



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 02:55 AM UTC

PDB ID : 1LUI / pdb_00001lui
Title : NMR Structures of Itk SH2 domain, Pro287cis isoform, ensemble of 20 low energy structures
Authors : Mallis, R.J.; Brazin, K.N.; Fulton, B.F.; Andreotti, A.M.
Deposited on : 2002-05-22

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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

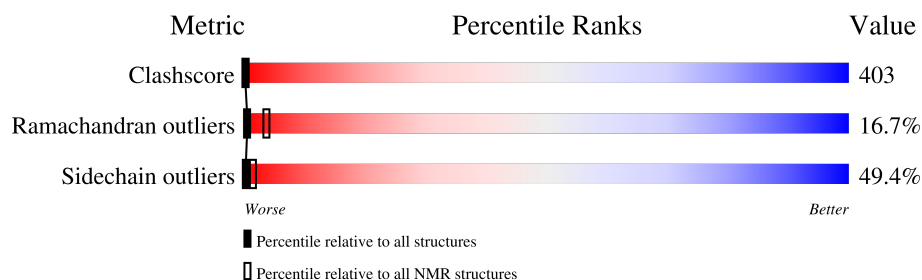
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	110	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:6-A:53, A:60-A:70, A:74-A:111 (97)	0.61	11

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 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

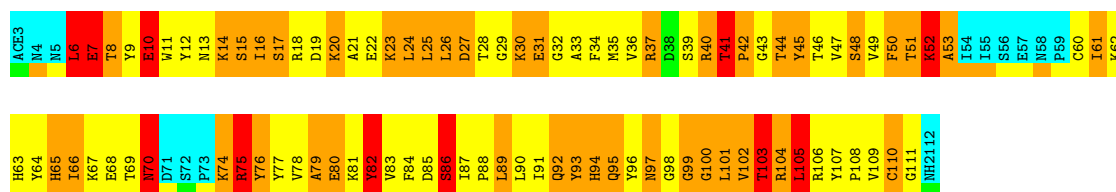
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1764 atoms, of which 877 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	110	Total	C	H	N	O	S	1
			1764	567	877	151	166	3	

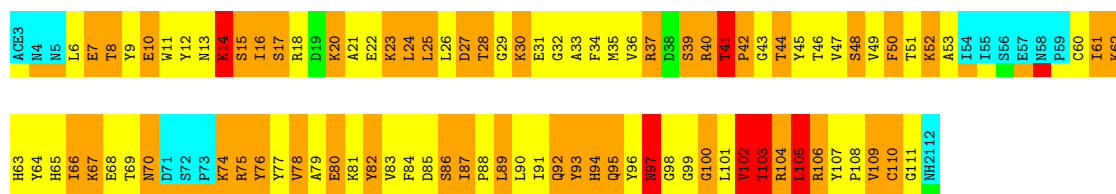
There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

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



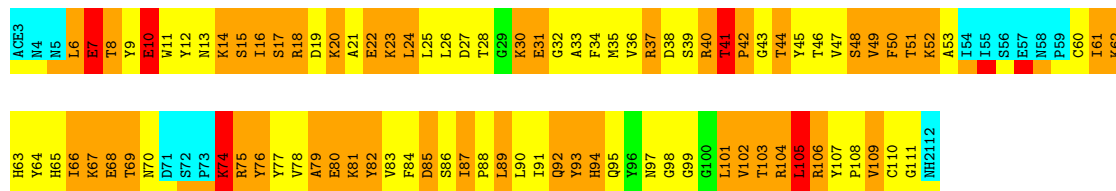
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



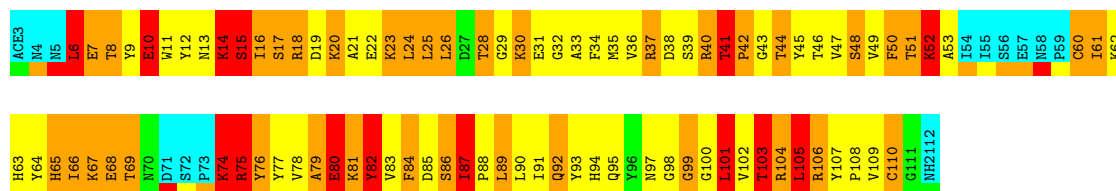
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



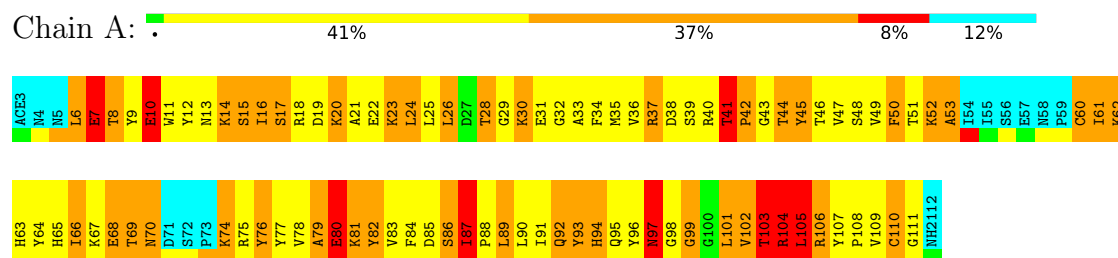
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



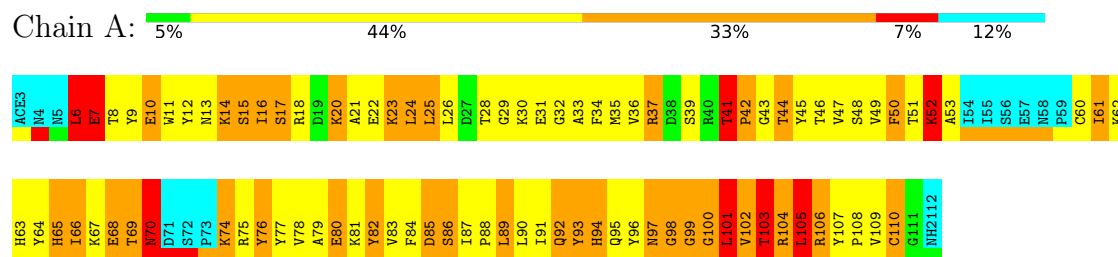
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



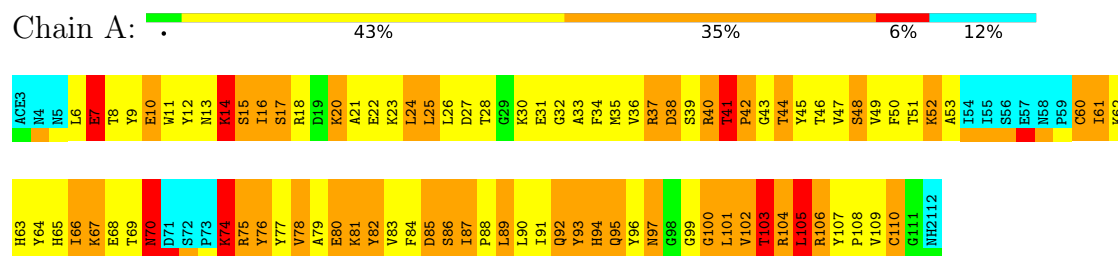
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



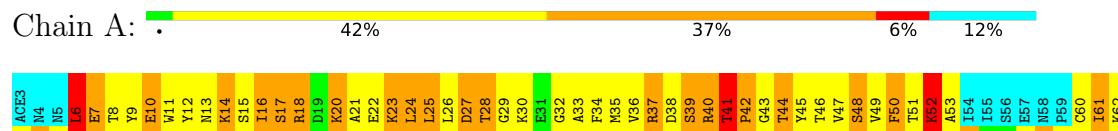
4.2.8 Score per residue for model 8

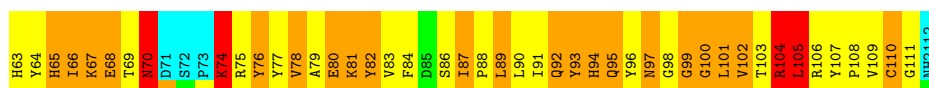
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

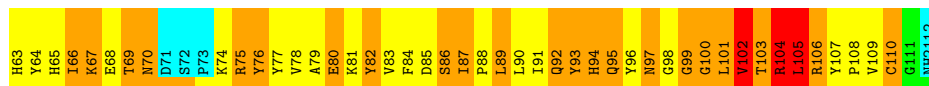




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

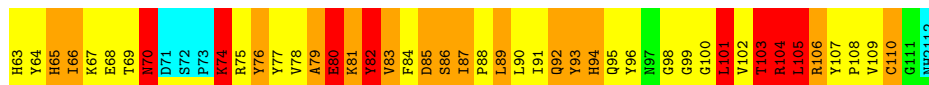
Chain A: . 39% 42% 5% 12%



4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: . 5% 42% 31% 10% 12%



4.2.12 Score per residue for model 12

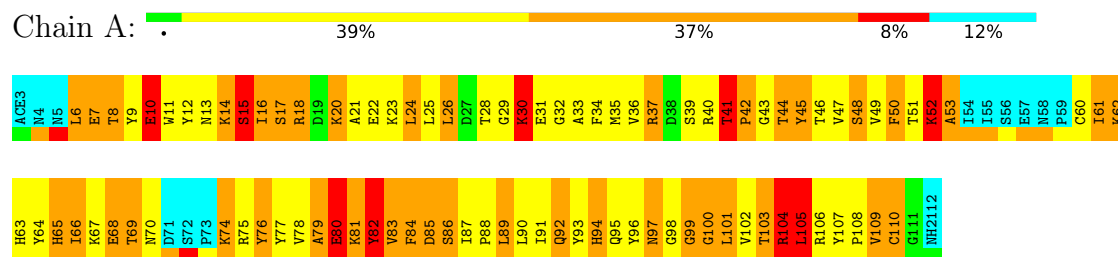
- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK

Chain A: . 43% 35% 9% 12%



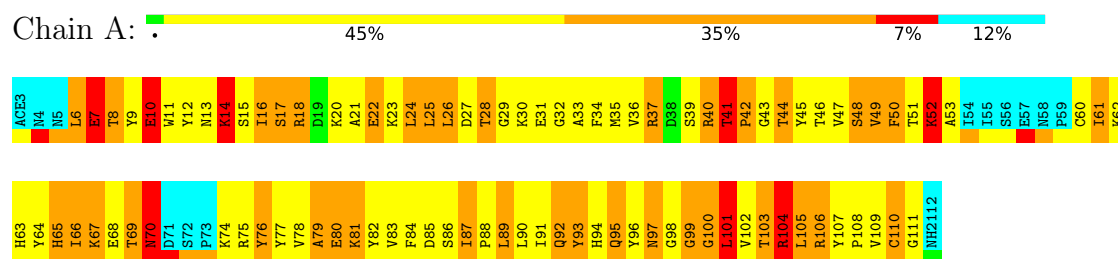
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



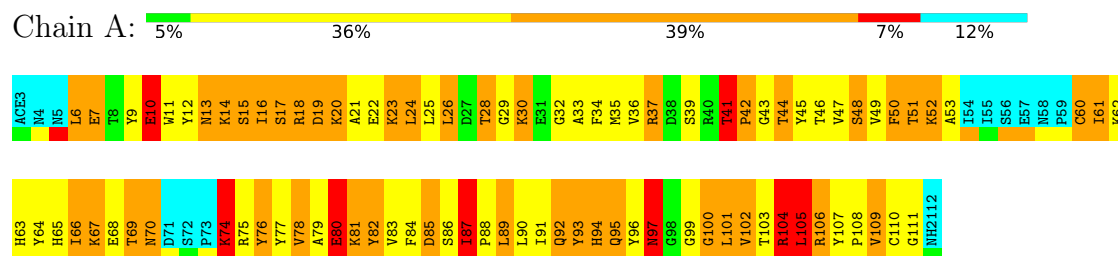
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



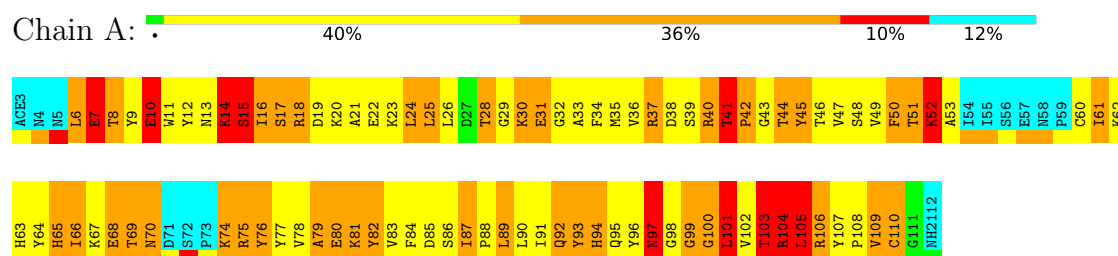
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



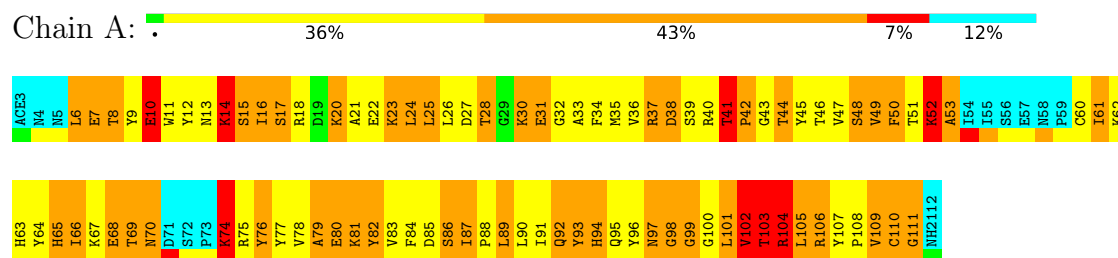
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



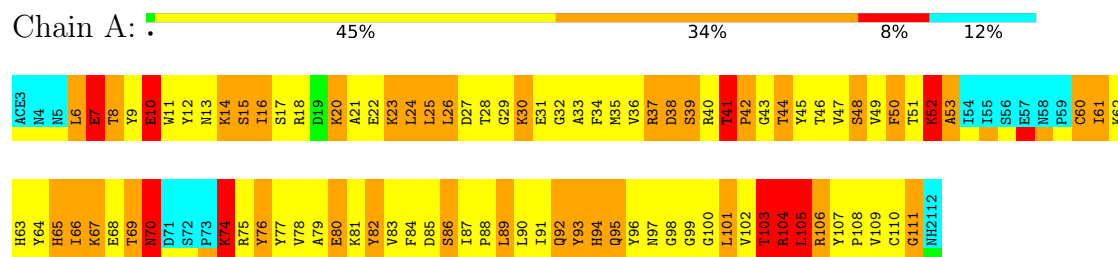
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



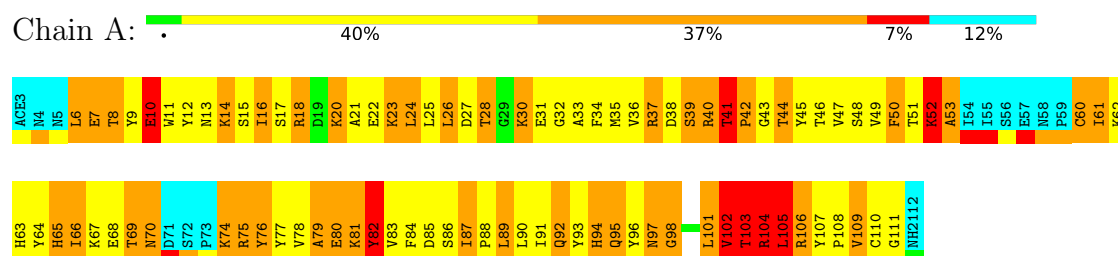
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



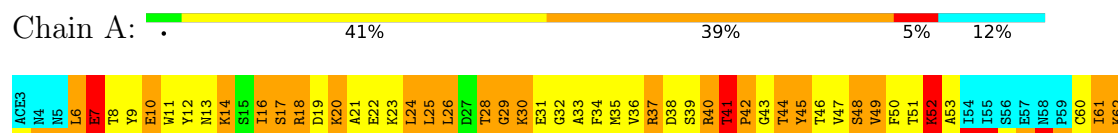
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Tyrosine-protein kinase ITK/TSK



H63	Y64	H65	I66	K67	E68	T69	N70	D71	S72	P73	K74	S75	Y76	Y77	V78	A79	E80	K81	Y82	V83	F84	D85	S86	I87	P88	L89	L90	I91	Q92	Y93	H94	Q95	Y96	N97	G98	G99	G100	L101	V102	T103	R104	L105	R106	Y107	P108	V109	C110	G111	NH2112
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	--------

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry and simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.37±0.01	0±0/820 (0.0± 0.0%)	0.74±0.02	0±0/1107 (0.0± 0.0%)
All	All	0.37	0/16400 (0.0%)	0.74	5/22140 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	87	ILE	CB-CA-C	-5.80	108.19	113.70	15	5

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	800	798	797	644±22
All	All	16000	15960	15940	12878

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 403.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CD1	1.27	1.62	10	20
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD12	1.24	1.64	17	17
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD22	1.24	1.60	6	17
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD22	1.24	1.66	3	11
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CE2	1.23	2.26	15	20
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:HG23	1.22	1.65	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:N	1.21	1.48	20	3
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:SD	1.20	1.77	12	15
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG2	1.20	1.67	1	8
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:OG	1.19	1.37	16	9
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG22	1.19	1.36	5	5
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG23	1.19	1.66	2	15
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD13	1.18	1.69	8	11
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG13	1.17	1.75	13	20
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE2	1.16	1.55	19	13
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CD1	1.16	1.74	8	17
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:HD12	1.15	1.76	3	20
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD22	1.15	1.16	7	17
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:HE1	1.15	1.70	4	9
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG21	1.15	1.72	12	3
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CZ	1.14	1.75	15	3
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HD13	1.14	1.77	2	10
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:HA	1.14	1.43	12	20
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:HE2	1.14	1.68	7	5
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:OG	1.13	1.42	12	3
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG12	1.13	1.42	1	11
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD21	1.13	1.16	10	10
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD1	1.13	1.72	18	17
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD13	1.12	1.72	19	20
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:HA	1.12	1.41	3	19
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:HD23	1.12	1.42	12	17
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD13	1.12	1.43	18	6
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG23	1.12	1.21	15	9
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CD2	1.11	1.78	2	11
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:HG12	1.11	1.44	17	20
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CD2	1.11	1.81	10	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:HE1	1.10	1.75	17	12
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:CB	1.10	1.75	2	14
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG2	1.10	1.75	2	11
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD23	1.10	1.81	12	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:C	1.09	1.72	18	6
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:N	1.09	1.59	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CG1	1.09	1.77	4	7
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD12	1.09	1.81	7	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:HE1	1.09	1.76	6	10
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD11	1.09	1.18	18	20
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD2	1.09	1.76	3	19
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD11	1.08	1.18	2	11
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE1	1.08	1.22	14	7
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HB3	1.08	1.18	2	6
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HG23	1.08	1.77	10	11
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG23	1.08	1.22	9	4
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HB2	1.07	1.24	20	6
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG11	1.07	1.25	8	6
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:HD11	1.07	1.22	8	20
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD1	1.07	2.42	5	6
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HD23	1.06	1.47	2	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HD12	1.06	1.48	3	16
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:N	1.06	1.64	11	17
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HG21	1.06	1.28	20	18
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD12	1.06	1.81	7	2
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:HG22	1.06	1.23	3	11
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG21	1.05	1.23	3	8
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD21	1.05	1.50	2	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HD23	1.05	1.24	20	3
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:HE1	1.05	1.25	4	9
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:N	1.05	1.90	9	20
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG2	1.05	1.82	9	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD12	1.04	1.81	4	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG11	1.04	1.30	11	7
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:HG23	1.04	1.22	2	8
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD12	1.04	1.05	15	6
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HD3	1.04	1.29	11	11
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:HD11	1.03	1.19	1	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD2	1.03	2.41	14	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG21	1.03	1.30	4	5
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD3	1.03	1.25	13	4
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD11	1.03	1.83	20	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CD	1.03	1.84	8	14
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG21	1.03	1.83	4	6
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HD13	1.03	1.29	8	20
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:HD11	1.02	1.84	3	12
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:CD2	1.02	1.83	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:CD1	1.02	1.83	17	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:O	1.02	1.52	4	7
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD21	1.02	1.68	4	8
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG3	1.02	1.28	8	5
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD12	1.02	1.54	4	12
1:A:36:VAL:HG13	1:A:46:THR:O	1.02	1.54	11	20
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:HD12	1.02	1.30	5	12
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD12	1.02	1.52	4	4
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:CE1	1.02	2.11	5	20
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD22	1.02	1.24	12	3
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HD11	1.02	1.29	17	2
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:CD1	1.01	2.42	20	20
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:HG22	1.01	1.28	15	20
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:HG12	1.01	1.55	4	20
1:A:34:PHE:CG	1:A:105:LEU:HD13	1.01	1.90	4	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD13	1.01	1.28	12	3
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:HG13	1.01	1.54	20	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:CE	1.01	1.83	13	11
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CD1	1.01	2.44	4	3
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:HG22	1.01	1.55	17	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:35:MET:SD	1.01	1.95	14	18
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:N	1.00	1.71	14	4
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD22	1.00	1.85	16	3
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:HG12	1.00	1.91	1	15
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:HA	1.00	1.57	9	20
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:HE1	1.00	1.03	6	4
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD22	0.99	1.32	8	18
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG22	0.99	1.33	4	4
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD2	0.99	2.50	17	9
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:CD1	0.98	2.46	17	20
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG22	0.98	1.55	19	15
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:HD1	0.98	1.17	8	2
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HD1	0.98	1.18	18	16
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG21	0.98	1.36	9	2
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD1	0.98	2.11	4	17
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG22	0.98	1.94	13	20
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:HG23	0.98	1.35	5	17
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HG22	0.98	1.32	12	3
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG23	0.98	1.36	9	6
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:N	0.98	1.74	20	4
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.97	1.83	12	2

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:25:LEU:N	0.97	1.72	18	2
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG11	0.97	1.87	8	4
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CD1	0.97	1.88	20	4
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HD12	0.97	1.36	13	6
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CE1	0.97	2.53	5	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:HG21	0.97	1.35	12	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:HD3	0.96	1.38	4	14
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG12	0.96	1.75	6	2
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD22	0.96	1.90	3	17
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD11	0.96	1.74	8	4
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HG23	0.96	1.90	14	10
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD23	0.96	1.59	16	3
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CG	0.96	2.53	1	20
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HD12	0.96	1.96	20	4
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE1	0.96	1.94	12	4
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CG2	0.96	2.48	18	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD11	0.96	1.91	2	11
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:HD11	0.96	1.91	3	20
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CE1	0.96	2.54	19	15
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:OG1	0.95	1.99	18	17
1:A:26:LEU:HG	1:A:61:ILE:HD11	0.95	1.34	14	5
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HD13	0.95	1.32	20	15
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:SG	0.95	2.01	19	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CD1	0.95	2.53	1	4
1:A:26:LEU:CG	1:A:61:ILE:HD11	0.95	1.91	14	4
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CD2	0.95	2.45	17	19
1:A:44:THR:CB	1:A:66:ILE:O	0.95	2.15	5	18
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CE1	0.95	1.96	19	17
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG21	0.95	1.97	14	20
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG22	0.95	1.36	4	3
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:CE	0.94	1.91	5	8
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:CD1	0.94	1.91	18	20
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE1	0.94	2.56	2	9
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CE1	0.94	2.55	4	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD11	0.94	1.93	5	15
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CD1	0.94	1.96	19	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:O	0.94	2.00	4	20
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB2	0.94	1.38	9	20
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.94	2.41	18	5
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:CG2	0.94	2.51	15	20
1:A:30:LYS:HB2	1:A:33:ALA:HB2	0.94	1.40	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD1	0.94	2.21	1	6
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:ND1	0.94	2.36	19	16
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:HD23	0.93	1.36	5	1
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD11	0.93	1.79	3	16
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD2	0.93	2.56	7	5
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HG12	0.93	1.94	1	15
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:HB3	0.93	1.39	2	20
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:HG13	0.92	1.98	20	20
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE1	0.92	2.58	19	5
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HD23	0.92	1.94	20	3
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HB3	0.92	2.00	4	20
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:HD2	0.92	1.94	3	20
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CD2	0.92	2.57	2	19
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:CE	0.92	1.93	1	8
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:HD12	0.92	1.88	4	4
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CE	0.92	2.18	2	1
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:HD13	0.92	1.40	9	5
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:HG21	0.92	1.41	8	4
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD21	0.92	2.00	4	5
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CH2	0.92	1.99	11	10
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE2	0.92	1.16	19	9
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CD2	0.92	2.18	16	3
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD13	0.91	2.00	1	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CZ	0.91	2.57	9	14
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CE1	0.91	2.59	19	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB3	0.91	1.41	19	13
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD2	0.91	1.99	14	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:ALA:N	0.91	1.77	9	4
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG12	0.91	1.40	4	4
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HA	0.91	2.00	8	20
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD13	0.91	1.42	5	4
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD21	0.91	1.95	19	10
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CE2	0.91	2.54	20	20
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CG1	0.91	1.96	2	18
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HD21	0.91	1.96	17	4
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HG	0.91	1.38	10	17
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CE1	0.91	2.54	20	14
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE1	0.91	2.58	7	10
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CD1	0.91	2.01	10	12
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD13	0.90	2.01	2	5
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:CG2	0.90	2.54	2	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:N	0.90	2.04	8	20
1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:THR:CG2	0.90	1.95	19	10
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG13	0.90	1.39	15	2
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CD1	0.90	2.01	4	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD21	0.90	1.40	6	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:CA	0.90	2.54	17	7
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:N	0.90	1.78	13	4
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CD2	0.90	2.02	12	4
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE1	0.90	2.60	20	11
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:CD2	0.90	1.96	19	17
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CG	0.90	1.97	20	3
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:CE2	0.90	2.00	17	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	0.90	1.41	13	9
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:OH	0.90	2.23	14	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD21	0.89	1.42	17	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD1	0.89	2.55	10	7
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.89	1.67	5	6
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CD2	0.89	1.98	16	14
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CD	0.89	2.14	17	7
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE1	0.89	1.37	5	3
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:CG	0.89	1.97	9	11
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:HG21	0.89	1.39	18	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD22	0.89	1.41	6	13
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CZ2	0.89	2.61	3	20
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:CE2	0.89	2.61	15	20
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD1	0.89	2.56	12	4
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:HG21	0.89	1.45	5	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:HB3	0.88	1.43	19	6
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD12	0.88	1.92	4	12
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:HG22	0.88	1.98	1	11
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD23	0.88	2.03	12	4
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG12	0.88	1.44	15	16
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD21	0.88	1.41	7	11
1:A:44:THR:HG23	1:A:65:HIS:NE2	0.88	1.84	4	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:HG21	0.88	1.45	7	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:CG2	0.88	1.99	5	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:CD	0.88	2.22	10	18
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG1	0.88	1.97	15	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:CE	0.87	2.52	2	15
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CD1	0.87	2.58	19	20
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CG1	0.87	1.97	13	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:HG23	0.87	1.95	11	5
1:A:64:TYR:HH	1:A:102:VAL:HG13	0.87	1.29	20	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:HE2	0.87	1.86	11	20
1:A:24:LEU:HD13	1:A:25:LEU:H	0.87	1.25	1	5
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:HD2	0.87	1.47	15	20
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG21	0.87	1.44	2	5
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CD1	0.87	2.35	20	3
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CG	0.87	2.22	14	14
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG21	0.87	1.99	17	6
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:OH	0.87	2.27	6	15
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:CD1	0.87	2.58	7	11
1:A:24:LEU:HD11	1:A:35:MET:HE1	0.87	1.44	1	2
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:CA	0.87	2.22	3	16
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:O	0.87	2.22	14	11
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:CD1	0.87	2.58	10	12
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:HG11	0.87	1.47	4	8
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.87	2.38	6	20
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE2	0.87	2.05	15	3
1:A:41:THR:CG2	1:A:44:THR:CG2	0.86	2.53	3	20
1:A:25:LEU:HD23	1:A:50:PHE:CD1	0.86	2.05	8	2
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG23	0.86	1.42	19	1
1:A:36:VAL:HA	1:A:46:THR:O	0.86	1.70	8	20
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:HH	0.86	0.96	4	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.86	2.57	11	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CD1	0.86	2.58	11	15
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:CD2	0.86	2.58	4	20
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG13	0.86	1.28	7	20
1:A:85:ASP:C	1:A:89:LEU:HD11	0.86	1.95	1	5
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB2	0.86	1.70	17	16
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD1	0.86	2.03	12	4
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CG	0.86	2.24	20	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CE2	0.86	2.59	8	20
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG21	0.86	2.01	16	8
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD1	0.85	2.53	4	20
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:CD1	0.85	2.38	3	20
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CD	0.85	2.01	2	20
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HA	0.85	2.05	3	6
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CD2	0.85	2.02	14	6
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD1	0.85	2.59	12	2
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CB	0.85	2.02	7	20
1:A:36:VAL:CG1	1:A:46:THR:O	0.85	2.24	6	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:N	0.85	2.10	17	20
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:O	0.85	2.10	15	20
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:CG2	0.85	2.55	19	13
1:A:24:LEU:CD1	1:A:35:MET:SD	0.85	2.65	12	13
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.85	2.60	7	12
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:CG1	0.85	2.54	12	3
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:N	0.85	2.40	18	8
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD1	0.85	2.54	18	17
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG22	0.84	1.97	3	2
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD13	0.84	2.06	14	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CE1	0.84	2.59	15	13
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	0.84	1.85	18	2
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD12	0.84	2.04	17	16
1:A:66:ILE:N	1:A:66:ILE:CD1	0.84	2.39	11	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CG	0.84	2.39	12	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:CB	0.84	2.01	15	14
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HG	0.84	1.72	7	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:CD2	0.84	2.30	3	7
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CZ	0.84	2.60	10	3
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:CZ	0.84	2.60	14	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:CA	0.84	2.02	1	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD12	0.84	1.48	7	2
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CD1	0.84	2.46	2	2
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CD2	0.84	2.61	6	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG23	0.84	1.45	14	2
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG11	0.84	1.49	4	4
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE1	0.84	2.61	4	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:CG2	0.84	2.02	12	8
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CZ	0.84	2.30	19	14
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HD2	0.84	1.47	3	6
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:HA3	0.84	2.08	5	10
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CE2	0.83	2.08	11	20
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:C	0.83	2.20	9	20
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CD2	0.83	2.61	10	3
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:CG1	0.83	2.61	9	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:HB2	0.83	1.50	20	9
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:CE1	0.83	2.06	20	8
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:HG22	0.83	2.03	13	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HG3	0.83	1.73	4	19
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CD1	0.83	2.60	8	17
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:CG1	0.83	2.03	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD12	0.83	1.47	4	3
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:NE2	0.83	2.46	5	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:CD1	0.83	2.02	20	5
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CE1	0.83	2.56	19	12
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.83	2.40	14	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HG23	0.83	1.50	10	4
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:HG22	0.83	2.03	9	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG3	0.83	1.74	7	10
1:A:68:GLU:HA	1:A:75:ARG:O	0.83	1.74	3	18
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.83	2.03	12	2
1:A:44:THR:HG1	1:A:65:HIS:CD2	0.83	1.92	3	5
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:OH	0.83	2.30	3	4
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:HG21	0.83	1.50	16	4
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HA	0.83	1.49	18	16
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HD12	0.83	1.49	3	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:HG11	0.83	2.03	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:C	0.83	1.99	20	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CD1	0.83	2.57	17	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG23	0.82	2.09	9	20
1:A:77:TYR:HB2	1:A:82:TYR:O	0.82	1.74	8	7
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CB	0.82	2.27	20	7
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:CE2	0.82	2.62	19	2
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CD	0.82	2.58	1	16
1:A:34:PHE:CD1	1:A:105:LEU:HD11	0.82	2.10	16	19
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:CA	0.82	2.27	19	20
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD12	0.82	1.72	19	11
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:CE1	0.82	2.47	2	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HE3	0.82	1.88	9	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CD2	0.82	2.09	16	13
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CE2	0.82	2.58	3	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:82:TYR:O	0.82	2.27	8	8
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD13	0.82	2.00	18	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HD13	0.82	2.08	1	2
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CB	0.82	2.05	12	4
1:A:84:PHE:HB3	1:A:89:LEU:HD12	0.82	1.48	6	4
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:OG	0.82	2.27	4	11
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD23	0.82	2.04	5	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:HD1	0.82	1.31	1	10
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:HG23	0.82	2.10	9	20
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:CB	0.82	2.05	20	15
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CD	0.82	2.05	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:N	1:A:36:VAL:O	0.82	2.12	17	20
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:O	0.82	1.75	3	5
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:CD1	0.82	2.62	20	3
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG2	0.82	2.04	12	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HE3	0.82	1.35	9	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CE1	0.81	2.63	17	19
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:NE2	0.81	2.43	17	12
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:HG3	0.81	2.09	15	9
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HD12	0.81	1.75	3	3
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:CE1	0.81	2.10	11	13
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CE2	0.81	2.09	17	6
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:NE2	0.81	2.43	4	2
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CD1	0.81	2.58	17	5
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:CB	0.81	2.59	17	5
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD1	0.81	2.05	19	7
1:A:66:ILE:HG22	1:A:90:LEU:CD1	0.81	2.06	8	14
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HG22	0.81	1.74	9	2
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:HD13	0.81	1.75	5	6
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CE	0.81	2.06	4	5
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:CE	0.81	2.43	8	14
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:CD2	0.81	2.53	2	3
1:A:24:LEU:HD22	1:A:35:MET:CE	0.81	1.99	6	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:CG1	0.81	2.05	10	5
1:A:76:TYR:N	1:A:76:TYR:HD1	0.81	1.71	6	20
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:CE2	0.81	2.68	4	3
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:CZ	0.81	2.64	5	14
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD2	0.80	1.77	7	20
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CE1	0.80	2.34	19	6
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:O	0.80	2.34	16	4
1:A:81:LYS:HB3	1:A:82:TYR:CE1	0.80	2.11	6	12
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CE2	0.80	2.69	6	20
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:HB2	0.80	2.06	9	8
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:HG12	0.80	2.11	6	14
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CE1	0.80	2.34	8	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:45:TYR:N	0.80	2.11	2	14
1:A:47:VAL:N	1:A:64:TYR:O	0.80	2.14	19	20
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:ND1	0.80	2.49	1	15
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CZ	0.80	2.70	14	13
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CE1	0.80	2.12	8	20
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:CB	0.80	2.29	17	12
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG12	0.80	2.06	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:CE	0.80	2.60	6	6
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:HG23	0.80	1.50	8	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:CE1	0.80	2.10	15	11
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HG3	0.80	1.91	14	7
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE2	0.80	2.11	19	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:CD2	0.80	2.45	11	10
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:LEU:H	0.80	1.37	16	2
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HG12	0.79	1.53	13	10
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CE2	0.79	2.35	10	2
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:HG23	0.79	1.52	14	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CA	0.79	2.31	9	19
1:A:33:ALA:HB3	1:A:50:PHE:HD2	0.79	1.38	11	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:74:LYS:O	0.79	1.76	11	3
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:NE1	0.79	1.93	8	20
1:A:34:PHE:HE2	1:A:91:ILE:HG21	0.79	1.32	15	20
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CD1	0.79	2.10	13	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:CD2	0.79	2.12	6	4
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HD13	0.79	2.12	14	7
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:N	0.79	2.45	19	5
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HB2	0.79	1.92	9	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:CG2	0.79	2.66	7	20
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HA	0.79	2.12	15	13
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:N	0.79	2.16	13	9
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:CD2	0.79	2.12	4	20
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CE2	0.79	2.51	4	9
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.79	2.08	6	2
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD13	0.79	1.93	3	4
1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:OE1	0.79	2.16	7	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG13	0.79	1.53	8	4
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HG3	0.79	2.13	16	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE2	0.79	2.06	11	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CD2	0.79	2.66	14	2
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:CA	0.79	2.30	9	15
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HG21	0.78	2.12	12	20
1:A:35:MET:N	1:A:48:SER:O	0.78	2.16	17	20
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CD1	0.78	2.13	5	13
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE1	0.78	2.13	13	2
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:101:LEU:HD11	0.78	1.37	12	1
1:A:35:MET:HB3	1:A:48:SER:OG	0.78	1.78	4	7
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CD2	0.78	2.66	15	5
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CG	0.78	2.66	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CD2	0.78	2.13	14	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:CG2	0.78	2.61	5	9
1:A:82:TYR:CD1	1:A:82:TYR:N	0.78	2.52	12	14
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:CB	0.78	2.60	20	9
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG13	0.78	1.52	9	3
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD22	0.78	2.04	20	3
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:CG1	0.78	2.09	8	3
1:A:35:MET:O	1:A:48:SER:N	0.78	2.16	7	20
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:HG22	0.78	1.77	1	2
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE2	0.78	2.37	2	4
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:CE1	0.78	2.13	9	8
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:H	0.78	1.38	7	4
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.78	2.37	14	1
1:A:39:SER:CB	1:A:65:HIS:CE1	0.78	2.65	4	12
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:HA	0.78	2.13	9	12
1:A:25:LEU:O	1:A:50:PHE:CE2	0.78	2.37	11	3
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:CE1	0.78	2.61	4	3
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HD12	0.78	2.13	4	6
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CG	0.78	2.14	12	3
1:A:36:VAL:CA	1:A:46:THR:O	0.78	2.32	8	20
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:ND2	0.78	2.16	3	3
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HB3	0.78	2.14	12	12
1:A:33:ALA:O	1:A:49:VAL:HA	0.78	1.79	8	20
1:A:34:PHE:CE2	1:A:91:ILE:HG23	0.78	2.14	19	20
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:OG	0.78	2.32	16	5
1:A:41:THR:O	1:A:43:GLY:N	0.77	2.17	4	20
1:A:50:PHE:CA	1:A:60:CYS:O	0.77	2.32	1	15
1:A:39:SER:HB2	1:A:65:HIS:NE2	0.77	1.94	5	11
1:A:44:THR:OG1	1:A:66:ILE:O	0.77	2.02	7	20
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CB	0.77	2.67	20	4
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD2	0.77	2.09	8	9
1:A:9:TYR:CE2	1:A:88:PRO:HB3	0.77	2.14	9	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CE	0.77	2.62	9	3
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.77	1.55	19	10
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:NE2	0.77	2.42	4	4
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:CE1	0.77	2.37	18	10
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG22	0.77	1.53	1	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:CG1	0.77	2.08	19	14
1:A:34:PHE:CB	1:A:105:LEU:HD12	0.77	2.09	7	16
1:A:76:TYR:O	1:A:84:PHE:N	0.77	2.17	19	20
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HB	0.77	1.56	19	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG1	0.77	2.62	8	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:HD11	0.77	2.14	20	19
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HG2	0.77	1.79	6	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG2	0.77	2.62	10	6
1:A:35:MET:HG2	1:A:48:SER:OG	0.77	1.79	9	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:OD1	0.77	2.37	14	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CD2	0.77	2.15	10	3
1:A:50:PHE:HA	1:A:60:CYS:O	0.77	1.79	16	17
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:CE	0.77	2.62	5	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CZ	0.77	2.38	18	9
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HE2	0.77	1.53	11	3
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:HG21	0.77	2.15	4	20
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:HB3	0.77	2.10	4	20
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:HD2	0.77	1.94	4	16
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG22	0.77	2.03	2	9
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CD2	0.77	2.33	2	2
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HG	0.77	2.15	3	10
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:CE1	0.77	2.38	12	3
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.77	2.15	13	6
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CE	0.76	2.11	19	15
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:HD12	0.76	2.15	20	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG23	0.76	2.11	19	1
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HG3	0.76	1.80	3	12
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:SD	0.76	2.58	13	10
1:A:64:TYR:HD2	1:A:78:VAL:HG11	0.76	1.41	3	3
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:HG23	0.76	2.09	9	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG11	0.76	2.10	1	4
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HA	0.76	2.09	12	17
1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CD	0.76	2.44	7	1
1:A:11:TRP:O	1:A:36:VAL:N	0.76	2.18	9	20
1:A:33:ALA:N	1:A:50:PHE:O	0.76	2.19	5	20
1:A:104:ARG:O	1:A:106:ARG:N	0.76	2.18	12	18
1:A:21:ALA:N	1:A:24:LEU:HD21	0.76	1.94	2	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HD12	0.76	2.16	4	4
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CG	0.76	2.39	16	4
1:A:16:ILE:CD1	1:A:35:MET:SD	0.76	2.74	14	16
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CD	0.76	2.06	3	4
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:CD1	0.76	2.49	17	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD1	0.76	2.39	17	4
1:A:34:PHE:HB2	1:A:105:LEU:HD12	0.76	1.58	18	16
1:A:44:THR:HB	1:A:66:ILE:O	0.76	1.81	18	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:O	1:A:65:HIS:ND1	0.76	2.19	7	13
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CA	0.76	2.11	18	13
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB2	0.76	1.80	11	12
1:A:25:LEU:CD1	1:A:109:VAL:CG2	0.76	2.60	12	3
1:A:74:LYS:HG3	1:A:83:VAL:HG23	0.76	1.57	8	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CD	0.76	2.63	8	5
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:N	0.75	2.19	6	16
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE2	0.75	2.69	14	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.75	2.63	3	12
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:CE1	0.75	2.39	10	4
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:101:LEU:CD1	0.75	1.95	12	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:O	0.75	2.35	14	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:O	0.75	2.20	19	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CD	0.75	2.33	20	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HA	0.75	1.81	16	19
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:H	0.75	1.41	2	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD2	0.75	2.65	17	3
1:A:82:TYR:O	1:A:84:PHE:CE1	0.75	2.39	19	5
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:CZ3	0.75	2.17	3	10
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:107:TYR:HE2	0.75	1.24	16	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.75	1.95	13	9
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:HD13	0.75	1.39	14	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:N	0.75	2.18	13	14
1:A:32:GLY:CA	1:A:51:THR:OG1	0.75	2.34	16	17
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CD2	0.75	2.55	12	6
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:HG13	0.75	2.11	12	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:CG1	0.75	2.63	18	20
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CE	0.75	2.35	12	8
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CD1	0.75	2.65	5	12
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:HB3	0.75	2.16	17	20
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:CG1	0.75	2.64	1	3
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:HA3	0.75	1.97	5	9
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD22	0.75	1.81	20	2
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CG	0.74	2.35	16	9
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:HD12	0.74	2.12	3	5
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:CD2	0.74	2.40	14	10
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HE2	0.74	1.81	7	2
1:A:78:VAL:CG1	1:A:79:ALA:N	0.74	2.49	9	3
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:HD11	0.74	1.41	20	1
1:A:16:ILE:O	1:A:37:ARG:NH1	0.74	2.21	20	4
1:A:67:LYS:O	1:A:77:TYR:N	0.74	2.21	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:VAL:CG2	1:A:66:ILE:CD1	0.74	2.65	17	11
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG2	0.74	2.36	9	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CE2	0.74	2.18	13	13
1:A:50:PHE:HB2	1:A:60:CYS:O	0.74	1.82	7	17
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:HG12	0.74	2.17	6	13
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB3	0.74	2.12	2	12
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CZ	0.74	2.41	5	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:NE2	0.74	2.20	17	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG2	0.74	2.11	19	1
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:CD1	0.74	2.50	3	15
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CG2	0.74	2.71	17	20
1:A:36:VAL:CG2	1:A:47:VAL:HG22	0.74	2.09	15	19
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:O	0.74	1.83	10	5
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HD13	0.74	1.83	17	3
1:A:18:ARG:O	1:A:63:HIS:NE2	0.74	2.20	4	12
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG2	0.74	2.13	4	5
1:A:22:GLU:CD	1:A:63:HIS:HE2	0.74	1.91	5	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE3	0.73	1.83	14	5
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:N	0.73	2.51	13	2
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:OE1	0.73	2.06	7	2
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG12	0.73	2.07	13	6
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:O	0.73	2.06	13	16
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:HG	0.73	2.18	14	10
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CD1	0.73	2.76	5	3
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CE1	0.73	2.41	6	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:48:SER:OG	0.73	1.83	7	1
1:A:47:VAL:O	1:A:64:TYR:N	0.73	2.18	19	20
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE2	0.73	2.40	3	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HG	0.73	2.13	17	13
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:CE2	0.73	2.70	15	3
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG1	0.73	2.67	1	2
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:CG1	0.73	2.14	3	15
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG22	0.73	1.83	2	6
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG2	0.73	2.66	11	8
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CD2	0.73	2.19	19	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:87:ILE:CG2	0.73	2.71	4	20
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:CE1	0.73	2.18	20	11
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:CD	0.73	2.67	18	20
1:A:51:THR:O	1:A:52:LYS:C	0.73	2.30	4	20
1:A:101:LEU:O	1:A:103:THR:N	0.73	2.21	7	10
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:CD1	0.73	2.36	20	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ALA:CB	1:A:60:CYS:SG	0.73	2.76	19	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:N	0.73	1.99	4	2
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:HE1	0.73	1.43	2	3
1:A:79:ALA:O	1:A:80:GLU:C	0.73	2.31	8	19
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:OH	0.73	2.19	6	4
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HB3	0.73	2.19	20	6
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CE1	0.73	2.19	2	2
1:A:26:LEU:CD2	1:A:61:ILE:HD11	0.73	2.14	10	3
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:HG21	0.73	1.99	12	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CD	0.73	2.37	13	1
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:N	0.73	2.22	8	20
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CD1	0.73	2.18	13	11
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:CG	0.73	2.14	4	2
1:A:67:LYS:C	1:A:68:GLU:OE1	0.73	2.32	9	6
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CB	0.73	2.36	17	3
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:CE	0.73	2.62	11	1
1:A:77:TYR:HA	1:A:90:LEU:CD1	0.72	2.13	9	20
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:O	0.72	2.37	6	8
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:CA	0.72	2.37	11	7
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:HG23	0.72	1.59	18	11
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:CA	0.72	2.15	6	1
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:CD1	0.72	2.62	3	16
1:A:6:LEU:HD12	1:A:12:TYR:CG	0.72	2.19	6	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:60:CYS:O	0.72	2.38	1	14
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CE1	0.72	2.19	4	7
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CE2	0.72	2.18	19	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HD1	0.72	1.40	19	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CD2	0.72	2.71	6	4
1:A:50:PHE:CD1	1:A:61:ILE:HD13	0.72	2.19	10	3
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CZ	0.72	2.20	8	19
1:A:9:TYR:CE1	1:A:88:PRO:HG3	0.72	2.19	14	3
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:NE2	0.72	2.22	5	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:HG3	0.72	1.83	20	2
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:CG2	0.72	2.62	3	2
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD3	0.72	2.15	16	13
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CG1	0.72	2.37	2	11
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:CA	0.72	2.73	9	20
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD21	0.72	2.10	2	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CZ	0.72	2.72	16	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HD21	0.72	1.61	5	12
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CG	0.72	2.37	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:N	0.72	2.23	3	2
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:CB	0.72	2.14	17	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD22	0.72	1.45	2	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HB3	0.72	2.19	7	6
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG2	0.72	2.67	17	5
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:HA	0.72	2.20	3	4
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:CD1	0.72	2.38	11	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE2	0.72	1.62	6	2
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.72	2.13	2	3
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CD1	0.72	2.72	7	16
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CG	0.72	2.73	15	9
1:A:6:LEU:HD22	1:A:88:PRO:CD	0.72	2.13	4	6
1:A:37:ARG:NH1	1:A:46:THR:OG1	0.72	2.23	17	5
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CE2	0.72	2.78	14	3
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CD2	0.71	2.20	18	9
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:HB	0.71	2.00	2	3
1:A:11:TRP:O	1:A:13:ASN:ND2	0.71	2.22	7	2
1:A:74:LYS:CB	1:A:84:PHE:C	0.71	2.63	6	1
1:A:66:ILE:HD12	1:A:87:ILE:HG13	0.71	1.61	20	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD21	0.71	2.14	2	5
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG21	0.71	2.14	2	6
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CE1	0.71	2.43	15	10
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:O	0.71	2.09	9	12
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CE2	0.71	2.20	3	5
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:HG23	0.71	2.15	14	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HD22	0.71	1.61	19	1
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:CD1	0.71	2.68	5	15
1:A:104:ARG:O	1:A:105:LEU:C	0.71	2.33	5	10
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:CE1	0.71	2.73	4	2
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CZ	0.71	2.20	14	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HD2	0.71	1.62	10	2
1:A:67:LYS:HG3	1:A:77:TYR:CE1	0.71	2.21	2	13
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:CG	0.71	2.21	19	2
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CD1	0.71	2.74	10	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CD2	0.71	2.21	7	13
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:CD	0.71	2.16	9	15
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:CD1	0.71	2.64	17	4
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:OE1	0.71	2.08	19	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HD2	0.71	1.63	14	3
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:OG	0.71	2.39	17	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD1	0.71	2.19	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CB	1:A:89:LEU:HD12	0.71	2.15	1	4
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:SD	0.71	2.25	9	4
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:HG2	0.71	1.61	20	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HG21	0.71	2.21	3	18
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CG2	0.71	2.15	10	19
1:A:49:VAL:O	1:A:62:LYS:N	0.71	2.24	18	12
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:CD	0.71	2.39	5	2
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:CD	0.71	2.34	10	1
1:A:9:TYR:CG	1:A:11:TRP:CE2	0.71	2.79	19	18
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:HB2	0.71	1.63	14	13
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:NZ	0.71	2.24	3	7
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:HD22	0.71	2.19	17	4
1:A:66:ILE:HG21	1:A:87:ILE:CD1	0.71	2.13	19	4
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.71	2.57	5	2
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE1	0.71	2.21	14	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CG	0.71	2.39	17	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:CE1	0.70	2.22	20	6
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:HG11	0.70	1.61	1	4
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:HA	0.70	1.86	10	19
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.70	2.16	15	6
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:CD2	0.70	2.69	20	3
1:A:75:ARG:CG	1:A:85:ASP:HA	0.70	2.16	2	7
1:A:98:GLY:O	1:A:100:GLY:N	0.70	2.24	9	7
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:HD12	0.70	2.09	18	15
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:CG	0.70	2.38	13	5
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:O	0.70	2.24	5	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:OG1	0.70	2.39	10	3
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HD23	0.70	1.62	17	2
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:HB2	0.70	2.16	17	20
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CE2	0.70	2.21	2	3
1:A:77:TYR:HB2	1:A:81:LYS:O	0.70	1.86	12	4
1:A:64:TYR:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.70	2.21	3	3
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.39	20	6
1:A:25:LEU:HD11	1:A:48:SER:HG	0.70	1.42	9	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG1	0.70	2.16	13	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:O	0.70	2.24	19	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:CD2	0.70	2.44	12	2
1:A:14:LYS:O	1:A:16:ILE:N	0.70	2.24	13	14
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:NE2	0.70	2.00	9	10
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:CD1	0.70	2.17	15	17
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CA	0.70	2.16	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CD1	0.70	2.56	13	3
1:A:14:LYS:HG3	1:A:15:SER:N	0.70	2.01	19	5
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG23	0.70	1.61	10	3
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.38	5	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:CD2	0.70	2.66	9	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG3	0.70	1.87	3	5
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:C	0.70	2.35	8	8
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:CB	0.70	2.16	20	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:CG2	0.70	2.17	5	9
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:HG2	0.70	1.86	17	20
1:A:65:HIS:C	1:A:66:ILE:HD13	0.70	2.11	11	10
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:CG	0.70	2.16	3	11
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG2	0.70	2.10	10	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:OG	0.70	2.34	12	3
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD12	0.70	1.44	7	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:CE2	0.70	2.73	10	2
1:A:51:THR:N	1:A:60:CYS:O	0.70	2.24	17	11
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CD1	0.70	2.22	16	20
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:CG2	0.70	2.65	13	4
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HB3	0.70	1.86	14	15
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CB	0.70	2.40	19	4
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:CG1	0.70	2.69	12	2
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CG	0.70	2.34	14	3
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:CG1	0.70	1.96	4	20
1:A:36:VAL:HG22	1:A:47:VAL:CG2	0.70	2.13	15	19
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HG12	0.70	2.21	5	6
1:A:110:CYS:SG	1:A:110:CYS:O	0.70	2.50	8	16
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HD11	0.70	1.64	4	8
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:HB	0.70	2.17	7	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:CD2	0.70	2.22	18	8
1:A:41:THR:CB	1:A:42:PRO:HD2	0.70	2.17	15	20
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:N	0.70	2.48	9	20
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CE	0.70	2.17	2	4
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG2	0.70	1.63	11	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CD	0.70	2.39	16	6
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CD	0.70	2.39	20	1
1:A:69:THR:O	1:A:70:ASN:C	0.70	2.34	8	8
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:CD	0.70	2.39	17	3
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE3	0.70	1.87	2	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:SD	0.70	2.75	3	7
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:HB3	0.70	1.60	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HA	0.70	2.21	16	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HD22	0.70	2.17	19	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CG	0.70	2.16	3	7
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CG2	0.70	2.40	10	4
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD1	0.70	2.17	4	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:93:TYR:OH	0.70	2.23	8	2
1:A:24:LEU:CG	1:A:35:MET:CE	0.69	2.62	4	6
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CG	0.69	2.39	13	4
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:C	0.69	2.65	6	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HD12	0.69	1.86	10	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:107:TYR:CD2	0.69	2.22	15	2
1:A:88:PRO:C	1:A:92:GLN:CD	0.69	2.60	17	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:O	0.69	2.40	12	9
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:HG23	0.69	2.17	1	5
1:A:75:ARG:N	1:A:84:PHE:O	0.69	2.25	5	5
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:CB	0.69	2.40	4	4
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CD	0.69	2.40	16	4
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:HE3	0.69	2.12	11	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CZ2	0.69	2.80	11	19
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CB	0.69	2.17	4	13
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:HE2	0.69	2.06	6	20
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CG	0.69	2.70	9	11
1:A:25:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG22	0.69	1.64	11	5
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.69	2.22	3	4
1:A:34:PHE:CE1	1:A:105:LEU:CD1	0.69	2.74	20	4
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:O	0.69	2.40	14	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:O	0.69	1.87	14	2
1:A:91:ILE:C	1:A:105:LEU:HD23	0.69	2.12	12	11
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HG23	0.69	1.64	8	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:CG1	0.69	2.69	13	7
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:CG	0.69	2.75	15	10
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD12	0.69	2.12	12	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CD	0.69	2.39	17	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG12	0.69	2.17	7	19
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:94:HIS:CE1	0.69	2.04	2	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:50:PHE:CG	0.69	2.21	9	7
1:A:45:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.69	2.23	17	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:51:THR:OG1	0.69	1.86	14	14
1:A:33:ALA:HA	1:A:107:TYR:O	0.69	1.88	6	16
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD1	0.69	2.40	1	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CG2	0.69	2.18	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:HB3	1:A:61:ILE:CG2	0.69	2.17	14	3
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:CG1	0.69	2.18	6	1
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HB3	0.69	1.87	7	1
1:A:95:GLN:CG	1:A:105:LEU:HB2	0.69	2.17	17	2
1:A:106:ARG:CZ	1:A:106:ARG:O	0.69	2.41	15	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HB3	0.69	2.17	20	3
1:A:39:SER:HB3	1:A:65:HIS:CE1	0.69	2.23	14	7
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CZ	0.69	2.22	2	13
1:A:96:TYR:O	1:A:98:GLY:N	0.69	2.26	1	2
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:C	0.69	2.35	7	8
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:NZ	0.69	2.56	2	5
1:A:22:GLU:N	1:A:22:GLU:OE1	0.69	2.26	4	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:SD	0.69	2.27	16	3
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:CG2	0.69	2.18	14	2
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NH2	0.69	2.26	17	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:CD1	0.69	2.76	3	13
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CB	0.69	2.18	10	13
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:CG1	0.69	2.18	6	15
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:NE2	0.69	2.02	4	4
1:A:70:ASN:HA	1:A:75:ARG:HG2	0.69	1.65	6	1
1:A:66:ILE:CD1	1:A:87:ILE:HG13	0.69	2.18	20	2
1:A:76:TYR:N	1:A:84:PHE:O	0.69	2.25	12	14
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:HG21	0.69	2.18	7	6
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.69	1.88	2	5
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:TYR:CE1	0.69	2.22	5	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:105:LEU:HG	0.69	1.63	4	1
1:A:98:GLY:HA3	1:A:104:ARG:CB	0.69	2.18	20	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:34:PHE:CD2	0.68	2.80	15	19
1:A:21:ALA:CB	1:A:48:SER:OG	0.68	2.41	18	4
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:HA2	0.68	1.47	8	2
1:A:39:SER:OG	1:A:65:HIS:NE2	0.68	2.26	7	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.18	9	14
1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:HD1	0.68	1.87	2	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:11:TRP:HH2	0.68	1.43	11	8
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.76	4	7
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:CA	0.68	2.01	8	2
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:CD	0.68	2.67	14	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:CG2	0.68	2.40	17	1
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD13	0.68	2.03	18	3
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:HG12	0.68	1.65	17	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB3	0.68	1.87	19	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:CG1	0.68	2.19	10	16
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:H	0.68	2.01	2	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ALA:H	0.68	1.48	7	4
1:A:51:THR:HG22	1:A:51:THR:O	0.68	1.87	16	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:CD	0.68	2.18	4	14
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG13	0.68	1.66	10	18
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:HD12	0.68	1.88	12	16
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:HE2	0.68	2.07	4	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HE2	0.68	1.88	19	4
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NE	0.68	2.27	15	1
1:A:86:SER:O	1:A:89:LEU:HG	0.68	1.89	2	4
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NH1	0.68	2.27	16	2
1:A:30:LYS:HD3	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.24	12	4
1:A:74:LYS:HE3	1:A:74:LYS:N	0.68	2.02	8	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:63:HIS:NE2	0.68	2.27	12	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:CD2	0.68	2.19	12	15
1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:HIS:CE1	0.68	2.23	7	2
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:HD11	0.68	2.23	8	7
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HG3	0.68	1.66	15	7
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CB	0.68	2.18	3	5
1:A:39:SER:O	1:A:41:THR:N	0.68	2.27	5	2
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:O	0.68	2.26	16	4
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HA	0.68	1.66	14	20
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:C	0.68	2.36	14	8
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:CD1	0.68	2.76	19	1
1:A:76:TYR:C	1:A:90:LEU:HD12	0.68	2.14	17	12
1:A:95:GLN:N	1:A:105:LEU:HB2	0.68	2.04	15	20
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.18	9	4
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CD2	0.68	2.24	3	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:CG	0.68	2.41	17	6
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:NH1	0.68	2.27	20	2
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:HG22	0.68	2.12	12	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:107:TYR:CE2	0.68	2.23	16	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HG3	0.68	2.19	17	8
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:12:TYR:HB2	0.68	2.24	6	8
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB2	0.68	1.64	20	7
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:H	0.68	1.96	17	2
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:CD	0.68	2.37	7	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:45:TYR:CG	0.68	2.24	17	2
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CD1	0.68	2.57	18	2
1:A:62:LYS:HE2	1:A:64:TYR:CZ	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:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD2	0.68	2.19	17	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:109:VAL:CG1	0.67	2.19	1	3
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:C	0.67	2.36	5	5
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:N	0.67	2.27	14	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD13	0.67	2.14	20	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:C	0.67	2.37	9	2
1:A:50:PHE:HD2	1:A:61:ILE:CD1	0.67	2.00	19	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG11	0.67	1.63	10	3
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:CG1	0.67	2.20	12	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:O	0.67	2.26	14	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:CG2	0.67	2.20	3	10
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HG13	0.67	1.64	6	4
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:HG3	0.67	1.89	11	2
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:C	0.67	2.67	4	11
1:A:35:MET:HE3	1:A:109:VAL:HG12	0.67	1.66	17	4
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:CE2	0.67	2.83	4	3
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CB	0.67	2.72	20	2
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CD2	0.67	2.24	20	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HE2	0.67	1.46	2	4
1:A:17:SER:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.67	2.05	16	10
1:A:37:ARG:N	1:A:46:THR:O	0.67	2.27	9	20
1:A:41:THR:HG21	1:A:44:THR:CG2	0.67	2.17	9	15
1:A:95:GLN:O	1:A:104:ARG:NH1	0.67	2.28	1	5
1:A:13:ASN:O	1:A:16:ILE:HB	0.67	1.88	7	10
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:HB2	0.67	1.87	3	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG22	0.67	1.65	9	2
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:NZ	0.67	2.27	14	3
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:HB2	0.67	1.88	2	13
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:O	0.67	2.42	10	4
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:82:TYR:HE1	0.67	1.31	17	4
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CE2	0.67	2.77	12	5
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:CD	0.67	2.70	18	20
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.67	2.40	5	6
1:A:87:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.67	2.43	12	20
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:O	0.67	2.11	6	13
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:CG2	0.67	2.19	6	5
1:A:69:THR:CG2	1:A:74:LYS:O	0.67	2.43	11	1
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:N	0.67	2.27	3	10
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:CA	0.67	2.58	6	5
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:HD2	0.67	1.90	1	6
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CD2	0.67	2.20	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CD2	0.67	2.48	20	2
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HA	0.67	2.24	4	5
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:HD12	0.67	1.50	4	5
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:NE2	0.67	2.58	4	3
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:CD2	0.67	2.83	5	2
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:SG	0.67	2.52	19	1
1:A:34:PHE:CD1	1:A:35:MET:N	0.67	2.63	2	18
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:CD1	0.67	2.58	1	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:100:GLY:N	0.67	2.43	3	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:CG1	0.67	2.20	14	4
1:A:60:CYS:C	1:A:61:ILE:HD13	0.67	2.15	19	6
1:A:62:LYS:NZ	1:A:64:TYR:CZ	0.67	2.60	7	4
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HG21	0.66	1.68	4	18
1:A:41:THR:OG1	1:A:42:PRO:HD3	0.66	1.90	18	17
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE1	0.66	2.07	12	3
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD2	0.66	2.39	2	1
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CE2	0.66	2.22	20	13
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:CA	0.66	2.58	5	6
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:CZ	0.66	2.48	4	1
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:CG	0.66	2.67	7	4
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD2	0.66	2.26	11	3
1:A:95:GLN:NE2	1:A:105:LEU:HB3	0.66	2.04	20	2
1:A:12:TYR:CE1	1:A:14:LYS:HG3	0.66	2.25	20	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CD2	0.66	2.78	2	10
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HG2	0.66	1.66	1	10
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HG13	0.66	1.65	13	13
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:CE	0.66	2.20	2	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HD12	0.66	2.24	4	2
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG2	0.66	1.90	7	3
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:CD	0.66	2.15	17	4
1:A:110:CYS:O	1:A:110:CYS:SG	0.66	2.53	14	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:N	0.66	2.51	5	5
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:NH2	0.66	2.29	1	1
1:A:39:SER:OG	1:A:40:ARG:N	0.66	2.27	1	6
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:HB	0.66	2.15	4	9
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:CB	0.66	2.43	5	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:C	0.66	2.15	6	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG13	0.66	2.20	12	1
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:CE1	0.66	2.73	9	15
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD22	0.66	2.26	1	3
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:CE1	0.66	2.78	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:PHE:O	1:A:109:VAL:HG22	0.66	1.90	4	2
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CE	0.66	2.74	4	1
1:A:70:ASN:HA	1:A:75:ARG:CG	0.66	2.21	6	1
1:A:62:LYS:HE2	1:A:64:TYR:CE1	0.66	2.25	10	2
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:CD	0.66	2.58	16	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE1	0.66	1.91	7	5
1:A:64:TYR:HB3	1:A:78:VAL:CG2	0.66	2.20	8	1
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:C	0.66	2.38	6	9
1:A:75:ARG:CG	1:A:84:PHE:O	0.66	2.44	20	4
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HA	0.66	2.26	17	3
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:O	0.66	2.13	15	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:90:LEU:CD2	0.66	2.73	8	14
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:N	0.66	2.28	12	11
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:ND2	0.66	2.64	3	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.66	2.20	6	2
1:A:18:ARG:NH1	1:A:19:ASP:OD2	0.66	2.29	10	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:CG1	0.66	2.19	12	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:GLU:OE1	0.66	2.13	20	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HD12	0.66	2.21	17	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HB2	0.66	1.68	17	13
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD3	0.66	2.21	10	7
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HD3	0.66	2.13	13	3
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB2	0.66	2.05	13	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:O	0.66	2.39	6	11
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:HD1	0.66	1.98	11	13
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:O	0.66	1.90	15	20
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CG	0.66	2.43	3	9
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:C	0.66	2.39	9	7
1:A:64:TYR:CE1	1:A:101:LEU:HB3	0.66	2.26	7	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:HB2	0.66	2.21	7	3
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:CG2	0.66	2.31	14	2
1:A:34:PHE:CD2	1:A:105:LEU:HG	0.65	2.25	2	11
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:HG13	0.65	1.68	12	15
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:N	0.65	2.64	14	18
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:N	0.65	2.29	10	13
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HE2	0.65	2.20	5	2
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:99:GLY:C	0.65	1.98	6	2
1:A:74:LYS:HE3	1:A:74:LYS:H	0.65	1.50	8	1
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:HB	0.65	1.89	14	2
1:A:69:THR:HG22	1:A:75:ARG:O	0.65	1.91	5	8
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.59	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:N	0.65	2.44	20	3
1:A:26:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG13	0.65	2.22	1	1
1:A:77:TYR:CA	1:A:90:LEU:CD1	0.65	2.70	3	17
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:CG	0.65	2.20	9	7
1:A:68:GLU:HG3	1:A:76:TYR:CD1	0.65	2.26	7	6
1:A:53:ALA:N	1:A:60:CYS:SG	0.65	2.69	19	1
1:A:53:ALA:CA	1:A:60:CYS:SG	0.65	2.84	19	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:N	0.65	2.65	6	12
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG3	0.65	2.17	11	12
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE3	0.65	2.21	14	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CD1	0.65	2.21	12	3
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:CD	0.65	2.21	1	5
1:A:11:TRP:CA	1:A:35:MET:HA	0.65	2.21	20	15
1:A:45:TYR:C	1:A:65:HIS:ND1	0.65	2.55	11	13
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:C	0.65	2.40	14	12
1:A:81:LYS:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.65	2.25	2	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:70:ASN:N	0.65	2.27	19	3
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CE	0.65	2.59	8	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:20:LYS:NZ	0.65	2.30	10	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.06	14	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD1	0.65	2.69	4	13
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:H	0.65	2.00	4	20
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:N	0.65	2.07	15	4
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:OE1	0.65	2.29	3	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:NE2	0.65	2.07	11	5
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:CD1	0.65	2.45	10	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:CE	0.65	2.22	3	2
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:C	0.65	2.40	11	4
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD1	0.65	2.27	12	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD2	0.65	2.21	6	3
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:NZ	0.65	2.07	2	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HD11	0.65	1.92	12	5
1:A:87:ILE:N	1:A:88:PRO:CD	0.65	2.60	20	18
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CD1	0.65	2.27	9	2
1:A:78:VAL:C	1:A:81:LYS:HE2	0.65	2.17	13	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:105:LEU:HG	0.65	1.69	14	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD13	0.65	2.27	17	1
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HG2	0.64	1.92	16	16
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:N	0.64	2.65	14	17
1:A:51:THR:O	1:A:53:ALA:N	0.64	2.30	4	3
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:CB	0.64	2.21	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:ASP:C	1:A:38:ASP:OD1	0.64	2.40	17	2
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:CE1	0.64	2.80	10	2
1:A:98:GLY:O	1:A:99:GLY:O	0.64	2.15	20	3
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:CE	0.64	2.22	18	4
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:CG1	0.64	2.22	8	4
1:A:25:LEU:O	1:A:28:THR:HG23	0.64	1.92	5	1
1:A:67:LYS:C	1:A:68:GLU:CD	0.64	2.65	7	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD1	0.64	2.45	3	4
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:CD2	0.64	2.70	16	7
1:A:30:LYS:O	1:A:52:LYS:CE	0.64	2.46	11	1
1:A:30:LYS:HG3	1:A:107:TYR:CE2	0.64	2.27	15	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:87:ILE:HB	0.64	1.67	6	2
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:C	0.64	2.18	16	10
1:A:34:PHE:HZ	1:A:91:ILE:CD1	0.64	2.06	3	20
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HG	0.64	2.17	2	10
1:A:24:LEU:HG	1:A:35:MET:CE	0.64	2.17	15	3
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:OE2	0.64	2.16	18	5
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:C	0.64	2.56	5	8
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CG1	0.64	2.74	17	3
1:A:12:TYR:CZ	1:A:14:LYS:HG3	0.64	2.27	20	2
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CG	0.64	2.23	7	9
1:A:74:LYS:HD3	1:A:74:LYS:N	0.64	2.08	7	3
1:A:14:LYS:CG	1:A:38:ASP:HB2	0.64	2.22	20	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:HD3	0.64	2.21	1	3
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:CG	0.64	2.45	2	5
1:A:82:TYR:CB	1:A:84:PHE:CZ	0.64	2.81	7	8
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HG3	0.64	2.22	20	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:HA3	0.64	2.08	12	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:C	0.64	2.18	10	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HG3	0.64	1.91	13	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:109:VAL:HG22	0.64	2.23	14	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HD13	0.64	2.21	18	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:HG13	0.64	2.18	17	3
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:HE2	0.64	2.05	19	4
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:O	0.64	2.16	8	7
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:CE1	0.64	2.86	18	8
1:A:66:ILE:O	1:A:68:GLU:OE2	0.64	2.16	7	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:83:VAL:HG11	0.64	1.67	17	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:45:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD13	0.64	1.51	17	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:CG	0.64	2.76	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:H	0.64	2.01	15	15
1:A:85:ASP:O	1:A:85:ASP:CG	0.64	2.40	6	3
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HG13	0.64	2.23	17	6
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:HD3	0.64	2.23	12	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:CE2	0.64	2.26	14	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE3	0.64	2.08	3	4
1:A:30:LYS:CE	1:A:107:TYR:CD2	0.64	2.81	4	2
1:A:93:TYR:HH	1:A:94:HIS:CE1	0.64	2.09	19	2
1:A:35:MET:HE1	1:A:111:GLY:H	0.64	1.52	9	2
1:A:104:ARG:CD	1:A:104:ARG:O	0.64	2.46	9	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:61:ILE:HG13	0.64	2.28	12	2
1:A:94:HIS:C	1:A:105:LEU:HB2	0.64	2.18	2	15
1:A:93:TYR:OH	1:A:94:HIS:HE1	0.64	1.76	8	4
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:HD12	0.63	2.18	4	5
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:CD2	0.63	2.46	17	5
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CG	0.63	2.23	9	14
1:A:97:ASN:ND2	1:A:98:GLY:N	0.63	2.46	3	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CG	0.63	2.28	11	5
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CD1	0.63	2.76	5	3
1:A:70:ASN:CA	1:A:75:ARG:HG2	0.63	2.23	6	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:O	0.63	1.92	7	2
1:A:44:THR:CG2	1:A:66:ILE:O	0.63	2.46	14	3
1:A:17:SER:C	1:A:37:ARG:NH1	0.63	2.56	5	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CG	0.63	2.86	5	2
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG3	0.63	2.28	18	2
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:CD	0.63	2.76	14	4
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:N	0.63	2.09	11	20
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CE1	0.63	2.81	12	20
1:A:93:TYR:CE2	1:A:94:HIS:NE2	0.63	2.66	14	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HB	0.63	1.68	7	3
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:CD2	0.63	2.80	8	3
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD12	0.63	2.28	10	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:109:VAL:CG2	0.63	2.75	14	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:CG1	0.63	2.23	12	5
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:CG	0.63	2.47	1	2
1:A:10:GLU:O	1:A:110:CYS:HB2	0.63	1.93	8	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:CD1	0.63	2.75	15	4
1:A:28:THR:CB	1:A:109:VAL:CG2	0.63	2.77	17	1
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HB3	0.63	1.68	17	11
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:CD1	0.63	2.67	20	8
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD12	0.63	2.09	6	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:OH	0.63	2.51	14	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:CE2	0.63	2.29	20	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:VAL:C	0.63	2.42	10	10
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:CE	0.63	2.24	5	3
1:A:96:TYR:O	1:A:97:ASN:O	0.63	2.17	17	6
1:A:94:HIS:CG	1:A:105:LEU:HD23	0.63	2.28	20	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG2	0.63	1.93	4	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:HB3	0.63	1.70	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:C	0.63	2.18	8	3
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:HG23	0.63	1.94	11	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD1	0.63	2.29	19	14
1:A:34:PHE:HA	1:A:48:SER:O	0.63	1.93	4	12
1:A:37:ARG:CZ	1:A:46:THR:HG21	0.63	2.23	12	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:CB	0.62	2.46	14	10
1:A:9:TYR:CZ	1:A:88:PRO:CB	0.62	2.81	14	11
1:A:94:HIS:NE2	1:A:101:LEU:HD22	0.62	2.07	9	5
1:A:93:TYR:CZ	1:A:94:HIS:CD2	0.62	2.87	5	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:OG1	0.62	2.10	9	3
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:CA	0.62	2.23	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:HG21	0.62	1.71	20	2
1:A:14:LYS:NZ	1:A:38:ASP:CG	0.62	2.57	20	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:103:THR:HG23	0.62	2.23	5	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG11	0.62	2.25	9	9
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:C	0.62	2.62	5	3
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.62	2.77	6	4
1:A:25:LEU:HG	1:A:109:VAL:CG2	0.62	2.24	7	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CB	0.62	2.63	13	2
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:HB	0.62	2.29	6	20
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:HG23	0.62	2.29	15	18
1:A:77:TYR:N	1:A:90:LEU:HD11	0.62	2.08	16	11
1:A:26:LEU:HG	1:A:61:ILE:CD1	0.62	2.24	7	5
1:A:61:ILE:HD13	1:A:61:ILE:N	0.62	2.09	4	4
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:CG1	0.62	2.36	1	3
1:A:66:ILE:CG2	1:A:76:TYR:HB3	0.62	2.22	19	5
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:N	0.62	2.31	12	4
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HG2	0.62	1.93	16	4
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:OE1	0.62	2.18	12	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:62:LYS:HB3	0.62	2.24	9	12
1:A:94:HIS:O	1:A:105:LEU:N	0.62	2.32	4	6
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG23	0.62	2.08	3	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:74:LYS:O	0.62	2.17	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:GLY:HA3	1:A:103:THR:OG1	0.62	1.93	9	3
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:CG	0.62	2.73	10	2
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HG23	0.62	1.94	10	1
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:C	0.62	2.42	17	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:OD1	0.62	2.32	19	1
1:A:34:PHE:CD2	1:A:95:GLN:NE2	0.62	2.68	20	1
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HD2	0.62	2.24	2	11
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:HG23	0.62	1.93	13	10
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:NE2	0.62	2.08	4	10
1:A:44:THR:HG21	1:A:66:ILE:O	0.62	1.95	14	3
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:CD	0.62	2.47	7	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD11	0.62	2.29	8	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CD	0.62	2.24	14	3
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:C	0.62	2.41	13	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HD1	0.62	1.55	17	3
1:A:34:PHE:N	1:A:107:TYR:O	0.62	2.30	20	18
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CD1	0.62	2.30	17	8
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:ND2	0.62	2.09	1	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:61:ILE:HB	0.62	2.25	2	5
1:A:77:TYR:CD2	1:A:80:GLU:CA	0.62	2.82	9	13
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:CA	0.62	2.48	4	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CD	0.62	2.25	17	2
1:A:35:MET:HB3	1:A:109:VAL:O	0.62	1.95	9	1
1:A:35:MET:HB2	1:A:48:SER:OG	0.62	1.95	12	2
1:A:53:ALA:N	1:A:60:CYS:HG	0.62	1.91	19	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:CB	0.62	2.25	19	18
1:A:45:TYR:O	1:A:66:ILE:CD1	0.62	2.47	13	9
1:A:45:TYR:C	1:A:66:ILE:HG12	0.62	2.20	7	10
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CE2	0.62	2.29	2	8
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:O	0.62	1.94	9	6
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HD2	0.62	2.25	4	1
1:A:31:GLU:N	1:A:52:LYS:HE3	0.62	2.10	11	1
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:109:VAL:HG13	0.62	1.55	12	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:HE1	0.62	1.93	18	12
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:HB3	0.62	1.95	14	6
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.62	2.61	14	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD22	0.62	1.95	12	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:O	0.62	2.18	20	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:36:VAL:CB	0.61	2.83	18	20
1:A:34:PHE:CD2	1:A:108:PRO:HB3	0.61	2.30	6	16
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CB	0.61	2.25	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:NZ	0.61	2.10	20	3
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:CB	0.61	2.24	6	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CE1	0.61	2.83	16	1
1:A:98:GLY:N	1:A:104:ARG:HD3	0.61	2.10	2	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:CE	0.61	2.73	9	4
1:A:49:VAL:HG21	1:A:102:VAL:CG1	0.61	2.24	9	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:CB	0.61	2.25	8	3
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:HG13	0.61	1.93	8	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:O	0.61	1.94	9	11
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CG2	0.61	2.08	4	17
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:N	0.61	2.10	9	20
1:A:87:ILE:C	1:A:91:ILE:HG12	0.61	2.19	17	20
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:OG1	0.61	2.16	2	3
1:A:88:PRO:O	1:A:92:GLN:HG2	0.61	1.95	17	9
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CE2	0.61	2.88	19	2
1:A:47:VAL:HB	1:A:64:TYR:HB2	0.61	1.71	15	7
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:CG2	0.61	2.83	19	17
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CA	0.61	2.83	3	6
1:A:11:TRP:CD1	1:A:95:GLN:NE2	0.61	2.69	5	2
1:A:18:ARG:CZ	1:A:19:ASP:OD2	0.61	2.48	10	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:108:PRO:CB	0.61	2.75	7	14
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:N	0.61	2.09	19	9
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG12	0.61	1.70	18	10
1:A:70:ASN:CG	1:A:70:ASN:O	0.61	2.43	2	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:CG	0.61	2.49	7	11
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CZ2	0.61	2.89	15	10
1:A:28:THR:CG2	1:A:29:GLY:N	0.61	2.63	6	10
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CE	0.61	2.49	20	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:87:ILE:HG13	0.61	1.72	19	14
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:HB2	0.61	1.73	5	19
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:HG3	0.61	1.96	20	12
1:A:110:CYS:O	1:A:111:GLY:O	0.61	2.18	17	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:CE1	0.61	2.30	5	3
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:C	0.61	2.21	6	1
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG3	0.61	2.19	7	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:83:VAL:CG2	0.61	2.25	14	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:82:TYR:CE1	0.61	2.69	18	10
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:H	0.61	2.09	16	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HB3	0.61	1.96	4	4
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:O	0.61	1.95	12	4
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD13	0.61	2.11	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CB	1:A:81:LYS:NZ	0.61	2.63	11	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:93:TYR:OH	0.61	1.96	14	1
1:A:9:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.61	2.34	5	18
1:A:11:TRP:CH2	1:A:87:ILE:HG21	0.61	2.29	2	6
1:A:34:PHE:CD1	1:A:47:VAL:CG1	0.61	2.82	8	20
1:A:66:ILE:HD13	1:A:66:ILE:H	0.61	1.55	12	13
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:C	0.61	2.20	1	2
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:CB	0.61	2.26	20	14
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:CD	0.61	2.26	9	6
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:N	0.61	2.64	2	1
1:A:74:LYS:O	1:A:75:ARG:HG3	0.61	1.95	9	2
1:A:31:GLU:CG	1:A:31:GLU:O	0.60	2.49	1	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:108:PRO:O	0.60	2.19	16	3
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CD2	0.60	2.40	2	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HB2	0.60	1.96	20	6
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HG2	0.60	1.96	18	5
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CZ	0.60	2.89	5	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:CG1	0.60	2.64	12	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:106:ARG:HG3	0.60	2.26	13	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:OD1	0.60	2.18	14	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CD2	0.60	2.74	16	1
1:A:35:MET:HG2	1:A:36:VAL:N	0.60	2.11	14	10
1:A:64:TYR:HH	1:A:101:LEU:HB3	0.60	1.56	1	1
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:CD1	0.60	2.80	14	9
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HA	0.60	1.95	9	12
1:A:10:GLU:CG	1:A:108:PRO:HB2	0.60	2.25	4	3
1:A:64:TYR:CB	1:A:78:VAL:HG21	0.60	2.21	8	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HD3	0.60	2.11	20	3
1:A:68:GLU:CA	1:A:75:ARG:O	0.60	2.46	3	12
1:A:76:TYR:CE2	1:A:86:SER:HA	0.60	2.30	5	3
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:CG2	0.60	2.77	12	3
1:A:18:ARG:HG2	1:A:19:ASP:N	0.60	2.10	4	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:O	0.60	1.97	19	5
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:CE	0.60	2.24	9	2
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:O	0.60	2.19	15	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CG1	0.60	2.79	12	2
1:A:86:SER:OG	1:A:88:PRO:CD	0.60	2.49	1	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD2	0.60	1.96	1	5
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HD3	0.60	1.72	4	3
1:A:66:ILE:CG1	1:A:87:ILE:HD11	0.60	2.26	2	4
1:A:78:VAL:HG23	1:A:81:LYS:HE3	0.60	1.73	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG23	0.60	1.73	4	3
1:A:77:TYR:CG	1:A:83:VAL:CG1	0.60	2.80	11	5
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:CG2	0.60	2.74	14	1
1:A:34:PHE:O	1:A:108:PRO:C	0.60	2.44	9	7
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:N	0.60	2.63	5	2
1:A:103:THR:CB	1:A:106:ARG:HB2	0.60	2.27	15	2
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:CZ	0.60	2.89	15	16
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:HE2	0.60	1.93	19	5
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:CD1	0.60	2.26	20	8
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:HD12	0.60	1.67	7	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:30:LYS:HE3	0.60	1.72	14	2
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:NZ	0.60	2.11	16	2
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD2	0.60	1.97	16	2
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:CG	0.60	2.50	13	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:105:LEU:HB3	0.60	2.21	20	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HE2	0.60	2.11	1	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:93:TYR:CE2	0.60	2.88	2	3
1:A:78:VAL:HG21	1:A:94:HIS:CE1	0.60	2.32	18	4
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:OE2	0.60	2.19	10	1
1:A:43:GLY:O	1:A:68:GLU:CD	0.60	2.44	12	1
1:A:20:LYS:HD2	1:A:20:LYS:C	0.60	2.22	18	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:88:PRO:HG3	0.60	1.95	12	6
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:HB	0.60	1.57	4	3
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:CE1	0.60	2.85	18	6
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HD3	0.60	1.97	8	4
1:A:25:LEU:HG	1:A:35:MET:SD	0.60	2.36	9	1
1:A:103:THR:HG23	1:A:106:ARG:HG3	0.60	1.74	13	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HB2	0.60	1.96	3	6
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:CB	0.60	2.50	9	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CG2	0.60	2.27	8	4
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG2	0.60	1.96	7	1
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:HG3	0.60	1.97	13	1
1:A:74:LYS:CD	1:A:83:VAL:HG23	0.60	2.26	14	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:CE1	0.59	2.85	11	11
1:A:67:LYS:NZ	1:A:67:LYS:HA	0.59	2.11	1	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HG	0.59	1.97	2	7
1:A:81:LYS:HZ1	1:A:100:GLY:N	0.59	1.94	3	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HB2	0.59	2.27	16	4
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HD2	0.59	2.12	16	2
1:A:25:LEU:HB2	1:A:61:ILE:HG21	0.59	1.72	5	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:CD2	0.59	2.85	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:30:LYS:HD2	0.59	2.26	14	2
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:CB	0.59	2.85	18	11
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CD2	0.59	2.15	13	5
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:HB	0.59	1.98	4	2
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:HA	0.59	1.73	6	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HG12	0.59	1.72	12	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:ILE:HG13	0.59	2.32	18	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.59	2.13	15	4
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:HD23	0.59	2.22	2	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:49:VAL:O	0.59	1.97	12	5
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:CE	0.59	2.27	15	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:CB	0.59	2.80	7	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CG	0.59	2.51	17	2
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HG23	0.59	1.98	18	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:85:ASP:O	0.59	2.21	2	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:109:VAL:HB	0.59	1.73	3	4
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HE2	0.59	1.73	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:CB	0.59	2.27	12	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:HD3	0.59	1.98	20	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:CE	0.59	2.09	1	5
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB3	0.59	1.74	4	11
1:A:85:ASP:C	1:A:86:SER:OG	0.59	2.45	2	3
1:A:6:LEU:HB3	1:A:9:TYR:CE1	0.59	2.33	9	2
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:HG13	0.59	1.97	11	1
1:A:18:ARG:C	1:A:18:ARG:HD3	0.59	2.23	14	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:45:TYR:HE2	0.59	1.54	17	1
1:A:53:ALA:C	1:A:60:CYS:SG	0.59	2.85	19	1
1:A:101:LEU:CD1	1:A:104:ARG:HA	0.59	2.28	19	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:88:PRO:HD3	0.59	2.22	10	4
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HB3	0.59	2.23	5	2
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:CG1	0.59	2.51	13	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG2	0.59	2.28	18	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:91:ILE:HD12	0.59	2.32	19	18
1:A:104:ARG:O	1:A:104:ARG:HD2	0.59	1.97	5	6
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CE1	0.59	2.32	5	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:CD	0.59	2.61	7	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HD2	0.59	1.98	14	2
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE2	0.59	1.75	19	7
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:HG12	0.59	1.72	19	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:105:LEU:CD1	0.59	2.85	20	3
1:A:70:ASN:N	1:A:75:ARG:HG2	0.59	2.13	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:HD11	1:A:35:MET:CB	0.59	2.28	8	1
1:A:74:LYS:HA	1:A:83:VAL:O	0.59	1.97	11	3
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:O	0.59	1.97	14	10
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:HB	0.58	2.33	1	18
1:A:34:PHE:C	1:A:108:PRO:HA	0.58	2.23	6	9
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:CB	0.58	2.51	4	17
1:A:103:THR:O	1:A:103:THR:OG1	0.58	2.21	19	7
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:C	0.58	2.06	18	4
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HB2	0.58	2.28	20	2
1:A:18:ARG:HB3	1:A:37:ARG:NH2	0.58	2.13	12	4
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:HD1	0.58	2.03	8	3
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:OH	0.58	1.98	11	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CE1	0.58	2.32	16	2
1:A:37:ARG:O	1:A:46:THR:OG1	0.58	2.21	4	11
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD2	0.58	1.96	16	4
1:A:84:PHE:CE1	1:A:90:LEU:HA	0.58	2.33	18	6
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.58	2.92	13	3
1:A:11:TRP:CB	1:A:35:MET:HA	0.58	2.28	9	7
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HD2	0.58	2.23	7	5
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:CE1	0.58	2.85	20	5
1:A:95:GLN:HA	1:A:105:LEU:CB	0.58	2.28	5	15
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CD1	0.58	2.33	19	7
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:HD23	0.58	1.75	3	3
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HB3	0.58	1.98	5	5
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HD3	0.58	1.98	6	4
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:CG1	0.58	2.82	13	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:HD23	0.58	1.97	19	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:HG2	0.58	2.32	15	7
1:A:11:TRP:HB2	1:A:35:MET:HA	0.58	1.74	9	6
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:N	0.58	2.66	3	3
1:A:99:GLY:O	1:A:100:GLY:O	0.58	2.20	13	2
1:A:29:GLY:HA3	1:A:52:LYS:NZ	0.58	2.13	15	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:OE2	0.58	1.98	20	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:HB	0.58	2.28	16	20
1:A:101:LEU:C	1:A:103:THR:N	0.58	2.61	7	10
1:A:67:LYS:HG2	1:A:77:TYR:OH	0.58	1.99	13	12
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CD1	0.58	2.86	7	1
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:HB	0.58	2.38	9	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CB	0.58	2.12	20	2
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:N	0.58	2.60	14	20
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HB3	0.58	1.97	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:CB	0.58	2.29	14	12
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:CE	0.58	2.11	13	3
1:A:32:GLY:N	1:A:51:THR:HG1	0.58	1.91	18	4
1:A:39:SER:C	1:A:40:ARG:HG2	0.58	2.23	1	1
1:A:74:LYS:HG3	1:A:83:VAL:O	0.58	1.98	1	2
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:CD	0.58	2.50	2	1
1:A:39:SER:C	1:A:41:THR:N	0.58	2.61	5	3
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:C	0.58	2.07	4	8
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:OG	0.58	2.21	2	3
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG12	0.58	1.75	13	1
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CE2	0.58	2.17	14	3
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:CD1	0.58	2.52	16	1
1:A:94:HIS:C	1:A:104:ARG:HB2	0.58	2.23	17	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:23:LYS:C	0.58	2.24	19	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.58	2.87	9	10
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:CA	0.58	2.67	4	18
1:A:30:LYS:O	1:A:51:THR:HA	0.58	1.98	5	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:N	0.58	2.37	9	4
1:A:11:TRP:C	1:A:35:MET:HA	0.58	2.24	17	15
1:A:11:TRP:HA	1:A:109:VAL:O	0.58	1.99	12	4
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE2	0.58	1.74	9	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:CD	0.58	2.51	15	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:HG21	0.57	1.75	4	5
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:HE3	0.57	2.29	4	1
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:C	0.57	2.47	4	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:108:PRO:HB3	0.57	2.34	4	15
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG13	0.57	2.29	16	2
1:A:51:THR:OG1	1:A:103:THR:HG21	0.57	1.98	10	8
1:A:21:ALA:CB	1:A:35:MET:SD	0.57	2.92	6	3
1:A:22:GLU:CA	1:A:61:ILE:HG21	0.57	2.19	19	2
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:N	0.57	2.67	11	1
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:HG	0.57	1.99	12	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HB3	0.57	2.29	20	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD2	0.57	1.75	20	9
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CZ	0.57	2.82	3	2
1:A:22:GLU:OE1	1:A:22:GLU:CA	0.57	2.51	4	2
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CD	0.57	2.28	4	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:NE2	0.57	2.67	12	5
1:A:75:ARG:HG2	1:A:84:PHE:O	0.57	1.99	5	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:NE2	0.57	2.14	7	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD1	0.57	2.11	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.17	13	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:102:VAL:CG1	0.57	2.29	17	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:HA2	0.57	1.58	17	1
1:A:14:LYS:C	1:A:16:ILE:N	0.57	2.62	17	16
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:HB	0.57	1.75	3	20
1:A:10:GLU:CD	1:A:108:PRO:HG2	0.57	2.25	20	6
1:A:47:VAL:O	1:A:63:HIS:HA	0.57	1.99	3	5
1:A:109:VAL:CG1	1:A:109:VAL:O	0.57	2.53	20	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:O	0.57	2.57	6	4
1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:HE2	0.57	2.28	8	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG12	0.57	2.29	13	2
1:A:104:ARG:HD2	1:A:104:ARG:C	0.57	2.24	12	2
1:A:67:LYS:HB2	1:A:67:LYS:NZ	0.57	2.14	14	1
1:A:95:GLN:CD	1:A:108:PRO:HD3	0.57	2.24	20	2
1:A:81:LYS:HE3	1:A:100:GLY:N	0.57	2.14	16	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:16:ILE:HG13	0.57	1.98	4	4
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:CE	0.57	2.29	4	1
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:ND2	0.57	2.62	7	2
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:109:VAL:CG1	0.57	2.11	12	1
1:A:86:SER:N	1:A:89:LEU:HD12	0.57	2.14	15	4
1:A:104:ARG:NH1	1:A:106:ARG:HA	0.57	2.14	12	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:HA2	0.57	2.14	17	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:HG23	0.57	1.76	19	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:108:PRO:CB	0.57	2.88	6	18
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:36:VAL:CB	0.57	2.87	1	18
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HD1	0.57	1.58	9	13
1:A:23:LYS:HD2	1:A:24:LEU:N	0.57	2.14	7	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD23	0.57	1.99	2	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CG	0.57	2.30	3	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:85:ASP:HA	0.57	1.75	3	3
1:A:77:TYR:CE2	1:A:80:GLU:HG2	0.57	2.34	8	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:83:VAL:HG11	0.57	1.77	2	2
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LYS:HD2	0.57	1.99	3	3
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:N	0.57	2.60	10	6
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CE1	0.57	2.57	5	1
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:C	0.57	2.78	8	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:101:LEU:HD11	0.57	2.12	12	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:93:TYR:HH	0.57	1.41	13	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:CD2	0.57	2.83	19	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG11	0.57	2.28	2	3
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.57	2.88	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:94:HIS:HB2	0.57	2.00	4	1
1:A:10:GLU:CA	1:A:110:CYS:HB3	0.57	2.29	19	2
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:H	0.57	2.07	6	7
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA2	0.57	1.75	1	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:CD2	0.57	2.83	12	11
1:A:102:VAL:O	1:A:103:THR:CB	0.57	2.52	18	5
1:A:6:LEU:CD1	1:A:45:TYR:CD2	0.57	2.80	16	6
1:A:20:LYS:O	1:A:23:LYS:HD2	0.57	2.00	7	1
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:C	0.57	2.48	10	2
1:A:68:GLU:OE1	1:A:68:GLU:CA	0.57	2.53	20	5
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:CE2	0.56	2.88	2	9
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HB	0.56	1.77	12	13
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:NZ	0.56	2.68	2	1
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:CE1	0.56	2.93	2	2
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:CD1	0.56	2.83	3	2
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:HG23	0.56	2.25	10	2
1:A:82:TYR:HD2	1:A:93:TYR:CE2	0.56	2.18	19	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:HG12	0.56	2.31	11	13
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.00	5	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG12	0.56	1.77	6	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CB	0.56	2.87	7	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:101:LEU:CG	0.56	2.87	7	2
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:C	0.56	2.25	7	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:108:PRO:HD3	0.56	2.00	14	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:CD2	0.56	2.30	19	1
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:HB3	0.56	2.15	1	1
1:A:35:MET:O	1:A:47:VAL:CA	0.56	2.52	10	19
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:HG3	0.56	2.16	2	8
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CG2	0.56	2.54	6	2
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:HD3	0.56	2.00	12	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CB	0.56	2.88	7	5
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CB	0.56	2.53	3	5
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:O	0.56	2.22	4	2
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HG3	0.56	1.77	5	2
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:HB2	0.56	1.99	9	1
1:A:86:SER:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.56	2.31	20	6
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:CD	0.56	2.30	12	1
1:A:35:MET:CE	1:A:109:VAL:HG12	0.56	2.30	14	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD13	0.56	2.30	16	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:CZ	0.56	2.35	19	1
1:A:62:LYS:HB3	1:A:64:TYR:HE1	0.56	1.61	1	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HB	0.56	2.00	6	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:50:PHE:CE1	0.56	2.36	8	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HG2	0.56	2.01	19	4
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:CG1	0.56	2.79	17	1
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CE1	0.56	2.35	1	9
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:HG21	0.56	1.77	6	4
1:A:87:ILE:HG22	1:A:91:ILE:HG13	0.56	1.76	8	11
1:A:40:ARG:CG	1:A:41:THR:N	0.56	2.68	4	1
1:A:74:LYS:CG	1:A:83:VAL:CG2	0.56	2.61	8	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HG	0.56	2.34	9	2
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CD2	0.56	2.16	10	2
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:HB3	0.56	1.77	19	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:CE	0.56	2.54	14	1
1:A:10:GLU:O	1:A:10:GLU:HG3	0.56	2.00	12	13
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:HD3	0.56	2.00	15	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:111:GLY:HA3	0.56	1.77	3	2
1:A:47:VAL:HG12	1:A:49:VAL:HG12	0.56	1.78	14	3
1:A:93:TYR:O	1:A:97:ASN:N	0.56	2.38	19	2
1:A:98:GLY:HA3	1:A:104:ARG:HB3	0.56	1.77	20	2
1:A:7:GLU:CG	1:A:14:LYS:HE2	0.56	2.30	5	1
1:A:19:ASP:HA	1:A:22:GLU:OE1	0.56	2.00	12	2
1:A:30:LYS:NZ	1:A:109:VAL:HG13	0.56	2.15	12	1
1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:O	0.56	2.54	18	1
1:A:31:GLU:O	1:A:106:ARG:HG3	0.56	2.01	5	5
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HG12	0.56	1.77	17	3
1:A:30:LYS:NZ	1:A:107:TYR:CD2	0.56	2.72	20	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:24:LEU:HG	0.56	2.31	13	10
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:HB	0.56	1.77	7	1
1:A:69:THR:O	1:A:74:LYS:O	0.56	2.23	8	1
1:A:70:ASN:O	1:A:70:ASN:ND2	0.56	2.37	9	1
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:CD1	0.56	2.54	14	3
1:A:102:VAL:C	1:A:103:THR:CG2	0.56	2.79	7	9
1:A:85:ASP:OD1	1:A:89:LEU:HD11	0.56	2.01	4	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:CB	0.56	2.83	7	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:CE	0.56	2.30	11	1
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HE3	0.56	2.01	14	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HD12	0.56	2.30	13	11
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ALA:C	0.56	2.49	5	6
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HZ2	0.56	2.14	14	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HB3	0.56	2.01	4	3
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:H	0.56	2.14	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:CG1	0.56	2.31	8	2
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:HA	0.56	2.16	13	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:GLN:CG	0.56	2.30	17	1
1:A:75:ARG:HB2	1:A:76:TYR:CE1	0.55	2.36	6	8
1:A:35:MET:HG2	1:A:36:VAL:H	0.55	1.61	14	3
1:A:52:LYS:HB2	1:A:52:LYS:NZ	0.55	2.16	17	1
1:A:41:THR:C	1:A:43:GLY:N	0.55	2.64	15	20
1:A:52:LYS:O	1:A:53:ALA:HB2	0.55	2.02	1	5
1:A:86:SER:C	1:A:89:LEU:CD1	0.55	2.79	5	5
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:CB	0.55	2.31	7	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:101:LEU:HD11	0.55	2.36	10	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:CG	0.55	2.54	11	1
1:A:7:GLU:HB2	1:A:14:LYS:HD3	0.55	1.79	1	1
1:A:45:TYR:CB	1:A:87:ILE:CG1	0.55	2.85	19	10
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:CB	0.55	2.31	3	5
1:A:49:VAL:CG2	1:A:49:VAL:O	0.55	2.53	9	9
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD1	0.55	1.59	11	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:74:LYS:CA	0.55	2.84	8	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:ALA:H	0.55	1.54	9	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:99:GLY:HA2	0.55	2.37	11	2
1:A:49:VAL:HG21	1:A:64:TYR:OH	0.55	2.01	20	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HD3	0.55	1.76	5	6
1:A:6:LEU:C	1:A:7:GLU:HG3	0.55	2.27	5	1
1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:CE	0.55	2.13	8	1
1:A:76:TYR:O	1:A:90:LEU:CD1	0.55	2.53	12	3
1:A:6:LEU:CD1	1:A:11:TRP:CZ3	0.55	2.90	11	3
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CD1	0.55	2.52	3	2
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:CE1	0.55	2.59	11	2
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:HG22	0.55	2.02	10	5
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:HD11	0.55	2.36	10	1
1:A:30:LYS:O	1:A:52:LYS:NZ	0.55	2.39	11	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:24:LEU:HD11	0.55	2.12	20	1
1:A:8:THR:HG23	1:A:9:TYR:CE1	0.55	2.37	3	2
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:HB3	0.55	1.61	8	6
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:82:TYR:HE1	0.55	1.43	16	3
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CD2	0.55	2.18	18	5
1:A:35:MET:SD	1:A:109:VAL:CG1	0.55	2.94	9	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:HA	0.55	2.02	11	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:82:TYR:HD2	0.55	1.58	14	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:CD	0.55	2.55	18	1
1:A:35:MET:C	1:A:48:SER:H	0.55	2.10	12	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:CG	1:A:24:LEU:N	0.55	2.69	3	10
1:A:32:GLY:HA2	1:A:51:THR:HG1	0.55	1.61	3	5
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD12	0.55	2.31	3	1
1:A:86:SER:C	1:A:88:PRO:HD2	0.55	2.26	7	8
1:A:17:SER:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.55	2.70	5	2
1:A:91:ILE:O	1:A:95:GLN:HB2	0.55	2.01	15	3
1:A:78:VAL:HG22	1:A:81:LYS:HZ1	0.55	1.61	13	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:99:GLY:C	0.55	2.65	16	1
1:A:34:PHE:HZ	1:A:36:VAL:CG2	0.55	2.13	6	18
1:A:95:GLN:NE2	1:A:108:PRO:HG3	0.55	2.17	8	4
1:A:10:GLU:HB2	1:A:108:PRO:O	0.55	2.02	3	7
1:A:16:ILE:CG2	1:A:37:ARG:CB	0.55	2.82	7	9
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:HD11	0.55	1.62	3	2
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:HD13	0.55	2.16	3	7
1:A:11:TRP:N	1:A:108:PRO:HB2	0.55	2.16	7	4
1:A:93:TYR:HA	1:A:97:ASN:OD1	0.55	2.01	8	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD3	0.55	2.02	16	4
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HG13	0.55	2.31	18	7
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD1	0.55	1.79	1	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:HG2	0.55	2.01	14	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HG21	0.55	2.32	5	1
1:A:66:ILE:HG21	1:A:90:LEU:HD13	0.55	1.75	10	3
1:A:31:GLU:HA	1:A:52:LYS:HE2	0.55	1.79	11	1
1:A:20:LYS:C	1:A:20:LYS:CD	0.55	2.79	12	2
1:A:30:LYS:HE3	1:A:109:VAL:HG12	0.55	1.79	12	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG13	0.55	1.78	16	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:LEU:CA	0.55	2.31	18	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:NE2	0.55	2.39	4	3
1:A:75:ARG:HG3	1:A:84:PHE:O	0.55	2.01	19	5
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:OD1	0.55	2.49	11	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:109:VAL:HG11	0.55	1.78	20	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:OD2	0.54	2.25	1	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:OE1	0.54	2.25	1	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:35:MET:O	0.54	2.61	12	9
1:A:106:ARG:HD3	1:A:106:ARG:C	0.54	2.27	18	3
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HD2	0.54	1.79	1	1
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:O	0.54	2.02	19	3
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:CD1	0.54	2.31	3	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CG	0.54	2.20	11	15
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:CG	0.54	2.56	12	1
1:A:74:LYS:CA	1:A:83:VAL:CG2	0.54	2.85	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:CG	1:A:38:ASP:CB	0.54	2.83	20	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HG2	0.54	2.03	3	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:NE2	0.54	2.70	18	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:HB2	0.54	2.03	18	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HB3	0.54	1.79	1	8
1:A:37:ARG:CG	1:A:37:ARG:HH11	0.54	2.14	8	7
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HD3	0.54	1.79	18	4
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.54	2.85	3	8
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HD3	0.54	2.02	7	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:ASP:CG	0.54	2.27	10	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:CD1	0.54	2.37	14	1
1:A:45:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CD1	0.54	2.14	17	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:61:ILE:CG2	0.54	2.33	19	1
1:A:14:LYS:CE	1:A:38:ASP:HB2	0.54	2.33	20	1
1:A:97:ASN:O	1:A:104:ARG:HB2	0.54	2.03	5	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:63:HIS:HE2	0.54	1.60	7	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:CD1	0.54	2.90	8	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:93:TYR:OH	0.54	2.02	12	1
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:NE2	0.54	2.00	14	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:O	0.54	2.02	3	4
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HG2	0.54	2.02	17	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:OH	0.54	2.02	7	5
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:CG	0.54	2.65	1	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:SER:CB	0.54	2.55	3	2
1:A:98:GLY:C	1:A:104:ARG:HG2	0.54	2.28	1	2
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HB2	0.54	1.79	4	5
1:A:24:LEU:O	1:A:28:THR:HB	0.54	2.02	6	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HG23	0.54	1.75	14	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:HD3	0.54	2.02	17	1
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:NZ	0.54	2.17	1	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CD1	0.54	2.37	2	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:HB	0.54	2.30	3	7
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HD3	0.54	1.79	10	5
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ALA:N	0.54	2.16	10	4
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HD2	0.54	1.79	20	3
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:HA	0.54	1.78	19	1
1:A:34:PHE:HZ	1:A:91:ILE:HD12	0.54	1.51	2	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:C	0.54	2.26	5	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:HB2	0.54	2.02	17	5
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:HA	0.54	1.79	8	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:107:TYR:CE2	0.54	2.61	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:HA	1:A:68:GLU:OE2	0.54	2.03	20	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.54	2.76	3	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CE1	0.54	2.13	4	1
1:A:97:ASN:O	1:A:98:GLY:C	0.54	2.49	17	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CD2	0.54	2.56	12	2
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:HB2	0.54	2.02	15	1
1:A:79:ALA:C	1:A:81:LYS:H	0.53	2.11	3	17
1:A:13:ASN:O	1:A:37:ARG:HA	0.53	2.04	6	3
1:A:69:THR:CG2	1:A:83:VAL:HG21	0.53	2.33	12	1
1:A:14:LYS:HZ3	1:A:38:ASP:CG	0.53	2.12	20	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:34:PHE:HE2	0.53	2.17	4	6
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG23	0.53	2.32	5	1
1:A:86:SER:HG	1:A:88:PRO:HG2	0.53	1.61	6	1
1:A:90:LEU:O	1:A:93:TYR:HD2	0.53	1.86	14	5
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:HG21	0.53	1.72	12	1
1:A:37:ARG:HG2	1:A:46:THR:OG1	0.53	2.04	11	12
1:A:66:ILE:CB	1:A:87:ILE:HD11	0.53	2.33	2	4
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CZ	0.53	2.97	2	2
1:A:82:TYR:CE2	1:A:93:TYR:HE1	0.53	2.22	2	1
1:A:37:ARG:HD3	1:A:46:THR:HB	0.53	1.80	17	7
1:A:67:LYS:CA	1:A:67:LYS:HE3	0.53	2.34	7	3
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:HG	0.53	2.33	13	1
1:A:26:LEU:HA	1:A:50:PHE:CZ	0.53	2.39	3	2
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:CB	0.53	2.33	18	2
1:A:28:THR:HG23	1:A:29:GLY:N	0.53	2.17	12	4
1:A:69:THR:HG23	1:A:69:THR:O	0.53	2.02	8	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:O	0.53	2.03	11	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:HG12	0.53	1.80	18	2
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:HG21	0.53	1.78	1	2
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:HA3	0.53	1.80	14	4
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE2	0.53	1.79	3	4
1:A:37:ARG:HG2	1:A:37:ARG:HH11	0.53	1.64	8	5
1:A:82:TYR:OH	1:A:99:GLY:HA2	0.53	2.04	4	2
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:HE1	0.53	1.59	13	1
1:A:67:LYS:HB2	1:A:67:LYS:HZ1	0.53	1.62	14	1
1:A:96:TYR:C	1:A:98:GLY:N	0.53	2.65	3	2
1:A:44:THR:C	1:A:45:TYR:CD1	0.53	2.86	6	7
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:CG	0.53	2.16	14	3
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:HG	0.53	1.81	17	1
1:A:6:LEU:C	1:A:8:THR:N	0.53	2.64	7	12
1:A:91:ILE:C	1:A:95:GLN:HG3	0.53	2.28	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CA	0.53	2.90	15	6
1:A:74:LYS:CB	1:A:83:VAL:O	0.53	2.57	12	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:23:LYS:CE	0.53	2.33	18	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:HA2	0.53	2.19	1	3
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:CD2	0.53	2.86	8	11
1:A:22:GLU:OE1	1:A:61:ILE:HB	0.53	2.04	2	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:105:LEU:HD12	0.53	2.31	4	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:108:PRO:HG2	0.53	2.03	10	1
1:A:37:ARG:HE	1:A:46:THR:HG21	0.53	1.63	20	1
1:A:75:ARG:HB3	1:A:76:TYR:CE1	0.53	2.39	11	7
1:A:81:LYS:CE	1:A:94:HIS:HE1	0.53	2.16	12	2
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:CD1	0.53	2.17	13	9
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CG	0.53	2.57	5	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:HD2	0.53	2.04	6	2
1:A:7:GLU:HB3	1:A:14:LYS:HE2	0.53	1.81	7	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:HA	0.53	2.18	8	4
1:A:66:ILE:CD1	1:A:66:ILE:H	0.53	2.15	12	6
1:A:64:TYR:C	1:A:78:VAL:CG2	0.53	2.82	8	1
1:A:32:GLY:O	1:A:106:ARG:HB2	0.53	2.04	13	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CG	0.53	2.34	17	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:95:GLN:HB2	0.53	1.82	17	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HG3	0.52	1.63	3	3
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:HD3	0.52	1.65	14	2
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG2	0.52	2.04	20	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:OG	0.52	2.03	15	4
1:A:79:ALA:HB3	1:A:81:LYS:HE3	0.52	1.81	4	1
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:CG1	0.52	2.82	7	2
1:A:35:MET:CG	1:A:48:SER:HG	0.52	2.16	9	2
1:A:53:ALA:O	1:A:60:CYS:HB2	0.52	2.05	11	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:93:TYR:HH	0.52	1.63	11	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:HA2	0.52	2.38	17	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:91:ILE:HG13	0.52	1.80	2	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:35:MET:HE3	0.52	1.78	5	4
1:A:11:TRP:HB2	1:A:34:PHE:CD2	0.52	2.35	20	6
1:A:7:GLU:CD	1:A:14:LYS:HE2	0.52	2.29	5	1
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:HE2	0.52	2.22	19	2
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CG	0.52	2.16	15	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:O	0.52	2.03	14	1
1:A:20:LYS:H	1:A:20:LYS:CD	0.52	2.16	14	1
1:A:106:ARG:CD	1:A:106:ARG:C	0.52	2.83	15	1
1:A:18:ARG:CG	1:A:19:ASP:N	0.52	2.71	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:O	1:A:92:GLN:HG2	0.52	2.05	17	1
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:CD	0.52	2.87	1	1
1:A:29:GLY:CA	1:A:50:PHE:HZ	0.52	2.18	13	4
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:HD2	0.52	2.04	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HB2	0.52	1.80	5	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:HG	0.52	1.82	13	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ARG:N	0.52	2.43	7	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG12	0.52	1.80	8	2
1:A:74:LYS:HG2	1:A:83:VAL:CG2	0.52	2.30	8	1
1:A:99:GLY:O	1:A:104:ARG:HB3	0.52	2.05	8	2
1:A:26:LEU:N	1:A:61:ILE:HD11	0.52	2.19	15	2
1:A:96:TYR:O	1:A:104:ARG:HD2	0.52	2.05	14	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:OG1	0.52	2.28	18	2
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:ND2	0.52	2.72	1	1
1:A:65:HIS:O	1:A:78:VAL:HA	0.52	2.04	3	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:H	0.52	2.18	7	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:34:PHE:CZ	0.52	2.98	15	4
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:OD1	0.52	2.27	10	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HD3	0.52	2.34	10	1
1:A:51:THR:O	1:A:51:THR:CG2	0.52	2.58	16	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:109:VAL:HG11	0.52	1.82	19	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:H	0.52	2.22	20	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HG21	0.52	2.34	12	8
1:A:94:HIS:HA	1:A:98:GLY:O	0.52	2.04	4	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:51:THR:HG23	0.52	1.79	7	2
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HD3	0.52	1.82	12	1
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:CZ	0.52	2.58	17	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG2	0.52	2.02	1	3
1:A:24:LEU:O	1:A:27:ASP:HB3	0.52	2.05	2	1
1:A:62:LYS:HB2	1:A:102:VAL:HG11	0.52	1.82	8	5
1:A:65:HIS:N	1:A:78:VAL:HG22	0.52	2.19	3	2
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:CA	0.52	2.35	6	1
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:CB	0.52	2.58	14	2
1:A:67:LYS:HG3	1:A:68:GLU:N	0.52	2.19	15	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CB	0.52	2.33	19	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CE2	0.52	2.93	20	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CG	0.52	2.58	20	1
1:A:9:TYR:C	1:A:11:TRP:H	0.52	2.12	5	8
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:HA	0.52	1.82	15	4
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:C	0.52	2.67	3	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:CG	0.52	2.35	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CE1	1:A:94:HIS:ND1	0.52	2.78	4	1
1:A:83:VAL:C	1:A:84:PHE:CG	0.52	2.88	14	3
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:HG3	0.52	2.04	13	5
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CE1	0.52	2.40	10	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE1	0.52	2.40	12	2
1:A:18:ARG:HG3	1:A:19:ASP:N	0.52	2.18	15	2
1:A:95:GLN:OE1	1:A:105:LEU:HB3	0.52	2.05	18	1
1:A:83:VAL:O	1:A:84:PHE:CG	0.52	2.63	14	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:61:ILE:HG13	0.52	1.80	18	2
1:A:67:LYS:CA	1:A:67:LYS:HE2	0.52	2.34	2	2
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:HD12	0.52	2.30	12	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:61:ILE:HD12	0.51	2.35	7	4
1:A:94:HIS:O	1:A:98:GLY:HA2	0.51	2.04	4	1
1:A:86:SER:H	1:A:89:LEU:HD13	0.51	1.64	13	5
1:A:30:LYS:N	1:A:52:LYS:HD3	0.51	2.20	6	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:OG1	0.51	2.03	10	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:63:HIS:CE1	0.51	2.40	11	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:106:ARG:CD	0.51	2.87	12	1
1:A:52:LYS:HD2	1:A:52:LYS:O	0.51	2.05	13	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:63:HIS:NE2	0.51	2.20	18	1
1:A:67:LYS:CE	1:A:67:LYS:CA	0.51	2.87	18	1
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:CD1	0.51	2.88	19	5
1:A:19:ASP:O	1:A:23:LYS:HE2	0.51	2.02	2	1
1:A:68:GLU:CG	1:A:76:TYR:CE1	0.51	2.93	13	8
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:HA	0.51	1.82	7	1
1:A:28:THR:HG21	1:A:109:VAL:HB	0.51	1.83	18	1
1:A:11:TRP:O	1:A:35:MET:C	0.51	2.53	9	2
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:C	0.51	2.30	4	2
1:A:22:GLU:OE2	1:A:61:ILE:HB	0.51	2.05	4	3
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:CD1	0.51	2.92	20	3
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:CD1	0.51	2.94	15	5
1:A:82:TYR:HB3	1:A:84:PHE:CZ	0.51	2.40	7	3
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:HG2	0.51	2.35	9	8
1:A:46:THR:OG1	1:A:65:HIS:CE1	0.51	2.64	9	4
1:A:43:GLY:C	1:A:68:GLU:OE2	0.51	2.53	10	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:CD1	0.51	2.40	16	1
1:A:85:ASP:H	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.16	1	1
1:A:37:ARG:HG3	1:A:37:ARG:HH11	0.51	1.66	15	5
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.51	1.81	5	5
1:A:25:LEU:HD13	1:A:50:PHE:HB3	0.51	1.81	6	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:77:TYR:O	0.51	2.05	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:CG	1:A:101:LEU:CD2	0.51	2.93	17	2
1:A:35:MET:HB2	1:A:109:VAL:O	0.51	2.06	1	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD11	0.51	1.81	13	5
1:A:81:LYS:HG3	1:A:82:TYR:HD1	0.51	1.64	2	1
1:A:98:GLY:C	1:A:100:GLY:N	0.51	2.69	5	2
1:A:30:LYS:HE2	1:A:107:TYR:CE2	0.51	2.39	8	1
1:A:91:ILE:O	1:A:105:LEU:CG	0.51	2.58	17	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:CG	0.51	2.37	19	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:102:VAL:CG1	0.51	2.59	19	2
1:A:75:ARG:NH1	1:A:76:TYR:CE1	0.51	2.79	19	1
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HG2	0.51	2.30	20	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:109:VAL:CG1	0.51	2.88	20	3
1:A:49:VAL:N	1:A:62:LYS:O	0.51	2.38	18	4
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.51	2.34	5	2
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CG	0.51	2.36	9	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:35:MET:HE3	0.51	1.77	13	1
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:CB	0.51	2.17	2	3
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:HG12	0.51	2.26	4	1
1:A:40:ARG:HG3	1:A:41:THR:N	0.51	2.21	4	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG23	0.51	2.36	6	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:21:ALA:CB	0.51	2.33	9	2
1:A:82:TYR:CD2	1:A:93:TYR:CD1	0.51	2.99	9	1
1:A:7:GLU:C	1:A:9:TYR:N	0.51	2.66	12	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:103:THR:HG23	0.51	1.81	5	3
1:A:20:LYS:C	1:A:23:LYS:HG2	0.51	2.31	9	6
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:HE2	0.51	2.36	3	3
1:A:7:GLU:HG2	1:A:14:LYS:HD3	0.51	1.82	5	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:NH1	0.51	2.59	5	1
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HG21	0.51	1.83	8	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:CZ	0.51	2.95	8	2
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HZ2	0.51	1.65	16	2
1:A:45:TYR:CG	1:A:87:ILE:CG1	0.51	2.92	8	4
1:A:30:LYS:HZ3	1:A:109:VAL:HG12	0.51	1.63	6	1
1:A:74:LYS:N	1:A:83:VAL:HG23	0.51	2.21	6	1
1:A:74:LYS:H	1:A:83:VAL:CG2	0.51	2.18	14	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:O	0.51	2.06	15	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:LYS:CB	0.50	2.36	9	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HG3	0.50	2.05	18	1
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:HG	0.50	1.65	19	1
1:A:35:MET:CG	1:A:36:VAL:N	0.50	2.73	5	11
1:A:14:LYS:CG	1:A:15:SER:H	0.50	2.18	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:CA	0.50	2.19	6	1
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:CD	0.50	2.75	10	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:81:LYS:HZ3	0.50	1.67	11	1
1:A:53:ALA:HB3	1:A:60:CYS:HB2	0.50	1.82	20	2
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:ASP:OD1	0.50	2.05	10	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG23	0.50	2.22	13	2
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:HG2	0.50	2.31	17	2
1:A:86:SER:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.50	2.36	20	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:75:ARG:HA	0.50	2.36	2	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:85:ASP:HA	0.50	1.82	2	1
1:A:10:GLU:HA	1:A:110:CYS:CB	0.50	2.36	10	5
1:A:31:GLU:OE2	1:A:51:THR:HG23	0.50	2.07	7	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HG	0.50	2.40	7	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:HB3	0.50	1.82	18	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:HD1	0.50	2.18	2	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:C	0.50	2.31	6	2
1:A:50:PHE:HB2	1:A:60:CYS:C	0.50	2.32	7	4
1:A:13:ASN:HB2	1:A:16:ILE:HD12	0.50	1.82	13	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:109:VAL:CG2	0.50	2.25	18	1
1:A:11:TRP:HD1	1:A:108:PRO:CB	0.50	2.20	8	15
1:A:36:VAL:HA	1:A:47:VAL:HA	0.50	1.84	10	18
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:CA	0.50	2.18	8	8
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:HB2	0.50	1.83	6	1
1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:HD2	0.50	2.22	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:N	0.50	2.37	12	1
1:A:74:LYS:H	1:A:83:VAL:HG21	0.50	1.66	14	1
1:A:93:TYR:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.50	2.64	14	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:HA	0.50	2.05	20	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:C	0.50	2.32	20	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:81:LYS:CG	0.50	2.89	6	3
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HE2	0.50	1.83	15	2
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:99:GLY:HA2	0.50	1.67	7	1
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG12	0.50	2.36	13	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:LEU:HB2	0.50	2.07	20	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:50:PHE:HB3	0.50	1.84	19	1
1:A:33:ALA:O	1:A:50:PHE:N	0.50	2.44	3	12
1:A:94:HIS:O	1:A:104:ARG:O	0.50	2.29	15	2
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:CG2	0.50	2.59	14	3
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:OD1	0.50	2.30	14	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:HA2	0.50	1.84	16	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HB2	0.50	1.84	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:HB3	0.50	1.83	20	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:12:TYR:CE1	0.50	2.89	10	8
1:A:103:THR:C	1:A:104:ARG:O	0.50	2.55	19	7
1:A:81:LYS:HB2	1:A:82:TYR:CE1	0.50	2.42	2	1
1:A:7:GLU:OE2	1:A:14:LYS:HE2	0.50	2.07	5	1
1:A:65:HIS:C	1:A:78:VAL:HG23	0.50	2.32	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HB	0.50	1.83	12	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:82:TYR:H	0.50	2.17	13	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:HA3	0.50	2.37	14	1
1:A:86:SER:CB	1:A:89:LEU:HG	0.50	2.36	17	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:HG3	0.50	2.07	18	1
1:A:23:LYS:HE2	1:A:23:LYS:N	0.49	2.17	2	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HB2	0.49	2.37	3	2
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:CG1	0.49	2.90	3	2
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG11	0.49	2.37	6	2
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:HG	0.49	2.43	6	2
1:A:75:ARG:NH2	1:A:85:ASP:HB3	0.49	2.22	7	2
1:A:7:GLU:O	1:A:9:TYR:N	0.49	2.44	12	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:23:LYS:HE3	0.49	1.83	18	2
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:CE	0.49	2.75	3	4
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HG2	0.49	1.83	1	8
1:A:81:LYS:NZ	1:A:94:HIS:HE1	0.49	2.01	2	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:N	0.49	2.59	10	3
1:A:28:THR:HB	1:A:30:LYS:HD2	0.49	1.83	4	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:37:ARG:CG	0.49	2.73	8	5
1:A:81:LYS:CE	1:A:99:GLY:O	0.49	2.60	5	1
1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:H	0.49	2.19	11	1
1:A:17:SER:HB2	1:A:20:LYS:HZ2	0.49	1.67	15	1
1:A:20:LYS:HG2	1:A:23:LYS:HE2	0.49	1.84	18	1
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:O	0.49	2.61	15	11
1:A:22:GLU:HG2	1:A:61:ILE:CB	0.49	2.37	8	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:CD	0.49	2.60	7	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CE1	0.49	2.42	10	2
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CD	0.49	2.55	1	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:85:ASP:OD1	0.49	2.08	3	2
1:A:29:GLY:C	1:A:52:LYS:HD3	0.49	2.33	6	1
1:A:9:TYR:O	1:A:12:TYR:N	0.49	2.46	14	7
1:A:9:TYR:O	1:A:10:GLU:C	0.49	2.55	10	16
1:A:66:ILE:HB	1:A:87:ILE:HD11	0.49	1.82	3	3
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CB	0.49	2.60	4	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:63:HIS:CD2	0.49	2.43	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ILE:HD11	1:A:21:ALA:HA	0.49	1.83	9	2
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:C	0.49	2.54	9	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:91:ILE:CG1	0.49	2.96	19	2
1:A:31:GLU:CD	1:A:106:ARG:HG3	0.49	2.32	18	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:64:TYR:CE2	0.49	2.42	20	1
1:A:90:LEU:C	1:A:93:TYR:HD1	0.49	2.15	19	4
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:O	0.49	2.06	2	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:93:TYR:CE2	0.49	2.25	2	3
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:CD	0.49	2.86	3	2
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:HG	0.49	2.37	14	2
1:A:17:SER:CB	1:A:20:LYS:HZ3	0.49	2.21	10	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:CE2	0.49	3.01	14	2
1:A:82:TYR:CB	1:A:93:TYR:OH	0.49	2.58	14	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:H	0.49	2.20	14	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:37:ARG:NH1	0.49	2.22	18	1
1:A:31:GLU:OE1	1:A:31:GLU:N	0.49	2.46	1	1
1:A:21:ALA:C	1:A:24:LEU:CG	0.49	2.85	2	4
1:A:78:VAL:CG2	1:A:94:HIS:HE1	0.49	2.20	20	4
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:CZ	0.49	2.75	10	1
1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:ND2	0.49	2.61	16	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:93:TYR:CE1	0.49	3.01	8	2
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:CA	0.49	2.21	18	3
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CG1	0.49	2.38	12	1
1:A:39:SER:OG	1:A:41:THR:HB	0.49	2.08	18	1
1:A:86:SER:HB3	1:A:88:PRO:HG2	0.49	1.84	13	5
1:A:87:ILE:HA	1:A:90:LEU:HB3	0.49	1.84	20	3
1:A:81:LYS:HE3	1:A:94:HIS:CE1	0.49	2.43	12	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:HE1	0.49	1.68	17	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:12:TYR:CB	0.49	2.37	20	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:61:ILE:CG2	0.49	2.29	15	3
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE2	0.49	1.84	4	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HD2	0.49	1.83	13	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:24:LEU:HD22	0.49	1.84	17	3
1:A:25:LEU:CD2	1:A:50:PHE:CD1	0.49	2.90	8	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:HB3	0.49	2.23	11	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:CD2	0.49	2.96	20	2
1:A:6:LEU:CD2	1:A:45:TYR:CE2	0.49	2.87	17	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:40:ARG:HG2	0.49	2.08	18	1
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:ND1	0.48	2.23	9	10
1:A:86:SER:HG	1:A:88:PRO:CG	0.48	2.21	6	2
1:A:45:TYR:CD1	1:A:45:TYR:N	0.48	2.80	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:CZ	1:A:99:GLY:HA2	0.48	2.43	2	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:35:MET:CE	0.48	2.61	9	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:81:LYS:NZ	0.48	2.22	13	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:63:HIS:CD2	0.48	2.43	15	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:PRO:N	0.48	2.76	2	3
1:A:62:LYS:CB	1:A:102:VAL:HG11	0.48	2.38	3	2
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD12	0.48	2.44	17	2
1:A:52:LYS:HB2	1:A:52:LYS:HZ3	0.48	1.68	17	1
1:A:16:ILE:C	1:A:20:LYS:HE3	0.48	2.34	3	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:CB	0.48	2.62	6	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:HD21	0.48	2.43	7	2
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:CD1	0.48	2.96	12	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CZ2	0.48	2.95	12	5
1:A:47:VAL:HG23	1:A:66:ILE:HD12	0.48	1.86	13	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:ASP:HB3	0.48	2.09	3	1
1:A:86:SER:CA	1:A:89:LEU:HD12	0.48	2.38	12	2
1:A:69:THR:N	1:A:75:ARG:HD2	0.48	2.23	17	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:60:CYS:HG	0.48	2.21	19	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:C	0.48	2.71	19	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CE2	0.48	2.96	2	3
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:CG2	0.48	2.90	5	1
1:A:95:GLN:CA	1:A:105:LEU:CB	0.48	2.91	10	4
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HD2	0.48	2.07	15	1
1:A:28:THR:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.48	2.38	17	1
1:A:21:ALA:HB3	1:A:48:SER:OG	0.48	2.08	18	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:95:GLN:HG2	0.48	1.85	20	1
1:A:20:LYS:C	1:A:24:LEU:HD23	0.48	2.31	2	1
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:HD12	0.48	1.84	2	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:76:TYR:CB	0.48	2.30	19	2
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.48	2.23	10	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:101:LEU:HD21	0.48	1.85	17	2
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB3	0.48	2.33	19	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:76:TYR:CE1	0.48	2.97	10	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:N	0.48	2.23	11	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:C	0.48	2.33	12	1
1:A:37:ARG:NE	1:A:46:THR:HG21	0.48	2.22	20	1
1:A:22:GLU:CB	1:A:23:LYS:HZ3	0.48	2.22	2	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CG	0.48	2.96	6	2
1:A:39:SER:O	1:A:41:THR:HB	0.48	2.08	9	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:11:TRP:CD2	0.48	2.43	14	4
1:A:81:LYS:HD2	1:A:82:TYR:CD1	0.48	2.40	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:CB	1:A:105:LEU:CG	0.48	2.92	14	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:CA	0.48	2.87	1	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:9:TYR:HD2	0.48	2.22	6	6
1:A:67:LYS:HE2	1:A:67:LYS:CA	0.48	2.39	15	1
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:H	0.48	2.17	5	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:64:TYR:HE1	0.48	2.19	8	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:84:PHE:CA	0.48	2.39	8	1
1:A:102:VAL:CG1	1:A:103:THR:N	0.48	2.77	10	2
1:A:104:ARG:NH2	1:A:106:ARG:HD2	0.48	2.23	10	1
1:A:40:ARG:C	1:A:41:THR:O	0.47	2.56	9	12
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:CG	0.47	2.97	7	2
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HG22	0.47	2.39	5	1
1:A:82:TYR:CZ	1:A:93:TYR:HE1	0.47	2.27	8	2
1:A:103:THR:HB	1:A:106:ARG:HB2	0.47	1.86	9	3
1:A:7:GLU:OE1	1:A:14:LYS:HG3	0.47	2.09	12	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:50:PHE:CD1	0.47	2.43	12	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HD3	0.47	2.07	14	1
1:A:18:ARG:CA	1:A:37:ARG:NH1	0.47	2.77	18	1
1:A:74:LYS:O	1:A:74:LYS:HD3	0.47	2.08	20	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:CG	0.47	2.22	15	6
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:TYR:CD1	0.47	2.43	19	2
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CD1	0.47	2.97	14	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE2	0.47	1.85	18	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:HD3	0.47	2.23	3	2
1:A:86:SER:OG	1:A:89:LEU:HG	0.47	2.09	16	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:NE2	0.47	2.24	14	1
1:A:95:GLN:HG3	1:A:105:LEU:HB2	0.47	1.79	17	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:38:ASP:CB	0.47	2.63	19	1
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:HE1	0.47	2.28	20	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:108:PRO:HG2	0.47	1.85	4	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:35:MET:SD	0.47	3.02	16	3
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:HB2	0.47	2.35	11	5
1:A:77:TYR:CB	1:A:81:LYS:O	0.47	2.62	5	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CD1	0.47	2.93	13	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:CA	0.47	2.40	18	3
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:HD22	0.47	1.70	14	1
1:A:36:VAL:CB	1:A:46:THR:O	0.47	2.62	12	14
1:A:41:THR:HG22	1:A:44:THR:H	0.47	1.69	2	2
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LEU:CG	0.47	2.63	3	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:SER:CA	0.47	2.97	5	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CG1	0.47	2.91	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:HD2	0.47	1.64	6	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:65:HIS:NE2	0.47	2.32	8	2
1:A:26:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HD11	0.47	1.84	10	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:76:TYR:CE1	0.47	2.67	10	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HE3	0.47	1.85	15	2
1:A:10:GLU:C	1:A:108:PRO:HB2	0.47	2.34	4	1
1:A:28:THR:CG2	1:A:109:VAL:CG1	0.47	2.72	4	1
1:A:10:GLU:O	1:A:109:VAL:CA	0.47	2.62	5	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:87:ILE:CG1	0.47	2.97	5	2
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:H	0.47	1.53	11	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:LYS:CG	0.47	2.98	15	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:CG2	0.47	2.39	12	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:C	0.47	2.93	17	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:96:TYR:CD1	0.47	2.45	2	1
1:A:98:GLY:N	1:A:104:ARG:CD	0.47	2.78	2	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.31	4	1
1:A:98:GLY:C	1:A:100:GLY:H	0.47	2.18	5	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:62:LYS:HB3	0.47	1.86	18	3
1:A:82:TYR:HB2	1:A:84:PHE:CE2	0.47	2.45	9	2
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:SER:O	0.47	2.32	8	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:6:LEU:H	0.47	1.70	11	2
1:A:82:TYR:O	1:A:83:VAL:CG1	0.47	2.63	8	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CG	0.47	2.40	20	1
1:A:34:PHE:CB	1:A:108:PRO:HA	0.46	2.41	15	3
1:A:76:TYR:O	1:A:83:VAL:C	0.46	2.57	3	2
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:H	0.46	1.70	3	1
1:A:104:ARG:C	1:A:106:ARG:N	0.46	2.73	7	3
1:A:40:ARG:NE	1:A:41:THR:H	0.46	2.08	4	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:83:VAL:N	0.46	2.24	7	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:76:TYR:OH	0.46	2.48	10	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:HE2	0.46	1.70	11	1
1:A:106:ARG:HD2	1:A:106:ARG:C	0.46	2.36	1	1
1:A:68:GLU:C	1:A:75:ARG:O	0.46	2.55	3	3
1:A:93:TYR:CD1	1:A:97:ASN:CG	0.46	2.93	3	2
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:HG	0.46	1.69	4	1
1:A:14:LYS:O	1:A:15:SER:C	0.46	2.59	5	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:25:LEU:H	0.46	1.69	8	5
1:A:95:GLN:HE22	1:A:108:PRO:CD	0.46	2.24	9	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:52:LYS:NZ	0.46	2.83	11	1
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:HD2	0.46	2.09	17	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:87:ILE:HG21	0.46	1.87	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HD3	0.46	2.41	1	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HZ2	0.46	1.71	1	1
1:A:78:VAL:O	1:A:81:LYS:HE3	0.46	2.10	2	1
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:CG2	0.46	2.63	11	1
1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:HZ3	0.46	2.07	2	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:O	0.46	2.59	7	6
1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CD	0.46	2.75	7	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:GLU:CG	0.46	2.64	10	1
1:A:35:MET:HG3	1:A:109:VAL:O	0.46	2.11	16	2
1:A:67:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CZ	0.46	2.45	8	4
1:A:106:ARG:HD3	1:A:106:ARG:O	0.46	2.11	5	1
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:HD2	0.46	2.07	9	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:ND2	0.46	2.63	12	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:64:TYR:CD1	0.46	2.45	15	1
1:A:18:ARG:C	1:A:63:HIS:NE2	0.46	2.72	18	1
1:A:100:GLY:N	1:A:101:LEU:HD13	0.46	2.25	20	1
1:A:67:LYS:O	1:A:76:TYR:C	0.46	2.58	9	8
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:PRO:CG	0.46	2.40	2	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:82:TYR:HD1	0.46	2.23	3	6
1:A:17:SER:H	1:A:20:LYS:HD3	0.46	1.69	3	3
1:A:62:LYS:CB	1:A:64:TYR:HE1	0.46	2.23	20	7
1:A:81:LYS:CD	1:A:82:TYR:HD1	0.46	2.15	12	1
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:HD1	0.46	2.24	9	4
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE1	0.46	2.23	3	3
1:A:95:GLN:HG2	1:A:105:LEU:CD2	0.46	2.40	3	1
1:A:97:ASN:HD22	1:A:98:GLY:N	0.46	2.08	3	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:107:TYR:OH	0.46	2.30	4	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:93:TYR:HB3	0.46	2.45	18	2
1:A:25:LEU:C	1:A:50:PHE:CE2	0.46	2.94	10	2
1:A:6:LEU:CG	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:103:THR:O	1:A:106:ARG:N	0.46	2.49	15	1
1:A:21:ALA:C	1:A:25:LEU:HD23	0.46	2.35	19	1
1:A:22:GLU:CA	1:A:61:ILE:HG13	0.46	2.41	5	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:90:LEU:CB	0.46	2.99	15	2
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG13	0.46	1.80	12	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:HD21	0.46	2.38	12	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:CE2	0.46	2.99	14	1
1:A:75:ARG:N	1:A:83:VAL:HG12	0.46	2.26	17	1
1:A:6:LEU:CD2	1:A:87:ILE:HB	0.46	2.41	1	2
1:A:67:LYS:HA	1:A:67:LYS:HE3	0.46	1.88	14	3
1:A:75:ARG:HD3	1:A:76:TYR:CZ	0.46	2.46	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LYS:CG	1:A:107:TYR:HD2	0.46	2.16	15	2
1:A:18:ARG:O	1:A:18:ARG:HD3	0.46	2.11	14	1
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:CG	0.46	2.90	16	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:83:VAL:CG1	0.46	2.99	18	3
1:A:28:THR:HB	1:A:109:VAL:CG2	0.46	2.41	17	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:83:VAL:O	0.46	2.11	18	1
1:A:40:ARG:O	1:A:41:THR:CG2	0.46	2.58	1	1
1:A:66:ILE:HA	1:A:78:VAL:HG13	0.46	1.88	4	1
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:CG	0.46	2.24	6	2
1:A:91:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HD21	0.46	1.86	8	3
1:A:6:LEU:CB	1:A:12:TYR:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ARG:CB	0.46	2.62	18	1
1:A:23:LYS:HG3	1:A:24:LEU:H	0.45	1.71	4	3
1:A:77:TYR:HD2	1:A:80:GLU:N	0.45	2.09	3	4
1:A:103:THR:OG1	1:A:106:ARG:CB	0.45	2.65	3	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:HG23	0.45	1.69	14	7
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:HD2	0.45	2.29	9	2
1:A:12:TYR:HA	1:A:36:VAL:HB	0.45	1.88	20	3
1:A:84:PHE:CG	1:A:90:LEU:HA	0.45	2.46	13	1
1:A:70:ASN:H	1:A:70:ASN:ND2	0.45	2.09	14	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:50:PHE:HB3	0.45	2.41	19	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:108:PRO:HA	0.45	1.86	15	3
1:A:20:LYS:HB3	1:A:23:LYS:HE3	0.45	1.86	3	3
1:A:82:TYR:CE1	1:A:93:TYR:HE2	0.45	2.27	4	1
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CE2	0.45	2.28	5	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:34:PHE:CD2	0.45	3.04	6	2
1:A:86:SER:HB2	1:A:88:PRO:HG2	0.45	1.89	7	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:48:SER:HG	0.45	2.19	9	1
1:A:35:MET:CB	1:A:109:VAL:O	0.45	2.62	9	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:HB	0.45	2.41	17	5
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:CE1	0.45	2.98	16	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:93:TYR:HD2	0.45	2.24	20	3
1:A:14:LYS:HG2	1:A:38:ASP:HB2	0.45	1.81	20	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:CZ	0.45	2.47	20	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:34:PHE:O	0.45	2.11	1	1
1:A:77:TYR:HE2	1:A:80:GLU:N	0.45	2.07	11	3
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:HD1	0.45	2.07	5	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:25:LEU:CD1	0.45	2.91	8	2
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HG2	0.45	2.42	1	1
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:N	0.45	2.64	2	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:HE1	0.45	2.25	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:HG21	1:A:87:ILE:CG2	0.45	2.42	9	3
1:A:68:GLU:CD	1:A:76:TYR:HE1	0.45	2.17	6	1
1:A:64:TYR:HD2	1:A:78:VAL:CG1	0.45	2.25	8	1
1:A:96:TYR:C	1:A:97:ASN:O	0.45	2.59	8	3
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB3	0.45	2.42	18	1
1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:OE1	0.45	2.11	20	1
1:A:32:GLY:H	1:A:51:THR:CA	0.45	2.24	5	2
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CD	0.45	2.94	2	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:36:VAL:CG1	0.45	2.99	5	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:HA	0.45	2.41	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:25:LEU:HD22	0.45	2.41	12	1
1:A:44:THR:CA	1:A:68:GLU:HG3	0.45	2.41	12	1
1:A:11:TRP:CB	1:A:34:PHE:O	0.45	2.64	1	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG13	0.45	1.86	1	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:TYR:H	0.45	1.65	4	1
1:A:67:LYS:CB	1:A:77:TYR:CZ	0.45	2.99	5	3
1:A:92:GLN:HE21	1:A:95:GLN:CD	0.45	2.19	7	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:63:HIS:HE1	0.45	2.24	8	2
1:A:30:LYS:HD2	1:A:109:VAL:HG11	0.45	1.86	12	1
1:A:68:GLU:OE2	1:A:76:TYR:CD2	0.45	2.70	13	2
1:A:29:GLY:O	1:A:52:LYS:HG3	0.45	2.12	15	1
1:A:45:TYR:HB2	1:A:66:ILE:HG13	0.45	1.89	18	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:95:GLN:HE21	0.45	2.25	20	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:61:ILE:O	0.45	2.60	2	1
1:A:43:GLY:O	1:A:45:TYR:CE1	0.45	2.69	3	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.45	2.38	4	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:CA	0.45	3.00	20	2
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:HH11	0.45	2.25	6	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:74:LYS:HA	0.45	1.86	8	1
1:A:37:ARG:CG	1:A:46:THR:CB	0.45	2.94	16	3
1:A:51:THR:O	1:A:60:CYS:HB3	0.45	2.11	20	1
1:A:34:PHE:CG	1:A:35:MET:N	0.45	2.84	17	5
1:A:16:ILE:HA	1:A:20:LYS:HE3	0.45	1.87	3	2
1:A:25:LEU:C	1:A:50:PHE:CE1	0.45	2.95	5	3
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:CD	0.45	2.25	5	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:109:VAL:HG21	0.45	2.27	9	1
1:A:64:TYR:N	1:A:64:TYR:CD1	0.45	2.84	10	3
1:A:62:LYS:HG2	1:A:64:TYR:CZ	0.45	2.47	11	1
1:A:67:LYS:HE3	1:A:67:LYS:CA	0.45	2.40	17	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HG11	0.45	2.12	17	1
1:A:93:TYR:HE2	1:A:94:HIS:CE1	0.45	2.24	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.45	2.42	2	2
1:A:10:GLU:C	1:A:110:CYS:CB	0.45	2.90	3	3
1:A:64:TYR:CG	1:A:101:LEU:HD23	0.45	2.43	6	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:35:MET:SD	0.45	2.49	9	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:64:TYR:HE1	0.45	2.25	15	5
1:A:95:GLN:C	1:A:96:TYR:CD1	0.45	2.95	11	2
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:OH	0.45	2.65	16	1
1:A:18:ARG:N	1:A:37:ARG:CZ	0.45	2.79	5	3
1:A:22:GLU:OE2	1:A:63:HIS:CE1	0.45	2.70	3	1
1:A:97:ASN:HD21	1:A:99:GLY:N	0.45	2.10	3	1
1:A:94:HIS:HD2	1:A:101:LEU:CD2	0.45	2.24	8	2
1:A:104:ARG:HH22	1:A:106:ARG:CZ	0.45	2.25	10	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:CB	0.45	2.42	12	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD13	0.45	1.71	12	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:99:GLY:CA	0.45	2.41	20	1
1:A:102:VAL:CG2	1:A:103:THR:N	0.44	2.78	1	3
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:HA2	0.44	1.89	4	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:101:LEU:CD1	0.44	2.98	8	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:110:CYS:N	0.44	2.81	14	2
1:A:105:LEU:HD22	1:A:105:LEU:H	0.44	1.72	17	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:HB2	0.44	2.35	20	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:111:GLY:N	0.44	2.81	1	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:91:ILE:HD11	0.44	2.42	12	3
1:A:18:ARG:CA	1:A:63:HIS:CD2	0.44	3.00	7	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:61:ILE:HG21	0.44	1.87	12	1
1:A:104:ARG:CZ	1:A:106:ARG:HA	0.44	2.42	12	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:N	0.44	2.27	16	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:50:PHE:CE1	0.44	2.47	20	2
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HB3	0.44	2.42	19	1
1:A:97:ASN:C	1:A:104:ARG:NE	0.44	2.75	2	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:7:GLU:O	0.44	2.61	4	1
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:109:VAL:HG12	0.44	1.62	6	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:85:ASP:N	0.44	2.27	6	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:HB3	0.44	1.87	7	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:105:LEU:HD23	0.44	1.89	15	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG22	0.44	1.89	16	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:H	0.44	1.72	4	1
1:A:88:PRO:C	1:A:92:GLN:OE1	0.44	2.59	5	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:68:GLU:OE1	0.44	2.65	7	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:35:MET:HB2	0.44	1.70	9	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LYS:HD3	0.44	1.89	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CE1	1:A:99:GLY:CA	0.44	3.00	9	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:77:TYR:CE1	0.44	2.47	14	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HE2	0.44	1.71	18	6
1:A:6:LEU:C	1:A:12:TYR:HD2	0.44	2.20	6	2
1:A:23:LYS:HG2	1:A:24:LEU:H	0.44	1.71	3	2
1:A:46:THR:HA	1:A:65:HIS:HA	0.44	1.89	15	6
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:HE21	0.44	2.10	3	7
1:A:40:ARG:O	1:A:44:THR:HG22	0.44	2.12	4	1
1:A:75:ARG:C	1:A:76:TYR:HD1	0.44	2.20	4	6
1:A:84:PHE:HZ	1:A:93:TYR:CZ	0.44	2.30	4	1
1:A:87:ILE:N	1:A:87:ILE:CD1	0.44	2.80	4	3
1:A:100:GLY:O	1:A:101:LEU:C	0.44	2.61	9	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:21:ALA:HA	0.44	2.42	9	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:61:ILE:CG2	0.44	2.43	12	1
1:A:29:GLY:C	1:A:50:PHE:CZ	0.44	2.96	13	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:30:LYS:H	0.44	2.25	13	3
1:A:12:TYR:OH	1:A:14:LYS:CB	0.44	2.66	20	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG1	0.44	2.42	20	1
1:A:84:PHE:HD2	1:A:90:LEU:CG	0.44	2.26	2	2
1:A:87:ILE:HB	1:A:88:PRO:HD3	0.44	1.90	3	2
1:A:51:THR:HG1	1:A:103:THR:HG21	0.44	1.72	10	1
1:A:10:GLU:OE1	1:A:108:PRO:HG2	0.44	2.12	11	3
1:A:49:VAL:CB	1:A:102:VAL:HG11	0.44	2.43	13	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:9:TYR:HE1	0.44	1.66	14	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:82:TYR:HE2	0.44	2.26	14	1
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:HD1	0.44	2.10	20	1
1:A:92:GLN:HE22	1:A:95:GLN:NE2	0.44	2.10	7	1
1:A:49:VAL:O	1:A:61:ILE:HA	0.44	2.13	9	1
1:A:32:GLY:HA3	1:A:106:ARG:HD2	0.44	1.90	12	1
1:A:44:THR:HB	1:A:68:GLU:HG3	0.44	1.89	12	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:49:VAL:CG1	0.44	2.95	17	1
1:A:48:SER:HA	1:A:62:LYS:O	0.44	2.13	18	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:101:LEU:CB	0.44	2.66	19	1
1:A:19:ASP:HB2	1:A:20:LYS:HE3	0.44	1.89	2	1
1:A:6:LEU:H	1:A:6:LEU:CD2	0.44	2.25	7	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:35:MET:HG2	0.44	2.21	12	1
1:A:20:LYS:O	1:A:20:LYS:HD3	0.44	2.13	12	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:81:LYS:NZ	0.44	2.81	13	1
1:A:47:VAL:CB	1:A:64:TYR:HB2	0.44	2.41	15	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HB3	0.44	1.72	19	2
1:A:74:LYS:C	1:A:83:VAL:HG12	0.44	2.37	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:CD	0.44	2.66	18	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:61:ILE:N	0.44	2.76	4	1
1:A:68:GLU:OE1	1:A:75:ARG:NE	0.44	2.47	6	1
1:A:74:LYS:CB	1:A:85:ASP:N	0.44	2.81	6	1
1:A:22:GLU:C	1:A:26:LEU:CD1	0.44	2.86	11	2
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:NZ	0.44	2.76	11	1
1:A:93:TYR:HB2	1:A:97:ASN:OD1	0.44	2.12	12	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:108:PRO:CA	0.43	2.42	20	6
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:HE	0.43	2.26	2	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:CD2	0.43	2.90	2	1
1:A:40:ARG:HH11	1:A:40:ARG:CG	0.43	2.26	3	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:90:LEU:HG	0.43	2.48	3	1
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:O	0.43	2.34	5	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:83:VAL:CG1	0.43	2.94	6	1
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:NE2	0.43	2.65	18	2
1:A:26:LEU:HD11	1:A:61:ILE:HG13	0.43	1.90	7	1
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:HD22	0.43	2.27	14	1
1:A:84:PHE:HD1	1:A:90:LEU:HD12	0.43	1.72	15	1
1:A:35:MET:CE	1:A:111:GLY:H	0.43	2.26	19	1
1:A:30:LYS:HE2	1:A:109:VAL:HG12	0.43	1.89	4	1
1:A:74:LYS:O	1:A:83:VAL:HG21	0.43	2.13	6	1
1:A:12:TYR:HE2	1:A:14:LYS:HG3	0.43	1.71	18	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:94:HIS:NE2	0.43	2.28	12	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CG1	0.43	2.43	14	1
1:A:47:VAL:CG1	1:A:49:VAL:HG12	0.43	2.42	14	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:104:ARG:NE	0.43	2.28	1	2
1:A:9:TYR:CB	1:A:11:TRP:CD2	0.43	3.01	11	4
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:HD13	0.43	2.47	12	1
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:CD2	0.43	2.27	15	2
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CD	0.43	2.65	17	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:20:LYS:H	0.43	1.73	16	2
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:HD12	0.43	1.72	7	2
1:A:75:ARG:HH21	1:A:85:ASP:CB	0.43	2.26	15	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:23:LYS:NZ	0.43	2.81	20	1
1:A:31:GLU:OE2	1:A:106:ARG:CZ	0.43	2.65	1	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:35:MET:SD	0.43	2.54	6	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.41	8	1
1:A:25:LEU:HD11	1:A:109:VAL:CG1	0.43	2.42	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:82:TYR:O	0.43	2.10	8	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:83:VAL:HG13	0.43	1.90	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG13	0.43	2.28	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLU:N	1:A:12:TYR:CE2	0.43	2.86	20	1
1:A:17:SER:N	1:A:20:LYS:NZ	0.43	2.67	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:109:VAL:HG12	0.43	2.44	1	2
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:CG2	0.43	2.19	2	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:75:ARG:HA	0.43	1.89	20	2
1:A:106:ARG:CG	1:A:106:ARG:NH1	0.43	2.81	6	1
1:A:46:THR:CA	1:A:65:HIS:ND1	0.43	2.81	9	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:35:MET:HG2	0.43	1.73	12	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:62:LYS:HD3	1:A:64:TYR:CZ	0.43	2.49	16	1
1:A:70:ASN:ND2	1:A:70:ASN:H	0.43	2.09	16	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:111:GLY:H	0.43	1.74	18	1
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:109:VAL:HG23	0.43	1.69	3	1
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:HE21	0.43	1.74	19	3
1:A:20:LYS:C	1:A:20:LYS:HD2	0.43	2.39	12	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:HG11	0.43	1.87	13	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:101:LEU:HD11	0.43	1.91	16	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:63:HIS:NE2	0.43	2.82	18	1
1:A:84:PHE:HE1	1:A:93:TYR:CZ	0.43	2.30	12	2
1:A:69:THR:O	1:A:75:ARG:CA	0.43	2.66	16	2
1:A:11:TRP:HB2	1:A:35:MET:CA	0.43	2.43	17	2
1:A:25:LEU:HD12	1:A:48:SER:OG	0.43	2.11	6	1
1:A:28:THR:CB	1:A:30:LYS:HE3	0.43	2.43	14	2
1:A:14:LYS:HE2	1:A:38:ASP:HB2	0.43	1.89	20	1
1:A:20:LYS:CB	1:A:23:LYS:CE	0.43	2.96	3	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:65:HIS:CD2	0.43	3.02	4	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:35:MET:HB3	0.43	1.89	5	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:HB2	0.43	2.28	12	1
1:A:96:TYR:N	1:A:96:TYR:CD1	0.43	2.86	13	1
1:A:37:ARG:CD	1:A:46:THR:CB	0.43	2.97	16	2
1:A:94:HIS:CD2	1:A:101:LEU:HD11	0.43	2.48	19	1
1:A:20:LYS:HZ3	1:A:20:LYS:N	0.43	2.12	4	1
1:A:74:LYS:CG	1:A:85:ASP:HB2	0.43	2.44	6	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:23:LYS:CG	0.43	2.96	7	2
1:A:74:LYS:CE	1:A:83:VAL:N	0.43	2.82	7	1
1:A:17:SER:HB3	1:A:20:LYS:HZ3	0.43	1.74	10	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:HA2	0.43	2.44	19	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:95:GLN:HE22	0.42	2.31	4	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:37:ARG:HB3	0.42	1.87	7	1
1:A:11:TRP:C	1:A:36:VAL:H	0.42	2.21	9	1
1:A:62:LYS:CE	1:A:64:TYR:HE1	0.42	2.25	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:SER:OG	1:A:63:HIS:ND1	0.42	2.52	18	2
1:A:104:ARG:NH1	1:A:105:LEU:O	0.42	2.52	12	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:85:ASP:OD2	0.42	2.67	15	1
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:CB	0.42	2.44	20	1
1:A:18:ARG:C	1:A:63:HIS:CE1	0.42	2.97	20	1
1:A:100:GLY:C	1:A:101:LEU:CG	0.42	2.92	2	1
1:A:68:GLU:HG2	1:A:76:TYR:CG	0.42	2.48	3	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:LEU:HD11	0.42	2.11	8	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:50:PHE:CD1	0.42	2.99	8	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:86:SER:HB2	0.42	2.14	11	1
1:A:74:LYS:N	1:A:85:ASP:OD1	0.42	2.52	15	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:24:LEU:HD11	0.42	2.13	16	1
1:A:31:GLU:CG	1:A:51:THR:HG23	0.42	2.43	19	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:105:LEU:HD11	0.42	2.45	20	1
1:A:91:ILE:CA	1:A:105:LEU:HD23	0.42	2.43	6	3
1:A:40:ARG:CG	1:A:40:ARG:NH1	0.42	2.82	3	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:91:ILE:CD1	0.42	2.96	4	1
1:A:109:VAL:HG12	1:A:110:CYS:N	0.42	2.28	9	1
1:A:26:LEU:N	1:A:61:ILE:CD1	0.42	2.82	15	2
1:A:67:LYS:CB	1:A:67:LYS:NZ	0.42	2.83	14	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:109:VAL:O	0.42	2.14	16	1
1:A:109:VAL:O	1:A:109:VAL:HG12	0.42	2.13	20	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:47:VAL:HG22	0.42	2.49	3	3
1:A:24:LEU:HB2	1:A:111:GLY:C	0.42	2.36	6	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:25:LEU:CD1	0.42	2.42	7	1
1:A:35:MET:CB	1:A:48:SER:HB3	0.42	2.41	7	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:104:ARG:CG	0.42	2.97	10	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:ARG:NE	0.42	2.50	11	1
1:A:78:VAL:O	1:A:79:ALA:HB3	0.42	2.13	12	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:ASP:OD2	0.42	2.14	17	1
1:A:7:GLU:OE1	1:A:7:GLU:C	0.42	2.63	4	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:35:MET:CG	0.42	2.93	13	2
1:A:64:TYR:HE2	1:A:101:LEU:HD23	0.42	1.70	15	1
1:A:32:GLY:C	1:A:106:ARG:HB3	0.42	2.40	18	1
1:A:41:THR:HG1	1:A:42:PRO:HD2	0.42	1.74	6	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:11:TRP:NE1	0.42	2.87	14	1
1:A:14:LYS:HG2	1:A:15:SER:H	0.42	1.75	6	5
1:A:99:GLY:O	1:A:101:LEU:CD1	0.42	2.61	5	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:109:VAL:CG2	0.42	2.45	6	3
1:A:10:GLU:HG3	1:A:108:PRO:HG2	0.42	1.90	8	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CG	0.42	2.68	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ASP:CA	1:A:89:LEU:HD11	0.42	2.44	1	1
1:A:49:VAL:CG2	1:A:102:VAL:HB	0.42	2.45	4	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:N	0.42	2.30	4	1
1:A:30:LYS:C	1:A:52:LYS:HZ1	0.42	2.23	11	1
1:A:64:TYR:CZ	1:A:101:LEU:CA	0.42	3.01	11	1
1:A:7:GLU:C	1:A:9:TYR:H	0.42	2.23	12	1
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:HG3	0.42	2.29	14	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:52:LYS:CB	0.42	2.81	17	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:104:ARG:CA	0.42	2.44	19	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:96:TYR:CE1	0.42	2.50	2	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:16:ILE:CD1	0.42	2.92	4	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:SER:N	0.42	2.75	6	3
1:A:7:GLU:CB	1:A:14:LYS:CE	0.42	2.96	11	2
1:A:12:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD2	0.42	3.07	5	2
1:A:45:TYR:HD1	1:A:87:ILE:CD1	0.42	2.28	9	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:THR:HG23	0.42	2.14	12	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:16:ILE:HD12	0.42	1.90	4	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:50:PHE:HD2	0.42	2.17	1	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:30:LYS:CE	0.42	2.45	6	2
1:A:34:PHE:CA	1:A:108:PRO:HA	0.42	2.45	6	1
1:A:32:GLY:CA	1:A:106:ARG:HB2	0.42	2.44	13	2
1:A:25:LEU:HD22	1:A:50:PHE:HB3	0.41	1.92	3	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD1	0.41	2.91	5	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:84:PHE:HA	0.41	2.45	6	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	3.03	12	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:CG	0.41	2.45	15	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:102:VAL:CG2	0.41	2.45	18	1
1:A:18:ARG:H	1:A:37:ARG:CZ	0.41	2.28	2	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:83:VAL:HB	0.41	1.91	2	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:O	0.41	2.68	3	3
1:A:12:TYR:C	1:A:13:ASN:HD22	0.41	2.23	5	1
1:A:31:GLU:HG2	1:A:106:ARG:HD2	0.41	1.91	5	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:111:GLY:HA2	0.41	1.90	6	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:107:TYR:HE2	0.41	2.28	6	1
1:A:7:GLU:O	1:A:8:THR:HG23	0.41	2.14	9	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE2	0.41	2.50	11	1
1:A:7:GLU:CA	1:A:12:TYR:HD2	0.41	2.28	12	1
1:A:40:ARG:HA	1:A:40:ARG:NE	0.41	2.31	13	1
1:A:103:THR:CB	1:A:106:ARG:HG3	0.41	2.45	13	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:48:SER:HB3	0.41	1.92	18	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:61:ILE:HG23	0.41	2.45	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:GLU:HB2	1:A:23:LYS:HE2	0.41	1.91	2	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:36:VAL:CB	0.41	2.28	10	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:87:ILE:CG2	0.41	2.45	7	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.69	7	1
1:A:81:LYS:O	1:A:83:VAL:CG1	0.41	2.66	11	1
1:A:31:GLU:HG3	1:A:106:ARG:HD3	0.41	1.88	12	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:94:HIS:HE2	0.41	1.74	14	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:14:LYS:HG2	0.41	2.50	16	2
1:A:9:TYR:CD1	1:A:11:TRP:CE2	0.41	3.08	19	1
1:A:34:PHE:HD2	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.11	20	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:TYR:N	0.41	2.51	3	1
1:A:67:LYS:CG	1:A:77:TYR:HE1	0.41	2.22	4	1
1:A:66:ILE:CG2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	2.90	5	2
1:A:45:TYR:CA	1:A:66:ILE:HG12	0.41	2.45	7	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:CE1	0.41	2.50	12	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:HD22	0.41	2.13	12	1
1:A:62:LYS:CD	1:A:64:TYR:CZ	0.41	3.03	16	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:84:PHE:HA	0.41	1.91	17	1
1:A:14:LYS:CD	1:A:38:ASP:HB2	0.41	2.45	20	1
1:A:52:LYS:O	1:A:53:ALA:CB	0.41	2.67	1	1
1:A:34:PHE:HD2	1:A:108:PRO:HB3	0.41	1.75	13	6
1:A:34:PHE:HE1	1:A:47:VAL:HG22	0.41	1.75	3	3
1:A:82:TYR:CG	1:A:93:TYR:HE2	0.41	2.29	5	1
1:A:79:ALA:O	1:A:81:LYS:CG	0.41	2.62	8	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:50:PHE:CE2	0.41	2.49	10	1
1:A:42:PRO:HB2	1:A:68:GLU:HB2	0.41	1.91	10	1
1:A:89:LEU:CA	1:A:92:GLN:HG2	0.41	2.46	17	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:50:PHE:HD1	0.41	2.28	5	1
1:A:49:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HB	0.41	1.92	13	1
1:A:86:SER:HB2	1:A:89:LEU:HG	0.41	1.93	15	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:48:SER:HB3	0.41	2.45	18	1
1:A:12:TYR:HD1	1:A:36:VAL:CG1	0.41	2.28	19	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:99:GLY:N	0.41	2.88	20	1
1:A:75:ARG:C	1:A:83:VAL:HG12	0.41	2.41	7	1
1:A:20:LYS:H	1:A:20:LYS:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:17:SER:O	0.41	2.15	11	1
1:A:98:GLY:O	1:A:104:ARG:CB	0.41	2.69	16	2
1:A:21:ALA:HB1	1:A:48:SER:HB2	0.41	1.92	12	1
1:A:37:ARG:NH1	1:A:63:HIS:HB3	0.41	2.31	12	1
1:A:30:LYS:H	1:A:30:LYS:HD2	0.41	1.74	13	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:108:PRO:CA	0.41	2.46	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:O	1:A:9:TYR:HD2	0.41	1.99	1	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:9:TYR:CD2	0.41	3.03	2	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:TYR:CD1	0.41	3.00	3	1
1:A:11:TRP:CE2	1:A:91:ILE:HG21	0.41	2.50	6	2
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:OD1	0.41	2.69	8	1
1:A:14:LYS:N	1:A:14:LYS:HD2	0.41	2.30	13	1
1:A:6:LEU:O	1:A:12:TYR:CZ	0.41	2.72	15	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:102:VAL:HG13	0.41	2.51	17	1
1:A:89:LEU:C	1:A:92:GLN:HG2	0.41	2.41	17	1
1:A:93:TYR:CA	1:A:97:ASN:HD22	0.41	2.29	18	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:85:ASP:OD1	0.41	2.53	1	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:14:LYS:HD3	0.41	2.44	5	1
1:A:7:GLU:HA	1:A:12:TYR:HD2	0.41	1.76	6	1
1:A:76:TYR:HD2	1:A:87:ILE:CD1	0.41	2.28	12	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:83:VAL:O	0.41	2.67	12	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:30:LYS:CD	0.41	2.68	16	1
1:A:99:GLY:C	1:A:101:LEU:HD13	0.41	2.41	18	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:TYR:HB2	0.41	2.50	19	1
1:A:39:SER:C	1:A:41:THR:H	0.41	2.22	5	2
1:A:9:TYR:HB2	1:A:11:TRP:CE2	0.41	2.49	8	1
1:A:74:LYS:C	1:A:75:ARG:HG3	0.41	2.41	9	1
1:A:90:LEU:HG	1:A:93:TYR:HE1	0.41	1.76	12	1
1:A:60:CYS:O	1:A:60:CYS:SG	0.41	2.76	15	1
1:A:85:ASP:N	1:A:89:LEU:HD12	0.40	2.28	1	1
1:A:40:ARG:CG	1:A:41:THR:H	0.40	2.27	4	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:GLN:OE1	0.40	2.69	5	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:61:ILE:CG2	0.40	2.45	6	1
1:A:69:THR:H	1:A:75:ARG:HA	0.40	1.75	7	1
1:A:8:THR:O	1:A:8:THR:OG1	0.40	2.38	10	1
1:A:66:ILE:HG13	1:A:87:ILE:HD12	0.40	1.92	14	1
1:A:44:THR:HG21	1:A:67:LYS:NZ	0.40	2.31	15	1
1:A:82:TYR:CD1	1:A:93:TYR:HE1	0.40	2.28	17	1
1:A:101:LEU:HB2	1:A:104:ARG:HA	0.40	1.93	17	1
1:A:106:ARG:C	1:A:106:ARG:HE	0.40	2.24	17	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:109:VAL:HG23	0.40	1.92	18	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:24:LEU:N	0.40	2.84	7	1
1:A:40:ARG:O	1:A:43:GLY:N	0.40	2.54	10	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:103:THR:HG23	0.40	1.92	10	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:87:ILE:HB	0.40	1.93	11	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:99:GLY:HA3	0.40	1.74	12	1
1:A:92:GLN:O	1:A:96:TYR:CD1	0.40	2.74	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:HD1	1:A:93:TYR:OH	0.40	1.96	17	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CE	0.40	2.70	20	1
1:A:11:TRP:HH2	1:A:87:ILE:HG22	0.40	1.61	2	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:76:TYR:CE1	0.40	2.89	4	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:100:GLY:N	0.40	2.84	16	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:99:GLY:N	0.40	2.69	17	1
1:A:96:TYR:C	1:A:97:ASN:OD1	0.40	2.65	19	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:16:ILE:CB	0.40	2.97	3	1
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LYS:HD3	0.40	2.42	3	1
1:A:24:LEU:CB	1:A:111:GLY:CA	0.40	2.99	6	1
1:A:7:GLU:CD	1:A:12:TYR:CE2	0.40	2.99	7	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ARG:HG3	0.40	2.16	7	1
1:A:31:GLU:HA	1:A:51:THR:HG23	0.40	1.92	17	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:ALA:HB3	0.40	1.92	18	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:61:ILE:HG23	0.40	2.47	19	1
1:A:30:LYS:HE3	1:A:107:TYR:HE2	0.40	1.68	4	1
1:A:74:LYS:CD	1:A:83:VAL:HB	0.40	2.46	7	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:90:LEU:HG	0.40	2.52	7	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:84:PHE:N	0.40	2.31	8	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:33:ALA:HB2	0.40	2.44	15	1
1:A:74:LYS:HB2	1:A:83:VAL:O	0.40	2.15	17	1
1:A:88:PRO:HA	1:A:91:ILE:HB	0.40	1.93	17	1
1:A:13:ASN:HD22	1:A:24:LEU:CD1	0.40	2.22	20	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	97/110 (88%)	67±2 (69±2%)	14±2 (15±3%)	16±2 (17±2%)	0	3
All	All	1940/2200 (88%)	1333 (69%)	283 (15%)	324 (17%)	0	3

All 31 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	41	THR	20
1	A	42	PRO	20
1	A	52	LYS	20
1	A	104	ARG	19
1	A	105	LEU	19
1	A	80	GLU	19
1	A	7	GLU	18
1	A	103	THR	17
1	A	15	SER	14
1	A	70	ASN	14
1	A	97	ASN	14
1	A	10	GLU	13
1	A	99	GLY	13
1	A	79	ALA	12
1	A	74	LYS	11
1	A	102	VAL	10
1	A	100	GLY	10
1	A	101	LEU	9
1	A	14	LYS	8
1	A	53	ALA	7
1	A	6	LEU	6
1	A	82	TYR	6
1	A	8	THR	5
1	A	86	SER	3
1	A	111	GLY	3
1	A	40	ARG	3
1	A	98	GLY	3
1	A	30	LYS	3
1	A	75	ARG	2
1	A	44	THR	2
1	A	29	GLY	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	86/97 (89%)	44±2 (51±3%)	42±2 (49±3%)	0	1
All	All	1720/1940 (89%)	870 (51%)	850 (49%)	0	1

All 68 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	10	GLU	20
1	A	16	ILE	20
1	A	24	LEU	20
1	A	37	ARG	20
1	A	61	ILE	20
1	A	66	ILE	20
1	A	76	TYR	20
1	A	89	LEU	20
1	A	92	GLN	20
1	A	14	LYS	19
1	A	41	THR	19
1	A	82	TYR	19
1	A	105	LEU	19
1	A	20	LYS	18
1	A	44	THR	18
1	A	50	PHE	18
1	A	94	HIS	18
1	A	6	LEU	17
1	A	17	SER	17
1	A	7	GLU	16
1	A	23	LYS	16
1	A	106	ARG	16
1	A	74	LYS	16
1	A	18	ARG	15
1	A	69	THR	15
1	A	81	LYS	15
1	A	110	CYS	15
1	A	48	SER	15
1	A	93	TYR	15
1	A	87	ILE	14
1	A	101	LEU	14
1	A	103	THR	14
1	A	25	LEU	13
1	A	30	LYS	13
1	A	65	HIS	13
1	A	86	SER	13
1	A	15	SER	13
1	A	52	LYS	13
1	A	70	ASN	12
1	A	104	ARG	12
1	A	8	THR	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	40	ARG	11
1	A	26	LEU	11
1	A	28	THR	11
1	A	67	LYS	10
1	A	109	VAL	10
1	A	27	ASP	9
1	A	31	GLU	9
1	A	102	VAL	9
1	A	75	ARG	9
1	A	95	GLN	9
1	A	68	GLU	9
1	A	62	LYS	8
1	A	85	ASP	8
1	A	60	CYS	8
1	A	51	THR	6
1	A	80	GLU	6
1	A	45	TYR	5
1	A	97	ASN	5
1	A	39	SER	4
1	A	78	VAL	4
1	A	49	VAL	4
1	A	22	GLU	3
1	A	38	ASP	3
1	A	83	VAL	3
1	A	84	PHE	2
1	A	19	ASP	2
1	A	13	ASN	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 [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided