



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 01:41 PM UTC

PDB ID : 2KFW / pdb_00002kfw
BMRB ID : 16240
Title : Solution structure of full-length SlyD from E.coli
Authors : Martino, L.; He, Y.; Hands-Taylor, K.L.; Valentine, E.R.; Kelly, G.; Giancola, C.; Conte, M.R.
Deposited on : 2009-02-28

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

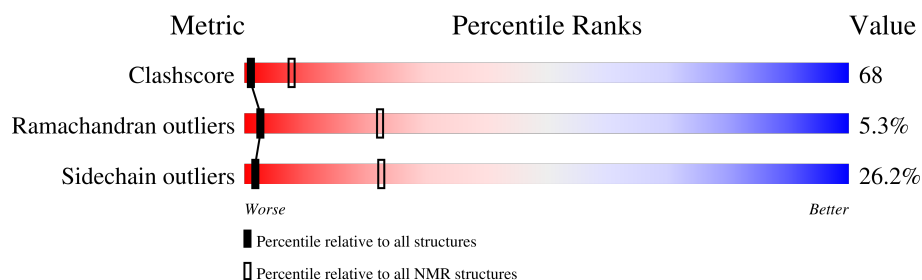
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 84%.

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	196	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 17 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:1-A:68, A:129-A:152 (92)	1.07	17
2	A:76-A:120 (45)	1.55	20

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

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

The models can be grouped into 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2799 atoms, of which 1336 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD.

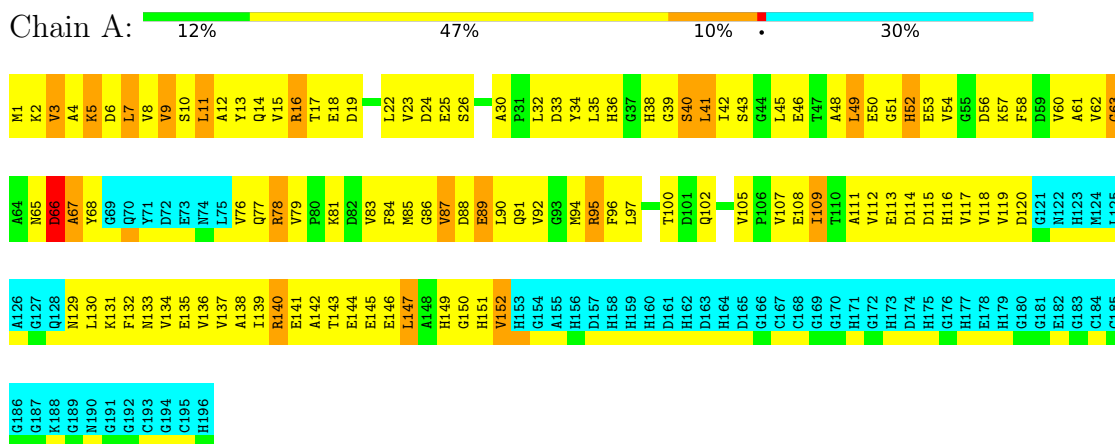
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	196	Total	C	H	N	O	S	0
			2799	892	1336	266	295	10	

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: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD

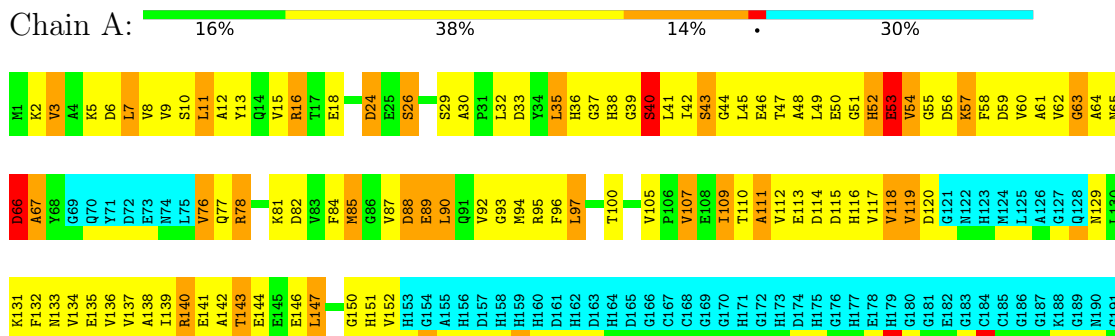


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

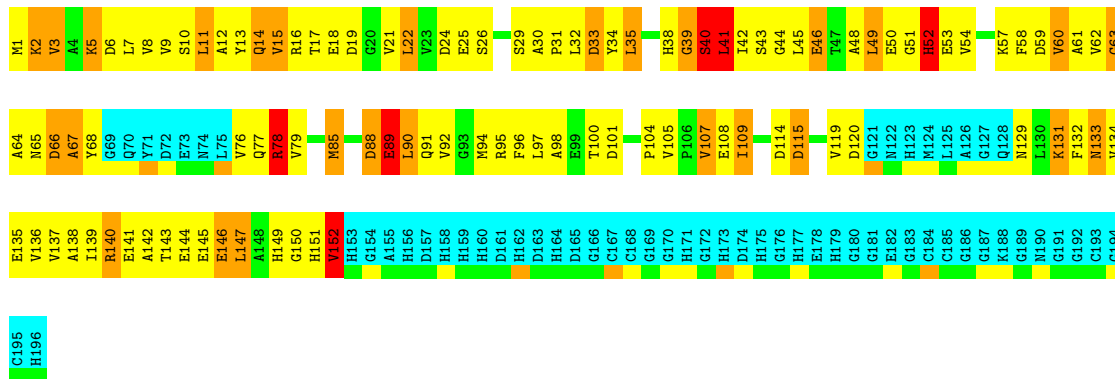
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





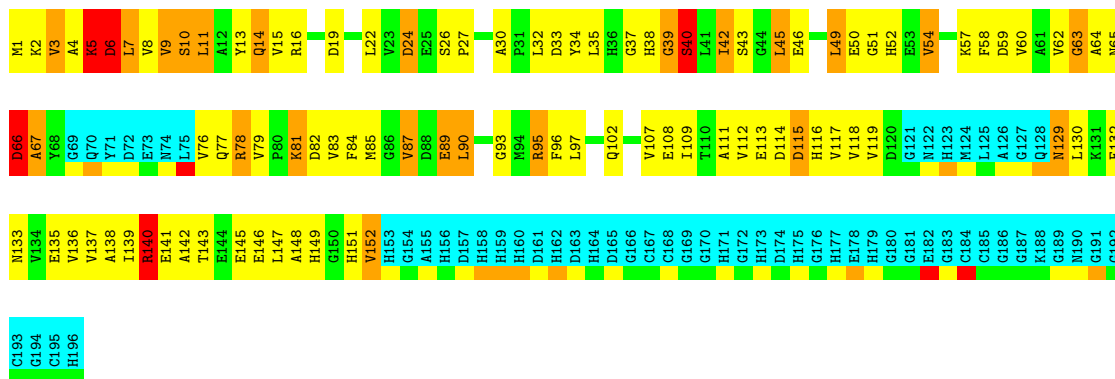
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



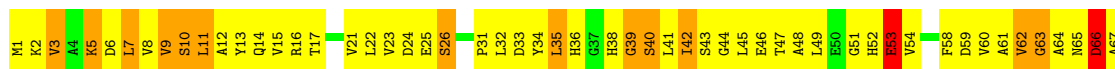
4.2.3 Score per residue for model 3

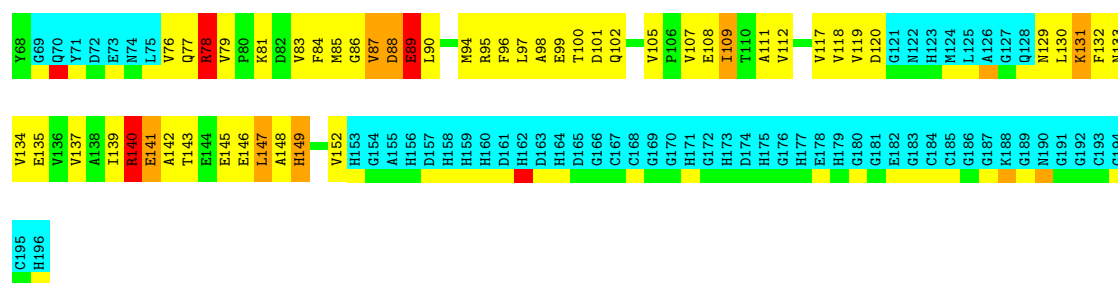
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



4.2.4 Score per residue for model 4

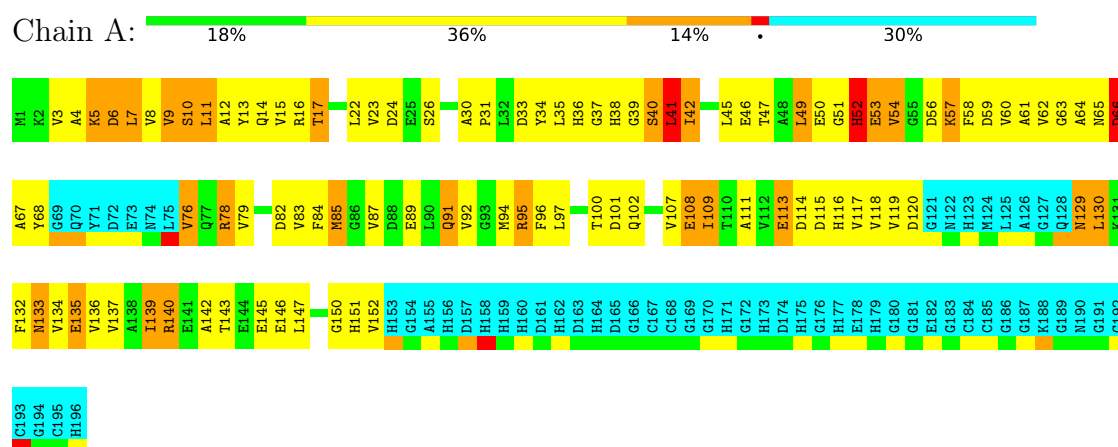
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





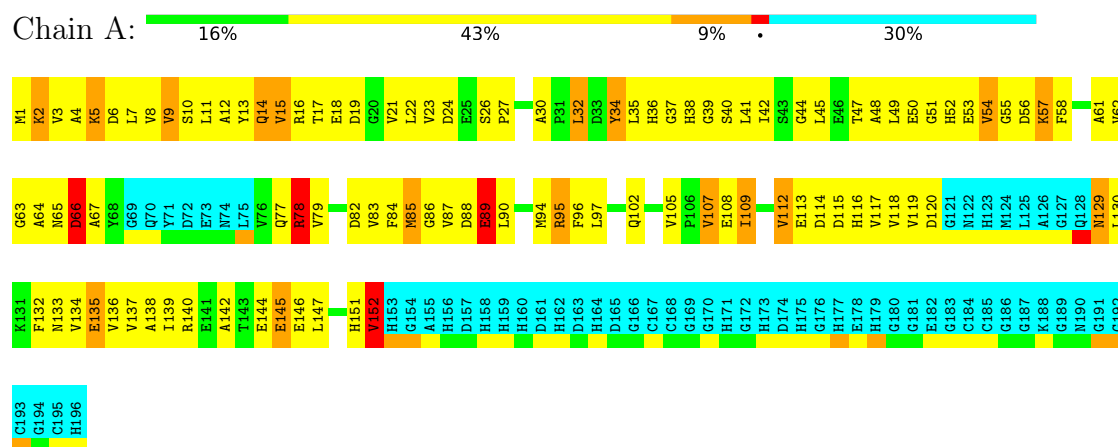
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



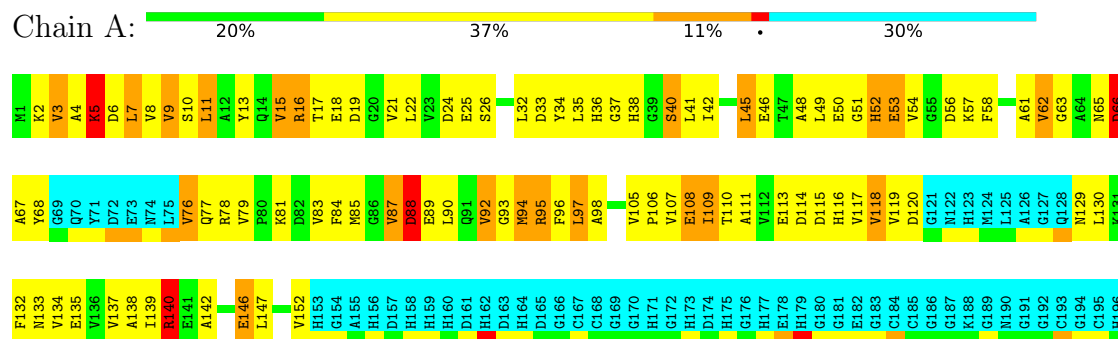
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



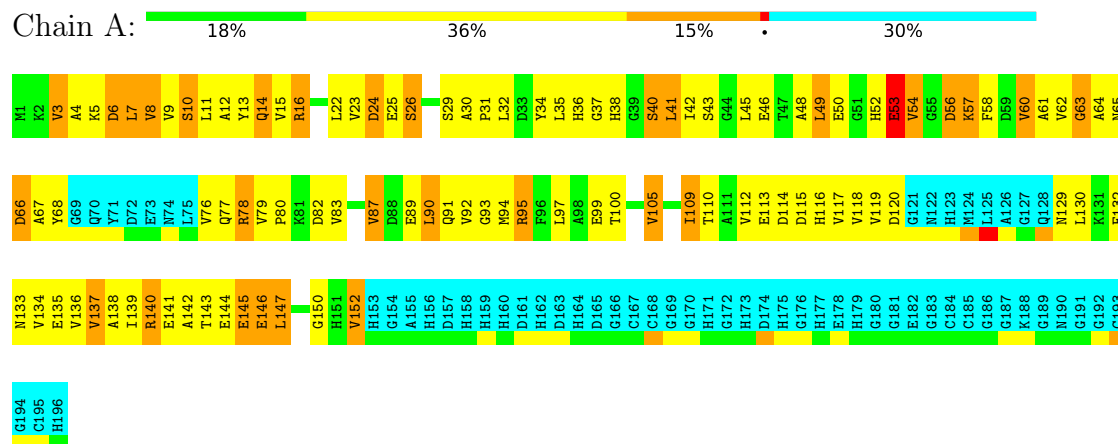
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



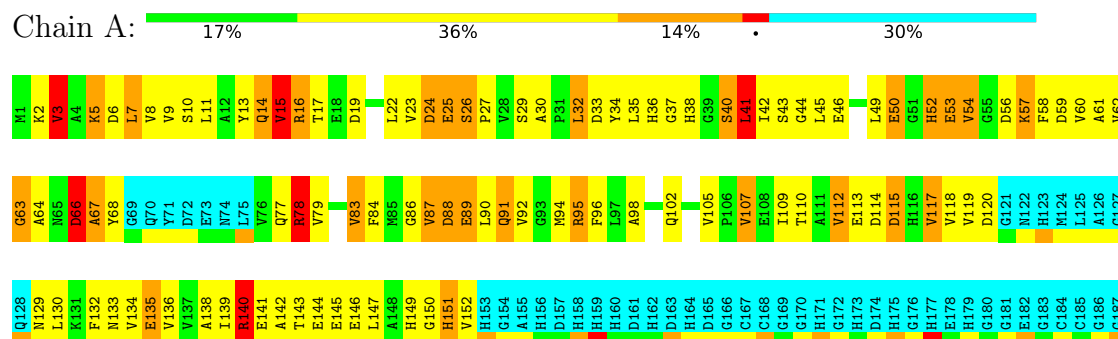
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



4.2.9 Score per residue for model 9

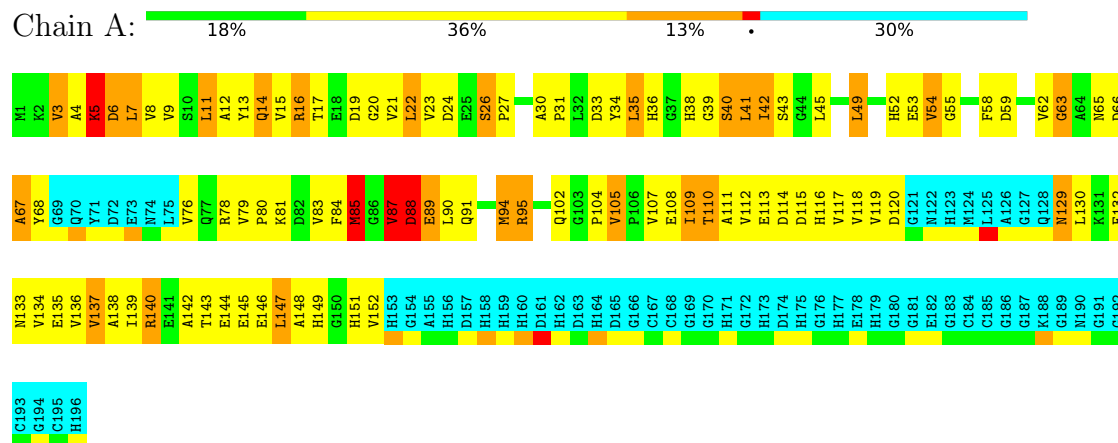
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





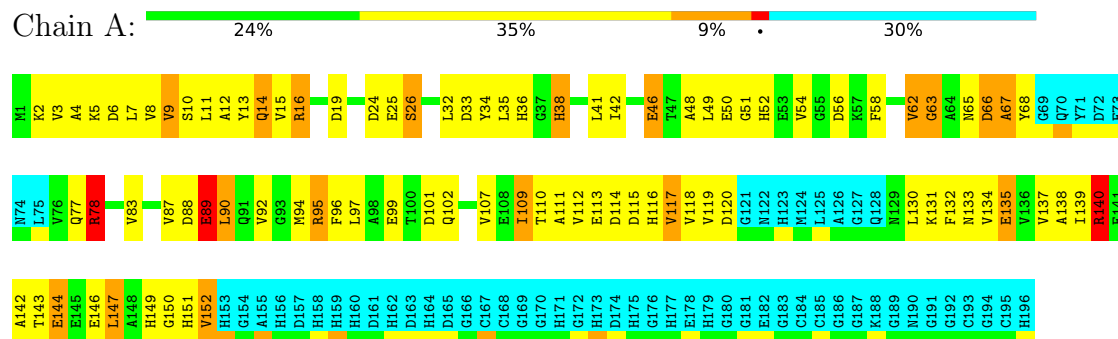
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



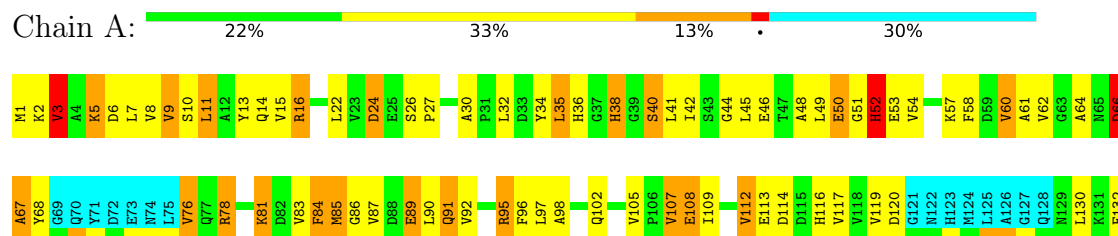
4.2.11 Score per residue for model 11

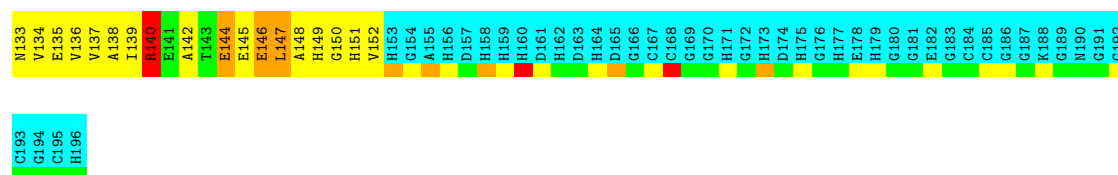
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



4.2.12 Score per residue for model 12

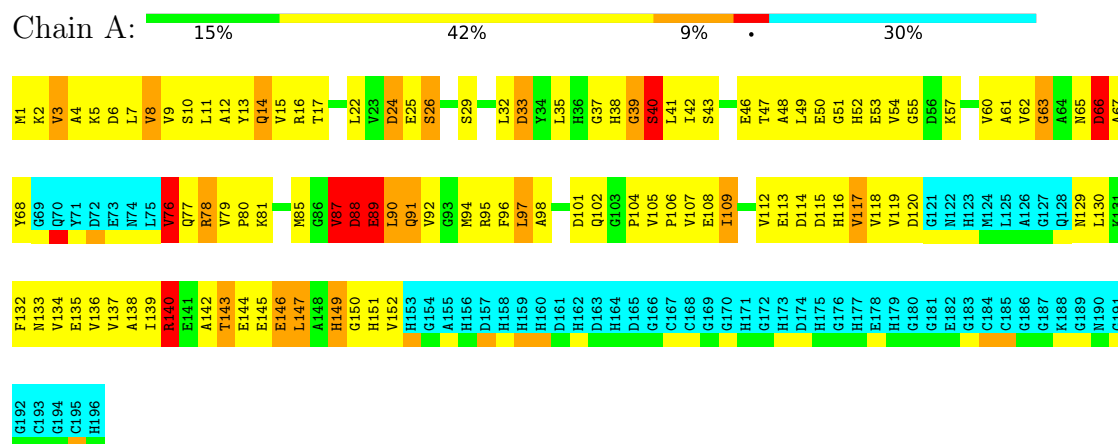
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





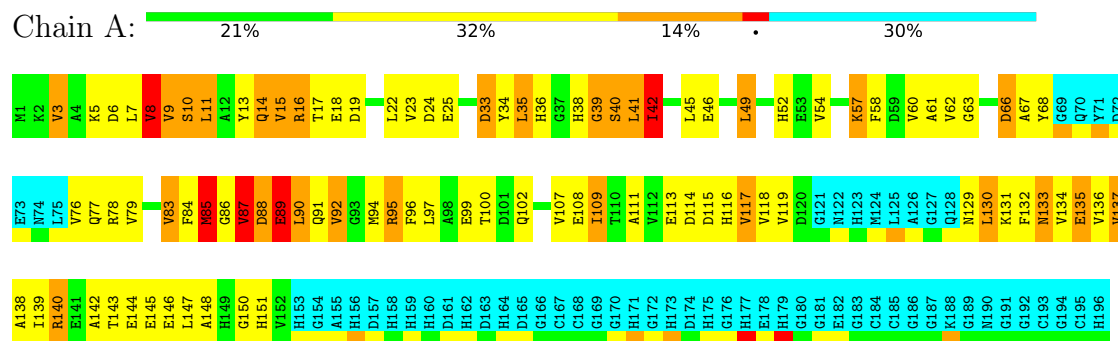
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



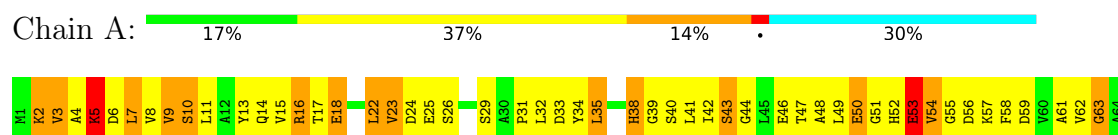
4.2.14 Score per residue for model 14

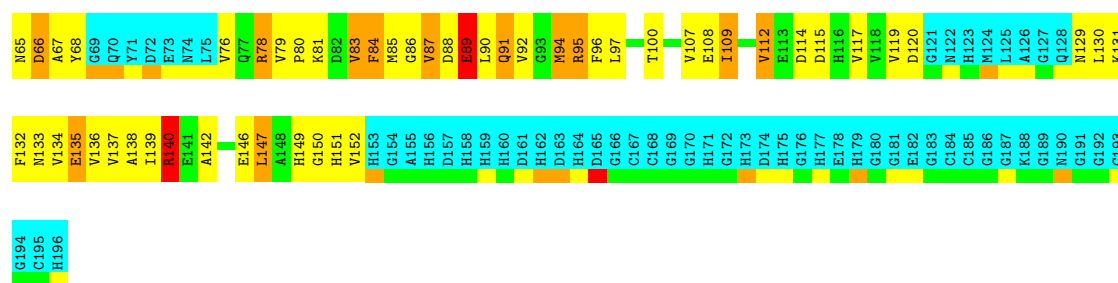
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



4.2.15 Score per residue for model 15

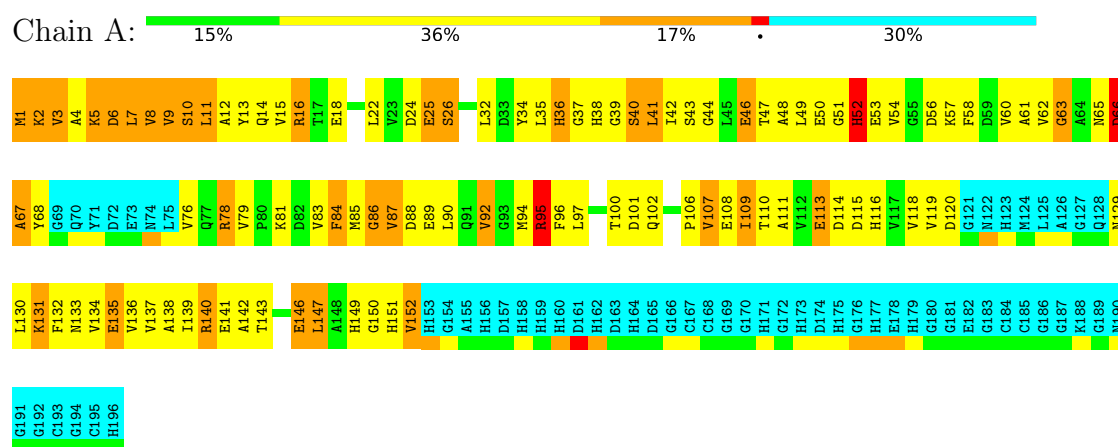
- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





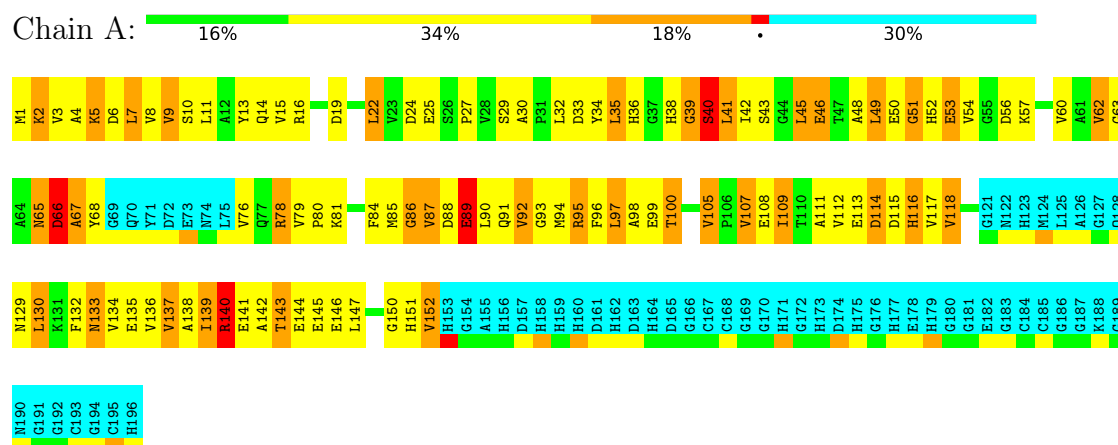
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



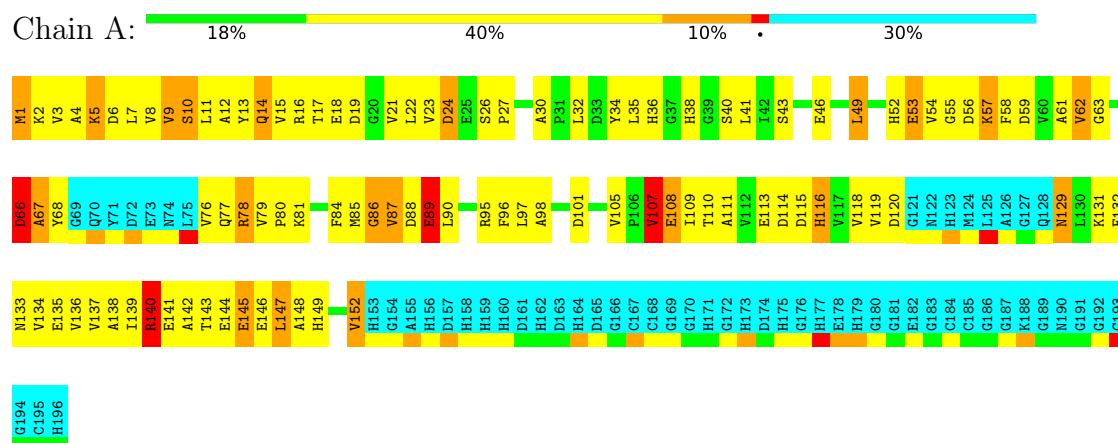
4.2.17 Score per residue for model 17 (medoid)

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



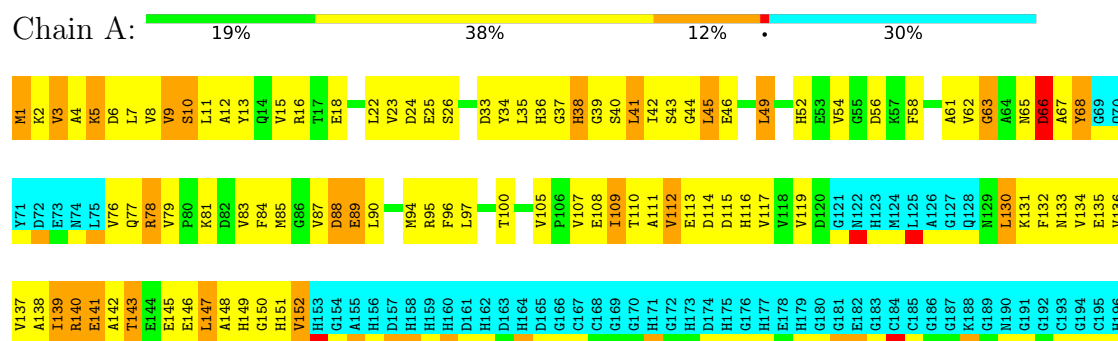
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



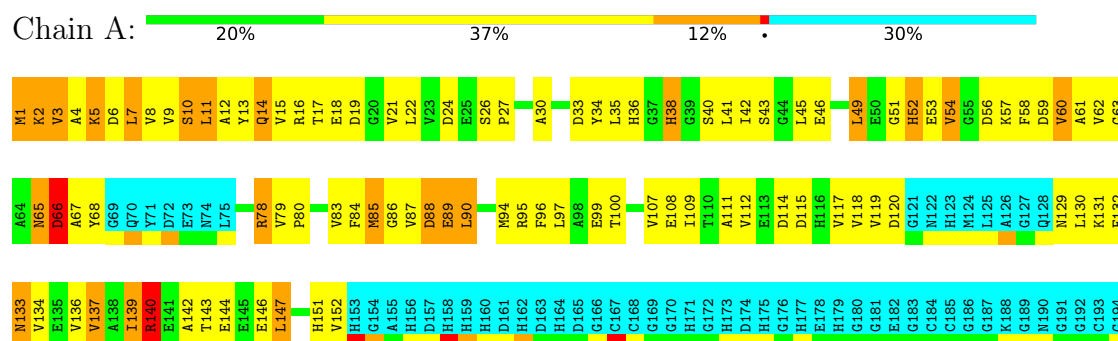
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: FKBP-type peptidyl-prolyl cis-trans isomerase slyD





5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

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

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1677
Number of shifts mapped to atoms	1677
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	84%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.48±0.00	0±0/1060 (0.0± 0.0%)	1.63±0.01	6±1/1445 (0.4± 0.1%)
All	All	1.48	0/21200 (0.0%)	1.63	115/28900 (0.4%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.8±0.4
All	All	0	76

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	87	VAL	N-CA-CB	-7.64	105.01	112.65	3	1
1	A	107	VAL	N-CA-CB	-6.67	104.98	112.45	12	7
1	A	109	ILE	N-CA-CB	-6.43	104.96	111.90	12	6
1	A	76	VAL	N-CA-CB	-6.39	104.99	111.90	16	4
1	A	117	VAL	N-CA-CB	-6.21	104.99	112.07	19	5
1	A	83	VAL	N-CA-CB	-6.17	104.98	112.33	12	7
1	A	112	VAL	N-CA-CB	-6.16	105.03	112.35	15	8
1	A	15	VAL	N-CA-CB	-6.01	105.19	112.35	14	4
1	A	105	VAL	N-CA-CB	-5.98	105.25	111.64	8	2
1	A	137	VAL	N-CA-CB	-5.90	104.92	111.41	17	5
1	A	88	ASP	N-CA-CB	-5.78	105.15	113.65	1	6
1	A	9	VAL	N-CA-CB	-5.68	104.95	112.34	19	12
1	A	62	VAL	N-CA-CB	-5.64	105.01	112.34	4	1
1	A	139	ILE	N-CA-CB	-5.61	105.05	112.34	20	1
1	A	115	ASP	N-CA-CB	-5.59	105.43	113.65	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	152	VAL	N-CA-CB	-5.56	104.99	112.10	19	9
1	A	60	VAL	N-CA-CB	-5.54	105.01	112.10	5	5
1	A	42	ILE	N-CA-CB	-5.32	104.94	111.00	10	1
1	A	92	VAL	N-CA-CB	-5.30	105.02	110.95	14	5
1	A	23	VAL	N-CA-CB	-5.26	105.02	112.12	15	1
1	A	3	VAL	N-CA-CB	-5.24	104.81	110.53	12	2
1	A	54	VAL	N-CA-CB	-5.19	105.13	110.95	4	15
1	A	118	VAL	N-CA-CB	-5.16	104.94	111.64	1	1
1	A	89	GLU	N-CA-CB	-5.08	105.70	111.79	12	2
1	A	40	SER	N-CA-CB	-5.08	105.02	112.78	5	1
1	A	30	ALA	N-CA-CB	-5.05	105.00	110.71	1	1
1	A	41	LEU	CB-CA-C	-5.04	110.79	116.63	9	1
1	A	8	VAL	N-CA-CB	-5.03	105.23	110.82	14	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	95	ARG	Sidechain	20
1	A	16	ARG	Sidechain	19
1	A	140	ARG	Sidechain	19
1	A	78	ARG	Sidechain	18

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1042	1015	1015	140±14
All	All	20840	20300	20300	2799

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 68.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:VAL:HG13	1.10	1.15	11	4
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:LEU:HD13	1.06	1.27	18	7
1:A:7:LEU:HD23	1:A:139:ILE:HG22	1.05	1.12	15	7
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:CD2	1.04	1.88	17	9
1:A:34:TYR:CD2	1:A:41:LEU:HD13	1.02	1.89	11	2
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:HG21	1.02	1.25	18	6
1:A:34:TYR:CE2	1:A:41:LEU:HD22	1.02	1.88	11	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:139:ILE:HG23	0.99	1.00	20	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:67:ALA:HB2	0.99	1.34	15	9
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:HD23	0.99	1.31	3	2
1:A:22:LEU:O	1:A:22:LEU:HD13	0.99	1.57	15	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:139:ILE:HG23	0.99	1.86	20	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:TYR:CD2	0.96	1.94	6	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:139:ILE:CD1	0.95	1.89	1	13
1:A:3:VAL:HG22	1:A:9:VAL:HG21	0.95	1.36	12	5
1:A:17:THR:HG22	1:A:130:LEU:HD23	0.94	1.39	9	2
1:A:112:VAL:HG23	1:A:117:VAL:HG22	0.94	1.35	1	2
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:CD2	0.94	1.92	11	7
1:A:111:ALA:O	1:A:118:VAL:HG22	0.94	1.63	16	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:146:GLU:HB3	0.94	1.40	13	20
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:HD12	0.94	1.97	15	1
1:A:63:GLY:O	1:A:67:ALA:HB3	0.93	1.63	6	4
1:A:48:ALA:HB1	1:A:58:PHE:CZ	0.93	1.99	8	2
1:A:22:LEU:HD22	1:A:23:VAL:N	0.93	1.79	15	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:139:ILE:CG2	0.93	1.92	20	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:7:LEU:O	0.93	1.62	19	1
1:A:6:ASP:O	1:A:7:LEU:HD12	0.93	1.64	3	6
1:A:52:HIS:NE2	1:A:139:ILE:HD11	0.93	1.78	15	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG21	0.92	1.38	1	2
1:A:9:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HG23	0.92	1.94	11	5
1:A:13:TYR:CB	1:A:134:VAL:HG22	0.92	1.94	8	4
1:A:12:ALA:HB1	1:A:26:SER:O	0.92	1.62	19	11
1:A:15:VAL:HG12	1:A:24:ASP:O	0.92	1.64	12	11
1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:VAL:CG1	0.91	1.96	18	4
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:HD11	0.91	1.64	13	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:146:GLU:CB	0.91	1.96	5	20
1:A:62:VAL:HG22	1:A:67:ALA:HB2	0.90	1.43	3	2
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:CD2	0.90	1.97	3	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:132:PHE:CE1	0.90	2.01	3	1
1:A:146:GLU:OE2	1:A:152:VAL:HG23	0.90	1.67	8	1
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD23	0.89	1.43	8	5
1:A:52:HIS:ND1	1:A:136:VAL:HG21	0.89	1.82	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:VAL:HG13	1:A:117:VAL:HG12	0.89	1.43	6	1
1:A:1:MET:HG2	1:A:139:ILE:HD11	0.88	1.45	6	1
1:A:87:VAL:HG21	1:A:90:LEU:CD2	0.88	1.98	20	1
1:A:6:ASP:HA	1:A:35:LEU:HD11	0.88	1.45	7	5
1:A:9:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HG23	0.87	1.45	11	3
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:CZ	0.87	2.05	11	2
1:A:11:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD21	0.87	1.99	11	1
1:A:63:GLY:HA2	1:A:67:ALA:HB3	0.87	1.47	16	14
1:A:7:LEU:CD2	1:A:139:ILE:HG22	0.87	1.97	15	5
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:CD2	0.86	1.99	9	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:CE1	0.86	2.05	2	4
1:A:6:ASP:CB	1:A:147:LEU:HD21	0.86	1.99	13	6
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:HG22	0.86	1.69	11	3
1:A:27:PRO:HG2	1:A:30:ALA:HB3	0.85	1.47	6	8
1:A:146:GLU:OE2	1:A:152:VAL:HG13	0.85	1.71	20	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:140:ARG:C	0.85	1.97	17	5
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	0.85	1.46	5	1
1:A:52:HIS:HB3	1:A:136:VAL:HG21	0.85	1.49	20	2
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD12	0.85	1.46	10	8
1:A:52:HIS:CD2	1:A:136:VAL:HG23	0.85	2.06	8	4
1:A:87:VAL:HG21	1:A:90:LEU:HD23	0.84	1.44	20	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:41:LEU:HD13	0.84	2.07	14	2
1:A:7:LEU:HD23	1:A:9:VAL:CG1	0.84	2.02	20	1
1:A:22:LEU:HD22	1:A:22:LEU:C	0.84	1.96	15	1
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:HD11	0.84	2.08	6	2
1:A:76:VAL:HG23	1:A:120:ASP:HB2	0.83	1.50	15	1
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:HG11	0.83	1.50	7	3
1:A:84:PHE:CD2	1:A:87:VAL:HG21	0.83	2.08	15	1
1:A:87:VAL:HB	1:A:90:LEU:HD23	0.82	1.51	18	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CE1	0.82	2.09	14	1
1:A:3:VAL:HG21	1:A:9:VAL:HG21	0.82	1.50	9	3
1:A:3:VAL:CG2	1:A:9:VAL:HG21	0.82	2.04	9	8
1:A:4:ALA:CB	1:A:7:LEU:HD13	0.82	2.04	18	3
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:CG2	0.82	2.05	18	6
1:A:9:VAL:HG12	1:A:11:LEU:CD1	0.81	2.05	8	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:45:LEU:HD23	0.81	2.05	14	2
1:A:63:GLY:CA	1:A:130:LEU:HD12	0.81	2.05	17	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HD13	0.81	1.49	4	15
1:A:11:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD11	0.81	2.05	18	2
1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:HD13	0.80	2.00	14	3
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:CD1	0.80	2.06	16	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ILE:HG23	1:A:67:ALA:HA	0.80	1.54	10	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:152:VAL:CG2	0.80	2.05	19	1
1:A:12:ALA:HB1	1:A:26:SER:OG	0.80	1.76	18	1
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:HG22	0.79	1.77	9	5
1:A:41:LEU:HD23	1:A:45:LEU:HD23	0.79	1.53	14	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HG23	0.79	1.54	19	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:130:LEU:HD21	0.79	2.08	6	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:134:VAL:HG21	0.79	1.53	10	3
1:A:6:ASP:O	1:A:7:LEU:HD22	0.79	1.77	17	4
1:A:11:LEU:O	1:A:11:LEU:HD12	0.79	1.78	11	4
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:HG23	0.79	1.77	14	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:146:GLU:HB2	0.79	1.53	8	13
1:A:58:PHE:CE2	1:A:60:VAL:HG22	0.79	2.12	20	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:TYR:CE2	0.78	2.13	6	1
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:HD23	0.78	2.13	12	1
1:A:56:ASP:O	1:A:136:VAL:HG22	0.78	1.79	18	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:NE2	0.78	1.94	1	6
1:A:3:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HD22	0.78	1.55	18	1
1:A:63:GLY:HA3	1:A:130:LEU:HD12	0.77	1.56	17	4
1:A:45:LEU:HD11	1:A:132:PHE:CE1	0.77	2.13	17	1
1:A:4:ALA:N	1:A:7:LEU:HD21	0.77	1.94	19	1
1:A:6:ASP:HB3	1:A:147:LEU:HD21	0.77	1.56	20	2
1:A:6:ASP:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.77	1.55	13	5
1:A:40:SER:C	1:A:41:LEU:HD12	0.77	2.04	19	5
1:A:98:ALA:HB3	1:A:105:VAL:O	0.77	1.80	7	5
1:A:7:LEU:HD12	1:A:139:ILE:HG22	0.77	1.56	4	2
1:A:9:VAL:HG12	1:A:139:ILE:HG23	0.77	1.55	17	2
1:A:13:TYR:CB	1:A:134:VAL:HG12	0.77	2.10	15	5
1:A:97:LEU:HD21	1:A:104:PRO:HB2	0.77	1.57	13	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:141:GLU:OE2	0.77	1.80	16	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HD13	0.77	2.10	11	7
1:A:107:VAL:HG12	1:A:119:VAL:HB	0.77	1.56	18	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:120:ASP:HA	0.77	1.55	13	1
1:A:7:LEU:O	1:A:9:VAL:HG23	0.76	1.81	6	7
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD13	0.76	2.06	10	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:90:LEU:HB2	0.76	1.55	15	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:VAL:CG2	0.76	2.10	1	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:83:VAL:HG11	0.76	2.11	15	1
1:A:15:VAL:O	1:A:22:LEU:HD13	0.76	1.81	4	2
1:A:78:ARG:HG2	1:A:118:VAL:HG23	0.76	1.55	17	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HD11	0.75	1.56	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:HG12	1:A:120:ASP:OD2	0.75	1.82	1	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:VAL:HG13	0.75	1.58	19	2
1:A:34:TYR:CE1	1:A:41:LEU:HD11	0.75	2.16	6	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:VAL:HG23	0.75	1.82	6	5
1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:VAL:CG1	0.75	2.12	19	3
1:A:9:VAL:HG23	1:A:138:ALA:O	0.75	1.80	16	2
1:A:42:ILE:HG23	1:A:67:ALA:CA	0.75	2.12	10	1
1:A:21:VAL:C	1:A:22:LEU:HD12	0.75	2.07	7	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HD11	0.75	2.16	16	1
1:A:79:VAL:O	1:A:117:VAL:HG22	0.74	1.83	8	4
1:A:34:TYR:CE1	1:A:41:LEU:HD13	0.74	2.18	14	2
1:A:48:ALA:HB1	1:A:60:VAL:HG21	0.74	1.58	13	2
1:A:76:VAL:HG23	1:A:120:ASP:CA	0.74	2.13	13	1
1:A:1:MET:CG	1:A:139:ILE:HD11	0.74	2.13	6	2
1:A:109:ILE:HA	1:A:119:VAL:HG12	0.74	1.59	15	3
1:A:79:VAL:CG1	1:A:83:VAL:HG21	0.74	2.13	4	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD13	0.74	1.97	13	1
1:A:52:HIS:HD1	1:A:136:VAL:HG21	0.74	1.43	15	1
1:A:3:VAL:HA	1:A:139:ILE:HG21	0.73	1.58	11	8
1:A:22:LEU:N	1:A:22:LEU:HD22	0.73	1.97	5	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:22:LEU:C	0.73	2.07	15	1
1:A:6:ASP:CA	1:A:35:LEU:HD11	0.73	2.12	16	3
1:A:15:VAL:HG22	1:A:24:ASP:O	0.73	1.83	11	1
1:A:42:ILE:HG21	1:A:67:ALA:HA	0.73	1.59	13	9
1:A:3:VAL:CG2	1:A:9:VAL:HG11	0.73	2.13	3	2
1:A:3:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HD13	0.73	1.60	11	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:11:LEU:O	0.73	1.83	16	2
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:CE1	0.73	2.19	14	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:139:ILE:HD11	0.73	2.18	15	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HD21	0.73	1.59	9	2
1:A:62:VAL:O	1:A:67:ALA:HB2	0.72	1.85	5	3
1:A:87:VAL:CG2	1:A:90:LEU:HD23	0.72	2.14	20	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:LEU:HB2	0.72	1.58	6	2
1:A:107:VAL:HB	1:A:119:VAL:HG21	0.72	1.61	16	2
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:HB	0.72	1.59	3	2
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD23	0.72	1.85	1	2
1:A:96:PHE:HB3	1:A:107:VAL:HG23	0.72	1.59	9	6
1:A:54:VAL:HG13	1:A:137:VAL:O	0.72	1.84	12	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:34:TYR:CZ	0.72	2.20	19	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:OH	0.71	1.84	11	1
1:A:1:MET:HE2	1:A:139:ILE:CG1	0.71	2.16	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:LYS:C	1:A:139:ILE:HD12	0.71	2.11	6	2
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:CG1	0.71	2.16	10	4
1:A:63:GLY:CA	1:A:67:ALA:HB3	0.71	2.15	9	12
1:A:45:LEU:HD13	1:A:132:PHE:CZ	0.71	2.19	5	1
1:A:15:VAL:HG12	1:A:132:PHE:CB	0.71	2.15	11	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:HG11	0.71	2.21	15	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:HG23	0.70	1.85	18	4
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD12	0.70	2.11	7	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HD21	0.70	2.21	17	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:HG21	0.70	2.21	15	2
1:A:34:TYR:CE2	1:A:41:LEU:HD12	0.70	2.21	15	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:HD12	0.70	1.86	19	2
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:HG13	0.70	1.86	5	2
1:A:146:GLU:HG2	1:A:152:VAL:HG12	0.70	1.62	17	1
1:A:35:LEU:HG	1:A:38:HIS:CE1	0.69	2.21	12	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HG	0.69	1.62	12	3
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:ASP:N	0.69	2.02	10	3
1:A:13:TYR:HB2	1:A:134:VAL:HG22	0.69	1.65	8	3
1:A:52:HIS:CE1	1:A:58:PHE:CE2	0.69	2.81	8	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:96:PHE:CZ	0.69	2.81	9	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	0.69	1.65	9	4
1:A:60:VAL:HG12	1:A:132:PHE:O	0.69	1.87	9	2
1:A:38:HIS:CG	1:A:38:HIS:O	0.68	2.46	15	5
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:C	0.68	2.37	16	4
1:A:17:THR:HG22	1:A:130:LEU:HD22	0.68	1.63	20	1
1:A:3:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD22	0.68	1.64	3	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:120:ASP:CB	0.68	2.18	13	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:132:PHE:HZ	0.68	1.47	5	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:49:LEU:HD21	0.68	1.63	16	3
1:A:15:VAL:HG23	1:A:130:LEU:HD12	0.68	1.65	19	1
1:A:52:HIS:CG	1:A:136:VAL:HG11	0.68	2.23	15	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:96:PHE:CE2	0.68	2.82	18	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:58:PHE:CE1	0.68	2.82	11	2
1:A:107:VAL:HB	1:A:119:VAL:HG22	0.68	1.63	14	5
1:A:9:VAL:HG21	1:A:49:LEU:CD1	0.68	2.18	3	1
1:A:96:PHE:O	1:A:107:VAL:HG22	0.68	1.88	3	6
1:A:84:PHE:CD1	1:A:96:PHE:CE2	0.68	2.82	7	1
1:A:109:ILE:HD13	1:A:109:ILE:N	0.68	2.03	14	1
1:A:129:ASN:C	1:A:130:LEU:HD22	0.68	2.13	4	1
1:A:3:VAL:HG13	1:A:9:VAL:HG21	0.68	1.66	6	3
1:A:36:HIS:CD2	1:A:49:LEU:HD13	0.68	2.23	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:HG12	1:A:140:ARG:O	0.67	1.89	20	5
1:A:52:HIS:CE1	1:A:58:PHE:CD2	0.67	2.82	1	2
1:A:58:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG23	0.67	2.24	16	2
1:A:11:LEU:HD11	1:A:49:LEU:HD11	0.67	1.64	20	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:139:ILE:HG22	0.67	1.65	8	2
1:A:7:LEU:HD13	1:A:140:ARG:O	0.67	1.89	4	5
1:A:40:SER:HB2	1:A:41:LEU:HD12	0.67	1.66	6	1
1:A:112:VAL:HG13	1:A:112:VAL:O	0.67	1.89	19	4
1:A:81:LYS:O	1:A:84:PHE:CD1	0.67	2.48	15	1
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:HD22	0.67	1.89	4	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:VAL:CB	0.66	2.19	17	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:HD2	0.66	1.45	4	2
1:A:5:LYS:CE	1:A:38:HIS:CE1	0.66	2.79	6	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:139:ILE:HD11	0.66	1.64	17	1
1:A:15:VAL:HG12	1:A:132:PHE:HB3	0.66	1.67	11	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:52:HIS:CD2	0.66	2.26	15	1
1:A:6:ASP:CB	1:A:147:LEU:HD11	0.66	2.21	7	2
1:A:22:LEU:HD12	1:A:22:LEU:N	0.66	2.06	7	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:96:PHE:CZ	0.65	2.84	9	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:7:LEU:C	0.65	2.15	19	1
1:A:9:VAL:O	1:A:9:VAL:HG23	0.65	1.89	3	4
1:A:8:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG21	0.65	1.68	19	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:136:VAL:N	0.65	2.06	17	2
1:A:7:LEU:HD23	1:A:140:ARG:C	0.65	2.15	1	2
1:A:11:LEU:HD21	1:A:34:TYR:OH	0.65	1.91	12	3
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:HG13	0.65	1.90	16	2
1:A:3:VAL:HG13	1:A:36:HIS:CD2	0.65	2.26	1	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:VAL:HG21	0.65	2.20	13	1
1:A:143:THR:O	1:A:147:LEU:HD12	0.65	1.91	14	1
1:A:58:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG23	0.65	2.27	16	2
1:A:62:VAL:CG1	1:A:132:PHE:CE2	0.65	2.80	11	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:VAL:HG23	0.65	1.92	15	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:LEU:HD22	0.65	1.69	7	2
1:A:13:TYR:CD1	1:A:132:PHE:CZ	0.65	2.85	9	3
1:A:13:TYR:HB2	1:A:134:VAL:HG12	0.65	1.69	15	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:VAL:HB	0.65	1.69	17	1
1:A:146:GLU:CG	1:A:152:VAL:HG12	0.65	2.22	17	1
1:A:6:ASP:C	1:A:35:LEU:HD11	0.64	2.17	16	2
1:A:11:LEU:HD12	1:A:11:LEU:C	0.64	2.17	6	2
1:A:60:VAL:CG1	1:A:132:PHE:CE1	0.64	2.80	12	1
1:A:110:THR:HG21	1:A:120:ASP:OD1	0.64	1.92	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:GLN:O	1:A:119:VAL:HG12	0.64	1.91	1	2
1:A:6:ASP:HB3	1:A:147:LEU:HD11	0.64	1.69	7	2
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:C	0.64	2.70	15	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:120:ASP:CG	0.64	2.17	1	2
1:A:3:VAL:HG12	1:A:36:HIS:CD2	0.64	2.28	5	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:150:GLY:O	0.64	1.93	14	3
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:CE1	0.64	2.66	16	4
1:A:58:PHE:CZ	1:A:134:VAL:CG2	0.64	2.80	16	3
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HD22	0.64	1.68	9	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:132:PHE:CE1	0.64	2.81	17	2
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:CB	0.64	2.80	15	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:89:GLU:H	0.64	1.51	17	2
1:A:83:VAL:HG12	1:A:83:VAL:O	0.64	1.92	11	4
1:A:35:LEU:HD23	1:A:150:GLY:O	0.64	1.92	8	2
1:A:15:VAL:CG1	1:A:132:PHE:CE1	0.64	2.81	14	1
1:A:58:PHE:CE2	1:A:60:VAL:CG2	0.64	2.81	20	2
1:A:146:GLU:OE1	1:A:152:VAL:HG23	0.64	1.93	6	1
1:A:48:ALA:HB1	1:A:58:PHE:CE1	0.64	2.28	8	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:118:VAL:HG13	0.63	1.70	11	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:76:VAL:O	0.63	1.92	8	4
1:A:13:TYR:HB3	1:A:134:VAL:HG22	0.63	1.69	8	2
1:A:35:LEU:CD2	1:A:38:HIS:CD2	0.63	2.82	11	5
1:A:45:LEU:HD11	1:A:134:VAL:HG21	0.63	1.70	4	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:CD1	0.63	2.67	18	3
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:CD2	0.63	2.81	12	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:139:ILE:CG2	0.63	2.24	13	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:38:HIS:CE1	0.63	2.81	14	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:LEU:CD1	0.63	2.24	11	3
1:A:84:PHE:O	1:A:84:PHE:CG	0.63	2.52	1	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:9:VAL:O	0.63	1.93	7	4
1:A:78:ARG:O	1:A:79:VAL:HG13	0.63	1.93	17	3
1:A:52:HIS:CD2	1:A:136:VAL:CG2	0.63	2.81	14	6
1:A:62:VAL:CG1	1:A:132:PHE:CE1	0.62	2.81	3	1
1:A:55:GLY:H	1:A:136:VAL:HG23	0.62	1.54	18	2
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:O	0.62	1.94	11	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:96:PHE:CE2	0.62	2.87	7	2
1:A:38:HIS:CD2	1:A:38:HIS:O	0.62	2.53	1	4
1:A:3:VAL:HG13	1:A:9:VAL:HG11	0.62	1.69	17	2
1:A:34:TYR:CE1	1:A:41:LEU:HD12	0.62	2.29	15	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:87:VAL:HG21	0.62	2.28	15	1
1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CD1	0.62	2.68	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:HIS:CD2	1:A:58:PHE:CD1	0.62	2.87	18	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:CD2	0.62	2.67	7	2
1:A:110:THR:HG22	1:A:118:VAL:O	0.62	1.95	9	3
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:HG22	0.62	1.93	12	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:49:LEU:HD11	0.62	1.71	1	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:130:LEU:N	0.62	2.08	11	1
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:HG13	0.62	1.93	12	2
1:A:36:HIS:O	1:A:38:HIS:CE1	0.62	2.53	12	1
1:A:2:LYS:O	1:A:139:ILE:HD12	0.61	1.95	18	2
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD21	0.61	1.71	9	2
1:A:87:VAL:CB	1:A:90:LEU:HD23	0.61	2.24	18	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:104:PRO:CB	0.61	2.26	13	1
1:A:3:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	0.61	1.72	20	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:107:VAL:CG2	0.61	2.84	2	2
1:A:3:VAL:HG12	1:A:50:GLU:HA	0.61	1.71	1	5
1:A:6:ASP:CA	1:A:147:LEU:HD21	0.61	2.24	4	2
1:A:92:VAL:O	1:A:92:VAL:HG13	0.61	1.96	14	3
1:A:11:LEU:HD21	1:A:34:TYR:HE1	0.61	1.54	14	1
1:A:68:TYR:N	1:A:68:TYR:CD1	0.61	2.65	2	5
1:A:6:ASP:C	1:A:7:LEU:HD12	0.61	2.20	3	3
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:CD1	0.61	2.26	9	2
1:A:41:LEU:O	1:A:42:ILE:C	0.61	2.44	14	3
1:A:107:VAL:CG1	1:A:119:VAL:HG21	0.61	2.26	18	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD12	0.60	2.21	8	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:90:LEU:CB	0.60	2.25	15	1
1:A:112:VAL:HG13	1:A:117:VAL:CG1	0.60	2.21	6	1
1:A:79:VAL:HG13	1:A:79:VAL:O	0.60	1.95	7	2
1:A:34:TYR:OH	1:A:41:LEU:HD23	0.60	1.96	12	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:67:ALA:HA	0.60	1.73	2	2
1:A:108:GLU:C	1:A:119:VAL:HG23	0.60	2.21	19	3
1:A:84:PHE:O	1:A:87:VAL:HG23	0.60	1.95	15	1
1:A:13:TYR:HB3	1:A:134:VAL:HG13	0.60	1.71	7	2
1:A:152:VAL:O	1:A:152:VAL:HG23	0.60	1.95	11	2
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CD1	0.60	2.63	13	2
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:CD2	0.60	2.68	15	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:HG13	0.60	1.95	3	3
1:A:96:PHE:C	1:A:107:VAL:HG22	0.60	2.21	6	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:HG23	0.60	1.97	20	4
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:O	0.60	2.55	15	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:38:HIS:NE2	0.60	2.65	19	7
1:A:86:GLY:C	1:A:87:VAL:HG12	0.60	2.22	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1:MET:HE2	1:A:139:ILE:HG22	0.60	1.72	19	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:58:PHE:CD1	0.60	2.90	11	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:96:PHE:CZ	0.60	2.90	5	2
1:A:132:PHE:CD1	1:A:132:PHE:O	0.59	2.55	16	12
1:A:7:LEU:HD22	1:A:141:GLU:HG3	0.59	1.72	4	1
1:A:38:HIS:O	1:A:38:HIS:CD2	0.59	2.55	15	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:134:VAL:HG13	0.59	2.27	1	2
1:A:58:PHE:CD1	1:A:58:PHE:N	0.59	2.70	18	2
1:A:62:VAL:HG12	1:A:66:ASP:O	0.59	1.97	12	4
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG23	0.59	1.97	18	7
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:CD1	0.59	2.82	15	2
1:A:112:VAL:HG23	1:A:117:VAL:HG12	0.59	1.72	10	4
1:A:109:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	0.59	1.74	9	2
1:A:83:VAL:HG22	1:A:83:VAL:O	0.59	1.97	15	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:O	0.59	1.98	13	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:130:LEU:N	0.59	2.13	3	4
1:A:15:VAL:HG13	1:A:15:VAL:O	0.59	1.96	7	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HD21	0.59	1.73	11	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:VAL:HG13	0.59	1.97	5	2
1:A:79:VAL:HG21	1:A:84:PHE:CZ	0.59	2.32	6	1
1:A:38:HIS:CD2	1:A:38:HIS:N	0.59	2.70	9	4
1:A:34:TYR:CD1	1:A:34:TYR:C	0.59	2.81	19	2
1:A:132:PHE:CE2	1:A:134:VAL:CG1	0.58	2.86	5	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:11:LEU:O	0.58	1.98	6	2
1:A:11:LEU:CD1	1:A:134:VAL:CG1	0.58	2.81	7	3
1:A:35:LEU:HG	1:A:38:HIS:CG	0.58	2.34	6	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:9:VAL:CG2	0.58	2.81	9	1
1:A:150:GLY:O	1:A:151:HIS:CG	0.58	2.56	19	4
1:A:6:ASP:OD1	1:A:38:HIS:CE1	0.58	2.56	6	1
1:A:37:GLY:C	1:A:38:HIS:CD2	0.58	2.81	7	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:152:VAL:CG2	0.58	2.81	19	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG22	0.58	1.73	20	1
1:A:61:ALA:C	1:A:62:VAL:HG13	0.58	2.23	18	4
1:A:1:MET:HE2	1:A:139:ILE:HG13	0.58	1.75	6	1
1:A:53:GLU:CG	1:A:56:ASP:CB	0.58	2.81	9	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:C	0.58	2.22	1	2
1:A:15:VAL:HG23	1:A:24:ASP:O	0.58	1.99	15	5
1:A:113:GLU:CB	1:A:116:HIS:NE2	0.58	2.66	3	2
1:A:67:ALA:O	1:A:68:TYR:CD1	0.58	2.57	11	2
1:A:52:HIS:ND1	1:A:136:VAL:HG11	0.58	2.14	15	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:83:VAL:CG2	0.58	2.82	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:LEU:HD23	1:A:38:HIS:CG	0.58	2.34	11	1
1:A:132:PHE:C	1:A:132:PHE:CD1	0.58	2.82	20	2
1:A:95:ARG:CG	1:A:108:GLU:CG	0.58	2.81	16	1
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:HG23	0.58	1.99	5	11
1:A:33:ASP:O	1:A:34:TYR:CG	0.58	2.57	20	3
1:A:33:ASP:O	1:A:152:VAL:HG21	0.58	1.98	7	1
1:A:13:TYR:HB3	1:A:134:VAL:HG12	0.58	1.75	16	3
1:A:13:TYR:CD1	1:A:13:TYR:O	0.58	2.57	9	2
1:A:34:TYR:CE1	1:A:40:SER:CB	0.58	2.87	12	2
1:A:87:VAL:CG2	1:A:90:LEU:CD2	0.58	2.77	20	1
1:A:49:LEU:O	1:A:52:HIS:CD2	0.58	2.57	2	1
1:A:89:GLU:O	1:A:90:LEU:HD12	0.58	1.99	7	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:54:VAL:O	0.58	1.96	8	3
1:A:130:LEU:HD23	1:A:130:LEU:H	0.58	1.57	11	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:33:ASP:OD1	0.57	1.98	10	2
1:A:8:VAL:CG1	1:A:142:ALA:HB2	0.57	2.29	2	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:9:VAL:HG11	0.57	1.74	20	1
1:A:21:VAL:C	1:A:22:LEU:HD22	0.57	2.25	4	1
1:A:56:ASP:O	1:A:136:VAL:HG12	0.57	1.99	5	1
1:A:34:TYR:N	1:A:34:TYR:CD1	0.57	2.71	6	1
1:A:42:ILE:HD12	1:A:62:VAL:CG1	0.57	2.29	9	1
1:A:60:VAL:O	1:A:132:PHE:CD1	0.57	2.58	3	1
1:A:48:ALA:O	1:A:52:HIS:CD2	0.57	2.57	4	3
1:A:79:VAL:HG13	1:A:83:VAL:HG21	0.57	1.74	4	1
1:A:145:GLU:O	1:A:149:HIS:CE1	0.57	2.57	12	1
1:A:112:VAL:HG23	1:A:116:HIS:O	0.57	1.99	13	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HD11	0.57	1.76	13	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:152:VAL:HG11	0.57	1.75	13	1
1:A:149:HIS:N	1:A:149:HIS:CD2	0.57	2.72	2	6
1:A:8:VAL:HG13	1:A:8:VAL:O	0.57	2.00	6	2
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:HG	0.57	1.76	10	1
1:A:83:VAL:O	1:A:84:PHE:C	0.57	2.47	16	1
1:A:42:ILE:CD1	1:A:68:TYR:CE1	0.57	2.86	2	3
1:A:111:ALA:HB3	1:A:118:VAL:CB	0.57	2.30	3	2
1:A:58:PHE:CE2	1:A:134:VAL:CG2	0.57	2.87	5	1
1:A:22:LEU:N	1:A:22:LEU:CD1	0.57	2.68	7	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:105:VAL:CG1	0.57	2.30	9	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:C	0.57	2.48	4	3
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:CG1	0.57	2.88	15	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:CG2	0.57	2.88	15	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:96:PHE:CD2	0.57	2.93	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:VAL:HG23	1:A:139:ILE:CG1	0.57	2.29	1	2
1:A:6:ASP:HA	1:A:35:LEU:HD23	0.57	1.77	10	2
1:A:87:VAL:HG13	1:A:88:ASP:H	0.57	1.58	10	4
1:A:84:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HG11	0.57	1.75	16	1
1:A:107:VAL:HG12	1:A:119:VAL:CB	0.57	2.29	18	1
1:A:36:HIS:CE1	1:A:46:GLU:OE1	0.56	2.58	4	1
1:A:15:VAL:HG21	1:A:130:LEU:HD12	0.56	1.76	5	1
1:A:58:PHE:CD1	1:A:58:PHE:C	0.56	2.83	15	2
1:A:17:THR:OG1	1:A:21:VAL:HG22	0.56	2.01	6	3
1:A:5:LYS:HE3	1:A:38:HIS:CE1	0.56	2.35	6	2
1:A:33:ASP:O	1:A:34:TYR:CD1	0.56	2.59	5	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:136:VAL:HG11	0.56	2.35	15	1
1:A:3:VAL:CG1	1:A:36:HIS:CE1	0.56	2.88	14	1
1:A:96:PHE:C	1:A:96:PHE:CD1	0.56	2.83	14	2
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:VAL:CG2	0.56	2.89	2	2
1:A:33:ASP:C	1:A:34:TYR:CD1	0.56	2.83	11	1
1:A:60:VAL:O	1:A:60:VAL:HG13	0.56	2.00	12	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:36:HIS:CG	0.56	2.89	16	1
1:A:107:VAL:CG1	1:A:119:VAL:CG2	0.56	2.83	18	1
1:A:61:ALA:C	1:A:62:VAL:HG23	0.56	2.25	12	11
1:A:59:ASP:C	1:A:60:VAL:HG23	0.56	2.25	4	2
1:A:22:LEU:N	1:A:22:LEU:CD2	0.56	2.66	5	2
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:CG2	0.56	2.54	18	7
1:A:87:VAL:CG1	1:A:90:LEU:CD1	0.56	2.83	8	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:HD13	0.56	1.77	17	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:VAL:CG2	0.56	2.54	6	6
1:A:3:VAL:CG1	1:A:36:HIS:ND1	0.56	2.68	14	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:11:LEU:N	0.56	2.15	15	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:87:VAL:CG2	0.56	2.86	15	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:131:LYS:HD3	0.56	1.77	16	1
1:A:94:MET:HB3	1:A:109:ILE:HD11	0.55	1.77	1	3
1:A:64:ALA:HB3	1:A:129:ASN:ND2	0.55	2.15	2	1
1:A:138:ALA:C	1:A:139:ILE:CG1	0.55	2.79	11	13
1:A:79:VAL:O	1:A:79:VAL:HG13	0.55	2.00	3	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:139:ILE:C	0.55	2.26	17	2
1:A:111:ALA:O	1:A:118:VAL:HG12	0.55	2.00	7	1
1:A:112:VAL:O	1:A:112:VAL:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:8:VAL:N	1:A:140:ARG:O	0.55	2.40	11	17
1:A:132:PHE:CD1	1:A:132:PHE:C	0.55	2.84	11	7
1:A:94:MET:HE2	1:A:109:ILE:HD11	0.55	1.78	2	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:O	0.55	2.00	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD12	1:A:135:GLU:C	0.55	2.26	17	2
1:A:113:GLU:OE1	1:A:118:VAL:HG13	0.55	2.00	16	1
1:A:150:GLY:O	1:A:151:HIS:CD2	0.55	2.59	16	2
1:A:109:ILE:HD13	1:A:119:VAL:HG12	0.55	1.76	7	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:90:LEU:CB	0.55	2.84	15	1
1:A:114:ASP:O	1:A:115:ASP:CB	0.55	2.53	5	5
1:A:151:HIS:N	1:A:151:HIS:CD2	0.55	2.75	9	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:90:LEU:HD13	0.55	2.31	17	1
1:A:109:ILE:CD1	1:A:117:VAL:HG11	0.55	2.32	9	1
1:A:30:ALA:N	1:A:31:PRO:CD	0.55	2.70	10	4
1:A:34:TYR:CG	1:A:41:LEU:HD13	0.55	2.37	2	2
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:HD22	0.55	2.02	12	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:21:VAL:CG2	0.55	2.55	6	3
1:A:138:ALA:C	1:A:139:ILE:HG23	0.55	2.26	6	2
1:A:51:GLY:O	1:A:52:HIS:CG	0.55	2.60	11	1
1:A:78:ARG:CB	1:A:118:VAL:HG12	0.55	2.31	6	1
1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:OD1	0.55	2.40	16	3
1:A:78:ARG:C	1:A:79:VAL:HG23	0.54	2.27	9	5
1:A:7:LEU:HD22	1:A:139:ILE:CG2	0.54	2.32	19	1
1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:VAL:N	0.54	2.17	1	3
1:A:9:VAL:O	1:A:9:VAL:CG2	0.54	2.56	3	4
1:A:17:THR:HG22	1:A:130:LEU:HD12	0.54	1.79	6	1
1:A:109:ILE:N	1:A:119:VAL:HG23	0.54	2.17	19	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:105:VAL:HG23	0.54	1.77	13	1
1:A:133:ASN:C	1:A:134:VAL:HG23	0.54	2.27	19	3
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:CB	0.54	2.55	10	11
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:VAL:CB	0.54	2.33	1	1
1:A:68:TYR:CD1	1:A:68:TYR:N	0.54	2.71	17	2
1:A:67:ALA:C	1:A:68:TYR:CD1	0.54	2.85	17	2
1:A:45:LEU:HD12	1:A:132:PHE:CZ	0.54	2.36	12	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:150:GLY:HA2	0.54	1.80	19	2
1:A:52:HIS:CB	1:A:136:VAL:HG21	0.54	2.30	20	1
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD2	0.54	2.80	1	1
1:A:38:HIS:ND1	1:A:38:HIS:N	0.54	2.56	12	2
1:A:146:GLU:OE1	1:A:152:VAL:CB	0.54	2.56	6	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:11:LEU:HD13	0.54	1.77	8	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:11:LEU:H	0.54	1.62	15	1
1:A:149:HIS:ND1	1:A:149:HIS:N	0.54	2.56	4	1
1:A:79:VAL:HG23	1:A:83:VAL:HG21	0.54	1.78	7	1
1:A:146:GLU:OE1	1:A:146:GLU:CA	0.54	2.56	8	2
1:A:7:LEU:O	1:A:9:VAL:HG13	0.54	2.03	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:GLY:C	1:A:67:ALA:HB3	0.54	2.26	6	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:VAL:CG1	0.54	2.56	5	3
1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:VAL:HG11	0.54	1.80	7	1
1:A:42:ILE:HG23	1:A:67:ALA:CB	0.54	2.33	10	1
1:A:38:HIS:CD2	1:A:38:HIS:H	0.54	2.21	19	4
1:A:86:GLY:C	1:A:87:VAL:CG1	0.54	2.80	4	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:VAL:CG1	0.54	2.33	10	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:140:ARG:C	0.53	2.81	14	4
1:A:151:HIS:CD2	1:A:151:HIS:C	0.53	2.85	10	6
1:A:1:MET:HE2	1:A:139:ILE:HG12	0.53	1.78	6	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:21:VAL:CG1	0.53	2.57	18	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:VAL:CG1	0.53	2.57	17	3
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:CG2	0.53	2.56	15	4
1:A:45:LEU:HD13	1:A:132:PHE:HE1	0.53	1.62	6	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:66:ASP:C	0.53	2.81	6	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:88:ASP:N	0.53	2.18	9	2
1:A:35:LEU:CG	1:A:38:HIS:O	0.53	2.57	16	1
1:A:66:ASP:O	1:A:67:ALA:HB2	0.53	2.03	2	3
1:A:1:MET:CE	1:A:139:ILE:O	0.53	2.57	3	5
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:CB	0.53	2.57	3	1
1:A:6:ASP:OD1	1:A:147:LEU:CD1	0.53	2.57	9	2
1:A:60:VAL:O	1:A:132:PHE:CE1	0.53	2.61	3	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:49:LEU:HD13	0.53	1.80	4	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:84:PHE:O	0.53	2.61	15	1
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CD	0.53	2.67	17	2
1:A:65:ASN:O	1:A:66:ASP:CB	0.53	2.56	13	9
1:A:44:GLY:O	1:A:47:THR:HG22	0.53	2.02	16	2
1:A:42:ILE:HG22	1:A:45:LEU:H	0.53	1.63	10	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:140:ARG:O	0.53	2.56	18	2
1:A:113:GLU:HB3	1:A:116:HIS:CE1	0.53	2.39	3	2
1:A:15:VAL:HG21	1:A:130:LEU:CD1	0.53	2.33	5	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:150:GLY:O	0.53	2.57	9	2
1:A:7:LEU:CD1	1:A:9:VAL:CG2	0.53	2.86	19	1
1:A:11:LEU:CB	1:A:135:GLU:O	0.53	2.57	2	5
1:A:13:TYR:C	1:A:13:TYR:CD1	0.53	2.86	8	2
1:A:22:LEU:HD12	1:A:25:GLU:OE1	0.53	2.03	4	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:130:LEU:CD2	0.53	2.32	14	3
1:A:58:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG21	0.53	2.38	15	1
1:A:89:GLU:CG	1:A:89:GLU:O	0.53	2.57	16	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:66:ASP:O	0.53	2.56	3	1
1:A:79:VAL:O	1:A:117:VAL:CG2	0.53	2.57	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD21	1:A:134:VAL:HG11	0.53	1.81	6	1
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:CG2	0.53	2.57	4	14
1:A:52:HIS:CD2	1:A:136:VAL:HG21	0.53	2.37	14	4
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:5:LYS:O	1:A:7:LEU:N	0.53	2.41	10	4
1:A:11:LEU:O	1:A:11:LEU:CD1	0.53	2.56	11	4
1:A:97:LEU:HD22	1:A:106:PRO:HA	0.53	1.81	7	1
1:A:35:LEU:C	1:A:38:HIS:CE1	0.53	2.87	12	1
1:A:86:GLY:C	1:A:87:VAL:HG22	0.53	2.29	12	1
1:A:62:VAL:O	1:A:67:ALA:CB	0.53	2.56	18	6
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:CG2	0.53	2.55	12	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:83:VAL:CG1	0.53	2.87	15	1
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:CB	0.53	2.57	16	6
1:A:87:VAL:O	1:A:88:ASP:CB	0.53	2.57	20	5
1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:OE1	0.53	2.42	2	5
1:A:78:ARG:C	1:A:79:VAL:CG2	0.53	2.82	14	4
1:A:6:ASP:OD1	1:A:147:LEU:CD2	0.53	2.57	6	1
1:A:139:ILE:CG1	1:A:139:ILE:O	0.53	2.57	6	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:23:VAL:CG2	0.53	2.87	8	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:96:PHE:CE1	0.53	2.97	9	1
1:A:95:ARG:CD	1:A:95:ARG:O	0.53	2.57	15	1
1:A:112:VAL:O	1:A:112:VAL:CG1	0.53	2.57	19	3
1:A:116:HIS:C	1:A:117:VAL:HG23	0.53	2.29	17	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:24:ASP:O	0.52	2.56	9	3
1:A:15:VAL:CG2	1:A:130:LEU:HD12	0.52	2.34	5	2
1:A:53:GLU:O	1:A:136:VAL:CG1	0.52	2.57	6	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:66:ASP:O	0.52	2.57	20	5
1:A:15:VAL:O	1:A:15:VAL:CG1	0.52	2.57	7	1
1:A:116:HIS:C	1:A:117:VAL:CG2	0.52	2.82	17	1
1:A:3:VAL:CA	1:A:139:ILE:HD13	0.52	2.34	14	11
1:A:61:ALA:HB2	1:A:131:LYS:HG3	0.52	1.79	4	1
1:A:63:GLY:CA	1:A:130:LEU:CB	0.52	2.87	6	1
1:A:61:ALA:C	1:A:62:VAL:CG1	0.52	2.82	16	3
1:A:79:VAL:HG23	1:A:80:PRO:HD2	0.52	1.79	13	2
1:A:84:PHE:CE2	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.97	18	1
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:N	0.52	2.41	5	4
1:A:58:PHE:CD1	1:A:58:PHE:O	0.52	2.63	2	2
1:A:102:GLN:NE2	1:A:129:ASN:OD1	0.52	2.42	6	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:132:PHE:CZ	0.52	2.93	10	2
1:A:112:VAL:HG13	1:A:117:VAL:HG22	0.52	1.80	12	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HD21	0.52	2.39	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:VAL:HG11	1:A:119:VAL:HG21	0.52	1.81	18	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:CD2	0.52	2.29	5	1
1:A:1:MET:HE2	1:A:139:ILE:O	0.52	2.04	6	2
1:A:38:HIS:CB	1:A:150:GLY:O	0.52	2.57	8	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:CG1	0.52	2.57	8	2
1:A:38:HIS:CD2	1:A:38:HIS:C	0.52	2.88	16	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:CG2	0.52	2.57	16	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HB	0.52	1.80	2	1
1:A:7:LEU:CA	1:A:140:ARG:O	0.52	2.58	19	3
1:A:52:HIS:O	1:A:52:HIS:ND1	0.52	2.42	8	2
1:A:54:VAL:CG1	1:A:137:VAL:O	0.52	2.57	12	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HG21	0.52	1.81	18	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:140:ARG:O	0.52	2.57	20	1
1:A:94:MET:HE2	1:A:109:ILE:CD1	0.52	2.33	1	1
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:CD1	0.52	2.58	2	3
1:A:5:LYS:O	1:A:5:LYS:CD	0.52	2.58	3	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:62:VAL:O	0.52	2.57	3	2
1:A:35:LEU:CG	1:A:38:HIS:NE2	0.52	2.73	17	2
1:A:96:PHE:O	1:A:107:VAL:CG2	0.52	2.57	6	2
1:A:7:LEU:HB3	1:A:139:ILE:HG22	0.52	1.80	11	1
1:A:34:TYR:CD2	1:A:41:LEU:CD1	0.52	2.81	11	1
1:A:34:TYR:CB	1:A:49:LEU:HD11	0.52	2.35	11	1
1:A:152:VAL:O	1:A:152:VAL:CG2	0.52	2.58	11	2
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	0.52	1.82	14	1
1:A:95:ARG:CG	1:A:107:VAL:O	0.52	2.58	17	2
1:A:86:GLY:C	1:A:87:VAL:HG13	0.52	2.30	18	2
1:A:110:THR:CG2	1:A:120:ASP:OD1	0.52	2.58	16	1
1:A:107:VAL:C	1:A:108:GLU:CG	0.52	2.83	2	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:CG	0.52	2.53	13	2
1:A:5:LYS:HE2	1:A:38:HIS:CE1	0.52	2.40	6	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:130:LEU:H	0.52	1.64	9	1
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:CD1	0.52	2.77	15	1
1:A:52:HIS:ND1	1:A:136:VAL:CG2	0.52	2.69	15	1
1:A:5:LYS:HE2	1:A:38:HIS:CG	0.52	2.40	16	1
1:A:52:HIS:ND1	1:A:52:HIS:N	0.52	2.58	2	1
1:A:78:ARG:C	1:A:79:VAL:HG13	0.52	2.29	6	4
1:A:146:GLU:OE1	1:A:152:VAL:CG2	0.52	2.58	6	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:CE2	0.52	2.78	8	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:132:PHE:HD2	0.52	1.65	9	1
1:A:109:ILE:HD11	1:A:117:VAL:CG1	0.52	2.35	9	1
1:A:58:PHE:CE1	1:A:134:VAL:CG2	0.52	2.93	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:CG2	1:A:33:ASP:OD2	0.52	2.58	20	1
1:A:61:ALA:C	1:A:62:VAL:CG2	0.52	2.83	14	7
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD1	0.52	2.80	10	3
1:A:3:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HD11	0.51	1.78	20	3
1:A:9:VAL:O	1:A:11:LEU:HD23	0.51	2.05	19	3
1:A:145:GLU:O	1:A:148:ALA:HB3	0.51	2.04	19	4
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:CG1	0.51	2.58	14	3
1:A:88:ASP:OD1	1:A:88:ASP:N	0.51	2.42	15	2
1:A:76:VAL:HG12	1:A:120:ASP:HB2	0.51	1.81	10	1
1:A:79:VAL:HG11	1:A:83:VAL:HG11	0.51	1.81	15	1
1:A:80:PRO:O	1:A:83:VAL:HG12	0.51	2.05	15	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:VAL:HG13	0.51	1.81	16	1
1:A:59:ASP:OD1	1:A:59:ASP:N	0.51	2.43	2	3
1:A:109:ILE:HG23	1:A:109:ILE:O	0.51	2.05	19	4
1:A:3:VAL:HG11	1:A:36:HIS:CD2	0.51	2.40	6	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:38:HIS:HD2	0.51	1.65	15	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:140:ARG:HB3	0.51	1.81	16	1
1:A:129:ASN:N	1:A:129:ASN:OD1	0.51	2.43	1	1
1:A:79:VAL:O	1:A:117:VAL:HG13	0.51	2.05	4	1
1:A:84:PHE:O	1:A:86:GLY:N	0.51	2.43	6	3
1:A:11:LEU:CD2	1:A:49:LEU:CD2	0.51	2.84	9	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:132:PHE:CE1	0.51	2.40	12	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:139:ILE:HD11	0.51	2.34	17	1
1:A:92:VAL:HG22	1:A:112:VAL:HG21	0.51	1.83	17	1
1:A:5:LYS:HE3	1:A:38:HIS:CG	0.51	2.39	19	1
1:A:93:GLY:CA	1:A:109:ILE:O	0.51	2.58	7	3
1:A:59:ASP:C	1:A:60:VAL:CG2	0.51	2.83	4	1
1:A:32:LEU:HB3	1:A:34:TYR:CE2	0.51	2.40	6	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:139:ILE:HG12	0.51	1.83	8	2
1:A:87:VAL:CG2	1:A:90:LEU:HD12	0.51	2.35	14	1
1:A:92:VAL:O	1:A:92:VAL:CG1	0.51	2.58	14	2
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:CG2	0.51	2.55	14	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:VAL:CG2	0.51	2.59	15	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:CD2	0.51	2.57	19	1
1:A:85:MET:O	1:A:85:MET:CG	0.51	2.57	20	1
1:A:138:ALA:O	1:A:139:ILE:CG1	0.51	2.58	19	5
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:CG1	0.51	2.57	16	3
1:A:118:VAL:C	1:A:119:VAL:HG13	0.51	2.31	20	2
1:A:40:SER:C	1:A:41:LEU:HD22	0.51	2.29	12	1
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:HG13	0.51	2.05	13	1
1:A:84:PHE:O	1:A:87:VAL:CG2	0.51	2.58	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:SER:C	1:A:41:LEU:CD1	0.51	2.81	19	1
1:A:47:THR:HG23	1:A:48:ALA:N	0.51	2.21	1	3
1:A:56:ASP:OD1	1:A:57:LYS:N	0.51	2.44	1	2
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:CG1	0.51	2.58	5	2
1:A:54:VAL:HA	1:A:136:VAL:HG13	0.51	1.81	6	1
1:A:32:LEU:O	1:A:34:TYR:CD2	0.51	2.63	8	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:58:PHE:CZ	0.51	2.99	11	1
1:A:35:LEU:HB3	1:A:38:HIS:ND1	0.51	2.20	12	1
1:A:94:MET:HG3	1:A:109:ILE:HD11	0.51	1.81	16	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:CG1	0.51	2.58	17	1
1:A:40:SER:OG	1:A:41:LEU:N	0.51	2.44	20	1
1:A:55:GLY:N	1:A:136:VAL:O	0.51	2.43	1	3
1:A:93:GLY:N	1:A:109:ILE:O	0.51	2.43	7	3
1:A:150:GLY:O	1:A:151:HIS:ND1	0.51	2.43	1	4
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:CB	0.51	2.59	5	8
1:A:52:HIS:O	1:A:56:ASP:CB	0.51	2.59	20	4
1:A:63:GLY:CA	1:A:130:LEU:HB2	0.51	2.36	6	1
1:A:143:THR:HG1	1:A:146:GLU:CD	0.51	2.13	17	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:C	0.51	2.51	13	4
1:A:9:VAL:HG22	1:A:34:TYR:O	0.51	2.06	5	2
1:A:139:ILE:HG13	1:A:139:ILE:O	0.51	2.05	6	1
1:A:146:GLU:CB	1:A:151:HIS:O	0.51	2.59	12	1
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:CG	0.51	2.58	15	1
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:90:LEU:HD21	0.51	1.65	15	1
1:A:34:TYR:CE1	1:A:40:SER:OG	0.51	2.60	19	1
1:A:89:GLU:O	1:A:94:MET:HE1	0.51	2.06	20	1
1:A:1:MET:CG	1:A:2:LYS:N	0.51	2.72	16	3
1:A:7:LEU:CD1	1:A:139:ILE:HG22	0.51	2.33	4	1
1:A:13:TYR:CE1	1:A:26:SER:OG	0.51	2.63	15	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:HB	0.51	2.06	15	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:45:LEU:C	0.51	2.84	19	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:9:VAL:HG11	0.51	1.83	3	1
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:CG1	0.51	2.59	19	3
1:A:3:VAL:CG2	1:A:139:ILE:CD1	0.50	2.81	4	4
1:A:47:THR:CG2	1:A:48:ALA:N	0.50	2.73	6	2
1:A:9:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HG22	0.50	1.84	6	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:83:VAL:N	0.50	2.44	8	1
1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:OD1	0.50	2.43	13	2
1:A:6:ASP:OD1	1:A:38:HIS:NE2	0.50	2.44	14	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:GLU:CG	0.50	2.59	15	1
1:A:143:THR:HG23	1:A:146:GLU:OE1	0.50	2.06	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:TYR:CZ	1:A:41:LEU:HD22	0.50	2.41	14	3
1:A:5:LYS:HG2	1:A:38:HIS:CE1	0.50	2.42	17	2
1:A:108:GLU:N	1:A:120:ASP:O	0.50	2.44	20	2
1:A:146:GLU:OE1	1:A:146:GLU:N	0.50	2.44	7	2
1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:GLU:OE2	0.50	2.07	8	1
1:A:34:TYR:HB3	1:A:49:LEU:CD1	0.50	2.36	11	1
1:A:42:ILE:CD1	1:A:68:TYR:CE2	0.50	2.94	12	1
1:A:13:TYR:HB2	1:A:132:PHE:CE2	0.50	2.41	19	1
1:A:6:ASP:OD2	1:A:147:LEU:CD2	0.50	2.60	20	2
1:A:33:ASP:N	1:A:33:ASP:OD1	0.50	2.43	2	5
1:A:44:GLY:HA3	1:A:62:VAL:HG11	0.50	1.83	12	3
1:A:52:HIS:NE2	1:A:136:VAL:HG21	0.50	2.22	2	1
1:A:132:PHE:CD1	1:A:132:PHE:N	0.50	2.79	5	2
1:A:3:VAL:CG1	1:A:36:HIS:CD2	0.50	2.95	6	1
1:A:15:VAL:O	1:A:23:VAL:N	0.50	2.41	6	2
1:A:11:LEU:HD21	1:A:34:TYR:CE1	0.50	2.40	14	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:139:ILE:CG2	0.50	2.32	4	1
1:A:138:ALA:C	1:A:139:ILE:CG2	0.50	2.84	6	2
1:A:53:GLU:CG	1:A:56:ASP:HB3	0.50	2.37	9	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:147:LEU:CD2	0.50	2.90	9	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:88:ASP:N	0.50	2.22	17	1
1:A:34:TYR:OH	1:A:49:LEU:HD13	0.50	2.07	2	1
1:A:109:ILE:CG2	1:A:109:ILE:O	0.50	2.57	15	3
1:A:58:PHE:O	1:A:133:ASN:ND2	0.50	2.44	5	3
1:A:3:VAL:HG22	1:A:139:ILE:CG2	0.50	2.37	18	1
1:A:34:TYR:HA	1:A:152:VAL:HG11	0.50	1.83	18	1
1:A:13:TYR:CB	1:A:133:ASN:O	0.50	2.60	11	7
1:A:22:LEU:HD11	1:A:25:GLU:HB3	0.50	1.84	2	1
1:A:39:GLY:O	1:A:40:SER:CB	0.50	2.59	2	7
1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CD	0.50	2.69	13	3
1:A:58:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HG21	0.50	2.42	5	1
1:A:36:HIS:CD2	1:A:49:LEU:HD23	0.50	2.42	6	1
1:A:63:GLY:HA2	1:A:130:LEU:CB	0.50	2.36	6	1
1:A:147:LEU:CD2	1:A:147:LEU:N	0.50	2.75	9	2
1:A:67:ALA:C	1:A:68:TYR:CG	0.50	2.89	13	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:11:LEU:HD22	0.50	1.84	15	1
1:A:134:VAL:C	1:A:135:GLU:CG	0.50	2.84	19	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:49:LEU:HD11	0.50	2.37	2	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:GLU:H	0.50	1.67	2	2
1:A:111:ALA:O	1:A:118:VAL:CG1	0.50	2.60	7	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:56:ASP:HB3	0.50	2.42	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1:MET:HE3	1:A:139:ILE:O	0.50	2.07	16	2
1:A:14:GLN:O	1:A:132:PHE:CB	0.49	2.60	4	6
1:A:91:GLN:O	1:A:94:MET:CB	0.49	2.60	2	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:C	0.49	2.90	16	2
1:A:13:TYR:CD1	1:A:13:TYR:N	0.49	2.80	15	4
1:A:63:GLY:HA2	1:A:130:LEU:HD12	0.49	1.78	17	1
1:A:76:VAL:CG1	1:A:120:ASP:OD2	0.49	2.59	1	1
1:A:11:LEU:CA	1:A:135:GLU:O	0.49	2.59	2	5
1:A:76:VAL:HG12	1:A:120:ASP:CB	0.49	2.38	10	1
1:A:8:VAL:CB	1:A:152:VAL:HG21	0.49	2.37	13	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:132:PHE:CD1	0.49	2.42	19	1
1:A:6:ASP:HA	1:A:147:LEU:HD21	0.49	1.83	4	3
1:A:84:PHE:O	1:A:84:PHE:CD1	0.49	2.65	1	1
1:A:101:ASP:N	1:A:101:ASP:OD1	0.49	2.44	5	2
1:A:96:PHE:C	1:A:107:VAL:CG2	0.49	2.85	6	1
1:A:41:LEU:HB3	1:A:45:LEU:HD21	0.49	1.84	7	1
1:A:4:ALA:O	1:A:6:ASP:N	0.49	2.42	3	1
1:A:79:VAL:O	1:A:117:VAL:CG1	0.49	2.60	4	1
1:A:36:HIS:CE1	1:A:50:GLU:HB2	0.49	2.42	5	2
1:A:6:ASP:OD1	1:A:147:LEU:HD11	0.49	2.07	9	1
1:A:149:HIS:HB2	1:A:151:HIS:CD2	0.49	2.43	10	2
1:A:151:HIS:O	1:A:151:HIS:CD2	0.49	2.65	14	1
1:A:79:VAL:O	1:A:79:VAL:CG1	0.49	2.60	7	3
1:A:95:ARG:CD	1:A:95:ARG:C	0.49	2.85	15	1
1:A:95:ARG:HG3	1:A:108:GLU:CG	0.49	2.36	16	1
1:A:40:SER:CB	1:A:41:LEU:HD12	0.49	2.37	18	1
1:A:5:LYS:CE	1:A:38:HIS:ND1	0.49	2.75	19	1
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:CG1	0.49	2.61	12	2
1:A:94:MET:CG	1:A:109:ILE:HD11	0.49	2.38	16	1
1:A:141:GLU:OE1	1:A:141:GLU:N	0.49	2.46	16	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:136:VAL:CG1	0.49	2.38	18	1
1:A:5:LYS:CG	1:A:6:ASP:N	0.49	2.75	9	3
1:A:17:THR:O	1:A:18:GLU:C	0.49	2.56	6	5
1:A:14:GLN:CD	1:A:22:LEU:HD21	0.49	2.33	10	1
1:A:34:TYR:CE2	1:A:41:LEU:CD2	0.49	2.81	11	2
1:A:90:LEU:HG	1:A:96:PHE:CE1	0.49	2.43	13	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:HG23	0.49	2.08	18	2
1:A:9:VAL:CG2	1:A:138:ALA:O	0.49	2.59	16	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:87:VAL:O	0.49	2.07	11	2
1:A:120:ASP:O	1:A:120:ASP:CG	0.49	2.56	9	5
1:A:144:GLU:O	1:A:148:ALA:HB2	0.49	2.08	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:VAL:CG1	1:A:139:ILE:CG1	0.49	2.90	17	1
1:A:15:VAL:O	1:A:22:LEU:CD1	0.49	2.61	17	2
1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:VAL:N	0.49	2.23	4	1
1:A:53:GLU:CG	1:A:56:ASP:HB2	0.49	2.38	9	1
1:A:5:LYS:HD2	1:A:38:HIS:CD2	0.49	2.43	10	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CG	0.49	2.60	17	1
1:A:13:TYR:CE1	1:A:41:LEU:HD21	0.48	2.43	1	1
1:A:30:ALA:N	1:A:31:PRO:HD3	0.48	2.23	10	2
1:A:13:TYR:CE1	1:A:132:PHE:CZ	0.48	3.01	7	1
1:A:100:THR:OG1	1:A:105:VAL:CG2	0.48	2.60	17	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:118:VAL:CG1	0.48	2.38	3	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:139:ILE:HG13	0.48	1.84	14	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:VAL:HG21	0.48	1.84	16	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:CG1	0.48	2.60	6	3
1:A:142:ALA:O	1:A:147:LEU:CD1	0.48	2.61	2	2
1:A:91:GLN:O	1:A:92:VAL:C	0.48	2.57	13	6
1:A:133:ASN:OD1	1:A:134:VAL:N	0.48	2.46	16	2
1:A:6:ASP:HA	1:A:35:LEU:CD2	0.48	2.38	10	2
1:A:58:PHE:O	1:A:134:VAL:HG22	0.48	2.08	10	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:134:VAL:HG21	0.48	2.38	17	1
1:A:5:LYS:C	1:A:36:HIS:O	0.48	2.57	18	1
1:A:11:LEU:HA	1:A:135:GLU:O	0.48	2.09	2	16
1:A:114:ASP:O	1:A:115:ASP:C	0.48	2.56	9	11
1:A:48:ALA:O	1:A:52:HIS:NE2	0.48	2.47	4	1
1:A:35:LEU:HB2	1:A:38:HIS:O	0.48	2.08	15	1
1:A:88:ASP:CG	1:A:89:GLU:CD	0.48	2.81	15	1
1:A:66:ASP:O	1:A:67:ALA:C	0.48	2.56	17	3
1:A:6:ASP:HB3	1:A:147:LEU:CD1	0.48	2.38	11	1
1:A:35:LEU:CB	1:A:38:HIS:O	0.48	2.61	17	1
1:A:58:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HB	0.48	2.43	19	2
1:A:19:ASP:OD1	1:A:20:GLY:N	0.48	2.46	10	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:90:LEU:HD21	0.48	2.23	15	1
1:A:7:LEU:HA	1:A:140:ARG:O	0.48	2.09	18	14
1:A:98:ALA:CB	1:A:105:VAL:O	0.48	2.59	7	2
1:A:146:GLU:CG	1:A:152:VAL:HA	0.48	2.39	12	1
1:A:38:HIS:CE1	1:A:147:LEU:HD23	0.48	2.44	13	1
1:A:43:SER:O	1:A:44:GLY:C	0.48	2.57	1	4
1:A:108:GLU:O	1:A:109:ILE:HD13	0.48	2.09	5	1
1:A:42:ILE:HD12	1:A:62:VAL:HG11	0.48	1.86	6	2
1:A:115:ASP:O	1:A:116:HIS:ND1	0.48	2.47	13	1
1:A:143:THR:CB	1:A:146:GLU:OE1	0.48	2.62	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:HIS:CD2	1:A:49:LEU:HB3	0.48	2.43	19	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:24:ASP:O	0.48	2.62	8	2
1:A:65:ASN:O	1:A:66:ASP:CG	0.48	2.57	5	3
1:A:5:LYS:HA	1:A:36:HIS:O	0.48	2.09	18	6
1:A:11:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD22	0.48	2.36	9	2
1:A:15:VAL:HG23	1:A:132:PHE:HD1	0.48	1.69	7	1
1:A:5:LYS:O	1:A:36:HIS:O	0.48	2.31	11	2
1:A:52:HIS:NE2	1:A:139:ILE:CD1	0.48	2.67	15	1
1:A:146:GLU:OE2	1:A:152:VAL:CG1	0.48	2.56	20	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:49:LEU:HD22	0.48	2.38	3	1
1:A:11:LEU:HA	1:A:137:VAL:HG23	0.48	1.86	5	1
1:A:49:LEU:O	1:A:50:GLU:C	0.48	2.57	15	4
1:A:107:VAL:HB	1:A:119:VAL:CG2	0.48	2.36	16	4
1:A:17:THR:OG1	1:A:19:ASP:OD1	0.48	2.32	10	1
1:A:10:SER:OG	1:A:33:ASP:CG	0.48	2.57	13	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:80:PRO:HD2	0.48	2.39	13	2
1:A:58:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HB	0.47	2.44	19	3
1:A:79:VAL:CG2	1:A:84:PHE:CZ	0.47	2.97	6	1
1:A:68:TYR:CE2	1:A:130:LEU:HD13	0.47	2.43	8	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:136:VAL:HB	0.47	2.44	15	1
1:A:107:VAL:CB	1:A:119:VAL:HG21	0.47	2.35	16	1
1:A:82:ASP:N	1:A:82:ASP:OD1	0.47	2.47	1	1
1:A:114:ASP:C	1:A:115:ASP:CG	0.47	2.80	1	2
1:A:45:LEU:O	1:A:46:GLU:C	0.47	2.57	3	6
1:A:36:HIS:NE2	1:A:50:GLU:CB	0.47	2.78	5	1
1:A:12:ALA:HB1	1:A:26:SER:HB3	0.47	1.85	6	1
1:A:6:ASP:N	1:A:38:HIS:NE2	0.47	2.49	12	1
1:A:24:ASP:OD1	1:A:25:GLU:N	0.47	2.47	16	2
1:A:84:PHE:CG	1:A:87:VAL:CG2	0.47	2.97	15	1
1:A:50:GLU:O	1:A:51:GLY:C	0.47	2.57	6	4
1:A:6:ASP:O	1:A:6:ASP:OD1	0.47	2.33	4	2
1:A:57:LYS:HB3	1:A:135:GLU:CG	0.47	2.39	6	3
1:A:58:PHE:CD1	1:A:60:VAL:HG23	0.47	2.44	8	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:CG	0.47	2.37	12	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:O	0.47	2.67	14	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:HIS:CG	0.47	2.44	16	1
1:A:27:PRO:CG	1:A:30:ALA:HB3	0.47	2.38	18	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:O	0.47	2.33	17	4
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:PHE:CD1	0.47	2.44	16	2
1:A:6:ASP:O	1:A:6:ASP:CG	0.47	2.57	8	3
1:A:45:LEU:HG	1:A:46:GLU:N	0.47	2.23	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:O	1:A:88:ASP:CG	0.47	2.57	7	2
1:A:60:VAL:CG1	1:A:60:VAL:O	0.47	2.61	12	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:CG2	0.47	2.62	20	2
1:A:114:ASP:C	1:A:115:ASP:OD2	0.47	2.57	3	1
1:A:80:PRO:HB3	1:A:116:HIS:CD2	0.47	2.44	18	2
1:A:4:ALA:H	1:A:7:LEU:HD21	0.47	1.67	19	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:CD1	0.47	2.39	1	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:19:ASP:C	0.47	2.56	10	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:CZ	0.47	2.83	11	1
1:A:106:PRO:C	1:A:107:VAL:CG1	0.47	2.86	16	2
1:A:68:TYR:O	1:A:68:TYR:CD1	0.47	2.68	14	1
1:A:95:ARG:CG	1:A:108:GLU:HG3	0.47	2.39	16	1
1:A:85:MET:O	1:A:86:GLY:O	0.47	2.33	17	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG13	0.47	2.09	1	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:97:LEU:N	0.47	2.82	11	3
1:A:113:GLU:O	1:A:116:HIS:O	0.47	2.32	1	5
1:A:119:VAL:C	1:A:120:ASP:OD1	0.47	2.57	4	1
1:A:101:ASP:OD1	1:A:102:GLN:N	0.47	2.48	5	1
1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:OD1	0.47	2.46	5	1
1:A:11:LEU:O	1:A:11:LEU:CG	0.47	2.62	6	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:TYR:HD2	0.47	1.62	6	1
1:A:23:VAL:O	1:A:24:ASP:CB	0.47	2.63	9	2
1:A:79:VAL:N	1:A:117:VAL:O	0.47	2.48	13	2
1:A:38:HIS:CE1	1:A:150:GLY:CA	0.47	2.98	11	1
1:A:130:LEU:N	1:A:130:LEU:CD2	0.47	2.78	11	1
1:A:53:GLU:O	1:A:54:VAL:C	0.47	2.58	12	3
1:A:58:PHE:C	1:A:133:ASN:OD1	0.47	2.58	12	1
1:A:133:ASN:OD1	1:A:133:ASN:C	0.47	2.58	16	1
1:A:143:THR:OG1	1:A:146:GLU:CD	0.47	2.57	16	2
1:A:6:ASP:O	1:A:7:LEU:CD2	0.47	2.58	17	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:9:VAL:CG1	0.47	2.92	3	1
1:A:15:VAL:CB	1:A:24:ASP:O	0.47	2.63	4	2
1:A:80:PRO:HD3	1:A:116:HIS:CE1	0.47	2.45	10	1
1:A:6:ASP:CB	1:A:147:LEU:CG	0.47	2.92	11	1
1:A:95:ARG:O	1:A:95:ARG:HD2	0.47	2.10	15	1
1:A:58:PHE:CE2	1:A:60:VAL:HG23	0.47	2.45	1	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:ASP:CG	0.47	2.57	5	1
1:A:38:HIS:O	1:A:39:GLY:C	0.47	2.56	6	1
1:A:84:PHE:O	1:A:85:MET:C	0.47	2.58	14	2
1:A:5:LYS:HG2	1:A:6:ASP:N	0.47	2.24	9	1
1:A:120:ASP:C	1:A:120:ASP:OD1	0.47	2.57	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:THR:N	1:A:146:GLU:OE1	0.47	2.43	11	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HA	0.47	1.85	12	1
1:A:35:LEU:CG	1:A:38:HIS:CE1	0.47	2.97	12	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:108:GLU:N	0.47	2.47	13	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:VAL:HG21	0.47	2.44	14	1
1:A:133:ASN:N	1:A:133:ASN:OD1	0.47	2.47	15	1
1:A:3:VAL:HB	1:A:52:HIS:CE1	0.47	2.44	2	1
1:A:15:VAL:CB	1:A:132:PHE:HB3	0.47	2.40	16	5
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:OD2	0.47	2.33	3	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:49:LEU:HD11	0.46	2.40	3	1
1:A:13:TYR:HA	1:A:133:ASN:O	0.46	2.09	8	9
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:O	0.46	2.34	4	2
1:A:9:VAL:HG13	1:A:136:VAL:HG23	0.46	1.87	13	2
1:A:108:GLU:CB	1:A:120:ASP:OD2	0.46	2.64	7	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.46	2.83	15	2
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:OE1	0.46	2.49	17	1
1:A:7:LEU:CG	1:A:140:ARG:O	0.46	2.62	18	1
1:A:12:ALA:CB	1:A:26:SER:OG	0.46	2.57	18	1
1:A:14:GLN:O	1:A:132:PHE:HA	0.46	2.10	11	12
1:A:34:TYR:CE2	1:A:41:LEU:HB2	0.46	2.45	14	3
1:A:113:GLU:HB2	1:A:116:HIS:CD2	0.46	2.46	3	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:139:ILE:C	0.46	2.87	5	2
1:A:87:VAL:HB	1:A:90:LEU:HD11	0.46	1.88	6	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:152:VAL:HG12	0.46	1.87	7	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:38:HIS:NE2	0.46	2.24	13	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:135:GLU:C	0.46	2.87	17	1
1:A:110:THR:O	1:A:111:ALA:HB2	0.46	2.10	19	3
1:A:3:VAL:CG1	1:A:50:GLU:HA	0.46	2.39	16	3
1:A:62:VAL:C	1:A:67:ALA:HB2	0.46	2.35	5	1
1:A:36:HIS:NE2	1:A:46:GLU:HA	0.46	2.25	9	2
1:A:96:PHE:CG	1:A:119:VAL:HG11	0.46	2.45	9	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:88:ASP:N	0.46	2.73	10	2
1:A:35:LEU:HG	1:A:38:HIS:NE2	0.46	2.24	17	1
1:A:132:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG23	0.46	2.44	20	1
1:A:37:GLY:O	1:A:46:GLU:OE1	0.46	2.34	1	1
1:A:10:SER:O	1:A:137:VAL:HB	0.46	2.11	5	12
1:A:63:GLY:HA2	1:A:67:ALA:CB	0.46	2.40	13	6
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CD1	0.46	2.64	11	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:49:LEU:HD21	0.46	2.39	14	1
1:A:5:LYS:HE2	1:A:38:HIS:CB	0.46	2.40	15	1
1:A:112:VAL:HG23	1:A:117:VAL:CG1	0.46	2.40	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:LYS:CE	1:A:38:HIS:HB2	0.46	2.41	16	1
1:A:7:LEU:C	1:A:7:LEU:CD1	0.46	2.86	19	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:9:VAL:CG1	0.46	2.86	20	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:PHE:CE1	0.46	2.45	1	1
1:A:14:GLN:O	1:A:132:PHE:HB2	0.46	2.10	4	6
1:A:37:GLY:C	1:A:46:GLU:OE2	0.46	2.59	5	1
1:A:11:LEU:C	1:A:11:LEU:CD1	0.46	2.85	6	2
1:A:53:GLU:O	1:A:56:ASP:OD1	0.46	2.33	6	1
1:A:142:ALA:HA	1:A:146:GLU:OE1	0.46	2.11	11	1
1:A:45:LEU:O	1:A:48:ALA:N	0.46	2.47	12	2
1:A:115:ASP:O	1:A:116:HIS:CG	0.46	2.69	13	1
1:A:114:ASP:O	1:A:115:ASP:HB2	0.46	2.10	3	2
1:A:57:LYS:CB	1:A:135:GLU:HB2	0.46	2.41	12	3
1:A:113:GLU:HB3	1:A:116:HIS:NE2	0.46	2.25	19	2
1:A:35:LEU:HG	1:A:38:HIS:CB	0.46	2.40	6	1
1:A:35:LEU:HB3	1:A:38:HIS:CB	0.46	2.41	6	1
1:A:84:PHE:O	1:A:85:MET:CB	0.46	2.62	6	2
1:A:145:GLU:OE1	1:A:145:GLU:CA	0.46	2.63	6	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:CD1	0.46	2.63	19	2
1:A:41:LEU:C	1:A:42:ILE:CG1	0.46	2.89	12	2
1:A:42:ILE:HD11	1:A:45:LEU:HD23	0.46	1.87	9	1
1:A:52:HIS:ND1	1:A:52:HIS:C	0.46	2.74	15	2
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:GLU:N	0.46	2.25	11	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG13	0.46	1.88	12	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:132:PHE:CZ	0.46	2.46	1	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:45:LEU:CD2	0.46	2.88	14	1
1:A:88:ASP:CG	1:A:89:GLU:OE2	0.46	2.59	15	1
1:A:5:LYS:HG2	1:A:37:GLY:C	0.46	2.36	16	1
1:A:83:VAL:O	1:A:84:PHE:O	0.46	2.33	16	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:34:TYR:CE2	0.46	2.95	6	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:90:LEU:HD11	0.46	2.41	8	1
1:A:41:LEU:HD23	1:A:45:LEU:CD2	0.46	2.33	14	1
1:A:31:PRO:O	1:A:33:ASP:OD1	0.46	2.33	15	1
1:A:139:ILE:O	1:A:139:ILE:HG13	0.46	2.11	18	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HD13	0.46	1.87	1	1
1:A:89:GLU:O	1:A:94:MET:SD	0.46	2.74	11	3
1:A:59:ASP:OD2	1:A:133:ASN:OD1	0.46	2.33	2	1
1:A:63:GLY:HA3	1:A:130:LEU:CD1	0.46	2.41	3	2
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:HG12	0.46	2.10	3	1
1:A:109:ILE:O	1:A:109:ILE:CG2	0.46	2.63	9	3
1:A:108:GLU:HB3	1:A:120:ASP:OD2	0.46	2.11	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:TYR:CE1	1:A:40:SER:HB3	0.46	2.46	12	1
1:A:57:LYS:HG3	1:A:135:GLU:CG	0.46	2.40	14	1
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:OE1	0.46	2.33	15	1
1:A:115:ASP:O	1:A:115:ASP:OD1	0.46	2.34	18	1
1:A:83:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CG	0.46	2.45	20	1
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:CG2	0.46	2.64	1	2
1:A:15:VAL:HG23	1:A:132:PHE:HB3	0.46	1.88	5	1
1:A:38:HIS:C	1:A:40:SER:N	0.46	2.74	6	1
1:A:9:VAL:O	1:A:9:VAL:CG1	0.46	2.62	7	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:O	0.46	2.11	7	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:58:PHE:CZ	0.46	2.88	8	1
1:A:6:ASP:C	1:A:7:LEU:HD22	0.46	2.34	14	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HG	0.46	2.41	17	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG22	0.45	2.11	4	2
1:A:6:ASP:HA	1:A:147:LEU:HD11	0.45	1.87	4	1
1:A:65:ASN:O	1:A:65:ASN:ND2	0.45	2.49	6	1
1:A:5:LYS:CE	1:A:37:GLY:HA3	0.45	2.40	8	1
1:A:13:TYR:O	1:A:13:TYR:CD1	0.45	2.69	4	1
1:A:23:VAL:O	1:A:24:ASP:OD1	0.45	2.34	9	2
1:A:55:GLY:C	1:A:135:GLU:OE2	0.45	2.60	10	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:139:ILE:CD1	0.45	2.38	11	1
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:CG	0.45	2.64	17	4
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:C	0.45	2.59	14	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:38:HIS:CD2	0.45	2.45	15	1
1:A:13:TYR:HB2	1:A:133:ASN:O	0.45	2.11	4	15
1:A:134:VAL:C	1:A:135:GLU:HG3	0.45	2.37	19	2
1:A:36:HIS:NE2	1:A:50:GLU:HB2	0.45	2.26	5	1
1:A:135:GLU:O	1:A:135:GLU:OE1	0.45	2.35	5	1
1:A:6:ASP:CG	1:A:147:LEU:CD2	0.45	2.89	6	1
1:A:24:ASP:O	1:A:24:ASP:OD1	0.45	2.34	7	1
1:A:41:LEU:C	1:A:42:ILE:HG13	0.45	2.36	12	2
1:A:6:ASP:HB2	1:A:147:LEU:CD2	0.45	2.40	18	2
1:A:108:GLU:OE1	1:A:120:ASP:O	0.45	2.34	13	1
1:A:114:ASP:OD1	1:A:115:ASP:OD1	0.45	2.34	14	1
1:A:133:ASN:C	1:A:134:VAL:CG2	0.45	2.90	19	3
1:A:5:LYS:O	1:A:38:HIS:HB2	0.45	2.12	16	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:HD21	0.45	1.89	1	1
1:A:62:VAL:O	1:A:67:ALA:HB3	0.45	2.12	2	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:LEU:CB	0.45	2.37	6	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:140:ARG:HB2	0.45	2.41	12	1
1:A:37:GLY:O	1:A:46:GLU:CD	0.45	2.60	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:VAL:HG13	1:A:36:HIS:ND1	0.45	2.26	14	1
1:A:40:SER:HB3	1:A:46:GLU:CG	0.45	2.41	19	1
1:A:54:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HG13	0.45	1.89	15	3
1:A:59:ASP:OD1	1:A:133:ASN:OD1	0.45	2.34	5	2
1:A:94:MET:C	1:A:94:MET:SD	0.45	2.99	10	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:34:TYR:N	0.45	2.84	11	1
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:HD23	0.45	2.37	13	1
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:C	0.45	2.57	13	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:VAL:CG1	0.45	2.41	17	1
1:A:79:VAL:O	1:A:117:VAL:O	0.45	2.35	17	1
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:HG12	0.45	2.11	5	3
1:A:76:VAL:CG2	1:A:120:ASP:HB3	0.45	2.41	12	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:VAL:CB	0.45	2.63	15	2
1:A:35:LEU:HD13	1:A:38:HIS:NE2	0.45	2.27	15	1
1:A:13:TYR:N	1:A:26:SER:OG	0.45	2.50	18	1
1:A:108:GLU:HB2	1:A:120:ASP:CG	0.45	2.37	18	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HG12	0.45	1.89	2	1
1:A:37:GLY:CA	1:A:46:GLU:OE2	0.45	2.64	3	1
1:A:146:GLU:OE2	1:A:152:VAL:HA	0.45	2.12	4	2
1:A:38:HIS:HB2	1:A:150:GLY:O	0.45	2.12	8	1
1:A:42:ILE:HD12	1:A:62:VAL:HG12	0.45	1.89	9	1
1:A:116:HIS:C	1:A:117:VAL:HG13	0.45	2.36	10	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:OD1	0.45	2.33	13	1
1:A:78:ARG:HG2	1:A:118:VAL:CG1	0.45	2.42	13	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:GLU:HG3	0.45	2.11	15	1
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:HG3	0.45	2.11	15	1
1:A:58:PHE:O	1:A:133:ASN:CG	0.45	2.60	16	1
1:A:2:LYS:CD	1:A:51:GLY:HA2	0.45	2.42	15	2
1:A:38:HIS:N	1:A:38:HIS:ND1	0.45	2.65	4	1
1:A:84:PHE:O	1:A:85:MET:O	0.45	2.35	5	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:130:LEU:HD21	0.45	1.87	6	1
1:A:15:VAL:HG23	1:A:132:PHE:CD1	0.45	2.47	7	1
1:A:16:ARG:CG	1:A:22:LEU:HG	0.45	2.41	7	1
1:A:11:LEU:HB3	1:A:134:VAL:CG1	0.45	2.42	8	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:ASP:HB3	0.45	2.11	20	2
1:A:42:ILE:O	1:A:46:GLU:OE1	0.45	2.34	11	1
1:A:10:SER:O	1:A:10:SER:OG	0.45	2.33	12	1
1:A:37:GLY:O	1:A:46:GLU:OE2	0.45	2.35	13	1
1:A:10:SER:CB	1:A:33:ASP:OD1	0.45	2.64	13	2
1:A:3:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	0.45	1.89	6	1
1:A:113:GLU:N	1:A:116:HIS:O	0.45	2.50	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ASP:O	1:A:120:ASP:OD1	0.45	2.35	7	1
1:A:63:GLY:O	1:A:68:TYR:N	0.45	2.50	9	1
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:OD1	0.45	2.35	9	1
1:A:23:VAL:HG22	1:A:102:GLN:NE2	0.45	2.27	10	1
1:A:76:VAL:CG1	1:A:120:ASP:HB2	0.45	2.42	10	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:ASP:HB2	0.45	2.11	16	2
1:A:33:ASP:O	1:A:152:VAL:HG11	0.45	2.12	3	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:24:ASP:O	0.45	2.12	4	1
1:A:10:SER:HB2	1:A:137:VAL:CG2	0.45	2.41	13	2
1:A:4:ALA:CB	1:A:7:LEU:HD22	0.45	2.38	7	1
1:A:13:TYR:N	1:A:13:TYR:CD1	0.45	2.84	18	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:108:GLU:C	0.45	2.60	18	1
1:A:83:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CD1	0.45	2.47	20	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:PHE:CD2	0.44	2.47	7	3
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:HG22	0.44	2.11	13	1
1:A:59:ASP:OD1	1:A:59:ASP:O	0.44	2.35	15	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:117:VAL:HG21	0.44	2.42	15	1
1:A:87:VAL:O	1:A:88:ASP:HB3	0.44	2.12	1	1
1:A:3:VAL:HG21	1:A:9:VAL:CG2	0.44	2.39	4	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:HB3	0.44	2.12	16	2
1:A:42:ILE:HD12	1:A:66:ASP:O	0.44	2.12	6	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:146:GLU:HB2	0.44	2.35	6	2
1:A:35:LEU:CD2	1:A:147:LEU:HG	0.44	2.42	10	2
1:A:54:VAL:CG2	1:A:137:VAL:O	0.44	2.66	10	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:22:LEU:H	0.44	1.71	16	1
1:A:142:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD13	0.44	1.86	16	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG12	0.44	1.88	18	1
1:A:77:GLN:N	1:A:119:VAL:O	0.44	2.48	18	1
1:A:146:GLU:O	1:A:151:HIS:O	0.44	2.35	20	1
1:A:14:GLN:O	1:A:132:PHE:CA	0.44	2.65	2	5
1:A:17:THR:O	1:A:19:ASP:N	0.44	2.50	18	4
1:A:150:GLY:C	1:A:151:HIS:CG	0.44	2.95	2	2
1:A:40:SER:O	1:A:40:SER:OG	0.44	2.36	4	2
1:A:108:GLU:HB3	1:A:120:ASP:O	0.44	2.12	12	2
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:CB	0.44	2.62	19	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:O	0.44	2.66	13	2
1:A:117:VAL:CG1	1:A:118:VAL:N	0.44	2.81	1	2
1:A:49:LEU:O	1:A:52:HIS:CG	0.44	2.71	2	1
1:A:3:VAL:CG1	1:A:36:HIS:CG	0.44	3.01	5	2
1:A:113:GLU:HB2	1:A:116:HIS:NE2	0.44	2.27	5	1
1:A:133:ASN:O	1:A:134:VAL:HG23	0.44	2.13	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CD	0.44	2.76	16	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:132:PHE:CZ	0.44	3.01	17	1
1:A:133:ASN:O	1:A:134:VAL:CG2	0.44	2.66	19	1
1:A:59:ASP:O	1:A:60:VAL:CG2	0.44	2.66	4	1
1:A:115:ASP:O	1:A:115:ASP:CG	0.44	2.60	13	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:134:VAL:HB	0.44	2.40	17	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:60:VAL:HG21	0.44	2.42	17	1
1:A:57:LYS:CB	1:A:135:GLU:HG2	0.44	2.43	18	1
1:A:111:ALA:CB	1:A:118:VAL:CG2	0.44	2.89	18	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:39:GLY:O	0.44	2.71	19	1
1:A:3:VAL:O	1:A:50:GLU:HA	0.44	2.13	1	1
1:A:92:VAL:HG11	1:A:111:ALA:HA	0.44	1.90	1	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:131:LYS:HG2	0.44	1.90	2	1
1:A:53:GLU:O	1:A:136:VAL:HG11	0.44	2.13	5	1
1:A:56:ASP:OD1	1:A:56:ASP:C	0.44	2.61	6	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:109:ILE:CD1	0.44	2.43	10	1
1:A:25:GLU:CG	1:A:25:GLU:O	0.44	2.65	14	1
1:A:89:GLU:O	1:A:89:GLU:HG2	0.44	2.12	16	1
1:A:33:ASP:OD1	1:A:33:ASP:N	0.44	2.49	19	2
1:A:67:ALA:O	1:A:68:TYR:HB2	0.44	2.12	2	1
1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:VAL:H	0.44	1.72	7	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:HG13	0.44	2.12	8	1
1:A:57:LYS:HA	1:A:134:VAL:O	0.44	2.13	9	2
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:HB3	0.44	2.28	18	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:140:ARG:O	0.44	2.13	19	1
1:A:40:SER:O	1:A:42:ILE:N	0.44	2.51	19	1
1:A:41:LEU:C	1:A:42:ILE:HG23	0.44	2.38	19	1
1:A:140:ARG:HG3	1:A:141:GLU:N	0.44	2.27	19	1
1:A:138:ALA:O	1:A:139:ILE:HG12	0.44	2.12	2	8
1:A:13:TYR:CA	1:A:133:ASN:O	0.44	2.66	4	5
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG13	0.44	2.12	11	3
1:A:87:VAL:HG11	1:A:96:PHE:HE1	0.44	1.72	6	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:41:LEU:HD21	0.44	2.42	7	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:132:PHE:CE1	0.44	2.47	9	1
1:A:65:ASN:O	1:A:66:ASP:HB2	0.44	2.12	11	1
1:A:3:VAL:HG13	1:A:36:HIS:CG	0.44	2.47	14	1
1:A:38:HIS:NE2	1:A:147:LEU:CD1	0.44	2.81	17	1
1:A:8:VAL:O	1:A:139:ILE:HA	0.44	2.13	17	4
1:A:152:VAL:HG13	1:A:152:VAL:O	0.44	2.13	3	2
1:A:5:LYS:C	1:A:7:LEU:N	0.44	2.76	5	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:58:PHE:HB2	0.44	2.28	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:LYS:HD3	1:A:38:HIS:NE2	0.44	2.28	7	1
1:A:84:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HG12	0.44	1.89	7	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:109:ILE:HD11	0.44	1.90	10	1
1:A:36:HIS:CD2	1:A:50:GLU:HB2	0.44	2.47	11	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:134:VAL:HG11	0.44	2.42	14	1
1:A:146:GLU:HG2	1:A:152:VAL:HG22	0.44	1.89	15	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG23	0.44	2.13	18	1
1:A:5:LYS:HE3	1:A:38:HIS:ND1	0.44	2.28	19	1
1:A:23:VAL:O	1:A:24:ASP:HB2	0.43	2.13	19	2
1:A:94:MET:O	1:A:109:ILE:CB	0.43	2.66	7	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:25:GLU:OE2	0.43	2.66	8	1
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:CD2	0.43	2.91	9	1
1:A:63:GLY:O	1:A:67:ALA:C	0.43	2.61	15	1
1:A:94:MET:CE	1:A:94:MET:C	0.43	2.91	15	1
1:A:5:LYS:CG	1:A:37:GLY:HA3	0.43	2.43	19	1
1:A:36:HIS:NE2	1:A:46:GLU:O	0.43	2.50	1	1
1:A:67:ALA:O	1:A:68:TYR:CB	0.43	2.65	2	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:118:VAL:N	0.43	2.81	4	2
1:A:45:LEU:CD2	1:A:134:VAL:HG11	0.43	2.43	6	1
1:A:34:TYR:CB	1:A:49:LEU:CD1	0.43	2.96	11	1
1:A:78:ARG:HG3	1:A:117:VAL:O	0.43	2.13	11	1
1:A:102:GLN:HA	1:A:102:GLN:OE1	0.43	2.13	11	1
1:A:118:VAL:C	1:A:119:VAL:CG1	0.43	2.91	20	1
1:A:44:GLY:HA3	1:A:66:ASP:CG	0.43	2.38	2	1
1:A:65:ASN:O	1:A:66:ASP:OD2	0.43	2.36	5	1
1:A:5:LYS:HE2	1:A:6:ASP:OD2	0.43	2.14	9	1
1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:VAL:C	0.43	2.38	17	1
1:A:107:VAL:CG1	1:A:119:VAL:CB	0.43	2.96	18	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:130:LEU:CD1	0.43	2.97	19	1
1:A:143:THR:N	1:A:146:GLU:HB2	0.43	2.28	10	2
1:A:17:THR:OG1	1:A:21:VAL:HB	0.43	2.13	4	2
1:A:24:ASP:OD1	1:A:24:ASP:C	0.43	2.61	7	2
1:A:14:GLN:O	1:A:14:GLN:CG	0.43	2.67	5	1
1:A:138:ALA:O	1:A:139:ILE:CG2	0.43	2.67	6	1
1:A:40:SER:OG	1:A:46:GLU:CD	0.43	2.62	7	1
1:A:90:LEU:N	1:A:90:LEU:CD1	0.43	2.82	9	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:119:VAL:O	0.43	2.14	12	1
1:A:62:VAL:O	1:A:132:PHE:CE2	0.43	2.72	14	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:87:VAL:HG11	0.43	1.90	3	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:130:LEU:HD13	0.43	2.44	7	1
1:A:84:PHE:CB	1:A:87:VAL:CG1	0.43	2.97	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:GLU:HG2	1:A:56:ASP:CB	0.43	2.43	9	1
1:A:130:LEU:N	1:A:130:LEU:CD1	0.43	2.79	10	2
1:A:15:VAL:HB	1:A:130:LEU:HD12	0.43	1.89	11	1
1:A:78:ARG:HG2	1:A:118:VAL:HG13	0.43	1.89	13	1
1:A:143:THR:HB	1:A:146:GLU:OE1	0.43	2.14	19	2
1:A:10:SER:HB3	1:A:33:ASP:OD1	0.43	2.14	2	2
1:A:96:PHE:CZ	1:A:107:VAL:HG21	0.43	2.49	2	2
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:N	0.43	2.51	4	1
1:A:80:PRO:N	1:A:116:HIS:HB2	0.43	2.28	8	1
1:A:95:ARG:O	1:A:95:ARG:CG	0.43	2.66	8	2
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:GLU:N	0.43	2.82	18	2
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:HB2	0.43	2.12	9	1
1:A:114:ASP:O	1:A:116:HIS:N	0.43	2.52	16	2
1:A:6:ASP:HB2	1:A:147:LEU:HG	0.43	1.90	11	1
1:A:35:LEU:CB	1:A:38:HIS:CE1	0.43	3.01	12	1
1:A:35:LEU:HB3	1:A:38:HIS:O	0.43	2.13	16	1
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:CD	0.43	2.61	19	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:135:GLU:O	0.43	2.14	5	7
1:A:62:VAL:HG11	1:A:66:ASP:O	0.43	2.12	6	1
1:A:63:GLY:HA2	1:A:130:LEU:HB3	0.43	1.90	6	1
1:A:5:LYS:HD2	1:A:38:HIS:NE2	0.43	2.29	9	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:9:VAL:CG2	0.43	2.25	12	1
1:A:112:VAL:CG2	1:A:116:HIS:O	0.43	2.66	13	1
1:A:94:MET:C	1:A:94:MET:HE2	0.43	2.38	15	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:VAL:HG11	0.43	2.44	1	1
1:A:94:MET:CB	1:A:109:ILE:HD11	0.43	2.43	1	2
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:VAL:CG2	0.43	2.44	2	1
1:A:5:LYS:HG3	1:A:38:HIS:CE1	0.43	2.49	4	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:141:GLU:HG3	0.43	2.42	4	1
1:A:42:ILE:CG1	1:A:45:LEU:HB2	0.43	2.43	4	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:134:VAL:HG21	0.43	2.44	4	2
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CG	0.43	2.77	5	1
1:A:36:HIS:C	1:A:38:HIS:N	0.43	2.76	6	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:136:VAL:HA	0.43	2.44	10	2
1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:CG	0.43	2.87	13	1
1:A:35:LEU:HG	1:A:38:HIS:O	0.43	2.13	16	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HG	0.43	2.13	17	1
1:A:35:LEU:CG	1:A:38:HIS:CB	0.43	2.97	6	1
1:A:63:GLY:HA3	1:A:130:LEU:HB2	0.43	1.91	6	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:139:ILE:CG2	0.43	2.32	11	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:38:HIS:CD2	0.43	2.48	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:TYR:CD1	1:A:40:SER:HB3	0.43	2.49	12	1
1:A:76:VAL:HB	1:A:120:ASP:CB	0.43	2.44	12	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:21:VAL:HG12	0.43	2.14	18	1
1:A:11:LEU:O	1:A:11:LEU:HG	0.43	2.12	19	5
1:A:41:LEU:HD23	1:A:45:LEU:HD13	0.43	1.90	1	1
1:A:64:ALA:HB3	1:A:129:ASN:HD21	0.43	1.74	2	1
1:A:96:PHE:HB3	1:A:107:VAL:CG2	0.43	2.44	7	3
1:A:9:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HG12	0.43	1.91	7	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.43	2.90	8	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:HB2	0.43	2.14	19	2
1:A:104:PRO:C	1:A:105:VAL:CG1	0.43	2.92	10	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:38:HIS:CG	0.43	3.01	11	1
1:A:57:LYS:HB3	1:A:135:GLU:CB	0.43	2.44	12	1
1:A:95:ARG:HG2	1:A:108:GLU:CD	0.43	2.39	16	1
1:A:45:LEU:CG	1:A:132:PHE:CE1	0.43	3.02	17	1
1:A:1:MET:HG3	1:A:2:LYS:N	0.43	2.29	19	2
1:A:65:ASN:OD1	1:A:65:ASN:N	0.42	2.51	2	1
1:A:76:VAL:C	1:A:77:GLN:HG3	0.42	2.38	2	1
1:A:38:HIS:O	1:A:40:SER:N	0.42	2.52	6	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD12	0.42	2.14	6	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:134:VAL:HG11	0.42	1.91	6	1
1:A:6:ASP:CB	1:A:147:LEU:HG	0.42	2.44	11	1
1:A:98:ALA:N	1:A:105:VAL:O	0.42	2.52	17	1
1:A:4:ALA:O	1:A:7:LEU:HB3	0.42	2.14	20	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:VAL:HG23	0.42	1.91	2	1
1:A:4:ALA:O	1:A:7:LEU:HB2	0.42	2.14	13	3
1:A:5:LYS:O	1:A:38:HIS:ND1	0.42	2.52	6	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:23:VAL:HG22	0.42	2.44	8	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:78:ARG:N	0.42	2.28	9	1
1:A:135:GLU:C	1:A:135:GLU:OE1	0.42	2.62	11	1
1:A:149:HIS:CE1	1:A:151:HIS:HB2	0.42	2.50	12	1
1:A:143:THR:HB	1:A:146:GLU:OE2	0.42	2.13	13	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:139:ILE:CG2	0.42	2.87	15	1
1:A:34:TYR:CD2	1:A:35:LEU:O	0.42	2.72	15	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD12	0.42	2.15	17	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:96:PHE:CE1	0.42	3.07	18	1
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:HB3	0.42	2.15	7	1
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:HA	0.42	2.14	7	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:118:VAL:HG23	0.42	1.91	9	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:CE2	0.42	2.48	12	1
1:A:60:VAL:HG11	1:A:132:PHE:CE1	0.42	2.47	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:CG1	1:A:140:ARG:HB3	0.42	2.44	16	1
1:A:66:ASP:O	1:A:67:ALA:O	0.42	2.37	17	1
1:A:2:LYS:CG	1:A:51:GLY:HA2	0.42	2.45	20	1
1:A:31:PRO:HB3	1:A:137:VAL:HG21	0.42	1.91	4	1
1:A:148:ALA:CB	1:A:149:HIS:CE1	0.42	3.02	4	1
1:A:64:ALA:N	1:A:129:ASN:OD1	0.42	2.52	5	1
1:A:6:ASP:HB2	1:A:147:LEU:CG	0.42	2.44	11	2
1:A:84:PHE:O	1:A:85:MET:HB2	0.42	2.15	12	1
1:A:140:ARG:CG	1:A:141:GLU:N	0.42	2.82	2	1
1:A:6:ASP:OD1	1:A:147:LEU:HG	0.42	2.15	3	2
1:A:9:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	0.42	1.86	3	1
1:A:77:GLN:O	1:A:119:VAL:O	0.42	2.37	7	1
1:A:49:LEU:O	1:A:52:HIS:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:117:VAL:HG21	0.42	2.45	15	1
1:A:109:ILE:CA	1:A:119:VAL:HG12	0.42	2.39	15	1
1:A:36:HIS:HA	1:A:40:SER:CB	0.42	2.45	18	1
1:A:57:LYS:HG2	1:A:135:GLU:CB	0.42	2.43	2	1
1:A:13:TYR:HB3	1:A:134:VAL:HA	0.42	1.91	8	1
1:A:89:GLU:OE1	1:A:91:GLN:NE2	0.42	2.53	9	1
1:A:114:ASP:C	1:A:116:HIS:N	0.42	2.77	10	2
1:A:15:VAL:CG1	1:A:23:VAL:HB	0.42	2.44	14	1
1:A:22:LEU:HD22	1:A:23:VAL:CA	0.42	2.41	15	1
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:CG1	0.42	2.68	19	2
1:A:111:ALA:C	1:A:112:VAL:HG23	0.42	2.39	17	1
1:A:12:ALA:O	1:A:134:VAL:HA	0.42	2.14	19	1
1:A:98:ALA:O	1:A:104:PRO:HA	0.42	2.14	2	1
1:A:15:VAL:N	1:A:24:ASP:O	0.42	2.51	8	2
1:A:36:HIS:O	1:A:37:GLY:C	0.42	2.62	6	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG12	0.42	1.92	10	1
1:A:54:VAL:HG23	1:A:137:VAL:O	0.42	2.15	10	1
1:A:146:GLU:OE1	1:A:152:VAL:HA	0.42	2.14	10	1
1:A:14:GLN:N	1:A:14:GLN:OE1	0.42	2.53	17	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:139:ILE:HG13	0.42	2.44	17	1
1:A:113:GLU:CB	1:A:116:HIS:CD2	0.42	3.03	19	1
1:A:14:GLN:O	1:A:14:GLN:HG3	0.42	2.14	5	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:58:PHE:CE2	0.42	3.07	8	1
1:A:77:GLN:CG	1:A:119:VAL:CG2	0.42	2.97	8	1
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:HG12	0.42	2.15	8	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:90:LEU:HD12	0.42	1.92	14	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	0.42	1.92	15	1
1:A:54:VAL:HG11	1:A:139:ILE:HG13	0.42	1.90	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:VAL:HG12	1:A:11:LEU:HD23	0.42	1.92	18	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HD21	0.42	1.91	4	1
1:A:36:HIS:CD2	1:A:46:GLU:OE1	0.42	2.73	4	1
1:A:4:ALA:O	1:A:5:LYS:C	0.42	2.63	10	3
1:A:57:LYS:CE	1:A:135:GLU:OE1	0.42	2.68	8	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:HD12	0.42	2.15	9	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD22	0.42	2.30	9	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:HE2	0.42	1.74	12	1
1:A:146:GLU:HB3	1:A:151:HIS:O	0.42	2.15	12	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:90:LEU:HB2	0.42	2.35	15	1
1:A:108:GLU:H	1:A:119:VAL:HG22	0.42	1.75	16	1
1:A:11:LEU:HG	1:A:135:GLU:O	0.42	2.15	17	1
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:GLU:N	0.42	2.29	18	1
1:A:38:HIS:O	1:A:38:HIS:CG	0.42	2.73	1	1
1:A:90:LEU:HD12	1:A:94:MET:HE1	0.42	1.92	2	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:107:VAL:HG23	0.42	2.48	2	1
1:A:42:ILE:HG13	1:A:45:LEU:CB	0.42	2.44	4	1
1:A:11:LEU:CB	1:A:136:VAL:HA	0.42	2.45	9	2
1:A:16:ARG:CG	1:A:22:LEU:HD12	0.42	2.44	8	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:CG	0.42	2.68	8	1
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG23	0.42	2.15	12	1
1:A:16:ARG:O	1:A:16:ARG:HG3	0.42	2.14	14	1
1:A:81:LYS:O	1:A:84:PHE:CE1	0.42	2.73	15	1
1:A:113:GLU:HB3	1:A:116:HIS:CD2	0.42	2.50	19	1
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:HG3	0.41	2.15	10	4
1:A:77:GLN:NE2	1:A:79:VAL:HB	0.41	2.30	3	1
1:A:42:ILE:HG13	1:A:45:LEU:HB2	0.41	1.91	4	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:23:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:GLU:CD	0.41	2.40	8	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:118:VAL:CG1	0.41	2.42	11	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:134:VAL:CG1	0.41	2.45	14	1
1:A:43:SER:CB	1:A:66:ASP:OD2	0.41	2.69	3	1
1:A:63:GLY:N	1:A:129:ASN:OD1	0.41	2.53	5	1
1:A:40:SER:O	1:A:41:LEU:HG	0.41	2.14	8	1
1:A:58:PHE:CD1	1:A:59:ASP:N	0.41	2.88	9	1
1:A:62:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CE2	0.41	2.50	10	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HG21	0.41	2.44	18	1
1:A:41:LEU:HD12	1:A:41:LEU:N	0.41	2.30	18	1
1:A:79:VAL:HB	1:A:83:VAL:HG21	0.41	1.93	19	1
1:A:14:GLN:HG2	1:A:22:LEU:CD2	0.41	2.45	20	1
1:A:132:PHE:CD1	1:A:134:VAL:HG23	0.41	2.49	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:SER:HB3	1:A:33:ASP:CG	0.41	2.40	15	2
1:A:17:THR:C	1:A:19:ASP:N	0.41	2.77	18	2
1:A:44:GLY:HA3	1:A:66:ASP:HB3	0.41	1.92	2	1
1:A:31:PRO:CB	1:A:137:VAL:HG21	0.41	2.45	4	1
1:A:17:THR:HG23	1:A:23:VAL:CG2	0.41	2.44	18	3
1:A:13:TYR:CD1	1:A:26:SER:OG	0.41	2.73	15	1
1:A:40:SER:C	1:A:41:LEU:CG	0.41	2.91	19	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.41	2.88	1	1
1:A:93:GLY:O	1:A:94:MET:C	0.41	2.62	17	2
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ASP:HB2	0.41	2.15	14	3
1:A:145:GLU:OE1	1:A:146:GLU:OE2	0.41	2.38	3	1
1:A:41:LEU:O	1:A:42:ILE:O	0.41	2.39	4	1
1:A:68:TYR:OH	1:A:132:PHE:CZ	0.41	2.65	7	1
1:A:13:TYR:HB3	1:A:134:VAL:CG2	0.41	2.44	8	1
1:A:53:GLU:HG3	1:A:56:ASP:CB	0.41	2.44	9	1
1:A:84:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CG1	0.41	2.45	16	1
1:A:13:TYR:CD2	1:A:13:TYR:N	0.41	2.89	19	1
1:A:80:PRO:HB3	1:A:116:HIS:CB	0.41	2.44	8	1
1:A:34:TYR:CE1	1:A:40:SER:HB2	0.41	2.50	12	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:19:ASP:N	0.41	2.54	17	1
1:A:22:LEU:O	1:A:22:LEU:CG	0.41	2.68	19	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:140:ARG:CA	0.41	2.46	8	1
1:A:102:GLN:OE1	1:A:102:GLN:CA	0.41	2.68	11	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:33:ASP:OD2	0.41	2.14	14	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HD11	0.41	2.51	14	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:58:PHE:CE1	0.41	3.04	15	1
1:A:53:GLU:HB3	1:A:56:ASP:CG	0.41	2.41	15	1
1:A:108:GLU:N	1:A:119:VAL:HG22	0.41	2.31	19	1
1:A:15:VAL:HA	1:A:132:PHE:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:52:HIS:O	1:A:53:GLU:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:36:HIS:CD2	1:A:49:LEU:CD2	0.41	3.04	6	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:68:TYR:HE1	0.41	1.75	7	1
1:A:135:GLU:OE2	1:A:136:VAL:O	0.41	2.39	10	1
1:A:5:LYS:HE2	1:A:38:HIS:CD2	0.41	2.51	12	1
1:A:108:GLU:CB	1:A:120:ASP:O	0.41	2.68	12	1
1:A:79:VAL:HG12	1:A:83:VAL:HB	0.41	1.93	14	1
1:A:86:GLY:C	1:A:87:VAL:HG23	0.41	2.39	15	1
1:A:95:ARG:C	1:A:95:ARG:HD3	0.41	2.41	15	1
1:A:129:ASN:C	1:A:130:LEU:HG	0.41	2.40	16	1
1:A:95:ARG:HG3	1:A:107:VAL:O	0.41	2.15	17	1
1:A:2:LYS:C	1:A:139:ILE:CD1	0.41	2.94	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:CG2	1:A:90:LEU:HD21	0.41	2.46	1	1
1:A:93:GLY:HA2	1:A:109:ILE:O	0.41	2.16	17	2
1:A:58:PHE:CD2	1:A:60:VAL:CG2	0.41	3.04	3	1
1:A:87:VAL:HG11	1:A:90:LEU:CD1	0.41	2.44	8	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:21:VAL:N	0.41	2.54	10	1
1:A:114:ASP:O	1:A:116:HIS:CD2	0.41	2.73	13	1
1:A:88:ASP:OD1	1:A:89:GLU:N	0.41	2.54	15	1
1:A:5:LYS:O	1:A:38:HIS:CD2	0.41	2.73	18	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:85:MET:CG	0.41	2.46	1	1
1:A:113:GLU:O	1:A:114:ASP:C	0.41	2.64	1	1
1:A:52:HIS:NE2	1:A:136:VAL:CG2	0.41	2.83	2	1
1:A:39:GLY:O	1:A:40:SER:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:HB	0.41	2.16	3	1
1:A:138:ALA:HB1	1:A:140:ARG:HH11	0.41	1.75	3	1
1:A:63:GLY:O	1:A:67:ALA:CB	0.41	2.52	6	1
1:A:78:ARG:C	1:A:79:VAL:CG1	0.41	2.94	6	1
1:A:13:TYR:CD1	1:A:13:TYR:C	0.41	2.99	9	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:26:SER:O	0.41	2.39	9	1
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:HD23	0.41	2.41	9	1
1:A:42:ILE:CD1	1:A:45:LEU:HD23	0.41	2.46	9	1
1:A:109:ILE:CD1	1:A:117:VAL:CG1	0.41	2.99	9	1
1:A:88:ASP:O	1:A:89:GLU:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:139:ILE:HA	0.41	1.92	13	1
1:A:143:THR:CB	1:A:146:GLU:OE2	0.41	2.68	13	1
1:A:38:HIS:CE1	1:A:150:GLY:HA2	0.41	2.50	15	1
1:A:95:ARG:CB	1:A:108:GLU:HA	0.41	2.46	15	1
1:A:44:GLY:O	1:A:47:THR:CG2	0.41	2.68	16	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:118:VAL:HG23	0.41	2.38	17	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:149:HIS:CE1	0.41	2.50	4	1
1:A:4:ALA:O	1:A:36:HIS:HB3	0.41	2.16	20	3
1:A:77:GLN:NE2	1:A:79:VAL:CG1	0.41	2.84	6	1
1:A:108:GLU:N	1:A:119:VAL:CG2	0.41	2.84	16	1
1:A:143:THR:OG1	1:A:146:GLU:OE1	0.41	2.32	19	1
1:A:13:TYR:O	1:A:26:SER:OG	0.40	2.39	4	1
1:A:109:ILE:HD13	1:A:119:VAL:CG1	0.40	2.46	7	1
1:A:13:TYR:CB	1:A:134:VAL:CG2	0.40	2.84	8	1
1:A:61:ALA:HA	1:A:130:LEU:O	0.40	2.17	9	1
1:A:25:GLU:O	1:A:25:GLU:HG3	0.40	2.16	15	1
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:CG2	0.40	2.68	15	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HG12	0.40	1.92	1	1
1:A:9:VAL:HA	1:A:138:ALA:O	0.40	2.16	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:GLY:O	1:A:52:HIS:O	0.40	2.39	2	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:132:PHE:HE1	0.40	1.64	3	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:105:VAL:HG13	0.40	1.94	9	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:GLU:CD	0.40	2.65	11	1
1:A:83:VAL:HG12	1:A:84:PHE:N	0.40	2.30	16	1
1:A:32:LEU:HG	1:A:34:TYR:CE2	0.40	2.52	17	1
1:A:111:ALA:O	1:A:112:VAL:HG23	0.40	2.16	17	1
1:A:59:ASP:O	1:A:59:ASP:OD1	0.40	2.38	20	1
1:A:108:GLU:O	1:A:119:VAL:CG1	0.40	2.70	3	1
1:A:95:ARG:O	1:A:95:ARG:HG3	0.40	2.15	8	1
1:A:102:GLN:O	1:A:102:GLN:HG2	0.40	2.15	9	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:134:VAL:HG11	0.40	1.92	10	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:90:LEU:HB3	0.40	2.45	15	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:36:HIS:ND1	0.40	2.30	16	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:139:ILE:CD1	0.40	2.99	17	1
1:A:93:GLY:O	1:A:108:GLU:CG	0.40	2.69	17	1
1:A:7:LEU:HG	1:A:140:ARG:O	0.40	2.16	18	1
1:A:68:TYR:C	1:A:68:TYR:CD1	0.40	3.00	18	1
1:A:100:THR:OG1	1:A:105:VAL:HG21	0.40	2.17	1	1
1:A:79:VAL:HG21	1:A:84:PHE:CE1	0.40	2.51	6	1
1:A:45:LEU:HD22	1:A:132:PHE:CZ	0.40	2.52	8	1
1:A:92:VAL:O	1:A:92:VAL:HG23	0.40	2.17	9	1
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:CG2	0.40	2.69	10	1
1:A:138:ALA:C	1:A:139:ILE:HG13	0.40	2.42	11	1
1:A:36:HIS:HA	1:A:41:LEU:CD1	0.40	2.46	16	1
1:A:59:ASP:O	1:A:59:ASP:CG	0.40	2.63	18	1
1:A:77:GLN:CG	1:A:78:ARG:N	0.40	2.84	18	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:24:ASP:H	0.40	1.77	2	1
1:A:102:GLN:O	1:A:102:GLN:NE2	0.40	2.44	3	1
1:A:53:GLU:HG2	1:A:56:ASP:HB2	0.40	1.93	9	1
1:A:135:GLU:CD	1:A:135:GLU:C	0.40	2.88	10	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:150:GLY:HA2	0.40	1.94	16	1
1:A:46:GLU:O	1:A:47:THR:C	0.40	2.64	16	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	136/196 (69%)	114±2 (84±2%)	15±3 (11±2%)	7±2 (5±2%)	2	22
All	All	2720/3920 (69%)	2278 (84%)	297 (11%)	145 (5%)	2	22

All 24 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	66	ASP	18
1	A	63	GLY	12
1	A	89	GLU	12
1	A	87	VAL	12
1	A	67	ALA	10
1	A	39	GLY	9
1	A	40	SER	9
1	A	53	GLU	7
1	A	85	MET	7
1	A	51	GLY	6
1	A	6	ASP	6
1	A	52	HIS	5
1	A	41	LEU	5
1	A	5	LYS	5
1	A	129	ASN	4
1	A	62	VAL	4
1	A	86	GLY	4
1	A	42	ILE	2
1	A	88	ASP	2
1	A	84	PHE	2
1	A	111	ALA	1
1	A	76	VAL	1
1	A	68	TYR	1
1	A	139	ILE	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	114/153 (75%)	84±4 (74±4%)	30±4 (26±4%)	2	22
All	All	2280/3060 (75%)	1682 (74%)	598 (26%)	2	22

All 91 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	66	ASP	17
1	A	3	VAL	15
1	A	5	LYS	15
1	A	97	LEU	15
1	A	57	LYS	14
1	A	89	GLU	14
1	A	2	LYS	13
1	A	7	LEU	13
1	A	147	LEU	13
1	A	32	LEU	12
1	A	109	ILE	12
1	A	11	LEU	11
1	A	26	SER	11
1	A	43	SER	11
1	A	78	ARG	11
1	A	85	MET	11
1	A	90	LEU	11
1	A	143	THR	11
1	A	14	GLN	11
1	A	10	SER	11
1	A	140	ARG	11
1	A	40	SER	10
1	A	131	LYS	10
1	A	144	GLU	10
1	A	22	LEU	10
1	A	49	LEU	10
1	A	100	THR	10
1	A	24	ASP	9
1	A	145	GLU	9
1	A	16	ARG	8
1	A	35	LEU	8
1	A	53	GLU	8
1	A	141	GLU	8
1	A	95	ARG	8
1	A	91	GLN	8
1	A	113	GLU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	29	SER	7
1	A	41	LEU	7
1	A	52	HIS	7
1	A	81	LYS	7
1	A	135	GLU	7
1	A	18	GLU	6
1	A	146	GLU	6
1	A	88	ASP	6
1	A	99	GLU	6
1	A	46	GLU	5
1	A	101	ASP	5
1	A	133	ASN	5
1	A	19	ASP	5
1	A	149	HIS	5
1	A	1	MET	5
1	A	102	GLN	5
1	A	108	GLU	5
1	A	130	LEU	5
1	A	25	GLU	5
1	A	65	ASN	5
1	A	38	HIS	5
1	A	34	TYR	4
1	A	42	ILE	4
1	A	45	LEU	4
1	A	47	THR	4
1	A	56	ASP	4
1	A	116	HIS	4
1	A	8	VAL	4
1	A	50	GLU	4
1	A	15	VAL	3
1	A	33	ASP	3
1	A	115	ASP	3
1	A	82	ASP	3
1	A	77	GLN	3
1	A	94	MET	3
1	A	87	VAL	3
1	A	114	ASP	3
1	A	152	VAL	2
1	A	129	ASN	2
1	A	139	ILE	2
1	A	118	VAL	2
1	A	105	VAL	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	110	THR	2
1	A	76	VAL	2
1	A	107	VAL	2
1	A	119	VAL	1
1	A	6	ASP	1
1	A	17	THR	1
1	A	151	HIS	1
1	A	117	VAL	1
1	A	84	PHE	1
1	A	9	VAL	1
1	A	36	HIS	1
1	A	79	VAL	1
1	A	68	TYR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 84% for the well-defined parts and 69% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1677
Number of shifts mapped to atoms	1677
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	156	-0.01 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	140	-0.10 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	143	0.15 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	148	-0.14 ± 0.20	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 84%, i.e. 1502 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1795. 0 out of 37 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	669/686 (98%)	274/280 (98%)	265/274 (97%)	130/132 (98%)
Sidechain	789/1000 (79%)	531/655 (81%)	258/321 (80%)	0/24 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	44/109 (40%)	22/56 (39%)	22/47 (47%)	0/6 (0%)
Overall	1502/1795 (84%)	827/991 (83%)	545/642 (85%)	130/162 (80%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 69%, i.e. 1676 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2421. 0 out of 39 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	757/999 (76%)	310/416 (75%)	299/392 (76%)	148/191 (77%)
Sidechain	865/1206 (72%)	582/784 (74%)	283/392 (72%)	0/30 (0%)
Aromatic	54/216 (25%)	27/116 (23%)	27/80 (34%)	0/20 (0%)
Overall	1676/2421 (69%)	919/1316 (70%)	609/864 (70%)	148/241 (61%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	128	GLN	CG	26.81	28.36 – 39.21	-6.4

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:

