:A:19:ARG:C	1:A:20:THR:OG1	0.45	2.60	12	1
1:A:109:GLY:O	1:A:132:ARG:NH1	0.45	2.50	13	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:O	0.45	2.65	15	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:137:ILE:C	0.45	2.94	19	1
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD13	0.45	2.11	22	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:CG2	0.45	2.89	27	3
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:NE2	0.45	2.50	28	1
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.45	2.47	31	1
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD12	0.45	2.36	36	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:135:ILE:HG12	0.45	2.41	38	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HG2	0.45	2.41	39	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.45	2.42	1	1
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:HD3	0.45	2.37	2	1
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:OG	0.45	2.35	8	1
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:HB2	0.45	2.13	10	5
1:A:21:ARG:N	1:A:21:ARG:CD	0.45	2.80	11	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:HG2	0.45	1.89	36	4
1:A:159:ARG:HG3	1:A:160:ALA:N	0.45	2.27	17	2
1:A:87:PRO:CA	1:A:130:PHE:CD1	0.45	3.00	18	1
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:CB	0.45	2.72	19	1
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:HD2	0.45	2.37	29	2
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HB	0.45	1.88	29	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CD2	0.45	3.05	33	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:N	0.45	2.46	34	2
1:A:69:MET:CG	1:A:117:GLY:HA3	0.44	2.42	37	3
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CZ	0.44	2.42	1	2
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:H	0.44	2.25	7	8
1:A:33:ALA:O	1:A:37:GLY:C	0.44	2.60	3	2
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.42	26	5
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.44	2.42	7	3
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:CA	0.44	2.65	8	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:O	0.44	2.35	30	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CG	0.44	3.00	15	1
1:A:136:GLY:C	1:A:137:ILE:HG23	0.44	2.37	23	1
1:A:101:PHE:N	1:A:101:PHE:CD1	0.44	2.85	25	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD21	0.44	2.42	29	2
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:HD12	0.44	2.37	37	1
1:A:103:ARG:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.44	2.48	1	1
1:A:100:GLU:OE2	1:A:101:PHE:N	0.44	2.50	10	3
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:CE1	0.44	2.95	18	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:HD23	0.44	2.42	24	1
1:A:58:ARG:HB3	1:A:177:ILE:CG2	0.44	2.42	34	1
1:A:33:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	0.44	1.88	8	2
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:HB2	0.44	2.11	8	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:CA	0.44	2.41	30	4
1:A:71:GLU:O	1:A:71:GLU:OE1	0.44	2.35	26	4
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:HB3	0.44	1.90	13	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:64:LYS:NZ	0.44	2.27	19	1
1:A:191:TRP:CE3	1:A:191:TRP:HA	0.44	2.47	19	1
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:N	0.44	2.49	21	2
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:CB	0.44	2.38	35	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:49:GLU:OE1	0.44	2.70	27	1
1:A:64:LYS:CD	1:A:64:LYS:N	0.44	2.80	27	1
1:A:66:ARG:HB2	1:A:71:GLU:OE2	0.44	2.12	27	1
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:NE2	0.44	2.80	4	1
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HA	0.44	2.12	33	5
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HG12	0.44	1.90	12	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:ALA:O	0.44	2.13	13	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CA	0.44	2.43	19	4
1:A:87:PRO:C	1:A:89:ASN:N	0.44	2.76	13	2
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:HB2	0.44	2.42	21	1
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:NE1	0.44	2.81	22	2
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:CG	0.44	2.37	25	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:68:TYR:OH	0.44	2.35	27	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CB	0.44	2.43	31	1
1:A:188:VAL:O	1:A:190:ALA:N	0.44	2.51	8	5
1:A:63:ALA:O	1:A:64:LYS:HB3	0.44	2.12	17	7
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.44	2.48	18	3
1:A:165:ILE:O	1:A:168:GLN:N	0.44	2.51	16	2
1:A:75:GLN:CD	1:A:75:GLN:N	0.44	2.75	29	1
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CB	0.44	3.01	30	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.27	30	1
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:HB2	0.44	2.13	35	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:CB	0.44	2.65	40	1
1:A:157:ALA:C	1:A:161:GLU:OE1	0.44	2.61	40	1
1:A:66:ARG:O	1:A:67:CYS:C	0.44	2.61	1	8
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HG2	0.44	2.12	24	16
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CE2	0.44	3.05	3	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CG1	0.44	2.43	10	2
1:A:182:GLU:O	1:A:186:ASN:CG	0.44	2.60	30	4
1:A:21:ARG:NE	1:A:158:GLU:OE1	0.44	2.50	16	2
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:C	0.44	2.75	17	1
1:A:99:LEU:C	1:A:138:GLY:H	0.44	2.20	23	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:NE2	0.44	2.80	25	1
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG2	0.44	2.42	29	1
1:A:49:GLU:CD	1:A:64:LYS:O	0.44	2.60	5	1
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:N	0.44	2.76	31	7
1:A:46:SER:O	1:A:75:GLN:NE2	0.44	2.47	17	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HG3	0.44	2.13	22	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:O	0.44	2.13	23	1
1:A:100:GLU:CA	1:A:138:GLY:N	0.44	2.80	23	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:CG	0.44	2.60	24	1
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.96	26	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:C	0.44	2.76	27	1
1:A:51:ALA:O	1:A:62:LEU:N	0.44	2.48	32	1
1:A:20:THR:HG22	1:A:152:GLU:C	0.44	2.38	34	1
1:A:191:TRP:N	1:A:191:TRP:HE3	0.44	2.11	1	3
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:CG2	0.44	2.42	26	2
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CG	0.44	2.88	4	1
1:A:100:GLU:OE2	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.50	15	1
1:A:7:VAL:CB	1:A:62:LEU:HD22	0.44	2.43	27	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HB	0.44	2.48	27	2
1:A:105:ARG:HG3	1:A:105:ARG:O	0.44	2.13	36	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HB	0.44	2.42	4	5
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.44	2.48	5	3
1:A:178:GLU:C	1:A:178:GLU:OE1	0.44	2.61	5	2
1:A:19:ARG:CG	1:A:155:THR:HG23	0.44	2.43	11	1
1:A:168:GLN:C	1:A:168:GLN:CD	0.44	2.86	19	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HG23	0.44	2.47	22	1
1:A:97:LEU:C	1:A:138:GLY:HA3	0.44	2.38	32	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:HB3	0.44	2.43	35	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CG1	0.43	2.42	8	2
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	8	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:135:ILE:HD11	0.43	2.42	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:THR:O	1:A:168:GLN:NE2	0.43	2.51	17	1
1:A:108:ILE:O	1:A:108:ILE:HD13	0.43	2.12	37	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CG	0.43	2.66	21	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD23	0.43	2.43	32	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:HB3	0.43	2.13	37	2
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG22	0.43	2.37	38	1
1:A:132:ARG:O	1:A:133:VAL:HG23	0.43	2.13	39	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:95:ASP:H	0.43	2.31	25	8
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:CB	0.43	2.96	34	3
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.43	9	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:N	0.43	2.27	9	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:154:PHE:N	0.43	2.51	14	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:94:HIS:CG	0.43	3.01	39	2
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:CB	0.43	2.66	25	1
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD13	0.43	1.90	26	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:H	0.43	2.26	26	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NH1	0.43	2.51	30	1
1:A:160:ALA:HA	1:A:163:PRO:CG	0.43	2.43	40	1
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:CD	0.43	2.94	40	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:HB3	0.43	2.43	17	13
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:HB2	0.43	2.14	37	3
1:A:72:SER:O	1:A:73:GLY:C	0.43	2.62	4	8
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:CG	0.43	2.96	7	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG12	0.43	2.42	31	5
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:ND2	0.43	2.74	23	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:94:HIS:N	0.43	2.28	23	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB3	0.43	2.13	23	2
1:A:65:PRO:HG3	1:A:75:GLN:HB2	0.43	1.90	31	1
1:A:49:GLU:HG3	1:A:50:VAL:N	0.43	2.27	3	10
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:O	0.43	2.14	1	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:17:TYR:OH	0.43	2.51	2	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:ND1	0.43	2.29	9	1
1:A:69:MET:SD	1:A:70:ASN:OD1	0.43	2.77	9	1
1:A:100:GLU:HB2	1:A:137:ILE:C	0.43	2.38	25	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HB	0.43	2.49	27	1
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:HE3	0.43	2.38	34	1
1:A:43:HIS:C	1:A:48:ALA:O	0.43	2.61	40	1
1:A:168:GLN:C	1:A:188:VAL:CG1	0.43	2.92	38	3
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:HD2	0.43	2.29	31	2
1:A:113:GLY:O	1:A:114:GLY:C	0.43	2.60	20	2
1:A:66:ARG:CB	1:A:71:GLU:OE2	0.43	2.66	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:O	1:A:77:GLY:N	0.43	2.51	27	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:CG2	0.43	2.63	16	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:92:VAL:CG2	0.43	2.43	21	1
1:A:168:GLN:HB2	1:A:191:TRP:CH2	0.43	2.48	24	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:104:ILE:O	0.43	2.14	26	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CE1	0.43	3.02	27	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:O	0.43	2.13	38	1
1:A:69:MET:C	1:A:117:GLY:CA	0.43	2.91	39	1
1:A:65:PRO:CG	1:A:72:SER:HA	0.43	2.44	6	2
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:HB3	0.43	2.14	11	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:169:ALA:N	0.43	2.82	12	1
1:A:185:GLN:O	1:A:190:ALA:N	0.43	2.52	37	2
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:N	0.43	2.52	24	1
1:A:152:GLU:HG2	1:A:153:ASN:N	0.43	2.29	27	1
1:A:156:PRO:O	1:A:158:GLU:N	0.43	2.52	31	3
1:A:59:SER:OG	1:A:60:LEU:N	0.43	2.52	33	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CE1	0.43	2.49	35	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD13	0.43	2.44	37	1
1:A:9:GLY:O	1:A:64:LYS:CB	0.43	2.67	37	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD21	0.43	2.43	38	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG23	0.43	2.44	40	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:119:ARG:NH2	0.43	2.52	4	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA2	0.43	2.14	31	2
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CD	0.43	2.66	7	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD23	0.43	1.91	12	1
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:HD1	0.43	2.21	23	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HG3	0.43	2.14	25	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:HG3	0.43	2.43	30	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:161:GLU:HG3	0.43	2.44	35	1
1:A:181:MET:C	1:A:183:PRO:HD2	0.43	2.38	2	4
1:A:128:LYS:CG	1:A:128:LYS:O	0.43	2.67	8	1
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:NE2	0.43	2.51	11	2
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	0.43	2.28	15	2
1:A:127:THR:C	1:A:128:LYS:HG2	0.43	2.39	20	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:118:LEU:CD1	0.43	3.02	21	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:168:GLN:CA	0.43	2.67	21	1
1:A:91:ILE:CB	1:A:131:GLN:HG2	0.43	2.44	24	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HA	0.43	2.43	39	3
1:A:17:TYR:HB3	1:A:151:LEU:HD11	0.43	1.89	29	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CD1	0.43	2.48	30	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.44	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.43	2.46	5	3
1:A:152:GLU:OE1	1:A:153:ASN:N	0.43	2.50	9	1
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:N	0.43	2.48	10	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:113:GLY:N	0.43	2.77	12	1
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:HG2	0.43	2.14	23	2
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	25	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	0.43	2.13	30	1
1:A:36:LEU:O	1:A:36:LEU:CD1	0.43	2.55	30	1
1:A:19:ARG:O	1:A:158:GLU:OE1	0.43	2.37	35	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:70:ASN:N	0.43	2.29	3	5
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB2	0.43	2.14	9	3
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HG23	0.43	2.46	22	1
1:A:99:LEU:HG	1:A:101:PHE:CE1	0.43	2.49	23	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:125:LEU:HD22	0.43	1.89	24	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG12	0.43	2.14	28	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CE2	0.43	2.49	32	1
1:A:106:LEU:HD21	1:A:181:MET:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.42	2.67	11	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:CG2	0.42	2.64	11	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE2	0.42	2.38	13	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:24:LEU:CD2	0.42	2.96	15	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.42	3.00	18	1
1:A:92:VAL:O	1:A:132:ARG:HA	0.42	2.14	21	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:C	0.42	2.39	29	1
1:A:88:ALA:HB2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.44	32	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD11	0.42	2.29	34	1
1:A:14:GLY:C	1:A:18:ALA:CB	0.42	2.91	36	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:11:GLY:N	0.42	2.30	1	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:113:GLY:N	0.42	2.52	24	2
1:A:43:HIS:C	1:A:44:LYS:O	0.42	2.61	8	2
1:A:152:GLU:CG	1:A:153:ASN:N	0.42	2.82	37	2
1:A:121:VAL:CG1	1:A:132:ARG:NH2	0.42	2.82	15	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:101:PHE:CE1	0.42	2.48	20	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:O	0.42	2.37	24	1
1:A:99:LEU:CB	1:A:101:PHE:CE1	0.42	3.02	25	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:HA	0.42	1.91	25	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:CD	0.42	2.97	26	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:129:ASP:HB2	0.42	2.43	27	1
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.44	27	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE3	0.42	2.50	30	1
1:A:157:ALA:O	1:A:161:GLU:CD	0.42	2.61	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:CD1	0.42	2.44	40	1
1:A:69:MET:HE3	1:A:116:ASN:HB2	0.42	1.92	1	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:92:VAL:HG13	0.42	2.44	17	2
1:A:47:GLY:C	1:A:48:ALA:O	0.42	2.61	38	6
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:ND2	0.42	2.28	7	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:69:MET:HA	0.42	2.45	9	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.45	10	3
1:A:102:GLY:HA2	1:A:165:ILE:HG21	0.42	1.92	10	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:166:CYS:N	0.42	2.29	20	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:63:ALA:CB	0.42	2.44	27	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:HD3	0.42	2.30	27	2
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:O	0.42	2.37	37	1
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:HD1	0.42	2.12	7	1
1:A:46:SER:OG	1:A:75:GLN:NE2	0.42	2.51	26	1
1:A:12:ASN:H	1:A:23:ASN:HA	0.42	1.74	34	1
1:A:91:ILE:CG1	1:A:93:ILE:HD11	0.42	2.44	37	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:166:CYS:HB3	0.42	2.45	17	5
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.68	9	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:158:GLU:OE2	0.42	2.38	14	1
1:A:3:GLU:CB	1:A:4:PRO:HD3	0.42	2.44	16	1
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CD1	0.42	2.49	17	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:CD1	0.42	2.41	21	1
1:A:64:LYS:HB2	1:A:68:TYR:CE1	0.42	2.49	24	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB2	0.42	2.45	28	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:158:GLU:HG2	0.42	2.29	31	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HD13	0.42	1.87	37	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG1	0.42	2.45	40	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:61:VAL:HB	0.42	1.92	8	3
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:HB2	0.42	2.15	14	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HB	0.42	2.45	18	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:H	0.42	2.27	18	2
1:A:15:ALA:C	1:A:17:TYR:N	0.42	2.76	26	1
1:A:65:PRO:HB3	1:A:75:GLN:CD	0.42	2.39	35	1
1:A:30:ASP:OD1	1:A:30:ASP:C	0.42	2.63	2	1
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG21	0.42	1.73	13	2
1:A:96:ASP:N	1:A:137:ILE:HD11	0.42	2.30	4	1
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:CD1	0.42	2.83	6	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:158:GLU:OE1	0.42	2.53	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:CB	0.42	2.45	35	2
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE1	0.42	2.37	21	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HB2	0.42	1.92	24	1
1:A:119:ARG:O	1:A:122:VAL:HG12	0.42	2.14	7	5
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.30	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:90:ILE:HA	0.42	2.15	16	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:165:ILE:HG21	0.42	2.45	20	1
1:A:96:ASP:O	1:A:136:GLY:HA2	0.42	2.15	27	1
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CG	0.42	2.50	28	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:VAL:HB	0.42	1.91	38	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.42	2.88	5	1
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:CG	0.42	3.02	7	1
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HB2	0.42	2.14	23	2
1:A:33:ALA:O	1:A:37:GLY:N	0.42	2.53	25	2
1:A:168:GLN:OE1	1:A:188:VAL:CG1	0.42	2.68	26	1
1:A:35:ARG:C	1:A:37:GLY:N	0.42	2.76	29	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:26:PHE:CB	0.42	2.68	31	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CZ	0.42	2.50	33	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.53	34	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:65:PRO:O	0.42	2.37	35	1
1:A:132:ARG:NH2	1:A:134:ARG:NE	0.42	2.68	2	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:152:GLU:N	0.42	2.53	10	2
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:HE1	0.42	1.72	3	2
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CE3	0.42	2.49	5	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:CG1	0.42	2.44	11	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:58:ARG:NE	0.42	2.83	13	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:ND1	0.42	2.77	21	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE1	0.42	2.50	36	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG3	0.42	2.12	31	2
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:OE2	0.42	2.38	35	1
1:A:132:ARG:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.42	2.45	39	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CA	0.41	2.68	32	3
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG12	0.41	2.15	10	1
1:A:3:GLU:N	1:A:4:PRO:CD	0.41	2.82	16	1
1:A:112:GLU:N	1:A:132:ARG:HH22	0.41	2.13	19	1
1:A:91:ILE:HB	1:A:131:GLN:HG2	0.41	1.91	24	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:HB3	0.41	1.91	25	1
1:A:131:GLN:HG3	1:A:132:ARG:N	0.41	2.30	25	1
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CD2	0.41	2.50	25	1
1:A:52:THR:HA	1:A:60:LEU:O	0.41	2.15	32	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:152:GLU:O	0.41	2.64	34	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ASP:O	1:A:174:GLU:HG2	0.41	2.15	39	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE2	0.41	2.39	25	5
1:A:75:GLN:CD	1:A:79:LEU:CD1	0.41	2.93	5	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:8:VAL:N	1:A:91:ILE:O	0.41	2.48	15	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:CB	0.41	2.45	29	2
1:A:8:VAL:O	1:A:92:VAL:HA	0.41	2.15	21	2
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:HB2	0.41	2.15	23	1
1:A:152:GLU:OE2	1:A:154:PHE:CE1	0.41	2.74	27	1
1:A:93:ILE:HG12	1:A:133:VAL:O	0.41	2.14	31	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HB	0.41	2.15	37	2
1:A:117:GLY:O	1:A:120:SER:N	0.41	2.53	33	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:CB	0.41	2.45	39	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:NH2	0.41	2.30	39	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD2	0.41	2.60	13	3
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:C	0.41	2.40	4	1
1:A:167:GLU:HG3	1:A:168:GLN:N	0.41	2.30	40	2
1:A:96:ASP:OD1	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.15	20	1
1:A:75:GLN:C	1:A:78:PRO:HD2	0.41	2.40	34	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE2	0.41	2.93	34	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:118:LEU:HD21	0.41	1.76	37	1
1:A:26:PHE:HE1	1:A:64:LYS:HZ2	0.41	1.57	3	1
1:A:49:GLU:HB3	1:A:64:LYS:CE	0.41	2.45	4	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:CG2	0.41	2.69	14	2
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:HG13	0.41	2.14	8	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	15	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:40:PHE:N	0.41	2.30	17	1
1:A:83:TYR:C	1:A:84:SER:OG	0.41	2.64	20	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.41	2.15	20	1
1:A:137:ILE:O	1:A:152:GLU:OE2	0.41	2.38	23	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD23	0.41	2.46	25	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:HB3	0.41	2.16	27	1
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:HD3	0.41	1.93	29	3
1:A:176:LEU:HG	1:A:181:MET:CB	0.41	2.46	31	2
1:A:101:PHE:CZ	1:A:138:GLY:HA3	0.41	2.50	31	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG2	0.41	2.50	35	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:158:GLU:CD	0.41	2.41	32	2
1:A:41:LYS:O	1:A:50:VAL:O	0.41	2.38	25	2
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:CD	0.41	2.64	3	1
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	5	1
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:O	0.41	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:GLN:HG3	1:A:188:VAL:HG13	0.41	1.91	6	1
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:CD2	0.41	2.82	11	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:NZ	0.41	2.83	12	2
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:CG1	0.41	2.46	14	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:158:GLU:CD	0.41	2.93	16	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:HB3	0.41	2.45	26	1
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	31	1
1:A:96:ASP:CG	1:A:134:ARG:CB	0.41	2.94	34	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:HB3	0.41	2.46	36	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:17:TYR:OH	0.41	2.36	2	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:149:PHE:O	0.41	2.74	2	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:151:LEU:C	0.41	2.63	3	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:75:GLN:HE22	0.41	1.76	9	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:18:ALA:HB1	0.41	1.92	19	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	2.51	19	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:137:ILE:C	0.41	2.40	22	1
1:A:99:LEU:O	1:A:137:ILE:HA	0.41	2.16	23	1
1:A:100:GLU:HG3	1:A:138:GLY:N	0.41	2.30	25	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:HG23	0.41	2.16	28	1
1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:HIS:CB	0.41	2.45	29	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.41	2.44	34	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.31	35	1
1:A:40:PHE:CA	1:A:51:ALA:HB2	0.41	2.37	35	1
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CZ	0.41	2.72	35	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG23	0.41	1.93	4	1
1:A:113:GLY:O	1:A:114:GLY:O	0.41	2.39	4	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD21	0.41	2.15	5	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:16:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HA	0.41	1.92	23	2
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD12	0.41	2.15	17	2
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:HD3	0.41	2.45	17	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CA	0.41	2.69	17	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HA	0.41	2.51	18	1
1:A:21:ARG:HH21	1:A:151:LEU:HD11	0.41	1.76	21	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:168:GLN:HA	0.41	2.14	21	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:137:ILE:HG21	0.41	1.91	22	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:39:LYS:HA	0.41	1.92	28	1
1:A:76:ILE:CD1	1:A:90:ILE:HD13	0.41	2.45	29	1
1:A:99:LEU:N	1:A:138:GLY:O	0.41	2.53	32	1
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:CG	0.41	2.93	40	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:O	0.41	2.15	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.46	12	1
1:A:128:LYS:CG	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	12	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CZ	0.41	3.08	14	1
1:A:137:ILE:C	1:A:138:GLY:O	0.41	2.64	18	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:CB	0.41	2.99	19	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:O	0.41	2.38	20	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD12	0.41	1.91	24	1
1:A:129:ASP:C	1:A:130:PHE:O	0.41	2.64	26	1
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:OG	0.41	2.39	30	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:61:VAL:C	0.41	2.41	31	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:72:SER:N	0.41	2.31	31	1
1:A:19:ARG:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	2	1
1:A:107:LYS:O	1:A:132:ARG:O	0.41	2.38	4	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:OD2	0.41	2.39	4	1
1:A:178:GLU:OE1	1:A:178:GLU:O	0.41	2.38	5	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	1.92	6	1
1:A:104:ILE:HA	1:A:135:ILE:HA	0.41	1.93	8	1
1:A:5:LEU:HD11	1:A:58:ARG:NE	0.41	2.31	13	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:O	0.41	2.39	13	1
1:A:67:CYS:H	1:A:71:GLU:CD	0.41	2.24	14	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HB3	0.41	2.44	14	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:44:LYS:N	0.41	2.88	22	1
1:A:69:MET:CE	1:A:70:ASN:HB2	0.41	2.45	22	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD1	0.41	2.93	22	1
1:A:58:ARG:HB2	1:A:177:ILE:CG2	0.41	2.46	23	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	26	1
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.46	28	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.84	30	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:VAL:N	0.41	2.84	33	2
1:A:112:GLU:OE2	1:A:132:ARG:NH1	0.41	2.54	36	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:C	0.41	2.41	37	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CB	0.41	2.68	39	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	3	1
1:A:17:TYR:HB2	1:A:151:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:69:MET:CG	1:A:70:ASN:N	0.41	2.82	18	1
1:A:128:LYS:O	1:A:128:LYS:CG	0.41	2.68	25	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:35:ARG:HD3	0.41	2.45	29	1
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.41	2.50	30	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:71:GLU:CA	0.41	2.68	31	1
1:A:164:THR:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	40	2
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:HG12	0.40	1.93	37	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:CD1	0.40	2.46	3	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:64:LYS:O	0.40	2.39	5	2
1:A:25:GLY:O	1:A:28:VAL:HG12	0.40	2.15	10	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:CD	0.40	2.94	11	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:137:ILE:O	0.40	2.69	21	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:LEU:HB2	0.40	2.16	21	2
1:A:112:GLU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.40	2.16	25	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG23	0.40	1.92	40	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD13	0.40	1.91	8	1
1:A:45:ARG:CB	1:A:50:VAL:HG21	0.40	2.47	8	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:162:VAL:HG21	0.40	2.31	12	1
1:A:5:LEU:HB2	1:A:89:ASN:CB	0.40	2.46	14	1
1:A:191:TRP:O	1:A:191:TRP:CG	0.40	2.74	14	1
1:A:13:PRO:HG3	1:A:67:CYS:N	0.40	2.30	17	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE1	0.40	2.40	26	2
1:A:43:HIS:CE1	1:A:48:ALA:C	0.40	3.00	19	1
1:A:128:LYS:HE3	1:A:128:LYS:CA	0.40	2.46	34	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:SG	0.40	2.57	2	1
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:75:GLN:NE2	0.40	2.54	3	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:LEU:C	0.40	2.64	28	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.40	2.88	8	1
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG21	0.40	1.92	9	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CD1	0.40	2.85	10	1
1:A:87:PRO:CD	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.46	11	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB3	0.40	2.47	11	1
1:A:107:LYS:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.40	2.47	17	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:151:LEU:HD13	0.40	2.17	21	1
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:N	0.40	2.63	23	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:HB	0.40	1.93	30	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HG2	0.40	2.16	31	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:H	0.40	1.76	32	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:CD2	0.40	2.69	33	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:166:CYS:N	0.40	2.73	36	1
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:H	0.40	1.77	39	1
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:OE1	0.40	2.39	3	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:176:LEU:O	0.40	2.69	4	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:CD1	0.40	2.46	5	1
1:A:45:ARG:HB2	1:A:50:VAL:HG21	0.40	1.93	8	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:24:LEU:HD22	0.40	1.94	13	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:CG2	0.40	2.69	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ASP:OD1	1:A:135:ILE:HB	0.40	2.17	23	1
1:A:100:GLU:CA	1:A:137:ILE:C	0.40	2.94	25	1
1:A:46:SER:OG	1:A:75:GLN:CD	0.40	2.64	26	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.16	27	1
1:A:67:CYS:HB3	1:A:71:GLU:HB2	0.40	1.93	32	1
1:A:69:MET:HE3	1:A:117:GLY:N	0.40	2.31	33	1
1:A:96:ASP:HB2	1:A:135:ILE:O	0.40	2.16	34	1
1:A:4:PRO:HA	1:A:58:ARG:CD	0.40	2.47	37	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HZ	0.40	1.75	39	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:CG	0.40	3.00	39	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG21	0.40	1.93	40	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:137:ILE:O	0.40	2.16	7	1
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	8	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:OD2	0.40	2.40	9	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:C	0.40	2.64	12	1
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:CG	0.40	2.42	14	1
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:N	0.40	2.32	14	1
1:A:104:ILE:HG13	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	16	1
1:A:67:CYS:HB2	1:A:71:GLU:CG	0.40	2.46	18	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HE2	0.40	1.92	20	1
1:A:66:ARG:HB2	1:A:71:GLU:CD	0.40	2.42	27	1
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:N	0.40	2.54	30	1
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	0.40	2.16	30	2
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:O	0.40	2.68	35	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:23:ASN:O	0.40	2.40	37	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:131:GLN:O	0.40	2.17	38	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:CG2	0.40	2.47	40	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	180/204 (88%)	130±3 (72±2%)	31±4 (17±2%)	19±4 (10±2%)	1	9
All	All	7200/8160 (88%)	5206 (72%)	1251 (17%)	743 (10%)	1	9

All 58 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	68	TYR	40
1	A	69	MET	40
1	A	153	ASN	39
1	A	156	PRO	39
1	A	65	PRO	36
1	A	152	GLU	34
1	A	155	THR	32
1	A	154	PHE	27
1	A	38	ALA	26
1	A	77	GLY	25
1	A	14	GLY	25
1	A	15	ALA	23
1	A	102	GLY	22
1	A	128	LYS	18
1	A	21	ARG	18
1	A	127	THR	17
1	A	40	PHE	17
1	A	189	HIS	16
1	A	129	ASP	16
1	A	20	THR	16
1	A	55	SER	14
1	A	108	ILE	14
1	A	48	ALA	14
1	A	114	GLY	13
1	A	110	GLY	12
1	A	43	HIS	11
1	A	112	GLU	11
1	A	45	ARG	11
1	A	44	LYS	10
1	A	130	PHE	9
1	A	138	GLY	9
1	A	3	GLU	7
1	A	115	HIS	6
1	A	58	ARG	6
1	A	111	GLY	6
1	A	113	GLY	6
1	A	16	ASN	5
1	A	60	LEU	5
1	A	109	GLY	5
1	A	46	SER	4
1	A	36	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	ALA	4
1	A	22	HIS	4
1	A	13	PRO	3
1	A	47	GLY	3
1	A	41	LYS	3
1	A	181	MET	2
1	A	37	GLY	2
1	A	116	ASN	2
1	A	64	LYS	2
1	A	179	GLN	2
1	A	133	VAL	2
1	A	67	CYS	1
1	A	180	GLY	1
1	A	42	ALA	1
1	A	100	GLU	1
1	A	137	ILE	1
1	A	50	VAL	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	135/153 (88%)	79±3 (58±3%)	56±3 (42±3%)	0	4
All	All	5400/6120 (88%)	3146 (58%)	2254 (42%)	0	4

All 119 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	VAL	40
1	A	31	LEU	40
1	A	36	LEU	40
1	A	39	LYS	40
1	A	41	LYS	40
1	A	52	THR	40
1	A	74	ARG	40
1	A	81	LYS	40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	91	ILE	40
1	A	106	LEU	40
1	A	150	VAL	40
1	A	155	THR	40
1	A	10	LEU	39
1	A	108	ILE	39
1	A	162	VAL	39
1	A	104	ILE	39
1	A	5	LEU	38
1	A	67	CYS	38
1	A	93	ILE	38
1	A	175	LEU	38
1	A	79	LEU	37
1	A	127	THR	37
1	A	154	PHE	37
1	A	165	ILE	37
1	A	24	LEU	36
1	A	64	LYS	35
1	A	6	LEU	34
1	A	62	LEU	34
1	A	44	LYS	33
1	A	159	ARG	32
1	A	137	ILE	31
1	A	182	GLU	31
1	A	58	ARG	31
1	A	60	LEU	28
1	A	71	GLU	28
1	A	55	SER	27
1	A	132	ARG	27
1	A	40	PHE	25
1	A	22	HIS	24
1	A	54	ARG	23
1	A	97	LEU	23
1	A	178	GLU	23
1	A	59	SER	22
1	A	3	GLU	21
1	A	43	HIS	21
1	A	187	ARG	21
1	A	99	LEU	21
1	A	35	ARG	20
1	A	105	ARG	19
1	A	100	GLU	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	122	VAL	18
1	A	189	HIS	18
1	A	191	TRP	17
1	A	27	VAL	17
1	A	95	ASP	16
1	A	121	VAL	16
1	A	128	LYS	16
1	A	158	GLU	16
1	A	112	GLU	16
1	A	188	VAL	16
1	A	176	LEU	16
1	A	152	GLU	16
1	A	168	GLN	15
1	A	179	GLN	15
1	A	181	MET	15
1	A	45	ARG	15
1	A	115	HIS	14
1	A	76	ILE	14
1	A	164	THR	14
1	A	21	ARG	14
1	A	17	TYR	13
1	A	50	VAL	13
1	A	85	VAL	13
1	A	167	GLU	13
1	A	28	VAL	12
1	A	46	SER	12
1	A	7	VAL	12
1	A	101	PHE	12
1	A	107	LYS	12
1	A	12	ASN	11
1	A	49	GLU	11
1	A	103	ARG	11
1	A	98	ASP	11
1	A	151	LEU	10
1	A	134	ARG	9
1	A	90	ILE	9
1	A	96	ASP	9
1	A	116	ASN	8
1	A	131	GLN	8
1	A	125	LEU	7
1	A	174	GLU	7
1	A	120	SER	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	69	MET	7
1	A	130	PHE	7
1	A	118	LEU	6
1	A	129	ASP	6
1	A	94	HIS	5
1	A	89	ASN	5
1	A	119	ARG	5
1	A	75	GLN	5
1	A	171	ASP	4
1	A	19	ARG	4
1	A	70	ASN	3
1	A	149	PHE	3
1	A	153	ASN	2
1	A	135	ILE	2
1	A	177	ILE	2
1	A	20	THR	2
1	A	92	VAL	2
1	A	185	GLN	2
1	A	16	ASN	2
1	A	30	ASP	2
1	A	161	GLU	2
1	A	84	SER	2
1	A	173	THR	2
1	A	186	ASN	1
1	A	23	ASN	1
1	A	66	ARG	1
1	A	32	LEU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided