



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 09:35 AM UTC

PDB ID : 2M98 / pdb_00002m98
BMRB ID : 19286
Title : NMR Structure of BeF3 Activated Sma0114
Authors : Sheftic, S.R.; Gage, D.J.; Alexandrescu, A.T.
Deposited on : 2013-06-04

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

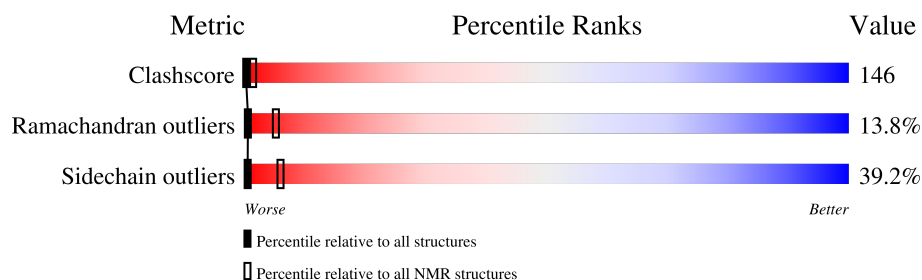
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 27%.

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	123	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 26 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:9-A:118 (110)	1.08	1

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 4 clusters and 10 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 5, 7, 11, 13, 14, 16, 19, 21
2	12, 20, 23
3	10, 24
4	6, 25
Single-model clusters	2; 3; 4; 8; 9; 15; 17; 18; 22; 26

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1917 atoms, of which 960 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Two-component response regulator.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	123	Total	C	H	N	O	S	0
			1912	601	960	158	188	5	

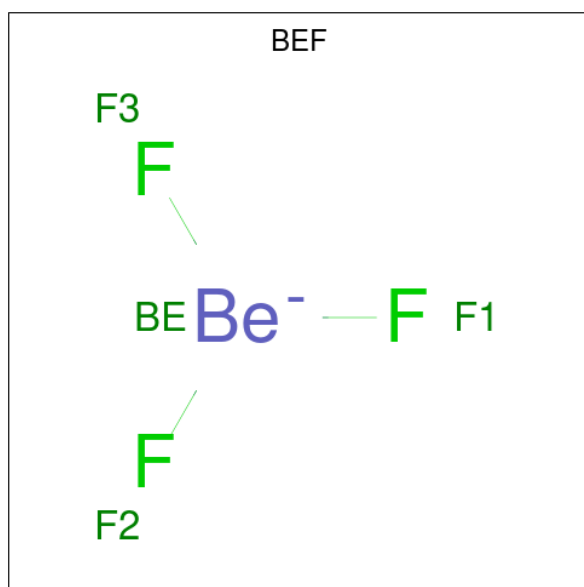
There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	expression tag	UNP Q930Y6
A	2	SER	-	expression tag	UNP Q930Y6
A	3	HIS	-	expression tag	UNP Q930Y6

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Ca
			1	1

- Molecule 3 is BERYLLIUM TRIFLUORIDE ION (CCD ID: BEF) (formula: BeF₃).



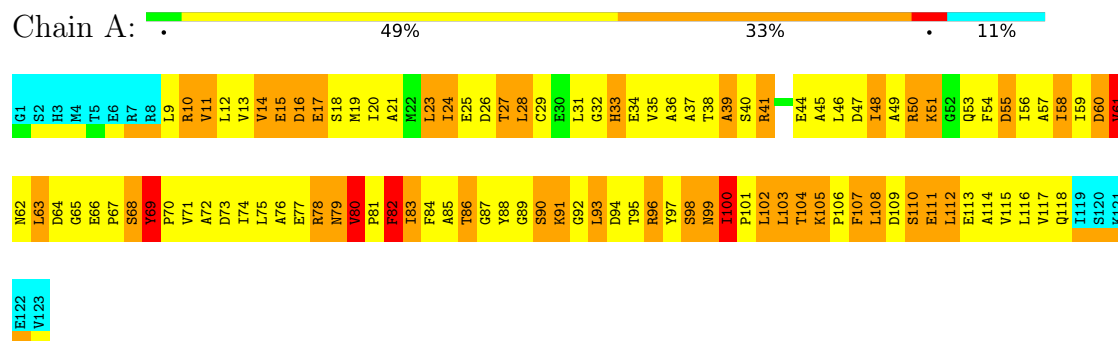
Mol	Chain	Residues	Atoms		
3	A	1	Total	Be	F
			4	1	3

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Two-component response regulator

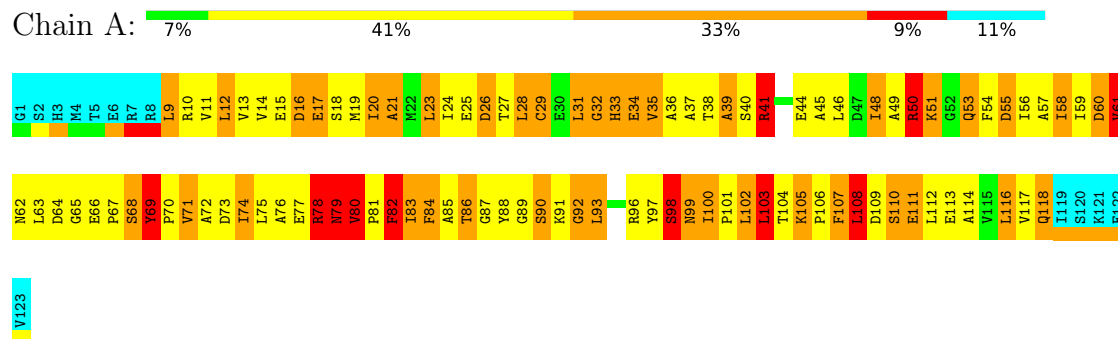


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

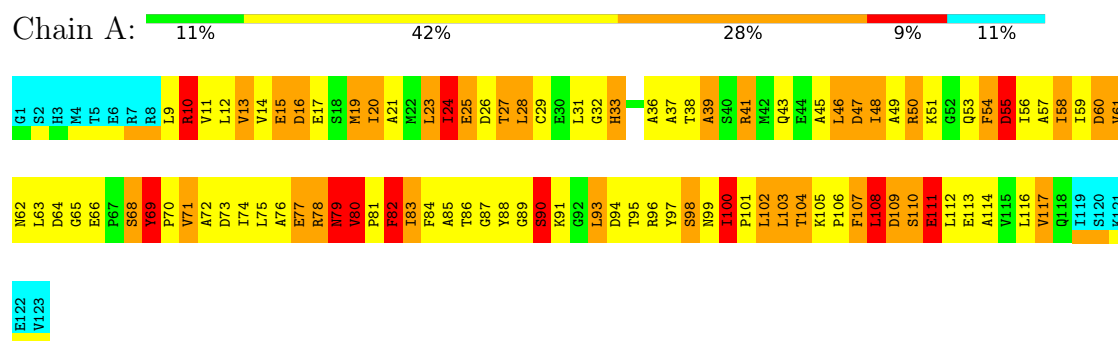
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Two-component response regulator



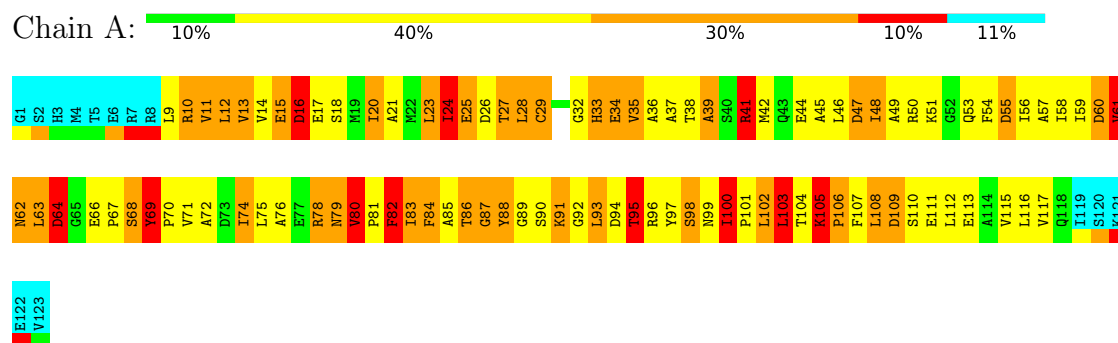
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Two-component response regulator



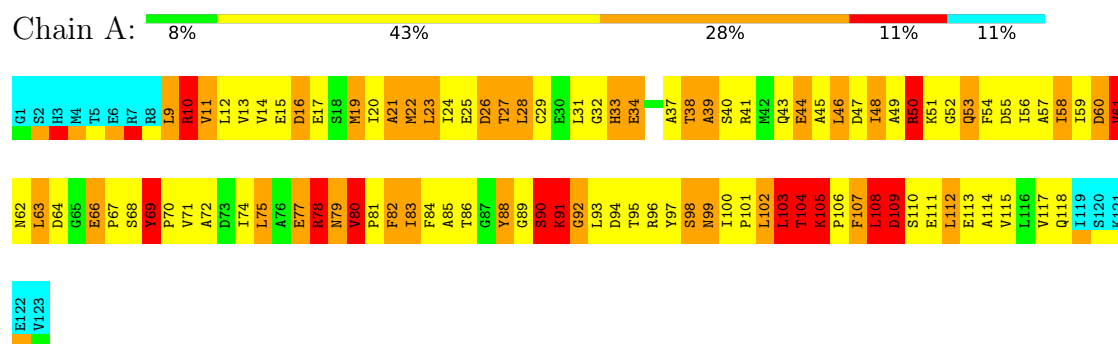
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Two-component response regulator



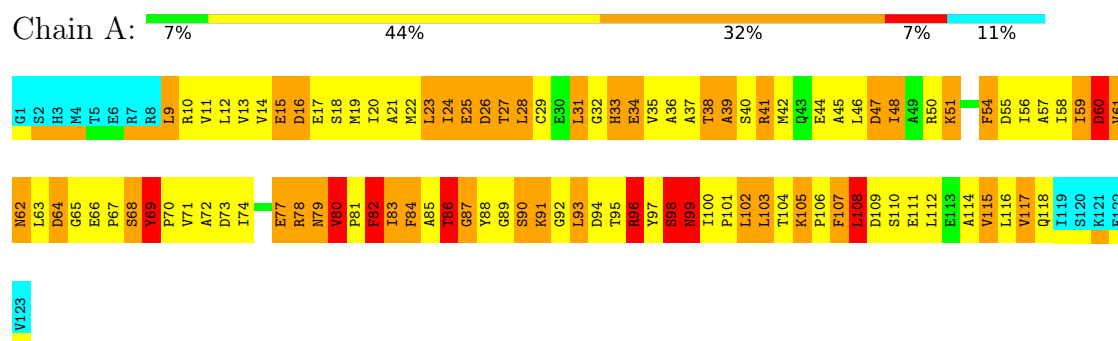
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Two-component response regulator



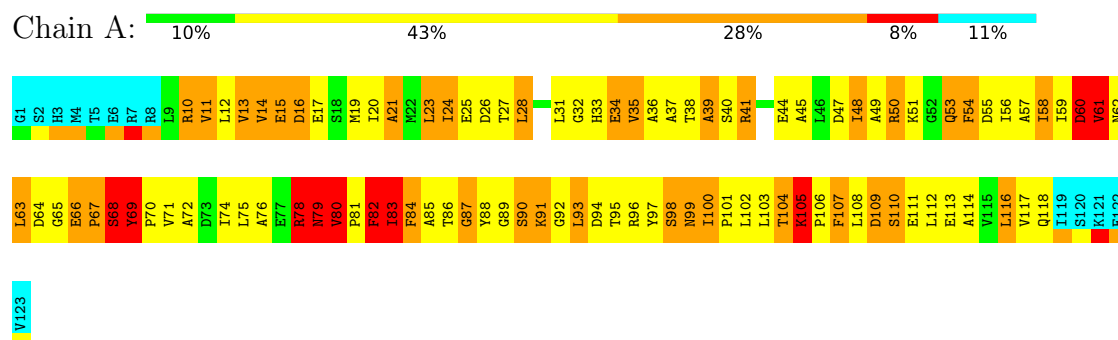
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Two-component response regulator



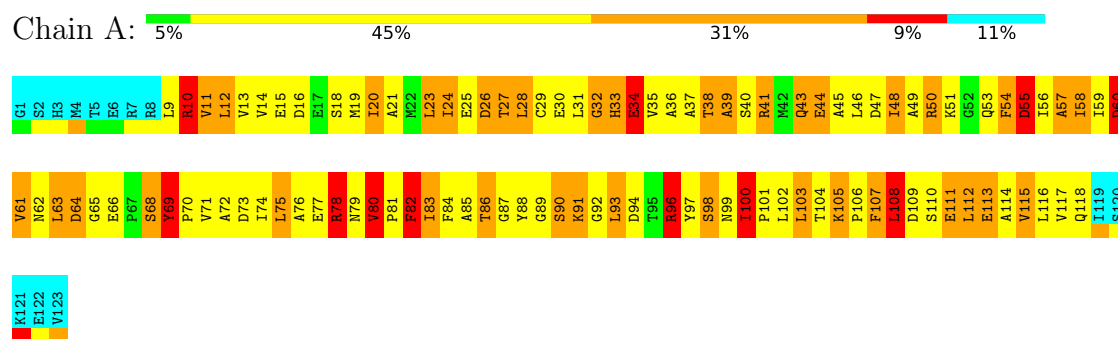
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Two-component response regulator



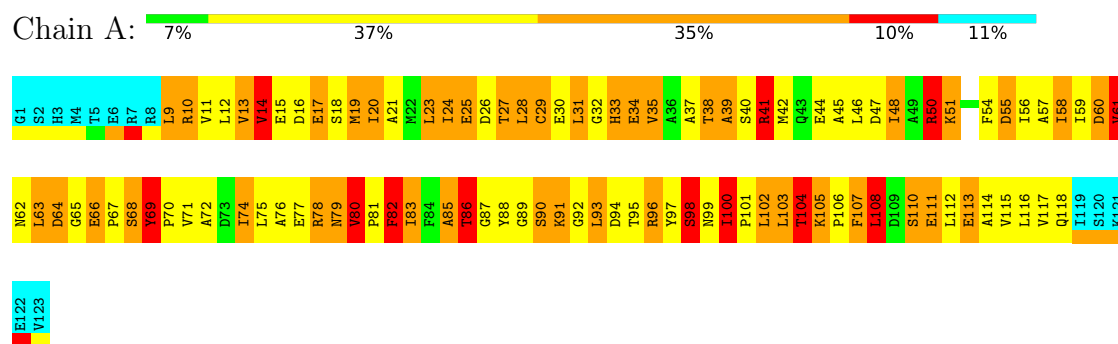
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Two-component response regulator



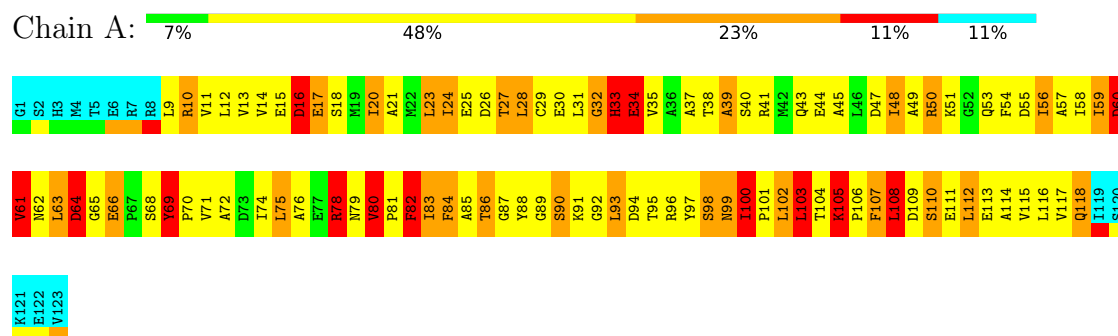
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Two-component response regulator



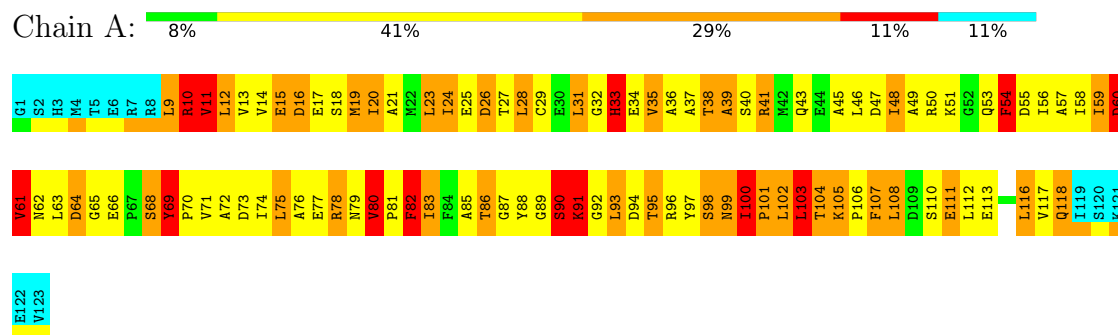
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Two-component response regulator



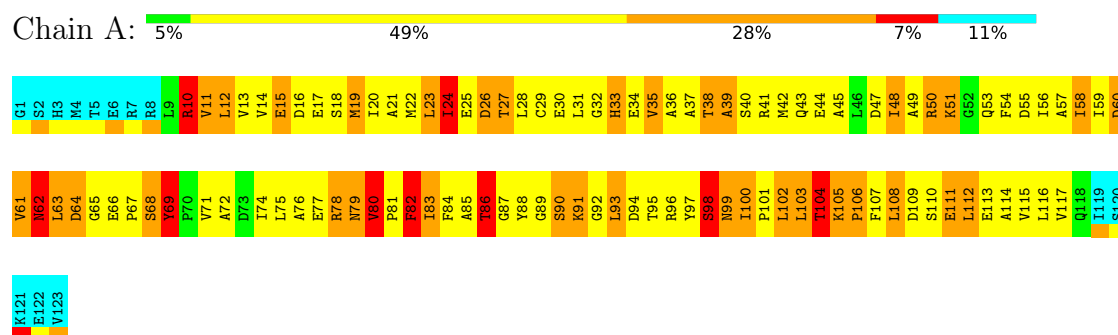
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Two-component response regulator



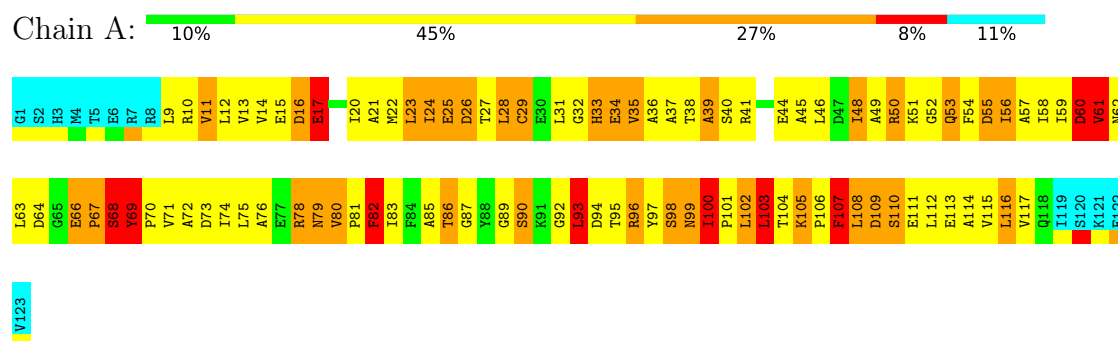
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Two-component response regulator



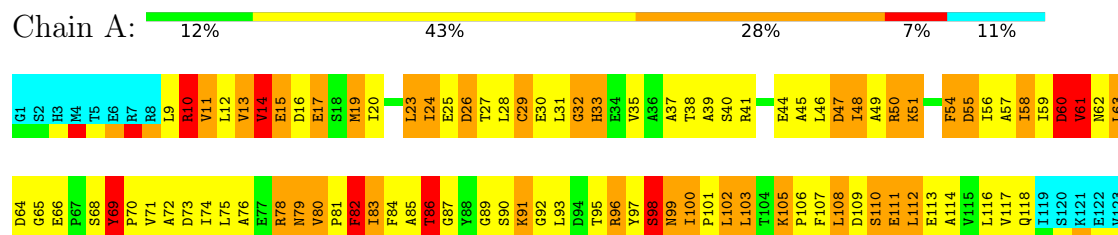
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Two-component response regulator



4.2.16 Score per residue for model 16

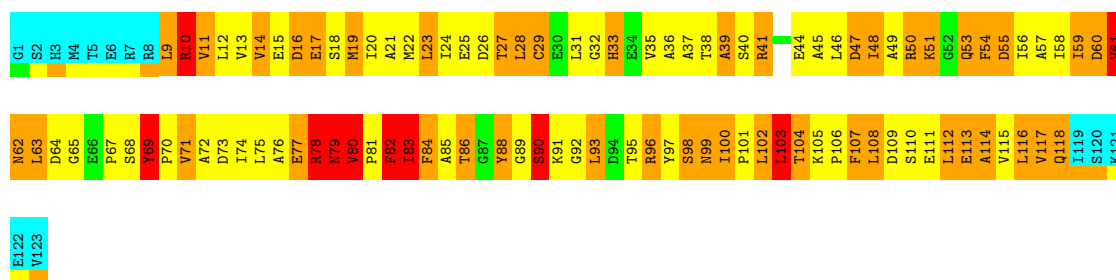
- Molecule 1: Two-component response regulator



4.2.17 Score per residue for model 17

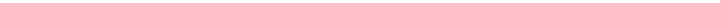
- Molecule 1: Two-component response regulator

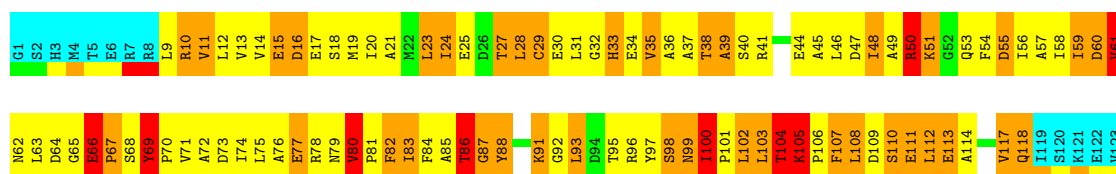




4.2.18 Score per residue for model 18

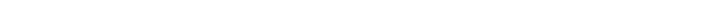
- Molecule 1: Two-component response regulator

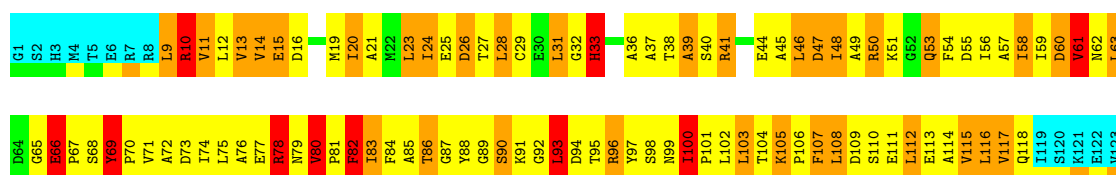
Chain A: 



4.2.19 Score per residue for model 19

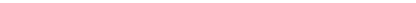
- Molecule 1: Two-component response regulator

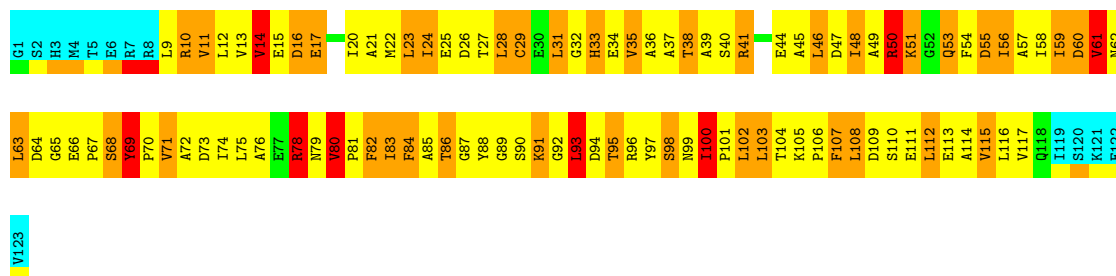
Chain A: 



4.2.20 Score per residue for model 20

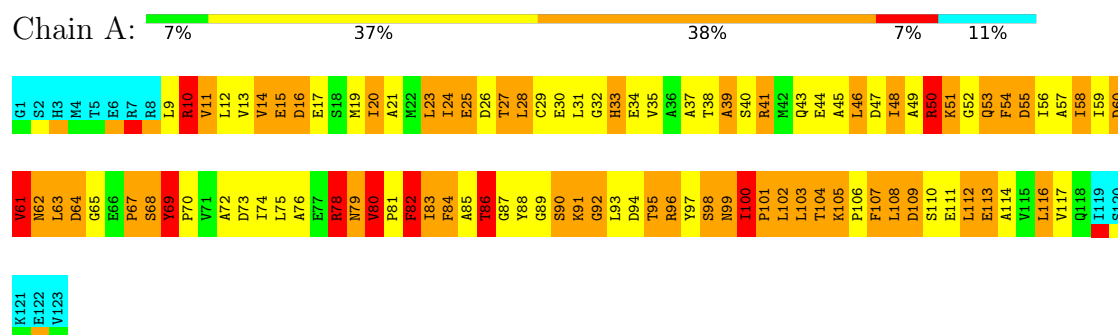
- Molecule 1: Two-component response regulator

Chain A:  7% 46% 30% 7% 11%



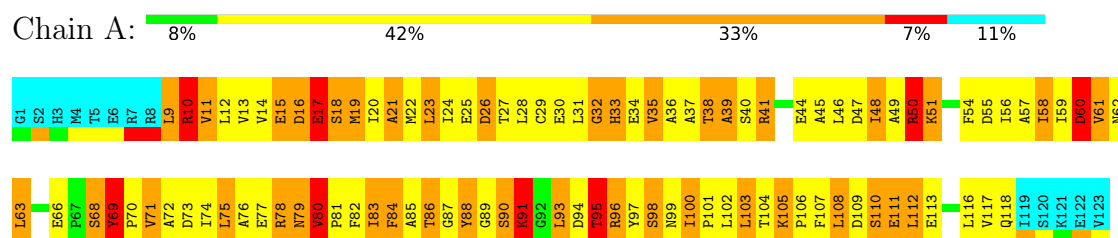
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Two-component response regulator



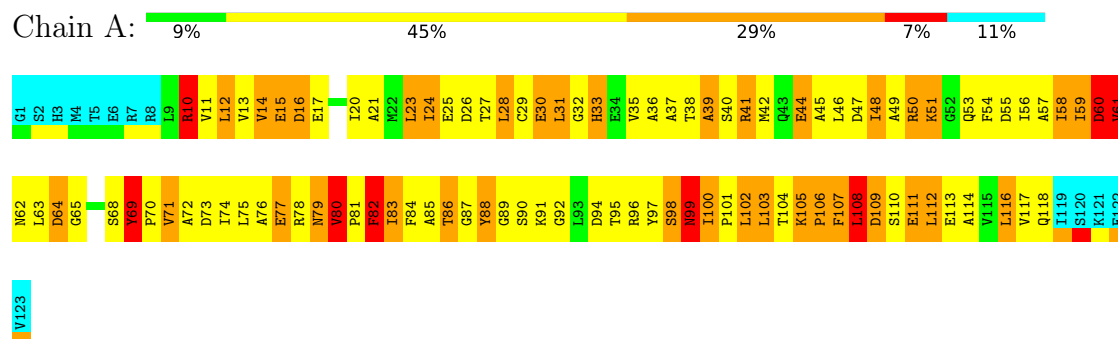
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Two-component response regulator



4.2.23 Score per residue for model 23

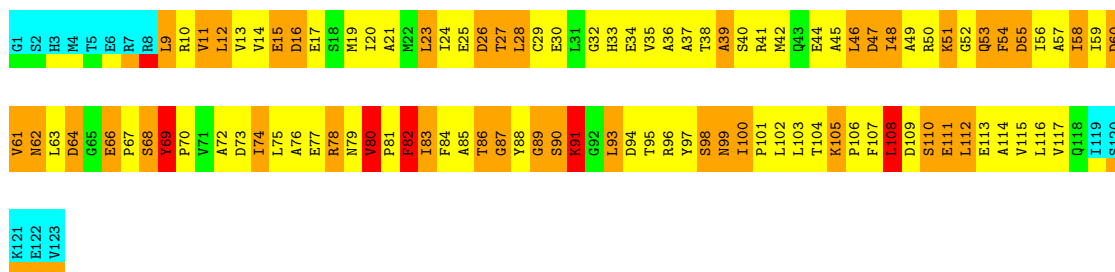
- Molecule 1: Two-component response regulator



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Two-component response regulator

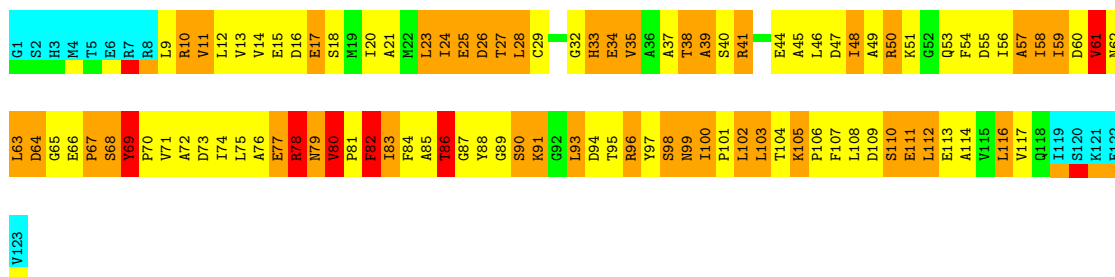




4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Two-component response regulator

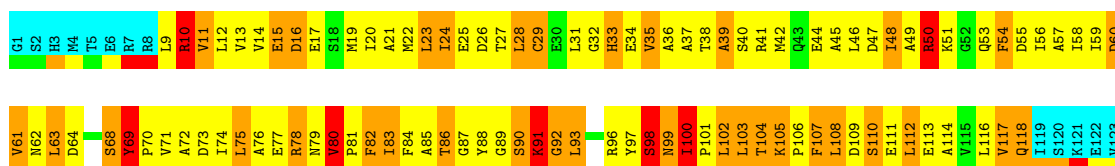
Chain A: 9% 42% 33% 5% 11%



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Two-component response regulator

Chain A: 8% 47% 28% 6% 11%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 500 calculated structures, 26 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

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

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	424
Number of shifts mapped to atoms	424
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	27%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.47±0.01	0±0/860 (0.0± 0.1%)	1.58±0.02	7±2/1170 (0.6± 0.2%)
All	All	1.47	8/22360 (0.0%)	1.58	174/30420 (0.6%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.6±0.5
All	All	0	119

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	82	PHE	C-N	-6.24	1.30	1.33	5	7
1	A	104	THR	N-CA	5.19	1.49	1.46	4	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	58	ILE	N-CA-CB	-7.91	104.75	112.65	25	14
1	A	11	VAL	N-CA-CB	-7.64	103.65	111.90	26	13
1	A	80	VAL	N-CA-CB	-7.30	101.00	111.21	7	21
1	A	24	ILE	N-CA-CB	-6.88	103.84	111.41	3	4
1	A	59	ILE	N-CA-CB	-6.72	105.56	112.28	17	1
1	A	115	VAL	N-CA-CB	-6.71	104.83	112.21	3	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	84	PHE	N-CA-CB	-6.69	101.16	111.46	1	19
1	A	14	VAL	N-CA-CB	-6.40	100.67	111.23	16	4
1	A	107	PHE	CA-CB-CG	-6.36	107.44	113.80	2	20
1	A	66	GLU	N-CA-CB	-6.16	104.82	111.66	19	2
1	A	27	THR	N-CA-C	-6.16	105.90	113.41	14	2
1	A	104	THR	N-CA-CB	-6.10	105.92	111.59	4	2
1	A	35	VAL	N-CA-CB	-6.02	105.19	112.35	21	6
1	A	68	SER	N-CA-CB	-6.00	104.84	113.65	25	4
1	A	32	GLY	N-CA-C	-5.95	107.48	115.21	22	8
1	A	99	ASN	N-CA-CB	-5.90	103.49	112.28	6	6
1	A	20	ILE	N-CA-CB	-5.88	103.50	112.15	3	2
1	A	64	ASP	N-CA-CB	-5.78	103.45	112.41	12	6
1	A	33	HIS	CA-CB-CG	-5.75	108.06	113.80	13	2
1	A	66	GLU	O-C-N	5.61	124.11	121.53	9	1
1	A	54	PHE	CA-CB-CG	-5.54	108.26	113.80	24	3
1	A	78	ARG	N-CA-CB	-5.54	105.15	111.79	9	2
1	A	108	LEU	N-CA-C	-5.45	106.63	113.28	4	1
1	A	91	LYS	N-CA-CB	-5.44	104.46	112.78	22	1
1	A	103	LEU	N-CA-CB	-5.37	103.14	111.35	17	2
1	A	57	ALA	CA-C-N	-5.31	117.91	122.96	25	2
1	A	57	ALA	C-N-CA	-5.31	117.91	122.96	25	2
1	A	106	PRO	N-CA-C	-5.30	107.51	114.03	23	2
1	A	89	GLY	N-CA-C	-5.25	108.09	114.92	24	1
1	A	90	SER	CB-CA-C	-5.19	109.62	115.79	4	1
1	A	52	GLY	N-CA-C	-5.18	108.68	115.47	4	1
1	A	56	ILE	N-CA-CB	-5.17	103.76	112.44	12	1
1	A	90	SER	N-CA-CB	-5.14	104.26	109.51	24	1
1	A	82	PHE	CA-CB-CG	-5.13	108.67	113.80	9	1
1	A	85	ALA	N-CA-CB	-5.12	103.62	111.56	11	1
1	A	33	HIS	N-CA-CB	-5.08	103.37	110.38	10	1
1	A	60	ASP	N-CA-CB	-5.06	102.75	110.39	8	1
1	A	74	ILE	N-CA-CB	-5.05	104.91	110.51	1	1
1	A	95	THR	N-CA-CB	-5.05	103.16	111.69	3	1
1	A	62	ASN	N-CA-CB	-5.01	104.14	110.45	14	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	78	ARG	Sidechain	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	50	ARG	Sidechain	25
1	A	96	ARG	Sidechain	25
1	A	41	ARG	Sidechain	23
1	A	10	ARG	Sidechain	20

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	847	851	851	248±21
2	A	1	0	0	0±0
3	A	4	0	0	7±3
All	All	22152	22126	22126	6483

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 146.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:HG12	1:A:20:ILE:HD11	1.08	1.24	7	21
1:A:13:VAL:HG22	1:A:58:ILE:HD13	1.08	1.24	5	14
1:A:48:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HD11	1.06	1.80	17	9
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:HD12	1.06	1.84	9	8
1:A:59:ILE:HD13	1:A:72:ALA:HB2	1.03	1.29	2	16
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HD13	1.02	1.52	24	3
1:A:31:LEU:HD13	1:A:33:HIS:CE1	1.00	1.91	11	12
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	1.00	1.57	15	13
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:NE2	0.99	1.73	23	7
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:O	0.99	1.58	24	1
1:A:86:THR:HG23	1:A:88:TYR:CD1	0.99	1.92	20	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.98	1.58	2	4
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:HD13	0.98	1.31	12	3
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:O	0.98	1.59	10	3
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:HG22	0.97	1.58	1	7
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:CE1	0.97	1.93	13	10
1:A:102:LEU:HD22	1:A:103:LEU:N	0.97	1.73	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:HIS:NE2	0.97	1.73	13	1
1:A:28:LEU:HD13	1:A:29:CYS:N	0.96	1.75	17	4
1:A:13:VAL:HG12	1:A:20:ILE:CD1	0.95	1.90	18	9
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:HD3	0.95	1.38	26	7
1:A:14:VAL:HG22	1:A:39:ALA:O	0.94	1.62	16	3
1:A:28:LEU:O	1:A:28:LEU:HD22	0.94	1.61	17	5
1:A:54:PHE:CE2	1:A:57:ALA:HB2	0.94	1.97	5	23
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:HD23	0.94	1.62	19	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:33:HIS:CD2	0.93	1.99	12	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:CYS:N	0.93	1.78	26	7
1:A:57:ALA:C	1:A:58:ILE:HD12	0.93	1.89	25	26
1:A:93:LEU:HD11	1:A:102:LEU:CD1	0.93	1.94	17	1
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:HG13	0.92	1.61	23	7
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:HB1	0.92	1.63	22	7
1:A:13:VAL:CG1	1:A:20:ILE:HD11	0.92	1.94	25	10
1:A:103:LEU:HD13	1:A:103:LEU:O	0.92	1.65	14	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:40:SER:HA	0.91	1.42	11	3
1:A:48:ILE:HD12	1:A:57:ALA:HB1	0.90	1.40	24	18
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD11	0.90	1.44	20	5
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:HD13	0.90	1.66	21	2
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:O	0.89	1.67	1	8
1:A:61:VAL:HG23	3:A:202:BEF:F2	0.89	1.56	12	3
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:O	0.89	1.67	14	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:N	0.89	1.82	8	4
1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CD2	0.89	2.03	15	3
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:HG23	0.89	1.68	2	3
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:HD23	0.89	2.03	17	2
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:HD11	0.88	1.44	21	20
1:A:100:ILE:HD11	1:A:117:VAL:CG2	0.88	1.98	5	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:33:HIS:NE2	0.88	1.84	1	1
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:HD21	0.88	1.99	4	2
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:ILE:HD11	0.88	1.45	6	13
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HG23	0.88	1.69	2	5
1:A:68:SER:O	1:A:72:ALA:HB3	0.88	1.69	15	16
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:HD12	0.88	1.99	24	1
1:A:49:ALA:HA	1:A:75:LEU:HD13	0.87	1.46	15	9
1:A:31:LEU:HD11	1:A:115:VAL:HG11	0.87	1.45	12	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:104:THR:N	0.87	1.83	14	2
1:A:63:LEU:HD13	1:A:87:GLY:HA3	0.87	1.47	20	2
1:A:12:LEU:HD11	1:A:54:PHE:HB2	0.87	1.46	3	4
1:A:80:VAL:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.86	1.45	9	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HD11	0.86	1.69	19	8
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:O	0.86	1.69	2	19
1:A:100:ILE:HD13	1:A:101:PRO:HD3	0.86	1.45	24	4
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HD12	0.86	1.70	23	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD22	0.86	1.96	11	3
1:A:101:PRO:HD3	1:A:117:VAL:HG11	0.85	1.44	15	2
1:A:109:ASP:N	1:A:112:LEU:HD21	0.85	1.85	6	2
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG21	0.85	1.48	7	3
1:A:62:ASN:OD1	1:A:86:THR:HG21	0.85	1.71	20	3
1:A:101:PRO:HB3	1:A:117:VAL:HG21	0.85	1.48	22	7
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:C	0.85	1.97	24	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:O	0.85	1.70	14	18
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:HG12	0.84	1.71	17	5
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HD22	0.84	1.72	26	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD22	0.84	1.97	24	6
1:A:10:ARG:NH2	1:A:36:ALA:HB2	0.84	1.86	24	3
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:HA	0.84	1.46	9	2
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HD21	0.84	1.46	10	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:ALA:HB3	0.84	1.72	8	17
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HA	0.84	1.47	9	4
1:A:100:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG23	0.84	1.47	5	3
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.84	1.73	20	3
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:HG23	0.83	1.47	18	3
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HD12	0.83	1.73	4	21
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD23	0.83	1.50	14	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:HD12	0.82	1.74	12	10
1:A:108:LEU:O	1:A:112:LEU:HD12	0.82	1.74	8	3
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:PRO:HD3	0.82	1.48	14	6
1:A:90:SER:OG	1:A:93:LEU:HD22	0.82	1.75	6	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:C	0.82	1.99	8	1
1:A:95:THR:HG22	1:A:99:ASN:ND2	0.82	1.89	11	3
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HD13	0.82	1.98	3	5
1:A:109:ASP:CA	1:A:112:LEU:HD21	0.82	2.04	26	7
1:A:103:LEU:HD11	1:A:106:PRO:HD2	0.82	1.51	18	1
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:CE2	0.82	2.09	11	7
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD13	0.82	1.89	21	4
1:A:9:LEU:HD22	1:A:55:ASP:OD1	0.82	1.74	8	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG22	0.82	1.51	15	1
3:A:202:BEF:F1	3:A:202:BEF:F2	0.81	1.77	18	20
1:A:57:ALA:HB3	1:A:75:LEU:HD21	0.81	1.52	6	1
1:A:48:ILE:CD1	1:A:57:ALA:HB1	0.81	2.04	24	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:LEU:HD13	1:A:103:LEU:C	0.81	2.00	18	2
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HD23	0.81	2.11	17	2
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:HD13	0.81	1.90	19	4
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HB	0.81	1.51	13	21
1:A:61:VAL:HG11	3:A:202:BEF:F3	0.81	1.65	24	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:40:SER:HA	0.80	1.53	20	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD22	0.80	1.75	5	21
1:A:59:ILE:CD1	1:A:72:ALA:HB2	0.80	2.06	2	7
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:HD12	0.80	1.91	3	5
1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:N	0.80	1.92	1	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:117:VAL:CG2	0.80	2.07	15	1
3:A:202:BEF:F3	3:A:202:BEF:F1	0.79	1.80	24	4
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD13	0.79	2.03	8	4
1:A:90:SER:HB3	1:A:102:LEU:HD21	0.79	1.52	4	1
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:HG22	0.79	2.02	16	9
1:A:59:ILE:HG21	1:A:68:SER:HA	0.79	1.52	15	10
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HG23	0.79	1.77	8	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:C	0.79	2.03	1	18
1:A:100:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HB	0.79	1.53	14	3
1:A:100:ILE:CG1	1:A:117:VAL:HG21	0.79	2.08	25	2
1:A:113:GLU:C	1:A:117:VAL:HG13	0.79	2.03	23	3
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:CD1	0.78	2.07	14	17
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HD12	0.78	1.53	24	2
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD21	0.78	1.55	25	7
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HG23	0.78	1.78	16	3
1:A:103:LEU:HD22	1:A:106:PRO:CG	0.78	2.08	15	1
1:A:56:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD11	0.78	2.08	13	16
1:A:12:LEU:CB	1:A:48:ILE:HG22	0.78	2.09	9	16
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:CZ	0.78	2.13	17	7
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD13	0.78	2.04	13	4
1:A:34:GLU:OE1	1:A:35:VAL:HG12	0.78	1.78	6	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:C	0.78	2.04	4	2
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.78	1.79	23	3
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:HB3	0.78	1.79	9	1
1:A:11:VAL:HG13	1:A:33:HIS:CE1	0.78	2.14	8	3
1:A:100:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	0.78	1.54	4	1
1:A:90:SER:N	1:A:102:LEU:HD23	0.78	1.92	11	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:33:HIS:HE1	0.77	1.36	11	5
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:HB	0.77	1.56	24	20
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:HD23	0.77	1.93	2	3
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:HD12	0.77	1.56	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:HB3	1:A:48:ILE:HG22	0.77	1.55	9	13
1:A:12:LEU:CD1	1:A:37:ALA:HB2	0.77	2.08	17	4
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:N	0.77	1.94	5	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:61:VAL:HG21	0.77	1.79	11	4
1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:O	0.77	1.77	15	19
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:C	0.77	2.05	13	3
1:A:76:ALA:HB2	1:A:91:LYS:HE3	0.77	1.55	25	1
1:A:25:GLU:HA	1:A:28:LEU:HD23	0.77	1.54	9	3
1:A:100:ILE:HD11	1:A:117:VAL:CB	0.77	2.09	5	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HD12	0.77	1.78	7	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:28:LEU:C	0.77	2.04	17	4
1:A:28:LEU:HD13	1:A:28:LEU:C	0.77	2.05	17	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:C	0.77	2.05	4	3
1:A:24:ILE:CG1	1:A:36:ALA:HB3	0.77	2.08	19	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:HD23	0.76	2.04	23	4
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:N	0.76	1.95	21	25
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD23	0.76	1.56	15	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:HE2	0.76	1.37	23	1
1:A:46:LEU:C	1:A:46:LEU:HD23	0.75	2.06	5	5
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD22	0.75	1.81	20	3
1:A:12:LEU:HD13	1:A:12:LEU:N	0.75	1.94	1	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:101:PRO:HG2	0.75	1.56	4	5
1:A:12:LEU:HD23	1:A:54:PHE:CD2	0.75	2.15	7	3
1:A:34:GLU:CD	1:A:35:VAL:HG12	0.75	2.07	6	1
1:A:111:GLU:CD	1:A:112:LEU:HD23	0.75	2.07	14	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	0.75	2.06	8	5
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:O	0.75	1.82	9	6
1:A:61:VAL:HB	3:A:202:BEF:F3	0.75	1.71	8	7
1:A:100:ILE:CD1	1:A:117:VAL:HG23	0.75	2.12	26	1
1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:HD23	0.74	1.97	16	7
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:N	0.74	1.97	24	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:CD	0.74	2.12	11	6
1:A:13:VAL:CG2	1:A:58:ILE:HD13	0.74	2.09	5	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD22	0.74	1.97	18	5
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CD1	0.74	2.50	3	4
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:HG12	0.74	1.82	22	18
1:A:103:LEU:HD22	1:A:103:LEU:C	0.74	2.07	14	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:HD13	0.74	2.06	1	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:110:SER:OG	0.74	1.81	7	2
1:A:80:VAL:O	1:A:95:THR:HG21	0.74	1.82	6	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:47:ASP:N	0.74	1.97	24	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:VAL:CG1	3:A:202:BEF:F3	0.74	2.26	24	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:100:ILE:N	0.74	1.96	8	3
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG23	0.74	1.81	26	15
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:HD13	0.73	1.81	6	2
1:A:105:LYS:CE	3:A:202:BEF:F2	0.73	2.26	15	3
1:A:63:LEU:HD23	1:A:63:LEU:N	0.73	1.98	17	4
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:CD1	0.73	2.12	12	3
1:A:66:GLU:CB	1:A:67:PRO:CD	0.73	2.67	4	2
1:A:103:LEU:HD21	1:A:106:PRO:HD2	0.73	1.58	14	1
1:A:104:THR:HG22	1:A:105:LYS:N	0.73	1.96	24	2
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CE1	0.73	2.42	3	18
1:A:13:VAL:HG22	1:A:58:ILE:CD1	0.73	2.09	5	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD23	0.73	1.97	10	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HD13	0.73	1.81	25	2
1:A:69:TYR:CD1	1:A:69:TYR:N	0.73	2.56	13	18
1:A:15:GLU:CG	1:A:20:ILE:HG21	0.73	2.13	24	9
1:A:79:ASN:HB2	1:A:95:THR:HG23	0.73	1.59	6	1
1:A:49:ALA:HB2	1:A:75:LEU:HD13	0.73	1.60	13	4
1:A:10:ARG:CZ	1:A:36:ALA:HB2	0.73	2.13	10	3
1:A:101:PRO:HA	1:A:117:VAL:HG11	0.73	1.58	24	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:HG22	0.73	1.60	16	2
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:O	0.72	2.07	3	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:111:GLU:OE1	0.72	1.82	17	2
1:A:54:PHE:HE2	1:A:57:ALA:HB2	0.72	1.44	13	7
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG13	0.72	1.85	26	16
1:A:49:ALA:CB	1:A:71:VAL:HG13	0.72	2.14	12	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD12	0.72	2.09	14	2
1:A:15:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HG21	0.72	1.62	13	7
1:A:113:GLU:C	1:A:117:VAL:HG23	0.72	2.09	2	2
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HD23	0.72	1.62	24	1
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CE2	0.72	2.43	11	8
1:A:103:LEU:HD23	1:A:110:SER:C	0.72	2.10	25	1
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG12	0.72	1.84	8	7
1:A:93:LEU:HD13	1:A:102:LEU:CD1	0.72	2.14	26	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:57:ALA:HB2	0.71	2.20	11	3
1:A:61:VAL:CG2	3:A:202:BEF:F2	0.71	2.27	12	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:37:ALA:HB2	0.71	1.60	17	2
3:A:202:BEF:F2	3:A:202:BEF:F3	0.71	1.87	25	7
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:CG2	0.71	2.14	8	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:104:THR:O	0.71	1.86	4	1
3:A:202:BEF:F1	3:A:202:BEF:F3	0.71	1.87	20	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HD12	0.71	1.85	7	2
1:A:95:THR:HG22	1:A:99:ASN:HD21	0.71	1.45	11	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:33:HIS:CG	0.71	2.59	6	1
1:A:101:PRO:O	1:A:103:LEU:HD23	0.71	1.84	10	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD22	0.71	2.01	22	9
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:CB	0.71	2.38	17	23
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:N	0.71	1.99	3	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:O	0.71	1.85	8	1
3:A:202:BEF:F2	3:A:202:BEF:F1	0.71	1.87	19	2
1:A:100:ILE:HD12	1:A:117:VAL:CG1	0.71	2.16	4	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:ILE:HG22	0.70	1.86	9	8
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD13	0.70	1.85	18	5
1:A:99:ASN:O	1:A:102:LEU:HD23	0.70	1.86	22	1
1:A:17:GLU:O	1:A:20:ILE:HG22	0.70	1.86	9	10
1:A:15:GLU:CG	3:A:202:BEF:F1	0.70	2.29	8	2
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:C	0.70	2.12	10	5
1:A:111:GLU:HG3	1:A:112:LEU:HD23	0.70	1.64	2	1
1:A:97:TYR:C	1:A:100:ILE:HD11	0.70	2.12	8	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:THR:HG23	0.70	1.86	22	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:36:ALA:HB1	0.70	1.63	17	4
1:A:105:LYS:NZ	3:A:202:BEF:F3	0.70	2.14	12	4
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD12	0.69	1.87	9	2
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CG	0.69	2.70	9	26
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HG13	0.69	1.87	22	5
1:A:60:ASP:OD1	3:A:202:BEF:F2	0.69	2.00	23	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:104:THR:HG22	0.69	2.17	13	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD12	0.69	2.12	25	3
1:A:95:THR:HG22	1:A:97:TYR:H	0.69	1.47	3	2
1:A:103:LEU:HD22	1:A:110:SER:C	0.69	2.11	26	1
1:A:100:ILE:N	1:A:101:PRO:CD	0.69	2.56	17	17
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:HB2	0.69	1.63	17	2
1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CE2	0.69	2.23	15	2
1:A:15:GLU:CB	3:A:202:BEF:F1	0.69	2.31	8	1
1:A:30:GLU:OE2	1:A:115:VAL:HG12	0.69	1.87	11	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:117:VAL:HG21	0.69	1.64	25	1
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:HB3	0.69	1.85	9	5
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:HG22	0.69	1.63	23	3
1:A:15:GLU:CD	3:A:202:BEF:F2	0.69	2.26	23	4
1:A:10:ARG:NH1	1:A:36:ALA:HB2	0.69	2.03	2	1
1:A:79:ASN:ND2	1:A:82:PHE:CE2	0.69	2.61	22	7
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:C	0.69	2.12	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:VAL:CG2	3:A:202:BEF:F3	0.69	2.31	6	5
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD13	0.69	1.64	9	3
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:CD2	0.69	2.17	15	1
1:A:61:VAL:CG1	1:A:61:VAL:O	0.69	2.40	11	13
1:A:15:GLU:OE2	3:A:202:BEF:F3	0.69	2.02	21	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:N	0.68	2.03	18	1
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:CG	0.68	2.41	19	5
1:A:49:ALA:HB3	1:A:71:VAL:HG13	0.68	1.63	25	2
1:A:71:VAL:HG12	1:A:72:ALA:N	0.68	2.03	22	1
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:CG1	0.68	2.41	20	9
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:TYR:H	0.68	1.49	18	3
1:A:60:ASP:OD2	3:A:202:BEF:F2	0.68	2.02	25	3
1:A:15:GLU:CD	3:A:202:BEF:F3	0.68	2.26	2	3
1:A:31:LEU:HD13	1:A:33:HIS:ND1	0.68	2.04	13	2
1:A:105:LYS:NZ	3:A:202:BEF:F2	0.68	2.16	13	6
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:OG1	0.68	1.88	26	9
3:A:202:BEF:F3	3:A:202:BEF:F2	0.68	1.92	16	2
1:A:83:ILE:HD12	1:A:101:PRO:O	0.68	1.88	1	1
1:A:80:VAL:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.68	2.19	7	6
1:A:79:ASN:ND2	1:A:82:PHE:CZ	0.68	2.62	26	6
1:A:54:PHE:O	1:A:56:ILE:N	0.68	2.25	17	9
1:A:13:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HD13	0.68	2.16	12	2
1:A:73:ASP:O	1:A:76:ALA:HB3	0.68	1.89	25	11
1:A:76:ALA:CB	1:A:91:LYS:CE	0.68	2.72	6	2
1:A:35:VAL:HG13	1:A:35:VAL:O	0.68	1.89	26	4
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CD2	0.68	2.47	7	8
1:A:79:ASN:CG	1:A:82:PHE:CE2	0.67	2.71	4	4
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:C	0.67	2.13	9	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:97:TYR:CD1	0.67	2.78	20	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HD11	0.67	1.64	26	1
1:A:80:VAL:CG2	1:A:81:PRO:HD2	0.67	2.19	7	24
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:PRO:CD	0.67	2.19	18	3
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:HD23	0.67	1.47	24	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HD13	0.67	1.89	2	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HD22	0.67	1.90	8	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG13	0.67	1.89	14	4
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:CB	0.67	2.41	14	9
1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:TYR:CE2	0.67	2.25	6	3
1:A:61:VAL:CB	3:A:202:BEF:F3	0.67	2.33	6	3
1:A:15:GLU:CG	3:A:202:BEF:F3	0.67	2.31	9	2
1:A:31:LEU:HD23	1:A:33:HIS:CE1	0.67	2.23	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:CE	3:A:202:BEF:F1	0.67	2.32	2	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:57:ALA:CB	0.67	2.78	4	3
1:A:11:VAL:HG11	1:A:28:LEU:CD2	0.67	2.20	14	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:39:ALA:O	0.67	1.88	22	2
1:A:44:GLU:O	1:A:48:ILE:HG23	0.67	1.90	12	10
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HD13	0.67	2.14	19	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:33:HIS:HD2	0.67	1.47	12	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:C	0.67	2.15	17	1
1:A:15:GLU:OE2	3:A:202:BEF:F1	0.67	2.03	6	3
1:A:10:ARG:NH1	1:A:11:VAL:HG22	0.67	2.04	15	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	0.67	1.47	24	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:104:THR:H	0.67	1.50	18	3
1:A:14:VAL:HB	1:A:39:ALA:O	0.67	1.90	18	21
1:A:15:GLU:OE1	3:A:202:BEF:F3	0.67	2.03	17	3
1:A:10:ARG:N	1:A:10:ARG:CD	0.67	2.58	9	3
1:A:103:LEU:HD22	1:A:104:THR:HG22	0.67	1.65	13	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:102:LEU:HD13	0.66	1.66	12	2
1:A:66:GLU:CB	1:A:67:PRO:HD3	0.66	2.20	18	2
1:A:60:ASP:OD2	3:A:202:BEF:F1	0.66	2.02	6	4
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:O	0.66	1.89	5	1
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD21	0.66	1.65	8	1
1:A:98:SER:HB3	1:A:100:ILE:HD12	0.66	1.65	20	3
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HD11	0.66	2.25	10	4
1:A:12:LEU:HD12	1:A:56:ILE:O	0.66	1.89	23	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD22	0.66	2.15	8	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:61:VAL:HG11	0.66	1.89	3	2
1:A:60:ASP:OD1	3:A:202:BEF:F3	0.66	2.04	20	7
1:A:24:ILE:CD1	1:A:38:THR:HG23	0.66	2.19	22	1
1:A:79:ASN:CG	1:A:82:PHE:CZ	0.66	2.74	7	7
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:CG1	0.66	2.21	9	1
1:A:69:TYR:CD1	1:A:71:VAL:CG1	0.66	2.78	18	1
1:A:15:GLU:OE1	3:A:202:BEF:F1	0.66	2.04	24	1
1:A:35:VAL:HG12	1:A:35:VAL:O	0.66	1.91	22	2
1:A:54:PHE:CE2	1:A:75:LEU:HD11	0.66	2.26	15	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:33:HIS:CE1	0.66	2.26	19	3
1:A:86:THR:HG23	1:A:88:TYR:HD1	0.66	1.49	20	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD23	0.66	2.15	21	1
1:A:100:ILE:H	1:A:101:PRO:CD	0.65	2.04	19	14
1:A:60:ASP:CG	3:A:202:BEF:F3	0.65	2.29	17	2
2:A:201:CA:CA	3:A:202:BEF:F3	0.65	1.63	8	1
1:A:82:PHE:CG	1:A:83:ILE:N	0.65	2.63	26	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:NZ	3:A:202:BEF:F1	0.65	2.16	21	4
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:CB	0.65	2.44	18	13
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.65	2.74	10	20
1:A:60:ASP:OD2	3:A:202:BEF:F3	0.65	2.04	17	3
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:N	0.65	2.06	17	2
1:A:15:GLU:OE1	3:A:202:BEF:F2	0.65	2.04	18	1
1:A:113:GLU:CA	1:A:117:VAL:HG23	0.65	2.21	2	2
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD22	0.65	1.91	17	2
1:A:15:GLU:O	1:A:40:SER:N	0.65	2.29	11	14
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:CB	0.65	2.45	2	9
1:A:86:THR:HG22	1:A:89:GLY:O	0.65	1.92	22	1
1:A:15:GLU:CD	3:A:202:BEF:F1	0.65	2.30	6	2
1:A:13:VAL:HG22	1:A:24:ILE:CD1	0.65	2.22	16	2
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD2	0.65	2.60	18	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:HB3	0.65	1.91	21	16
1:A:46:LEU:CD1	1:A:50:ARG:CD	0.65	2.74	4	3
1:A:17:GLU:OE2	3:A:202:BEF:F1	0.65	2.05	2	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:106:PRO:CG	0.65	2.20	12	2
1:A:105:LYS:HB3	3:A:202:BEF:F3	0.64	1.82	3	1
1:A:98:SER:O	1:A:100:ILE:HG23	0.64	1.91	13	3
1:A:61:VAL:HG23	3:A:202:BEF:F3	0.64	1.81	25	3
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HD23	0.64	1.68	11	1
1:A:98:SER:CB	1:A:100:ILE:HD11	0.64	2.22	26	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:H	0.64	1.50	20	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:CD2	0.64	2.42	2	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:106:PRO:CD	0.64	2.76	11	1
1:A:15:GLU:OE2	3:A:202:BEF:F2	0.64	2.05	16	2
1:A:54:PHE:CE2	1:A:57:ALA:CB	0.64	2.80	21	13
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:CD1	0.64	2.43	25	24
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:O	0.64	2.44	11	18
1:A:12:LEU:HD12	1:A:37:ALA:HB2	0.64	1.70	20	2
1:A:93:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD11	0.64	1.67	17	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:37:ALA:HB1	0.64	2.23	18	1
1:A:105:LYS:N	1:A:106:PRO:CD	0.64	2.60	1	22
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:H	0.64	1.49	18	2
1:A:48:ILE:CD1	1:A:59:ILE:CD1	0.64	2.75	15	5
1:A:68:SER:OG	1:A:72:ALA:HB3	0.64	1.93	17	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:H	0.64	1.51	1	5
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CD2	0.64	2.60	20	4
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:ILE:CD1	0.64	2.23	9	14
1:A:14:VAL:CG2	1:A:40:SER:HA	0.64	2.22	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ILE:CG2	1:A:69:TYR:CZ	0.64	2.81	17	3
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:CD1	0.64	2.51	18	2
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD1	0.64	2.61	11	7
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CD1	0.64	2.76	24	14
1:A:118:GLN:NE2	1:A:118:GLN:HA	0.64	2.07	23	3
1:A:15:GLU:HG3	3:A:202:BEF:F1	0.64	1.83	6	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CD2	0.64	2.81	15	3
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:O	0.64	2.16	18	26
1:A:15:GLU:O	1:A:17:GLU:N	0.64	2.31	21	12
1:A:10:ARG:HG2	1:A:35:VAL:C	0.64	2.18	20	4
1:A:59:ILE:O	1:A:59:ILE:CG2	0.64	2.45	23	13
1:A:99:ASN:O	1:A:102:LEU:HD21	0.64	1.92	14	2
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:CD	0.64	2.22	11	13
1:A:101:PRO:CD	1:A:117:VAL:HG11	0.64	2.20	15	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:105:LYS:O	0.63	2.46	2	4
1:A:109:ASP:CA	1:A:112:LEU:HD11	0.63	2.24	19	5
1:A:57:ALA:CB	1:A:75:LEU:HD21	0.63	2.22	6	1
1:A:48:ILE:HG13	1:A:57:ALA:HB1	0.63	1.71	16	9
1:A:11:VAL:HG13	1:A:33:HIS:ND1	0.63	2.07	8	1
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:CD2	0.63	2.51	11	10
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HG21	0.63	1.68	17	4
1:A:11:VAL:HG13	1:A:36:ALA:HB2	0.63	1.69	19	2
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:N	0.63	2.61	24	5
1:A:54:PHE:C	1:A:55:ASP:CG	0.63	2.65	2	3
1:A:60:ASP:OD1	3:A:202:BEF:F1	0.63	2.06	3	3
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:HG23	0.63	2.23	18	3
1:A:85:ALA:CA	1:A:103:LEU:O	0.63	2.47	15	22
1:A:108:LEU:HD23	1:A:109:ASP:HB2	0.63	1.71	16	2
1:A:15:GLU:CG	1:A:20:ILE:CG2	0.63	2.76	24	6
1:A:31:LEU:CB	1:A:33:HIS:CE1	0.63	2.82	6	1
1:A:10:ARG:O	1:A:54:PHE:O	0.63	2.16	26	14
1:A:9:LEU:HD23	1:A:33:HIS:CD2	0.62	2.29	1	1
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CD1	0.62	2.52	19	17
1:A:24:ILE:HD11	1:A:37:ALA:O	0.62	1.94	7	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:48:ILE:HG22	0.62	1.69	10	2
1:A:15:GLU:HG2	3:A:202:BEF:F3	0.62	1.84	18	1
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD12	0.62	1.70	10	2
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:CB	0.62	2.47	23	11
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CB	0.62	2.48	4	3
1:A:59:ILE:CG2	1:A:69:TYR:CE2	0.62	2.82	21	5
1:A:20:ILE:HD12	1:A:105:LYS:HE2	0.62	1.69	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:HD13	0.62	1.71	23	2
1:A:27:THR:HG22	1:A:31:LEU:HD23	0.62	1.71	20	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:CD	0.62	2.24	15	3
1:A:76:ALA:HB3	1:A:91:LYS:HE3	0.62	1.71	6	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:60:ASP:HB3	0.62	1.68	8	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:99:ASN:ND2	0.62	2.09	10	1
1:A:88:TYR:O	1:A:88:TYR:CD1	0.62	2.52	24	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:CG	0.62	2.43	2	4
1:A:51:LYS:CG	1:A:54:PHE:HB3	0.62	2.23	9	5
1:A:103:LEU:HD23	1:A:103:LEU:N	0.62	2.09	23	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:CD2	0.62	2.72	24	9
1:A:84:PHE:CE2	1:A:88:TYR:OH	0.62	2.53	10	1
1:A:105:LYS:HE2	3:A:202:BEF:F2	0.62	1.84	24	1
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CD2	0.62	2.78	26	4
1:A:103:LEU:HD22	1:A:106:PRO:HG2	0.62	1.70	15	1
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD22	0.62	2.10	21	1
1:A:12:LEU:CB	1:A:48:ILE:CG2	0.62	2.78	6	17
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	0.62	1.72	9	2
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HD12	0.62	2.30	12	5
1:A:111:GLU:HA	1:A:114:ALA:HB3	0.62	1.70	9	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:HD23	0.62	2.20	10	2
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:HD23	0.62	2.09	10	1
1:A:101:PRO:CA	1:A:117:VAL:HG11	0.62	2.25	24	1
1:A:76:ALA:HB2	1:A:91:LYS:CE	0.62	2.24	25	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD2	0.62	2.62	20	6
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:CG1	0.62	2.24	11	2
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:CB	0.62	2.25	7	8
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HE3	0.62	1.72	24	1
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HD23	0.61	2.19	19	2
1:A:103:LEU:HD13	1:A:104:THR:N	0.61	2.09	18	1
1:A:45:ALA:HA	1:A:48:ILE:HD13	0.61	1.72	18	6
1:A:60:ASP:C	1:A:61:VAL:HG12	0.61	2.19	14	6
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:O	0.61	2.53	4	1
1:A:62:ASN:N	1:A:86:THR:OG1	0.61	2.34	6	4
1:A:15:GLU:HB2	3:A:202:BEF:F3	0.61	1.84	8	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:72:ALA:HB2	0.61	1.72	21	3
1:A:23:LEU:HD21	1:A:111:GLU:HB3	0.61	1.71	23	1
1:A:48:ILE:CG1	1:A:57:ALA:HB1	0.61	2.25	14	18
1:A:23:LEU:HD11	1:A:111:GLU:OE2	0.61	1.94	3	2
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CE2	0.61	2.53	21	5
1:A:10:ARG:HD3	1:A:33:HIS:HB3	0.61	1.71	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:HG2	0.61	1.94	4	6
1:A:27:THR:HG23	1:A:111:GLU:OE2	0.61	1.94	9	1
1:A:15:GLU:HB2	3:A:202:BEF:F1	0.61	1.85	26	4
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:HG13	0.61	2.21	12	13
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CD1	0.61	2.64	23	5
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD12	0.61	1.72	23	2
1:A:80:VAL:O	1:A:82:PHE:CD1	0.60	2.54	9	19
1:A:66:GLU:N	1:A:67:PRO:CD	0.60	2.63	1	7
1:A:107:PHE:N	1:A:110:SER:OG	0.60	2.34	2	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:56:ILE:HB	0.60	1.71	3	4
1:A:15:GLU:O	1:A:39:ALA:HA	0.60	1.96	11	24
1:A:69:TYR:CD2	1:A:71:VAL:HG22	0.60	2.31	1	4
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:CB	0.60	2.49	11	4
1:A:10:ARG:CZ	1:A:28:LEU:CD1	0.60	2.79	26	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:C	0.60	2.20	3	5
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:HD2	0.60	1.72	11	12
1:A:86:THR:O	1:A:88:TYR:CD2	0.60	2.54	3	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.60	2.74	21	4
1:A:49:ALA:CB	1:A:75:LEU:HD13	0.60	2.26	13	9
1:A:106:PRO:HB2	1:A:108:LEU:HD21	0.60	1.73	24	1
1:A:24:ILE:CG2	1:A:25:GLU:N	0.60	2.64	14	25
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CZ	0.60	2.54	14	10
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:CD1	0.60	2.80	20	2
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:CD1	0.60	2.79	22	2
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:CG1	0.60	2.50	6	18
1:A:28:LEU:HD12	1:A:33:HIS:HB2	0.60	1.72	4	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:91:LYS:HB3	0.60	2.31	17	5
1:A:80:VAL:HB	1:A:81:PRO:HD2	0.60	1.73	24	13
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:CE1	0.60	2.85	6	4
1:A:15:GLU:HB2	3:A:202:BEF:F2	0.60	1.86	14	2
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:O	0.60	1.96	25	2
1:A:80:VAL:CB	1:A:81:PRO:HD2	0.60	2.27	24	13
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:CG	0.60	2.50	7	3
1:A:13:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HD12	0.60	1.73	17	1
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:CB	0.60	2.25	24	1
1:A:69:TYR:HD2	1:A:71:VAL:HG22	0.60	1.57	9	4
1:A:103:LEU:HD22	1:A:110:SER:HA	0.60	1.73	24	2
1:A:55:ASP:O	1:A:82:PHE:HA	0.60	1.97	5	22
1:A:104:THR:O	1:A:104:THR:CG2	0.60	2.50	6	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:HD12	0.60	2.26	26	3
1:A:83:ILE:HD13	1:A:114:ALA:HB1	0.60	1.72	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ARG:NH2	1:A:11:VAL:HG22	0.59	2.12	6	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:89:GLY:N	0.59	2.71	2	10
1:A:60:ASP:CG	3:A:202:BEF:F1	0.59	2.34	25	2
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:HD11	0.59	1.97	26	2
1:A:100:ILE:HD12	1:A:100:ILE:C	0.59	2.22	5	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:THR:HG23	0.59	1.96	23	1
1:A:90:SER:OG	1:A:91:LYS:N	0.59	2.35	24	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:N	0.59	2.11	2	2
1:A:35:VAL:HG23	1:A:35:VAL:O	0.59	1.97	3	3
1:A:79:ASN:ND2	1:A:94:ASP:N	0.59	2.51	8	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:CD1	0.59	2.50	2	2
1:A:59:ILE:HG23	1:A:69:TYR:OH	0.59	1.97	17	4
1:A:24:ILE:CD1	1:A:37:ALA:O	0.59	2.51	19	14
1:A:9:LEU:O	1:A:33:HIS:CG	0.59	2.56	8	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:69:TYR:OH	0.59	1.97	9	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:106:PRO:CD	0.59	2.27	15	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:HA	0.59	2.33	20	1
1:A:112:LEU:O	1:A:115:VAL:HG22	0.59	1.96	20	1
1:A:85:ALA:HB2	1:A:103:LEU:CD1	0.59	2.28	22	2
1:A:10:ARG:HD3	1:A:35:VAL:N	0.59	2.13	18	5
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:CE	0.59	2.76	15	1
1:A:31:LEU:CB	1:A:33:HIS:ND1	0.59	2.66	19	1
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HB	0.59	1.74	21	1
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:HB	0.59	1.98	2	5
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:CD1	0.59	2.66	20	7
1:A:49:ALA:HB2	1:A:71:VAL:HG13	0.59	1.74	22	2
1:A:103:LEU:CD1	1:A:103:LEU:C	0.59	2.75	22	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:CB	0.59	2.28	8	2
1:A:78:ARG:CG	1:A:79:ASN:N	0.59	2.66	8	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:33:HIS:CE1	0.59	2.86	1	5
1:A:10:ARG:CD	1:A:33:HIS:CB	0.59	2.80	17	2
1:A:60:ASP:HB2	1:A:105:LYS:NZ	0.59	2.13	26	1
1:A:109:ASP:C	1:A:112:LEU:HD21	0.59	2.21	26	1
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:CG1	0.58	2.50	24	11
1:A:59:ILE:HG12	1:A:69:TYR:CE2	0.58	2.33	15	7
1:A:12:LEU:HA	1:A:37:ALA:HB3	0.58	1.75	21	3
1:A:105:LYS:N	1:A:106:PRO:HD3	0.58	2.14	16	17
1:A:60:ASP:CG	1:A:61:VAL:N	0.58	2.60	15	15
1:A:100:ILE:CG1	1:A:101:PRO:CD	0.58	2.81	10	4
1:A:78:ARG:O	1:A:79:ASN:C	0.58	2.46	25	8
1:A:9:LEU:O	1:A:33:HIS:CD2	0.58	2.56	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ASP:C	1:A:60:ASP:OD1	0.58	2.46	9	2
1:A:98:SER:CB	1:A:100:ILE:CD1	0.58	2.80	16	3
1:A:10:ARG:HD2	1:A:33:HIS:CB	0.58	2.28	18	2
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD13	0.58	2.14	1	6
1:A:107:PHE:O	1:A:109:ASP:N	0.58	2.35	2	5
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:CD1	0.58	2.86	3	5
1:A:9:LEU:C	1:A:33:HIS:CD2	0.58	2.81	4	1
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:CG1	0.58	2.77	17	14
1:A:58:ILE:HD11	1:A:83:ILE:HG22	0.58	1.75	24	3
1:A:12:LEU:HB3	1:A:48:ILE:CG2	0.58	2.29	13	18
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:CB	0.58	2.51	17	9
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:GLU:N	0.58	2.13	25	10
1:A:57:ALA:HB3	1:A:75:LEU:CD2	0.58	2.27	6	2
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:C	0.58	2.81	7	2
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:CG1	0.58	2.50	24	9
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:CD1	0.58	2.66	18	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:34:GLU:CB	0.58	2.66	1	3
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:C	0.58	2.23	26	3
1:A:86:THR:OG1	1:A:87:GLY:N	0.58	2.34	25	15
1:A:100:ILE:CG1	1:A:101:PRO:HD3	0.58	2.27	10	11
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CE1	0.58	2.57	6	2
1:A:90:SER:HB3	1:A:102:LEU:HD23	0.58	1.76	23	1
2:A:201:CA:CA	3:A:202:BEF:F1	0.58	1.71	24	2
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:CD1	0.58	2.71	24	23
1:A:80:VAL:HB	1:A:81:PRO:CD	0.58	2.28	1	9
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:CG2	0.58	2.75	3	9
1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:GLN:HG2	0.58	1.74	6	2
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CD2	0.58	2.51	20	3
1:A:80:VAL:CB	1:A:81:PRO:CD	0.58	2.80	1	13
1:A:15:GLU:HB3	1:A:60:ASP:OD1	0.58	1.98	8	4
1:A:108:LEU:CA	1:A:112:LEU:HD12	0.58	2.29	9	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:HD2	0.58	1.75	11	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:C	0.58	2.82	1	10
1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:TYR:HE2	0.58	1.58	2	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:CD2	0.58	2.77	23	2
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:OG1	0.58	2.52	13	6
1:A:10:ARG:HD3	1:A:33:HIS:CB	0.58	2.28	17	1
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:CB	0.58	2.52	10	8
1:A:61:VAL:HG23	3:A:202:BEF:F1	0.58	1.89	3	1
1:A:100:ILE:CB	1:A:101:PRO:CD	0.58	2.81	15	3
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:CG2	0.57	2.29	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:CZ	1:A:78:ARG:CB	0.57	2.82	2	1
1:A:106:PRO:CD	1:A:110:SER:OG	0.57	2.52	2	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:54:PHE:N	0.57	2.69	5	8
1:A:80:VAL:CG1	1:A:81:PRO:HD2	0.57	2.28	5	5
1:A:58:ILE:HG23	1:A:85:ALA:H	0.57	1.58	6	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:CD1	0.57	2.52	12	20
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:HZ	0.57	1.59	17	4
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:HD22	0.57	2.14	6	2
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:CD1	0.57	2.52	20	7
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:CB	0.57	2.52	16	3
1:A:28:LEU:CD1	1:A:36:ALA:CB	0.57	2.82	14	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:H	0.57	1.59	2	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:105:LYS:CE	0.57	2.29	26	2
1:A:9:LEU:N	1:A:34:GLU:OE1	0.57	2.38	20	1
1:A:85:ALA:HA	1:A:103:LEU:O	0.57	1.99	20	19
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:ND2	0.57	2.53	26	10
1:A:88:TYR:CZ	1:A:90:SER:O	0.57	2.57	4	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:HG13	0.57	1.77	10	3
1:A:101:PRO:HG3	1:A:117:VAL:HG11	0.57	1.75	7	2
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:CE	0.57	2.51	18	4
1:A:60:ASP:HB2	1:A:105:LYS:CD	0.57	2.30	18	2
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:HB2	0.57	1.99	19	18
1:A:106:PRO:C	1:A:107:PHE:CG	0.57	2.82	3	1
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:PRO:CD	0.57	2.29	5	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:33:HIS:CD2	0.57	2.82	12	2
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:CA	0.57	2.29	14	3
1:A:98:SER:C	1:A:100:ILE:CD1	0.57	2.77	19	2
1:A:98:SER:HB3	1:A:100:ILE:HD11	0.57	1.75	26	2
1:A:10:ARG:NH2	1:A:36:ALA:CB	0.57	2.67	24	2
1:A:60:ASP:OD1	1:A:105:LYS:NZ	0.57	2.38	20	1
1:A:57:ALA:O	1:A:83:ILE:O	0.57	2.22	15	26
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:N	0.57	2.38	4	3
1:A:108:LEU:HA	1:A:112:LEU:HD12	0.57	1.76	9	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:39:ALA:O	0.57	2.49	11	2
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:ILE:CD1	0.57	2.82	16	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:CD2	0.57	2.51	25	8
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG2	0.57	2.52	2	13
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:CG	0.57	2.48	24	3
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:HD3	0.57	1.76	15	3
1:A:27:THR:O	1:A:30:GLU:CG	0.57	2.52	22	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:90:SER:O	0.57	2.57	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:CG2	0.57	2.82	10	4
1:A:12:LEU:HD12	1:A:54:PHE:CD2	0.57	2.35	9	3
1:A:60:ASP:OD1	1:A:61:VAL:N	0.57	2.38	25	8
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG1	0.57	2.53	21	2
1:A:103:LEU:HD12	1:A:106:PRO:CG	0.57	2.30	19	2
1:A:66:GLU:N	1:A:67:PRO:HD3	0.57	2.14	1	5
1:A:76:ALA:O	1:A:79:ASN:ND2	0.57	2.37	13	15
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:CD2	0.57	2.87	23	3
1:A:10:ARG:CD	1:A:33:HIS:HB3	0.57	2.29	20	4
1:A:84:PHE:CB	1:A:93:LEU:CD1	0.57	2.83	8	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:OD1	0.56	2.53	8	8
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:O	0.56	2.22	10	22
1:A:60:ASP:HA	1:A:85:ALA:O	0.56	2.00	11	16
1:A:86:THR:O	1:A:87:GLY:C	0.56	2.48	24	13
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:C	0.56	2.47	13	11
1:A:10:ARG:N	1:A:55:ASP:OD1	0.56	2.38	17	1
1:A:15:GLU:CD	1:A:16:ASP:N	0.56	2.63	21	2
1:A:83:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CE2	0.56	2.87	15	4
1:A:101:PRO:HG3	1:A:117:VAL:HG21	0.56	1.77	14	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:13:VAL:CG2	0.56	2.30	19	2
1:A:101:PRO:CB	1:A:114:ALA:HA	0.56	2.31	23	5
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CE2	0.56	2.55	2	4
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:N	0.56	2.34	2	3
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:VAL:HG13	0.56	1.77	3	1
1:A:105:LYS:O	1:A:107:PHE:N	0.56	2.37	3	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:CB	0.56	2.52	10	5
1:A:59:ILE:N	1:A:59:ILE:HD13	0.56	2.15	5	3
1:A:96:ARG:CB	1:A:96:ARG:CZ	0.56	2.83	5	2
1:A:10:ARG:NH1	1:A:10:ARG:HA	0.56	2.15	6	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:37:ALA:O	0.56	2.00	13	3
1:A:84:PHE:CB	1:A:93:LEU:HD12	0.56	2.30	8	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:80:VAL:HG21	0.56	2.36	16	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HG22	0.56	1.77	11	4
1:A:24:ILE:HG21	1:A:38:THR:CG2	0.56	2.31	2	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:GLU:O	0.56	2.38	26	3
1:A:21:ALA:CA	1:A:38:THR:OG1	0.56	2.53	12	9
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:H	0.56	1.61	11	2
1:A:113:GLU:CG	1:A:117:VAL:CG2	0.56	2.83	9	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:104:THR:O	0.56	2.53	4	1
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:CB	0.56	2.54	25	7
1:A:10:ARG:NH2	1:A:11:VAL:HG13	0.56	2.15	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CD	0.56	2.68	16	1
1:A:27:THR:HG21	1:A:111:GLU:OE2	0.56	2.01	21	1
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:CD	0.56	2.54	1	4
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:CE1	0.56	2.59	8	3
1:A:10:ARG:NH1	1:A:33:HIS:HB3	0.56	2.16	6	1
1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CD2	0.56	2.65	22	4
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:N	0.56	2.15	24	1
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:C	0.56	2.49	26	11
1:A:86:THR:O	1:A:88:TYR:N	0.56	2.39	3	4
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:CB	0.56	2.54	16	6
1:A:12:LEU:CD1	1:A:48:ILE:HG22	0.56	2.31	15	6
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:OD2	0.56	2.54	16	8
1:A:100:ILE:N	1:A:101:PRO:HD3	0.56	2.15	4	3
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:N	0.56	2.16	9	2
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD22	0.56	1.77	16	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:CD1	0.56	2.54	26	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:CG1	0.56	2.54	14	7
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.56	2.67	10	17
1:A:100:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HD3	0.56	2.31	11	13
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:CG2	0.56	2.54	12	4
1:A:62:ASN:HB2	1:A:86:THR:OG1	0.56	2.01	21	7
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:CD1	0.56	2.54	18	6
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:PRO:HD2	0.56	1.78	5	1
1:A:81:PRO:O	1:A:82:PHE:HB3	0.56	2.01	10	24
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:THR:N	0.56	2.39	13	10
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:HG13	0.56	1.78	3	2
1:A:66:GLU:HB2	1:A:67:PRO:CD	0.56	2.30	4	1
1:A:84:PHE:HB2	1:A:93:LEU:HD13	0.56	1.77	6	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:106:PRO:CD	0.56	2.31	11	1
1:A:88:TYR:CD2	1:A:90:SER:C	0.56	2.84	24	1
1:A:70:PRO:C	1:A:74:ILE:HD13	0.56	2.24	25	1
1:A:41:ARG:O	1:A:45:ALA:CB	0.55	2.54	20	11
1:A:78:ARG:O	1:A:79:ASN:O	0.55	2.24	2	7
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:ND2	0.55	2.40	22	5
1:A:88:TYR:CD2	1:A:90:SER:O	0.55	2.58	26	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:56:ILE:O	0.55	2.01	1	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:CG2	0.55	2.31	10	3
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HB	0.55	1.78	23	2
1:A:46:LEU:C	1:A:46:LEU:CD2	0.55	2.78	5	4
1:A:61:VAL:O	1:A:62:ASN:ND2	0.55	2.39	6	2
1:A:88:TYR:CE1	1:A:90:SER:O	0.55	2.59	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ILE:CG2	1:A:69:TYR:OH	0.55	2.54	17	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:86:THR:OG1	0.55	2.38	9	5
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:ASN:ND2	0.55	2.17	15	5
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:CB	0.55	2.54	12	5
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:N	0.55	2.17	7	2
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:ARG:CD	0.55	2.31	13	7
1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:GLN:HG2	0.55	1.79	12	3
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ARG:NE	0.55	2.39	13	1
1:A:61:VAL:CG2	3:A:202:BEF:F1	0.55	2.44	13	1
1:A:60:ASP:C	1:A:62:ASN:ND2	0.55	2.64	18	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:39:ALA:O	0.55	2.55	3	10
1:A:31:LEU:CD2	1:A:33:HIS:CE1	0.55	2.81	13	3
1:A:62:ASN:N	1:A:63:LEU:HD23	0.55	2.16	23	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:17:GLU:N	0.55	2.39	18	4
1:A:53:GLN:CG	1:A:53:GLN:O	0.55	2.54	15	1
1:A:93:LEU:O	1:A:99:ASN:ND2	0.55	2.40	9	8
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HD3	0.55	1.78	20	6
1:A:103:LEU:HD13	1:A:106:PRO:HG2	0.55	1.77	12	2
1:A:10:ARG:CB	1:A:35:VAL:O	0.55	2.54	17	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:101:PRO:O	0.55	2.55	1	3
1:A:110:SER:O	1:A:111:GLU:C	0.55	2.48	4	25
1:A:86:THR:O	1:A:89:GLY:N	0.55	2.37	6	3
1:A:13:VAL:HB	1:A:20:ILE:HD11	0.55	1.78	17	2
1:A:61:VAL:HB	3:A:202:BEF:F2	0.55	1.92	24	3
1:A:98:SER:HB2	1:A:100:ILE:CD1	0.55	2.31	16	4
1:A:79:ASN:HB2	1:A:82:PHE:CZ	0.55	2.37	18	3
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:H	0.55	1.60	21	1
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:ALA:N	0.55	2.17	6	8
1:A:86:THR:N	1:A:103:LEU:O	0.55	2.40	8	11
1:A:105:LYS:CB	3:A:202:BEF:F3	0.55	2.45	3	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD2	0.55	2.71	11	5
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HD13	0.55	1.78	8	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.55	2.80	1	6
1:A:57:ALA:C	1:A:58:ILE:CD1	0.55	2.79	8	14
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:CB	0.55	2.55	12	6
1:A:14:VAL:CG1	1:A:39:ALA:O	0.55	2.55	22	2
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:CD2	0.55	2.55	23	17
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:HG21	0.55	1.79	22	2
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:CG	0.55	2.55	14	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:110:SER:HA	0.55	2.32	24	2
1:A:10:ARG:HG2	1:A:36:ALA:N	0.55	2.16	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:THR:HG22	1:A:88:TYR:CE1	0.55	2.37	23	1
1:A:13:VAL:O	1:A:37:ALA:O	0.55	2.25	7	23
1:A:108:LEU:O	1:A:112:LEU:CD1	0.55	2.53	8	3
1:A:78:ARG:C	1:A:79:ASN:ND2	0.55	2.65	6	2
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:CG	0.55	2.54	6	2
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:CG	0.55	2.55	23	4
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ARG:NH1	0.55	2.39	11	1
1:A:15:GLU:HB3	3:A:202:BEF:F3	0.55	1.90	18	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:102:LEU:HD21	0.55	1.78	19	1
1:A:100:ILE:HB	1:A:101:PRO:HD3	0.55	1.78	11	6
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CZ	0.55	2.60	6	3
1:A:111:GLU:O	1:A:112:LEU:C	0.55	2.49	14	10
1:A:9:LEU:C	1:A:10:ARG:CD	0.55	2.80	8	3
1:A:84:PHE:HB2	1:A:93:LEU:HD12	0.55	1.79	8	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:CD1	0.55	2.31	24	2
1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:GLN:H	0.55	1.62	17	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:54:PHE:HD2	0.54	1.56	7	2
1:A:62:ASN:OD1	1:A:86:THR:CB	0.54	2.55	9	1
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:CG2	0.54	2.55	9	7
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:HD11	0.54	2.38	16	2
1:A:15:GLU:OE1	1:A:105:LYS:NZ	0.54	2.40	25	4
1:A:60:ASP:OD2	1:A:61:VAL:N	0.54	2.40	7	1
1:A:84:PHE:HB2	1:A:93:LEU:CD1	0.54	2.32	8	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:103:LEU:C	0.54	2.27	24	2
1:A:14:VAL:O	1:A:59:ILE:HA	0.54	2.03	20	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:109:ASP:OD1	0.54	2.55	21	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:ND1	0.54	2.17	22	1
1:A:60:ASP:CB	1:A:85:ALA:O	0.54	2.55	1	6
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:HB2	0.54	2.00	22	13
1:A:15:GLU:CD	1:A:15:GLU:C	0.54	2.74	2	1
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:LYS:N	0.54	2.36	14	7
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:CG1	0.54	2.54	22	6
1:A:90:SER:O	1:A:92:GLY:N	0.54	2.40	6	3
1:A:61:VAL:HB	3:A:202:BEF:F1	0.54	1.91	16	3
1:A:103:LEU:CB	1:A:110:SER:OG	0.54	2.55	25	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:HD12	0.54	2.02	26	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:60:ASP:OD1	0.54	2.02	18	8
1:A:51:LYS:HG2	1:A:54:PHE:HB3	0.54	1.79	10	8
1:A:62:ASN:ND2	1:A:67:PRO:O	0.54	2.40	4	1
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:HB	0.54	2.03	18	4
1:A:10:ARG:CG	1:A:35:VAL:O	0.54	2.56	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ARG:HG2	1:A:36:ALA:HB2	0.54	1.78	26	2
1:A:24:ILE:HD12	1:A:38:THR:HG23	0.54	1.79	22	1
1:A:86:THR:HG23	1:A:87:GLY:N	0.54	2.17	23	1
1:A:113:GLU:O	1:A:114:ALA:C	0.54	2.51	23	8
1:A:79:ASN:HB3	1:A:82:PHE:CE1	0.54	2.36	4	8
1:A:113:GLU:CG	1:A:117:VAL:HG21	0.54	2.33	9	1
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:CD2	0.54	2.68	17	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HB2	0.54	2.03	18	3
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:CB	0.54	2.56	21	1
1:A:12:LEU:HD21	1:A:54:PHE:HB2	0.54	1.79	1	1
1:A:26:ASP:CG	1:A:27:THR:N	0.54	2.65	16	19
1:A:91:LYS:C	1:A:91:LYS:CD	0.54	2.80	3	1
1:A:79:ASN:CB	1:A:82:PHE:CZ	0.54	2.90	11	4
1:A:99:ASN:O	1:A:102:LEU:HD11	0.54	2.03	16	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:110:SER:CB	0.54	2.33	20	1
1:A:104:THR:HG22	1:A:105:LYS:H	0.54	1.60	20	1
1:A:92:GLY:O	1:A:93:LEU:C	0.54	2.51	21	16
1:A:10:ARG:HD2	1:A:33:HIS:HB3	0.54	1.80	15	4
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CD2	0.54	2.60	24	2
1:A:59:ILE:HG12	1:A:72:ALA:HB2	0.54	1.80	15	1
1:A:91:LYS:CG	1:A:91:LYS:O	0.54	2.56	22	1
1:A:9:LEU:C	1:A:10:ARG:HD3	0.54	2.27	8	3
1:A:13:VAL:HB	1:A:24:ILE:HD11	0.54	1.79	25	2
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:CD	0.54	2.56	7	3
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:CB	0.54	2.56	10	2
1:A:61:VAL:N	1:A:86:THR:OG1	0.54	2.41	23	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:34:GLU:HB3	0.54	2.17	1	4
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:NZ	0.54	2.40	8	2
1:A:54:PHE:CZ	1:A:75:LEU:HD21	0.54	2.38	15	1
1:A:104:THR:C	1:A:106:PRO:HD3	0.54	2.28	2	6
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:CD1	0.54	2.78	3	7
1:A:56:ILE:CG2	1:A:83:ILE:HB	0.54	2.33	26	12
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CD2	0.54	2.71	24	6
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CG	0.54	2.51	7	4
1:A:44:GLU:O	1:A:48:ILE:CG2	0.54	2.56	12	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:CE1	0.54	2.38	19	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:33:HIS:HB3	0.53	2.33	6	3
1:A:49:ALA:CA	1:A:75:LEU:HD13	0.53	2.33	6	4
1:A:108:LEU:C	1:A:112:LEU:HD12	0.53	2.28	3	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:61:VAL:HG21	0.53	2.03	12	2
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HG	0.53	2.02	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ASN:H	1:A:63:LEU:HD23	0.53	1.63	5	3
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:HG21	0.53	2.33	6	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HG2	0.53	2.33	8	2
1:A:98:SER:HB2	1:A:100:ILE:HD11	0.53	1.81	10	3
1:A:107:PHE:CD1	1:A:107:PHE:N	0.53	2.76	22	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:33:HIS:CE1	0.53	2.83	23	5
1:A:97:TYR:CD1	1:A:97:TYR:N	0.53	2.74	1	18
1:A:84:PHE:CE2	1:A:86:THR:CG2	0.53	2.91	3	2
1:A:90:SER:CB	1:A:93:LEU:HD22	0.53	2.33	6	1
1:A:116:LEU:O	1:A:118:GLN:N	0.53	2.40	8	2
1:A:83:ILE:HG12	1:A:97:TYR:CE2	0.53	2.38	9	5
1:A:24:ILE:O	1:A:28:LEU:CG	0.53	2.57	18	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:110:SER:CB	0.53	2.32	21	2
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:CG1	0.53	2.56	22	1
1:A:86:THR:HG22	1:A:88:TYR:CD1	0.53	2.37	23	1
1:A:12:LEU:O	1:A:57:ALA:HA	0.53	2.04	18	21
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:C	0.53	2.51	2	3
1:A:105:LYS:HE3	3:A:202:BEF:F3	0.53	1.93	15	2
1:A:108:LEU:N	1:A:112:LEU:HD12	0.53	2.18	11	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:HB	0.53	1.79	24	3
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:CD	0.53	2.71	22	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:110:SER:C	0.53	2.81	26	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:HD12	0.53	2.28	3	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:48:ILE:HA	0.53	1.79	8	3
1:A:109:ASP:H	1:A:112:LEU:HD12	0.53	1.62	5	1
1:A:62:ASN:CB	1:A:86:THR:OG1	0.53	2.56	6	4
1:A:66:GLU:HG3	1:A:68:SER:OG	0.53	2.03	6	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:105:LYS:HE3	0.53	1.79	21	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:CG	0.53	2.34	21	1
1:A:98:SER:HB2	1:A:100:ILE:HD12	0.53	1.79	23	1
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:CD1	0.53	2.32	19	6
1:A:71:VAL:CG2	1:A:72:ALA:N	0.53	2.70	13	11
1:A:78:ARG:HG3	1:A:79:ASN:N	0.53	2.19	8	4
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:O	0.53	2.03	3	4
1:A:62:ASN:ND2	1:A:66:GLU:OE2	0.53	2.41	6	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:ALA:CB	0.53	2.56	15	5
1:A:84:PHE:H	1:A:102:LEU:HD22	0.53	1.63	19	1
1:A:28:LEU:O	1:A:32:GLY:N	0.53	2.40	15	17
1:A:10:ARG:CZ	1:A:33:HIS:CB	0.53	2.87	6	2
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CD1	0.53	2.61	4	2
1:A:51:LYS:O	1:A:53:GLN:N	0.53	2.42	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:HG23	0.53	2.27	10	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:11:VAL:HG22	0.53	2.18	17	1
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:HD2	0.53	2.19	22	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:102:LEU:HD12	0.53	1.80	24	1
1:A:105:LYS:HE3	3:A:202:BEF:F1	0.53	1.92	2	1
1:A:87:GLY:O	1:A:88:TYR:HB3	0.53	2.04	3	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:13:VAL:HG23	0.53	1.80	5	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:ALA:N	0.53	2.42	7	4
1:A:11:VAL:HG12	1:A:33:HIS:ND1	0.53	2.19	16	1
1:A:100:ILE:N	1:A:101:PRO:HD2	0.53	2.19	16	5
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:HD12	0.53	2.29	21	1
1:A:109:ASP:C	1:A:112:LEU:HD11	0.53	2.28	26	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:C	0.53	2.51	8	3
1:A:12:LEU:HB2	1:A:48:ILE:CG2	0.53	2.34	21	6
1:A:34:GLU:C	1:A:35:VAL:CG2	0.53	2.81	7	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:HB2	0.53	2.31	9	3
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:CD1	0.53	2.53	17	3
1:A:62:ASN:OD1	1:A:86:THR:CG2	0.53	2.54	20	1
1:A:10:ARG:NH2	1:A:33:HIS:CB	0.53	2.71	25	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:N	0.53	2.41	25	10
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:CG1	0.53	2.56	20	7
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:HG13	0.53	2.34	22	12
1:A:78:ARG:O	1:A:94:ASP:OD1	0.53	2.27	2	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:101:PRO:CG	0.53	2.32	4	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:35:VAL:O	0.53	2.41	7	1
1:A:113:GLU:HG2	1:A:117:VAL:HG21	0.53	1.80	9	1
1:A:100:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG21	0.53	1.81	20	2
1:A:105:LYS:HE3	3:A:202:BEF:F2	0.53	1.92	15	2
1:A:9:LEU:CB	1:A:55:ASP:OD1	0.53	2.57	17	1
1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HD22	0.53	1.63	20	1
1:A:49:ALA:HA	1:A:75:LEU:HD11	0.53	1.81	21	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:CB	0.53	2.55	20	6
1:A:84:PHE:CE2	1:A:86:THR:HG21	0.53	2.39	3	1
1:A:61:VAL:O	1:A:67:PRO:HG2	0.53	2.03	4	2
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CA	0.53	2.57	4	4
1:A:13:VAL:HG22	1:A:37:ALA:O	0.53	2.04	16	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:33:HIS:ND1	0.53	2.72	16	2
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:ILE:HD12	0.53	2.34	16	2
1:A:100:ILE:CD1	1:A:117:VAL:CG2	0.53	2.86	26	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:36:ALA:HB1	0.52	2.34	1	3
1:A:15:GLU:HB3	1:A:60:ASP:CG	0.52	2.30	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:PRO:HD2	1:A:110:SER:CB	0.52	2.34	25	5
1:A:15:GLU:HG3	1:A:16:ASP:N	0.52	2.18	18	1
1:A:56:ILE:CG2	1:A:58:ILE:CD1	0.52	2.87	25	1
1:A:113:GLU:CD	1:A:117:VAL:CG2	0.52	2.81	4	1
1:A:105:LYS:HE2	3:A:202:BEF:F1	0.52	1.93	8	1
1:A:100:ILE:HB	1:A:117:VAL:HG11	0.52	1.80	10	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:110:SER:CA	0.52	2.34	21	1
1:A:55:ASP:O	1:A:82:PHE:CB	0.52	2.56	24	1
1:A:110:SER:O	1:A:112:LEU:N	0.52	2.42	16	7
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:CG	0.52	2.57	4	3
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:CD2	0.52	2.73	8	1
1:A:67:PRO:C	1:A:69:TYR:CE1	0.52	2.88	8	1
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CZ	0.52	2.55	10	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:61:VAL:CG2	0.52	2.55	11	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:56:ILE:HD12	0.52	1.81	17	2
1:A:28:LEU:CA	1:A:33:HIS:NE2	0.52	2.72	19	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:110:SER:O	0.52	2.57	22	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:28:LEU:CD1	0.52	2.72	26	1
1:A:62:ASN:CG	1:A:86:THR:OG1	0.52	2.52	3	5
1:A:79:ASN:CG	1:A:94:ASP:O	0.52	2.53	8	1
1:A:93:LEU:O	1:A:99:ASN:CG	0.52	2.53	9	3
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:ASP:CG	0.52	2.52	21	3
1:A:76:ALA:HB3	1:A:91:LYS:CE	0.52	2.33	6	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:96:ARG:N	0.52	2.19	9	2
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:HE2	0.52	1.62	11	1
1:A:48:ILE:HD13	1:A:59:ILE:HD11	0.52	1.76	17	1
1:A:54:PHE:C	1:A:55:ASP:OD1	0.52	2.51	17	2
1:A:24:ILE:HG13	1:A:36:ALA:HB3	0.52	1.82	19	1
1:A:55:ASP:C	1:A:56:ILE:CG1	0.52	2.82	7	7
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLY:N	0.52	2.72	21	2
1:A:103:LEU:HG	1:A:104:THR:N	0.52	2.19	20	3
1:A:80:VAL:O	1:A:95:THR:OG1	0.52	2.27	21	4
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:C	0.52	2.53	26	3
1:A:103:LEU:HD22	1:A:104:THR:CG2	0.52	2.35	13	1
1:A:117:VAL:CG1	1:A:118:GLN:N	0.52	2.72	13	1
1:A:113:GLU:O	1:A:115:VAL:N	0.52	2.42	17	1
1:A:60:ASP:O	1:A:62:ASN:ND2	0.52	2.43	26	2
1:A:103:LEU:HD12	1:A:106:PRO:CD	0.52	2.35	23	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:CE	0.52	2.34	24	1
1:A:91:LYS:HG2	1:A:92:GLY:N	0.52	2.19	16	3
1:A:86:THR:C	1:A:104:THR:OG1	0.52	2.53	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLY:C	1:A:66:GLU:CG	0.52	2.81	25	2
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:CG	0.52	2.53	23	2
1:A:61:VAL:CB	3:A:202:BEF:F1	0.52	2.48	16	2
1:A:11:VAL:HG11	1:A:28:LEU:HD22	0.52	1.80	14	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:HB2	0.52	1.79	14	1
1:A:14:VAL:O	1:A:60:ASP:OD1	0.52	2.27	18	1
1:A:28:LEU:HA	1:A:33:HIS:NE2	0.52	2.20	19	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:69:TYR:CE2	0.52	2.40	26	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:N	0.52	2.42	21	5
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:GLU:N	0.52	2.19	26	6
1:A:106:PRO:HG2	1:A:107:PHE:CE1	0.52	2.39	3	1
1:A:10:ARG:HH21	1:A:11:VAL:HG22	0.52	1.64	25	2
1:A:101:PRO:CB	1:A:117:VAL:HG21	0.52	2.32	16	4
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HG3	0.52	2.05	20	1
1:A:104:THR:CG2	1:A:105:LYS:N	0.52	2.70	20	1
1:A:66:GLU:OE1	1:A:66:GLU:HA	0.52	2.03	1	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:GLU:C	0.52	2.52	22	13
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:CB	0.52	2.58	15	4
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:CB	0.52	2.58	20	5
1:A:20:ILE:HD12	1:A:105:LYS:CE	0.52	2.34	11	1
1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:OE1	0.52	2.57	14	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:40:SER:HA	0.52	2.33	16	1
1:A:100:ILE:H	1:A:102:LEU:HD21	0.52	1.62	18	1
1:A:20:ILE:HG23	1:A:39:ALA:H	0.52	1.65	3	7
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HE2	0.52	1.82	7	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:33:HIS:HB2	0.52	1.82	8	1
1:A:10:ARG:HG3	1:A:35:VAL:O	0.52	2.04	17	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:C	0.52	2.30	24	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:CD	0.51	2.52	2	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HB3	0.51	2.05	20	10
1:A:79:ASN:HB2	1:A:82:PHE:CE1	0.51	2.40	11	2
1:A:105:LYS:HG3	1:A:107:PHE:CE1	0.51	2.39	14	1
1:A:85:ALA:HB2	1:A:103:LEU:HD12	0.51	1.82	22	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:OD1	0.51	2.06	24	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:28:LEU:HD12	0.51	2.34	26	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HB3	0.51	2.05	16	6
1:A:31:LEU:HB3	1:A:33:HIS:CD2	0.51	2.40	8	1
1:A:74:ILE:HG22	1:A:78:ARG:HD3	0.51	1.83	10	1
1:A:112:LEU:C	1:A:116:LEU:CD2	0.51	2.83	12	1
1:A:13:VAL:C	1:A:20:ILE:HD11	0.51	2.30	19	2
1:A:98:SER:HB3	1:A:100:ILE:HG23	0.51	1.82	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:N	0.51	2.42	17	1
1:A:90:SER:O	1:A:90:SER:OG	0.51	2.28	23	1
1:A:55:ASP:O	1:A:81:PRO:O	0.51	2.28	9	6
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:HB	0.51	1.82	11	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:HB	0.51	2.35	24	3
1:A:10:ARG:N	1:A:10:ARG:HD3	0.51	2.21	21	1
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:CA	0.51	2.59	2	3
1:A:101:PRO:O	1:A:103:LEU:CD2	0.51	2.55	10	1
1:A:59:ILE:HD13	1:A:72:ALA:CB	0.51	2.29	25	3
1:A:12:LEU:HD13	1:A:37:ALA:CB	0.51	2.34	17	1
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:CZ	0.51	2.41	17	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:33:HIS:CE1	0.51	2.41	23	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:ALA:N	0.51	2.43	7	8
1:A:46:LEU:CD1	1:A:50:ARG:HD3	0.51	2.35	4	4
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:O	0.51	2.28	21	2
1:A:53:GLN:O	1:A:54:PHE:C	0.51	2.52	2	3
1:A:113:GLU:HB2	1:A:117:VAL:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:77:GLU:O	0.51	2.28	5	1
1:A:20:ILE:C	1:A:38:THR:OG1	0.51	2.54	11	1
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:HG3	0.51	2.05	20	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:C	0.51	2.84	21	2
1:A:114:ALA:O	1:A:118:GLN:NE2	0.51	2.44	1	2
1:A:15:GLU:HG3	1:A:20:ILE:CG2	0.51	2.35	5	5
1:A:53:GLN:O	1:A:54:PHE:O	0.51	2.29	6	2
1:A:107:PHE:C	1:A:108:LEU:HG	0.51	2.30	23	2
1:A:98:SER:HB3	1:A:100:ILE:CD1	0.51	2.36	25	5
1:A:24:ILE:O	1:A:27:THR:HG22	0.51	2.06	19	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:THR:OG1	0.51	2.29	12	3
1:A:116:LEU:O	1:A:117:VAL:C	0.51	2.51	13	5
1:A:88:TYR:CZ	1:A:90:SER:CA	0.51	2.93	7	1
1:A:11:VAL:C	1:A:36:ALA:HB3	0.51	2.31	9	1
1:A:117:VAL:O	1:A:118:GLN:C	0.51	2.54	17	2
1:A:105:LYS:HG2	1:A:107:PHE:CE1	0.51	2.40	17	1
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ARG:HD3	0.51	2.06	22	6
1:A:10:ARG:CB	1:A:55:ASP:OD2	0.51	2.59	2	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:17:GLU:CG	0.51	2.36	2	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:60:ASP:OD2	0.51	2.06	4	6
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:OG	0.51	2.29	22	5
1:A:106:PRO:C	1:A:107:PHE:CD1	0.51	2.89	3	2
1:A:105:LYS:HD2	3:A:202:BEF:F2	0.51	1.94	26	2
1:A:58:ILE:O	1:A:58:ILE:HG22	0.51	2.05	20	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:CB	0.51	2.59	10	3
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:C	0.51	2.52	22	1
1:A:55:ASP:O	1:A:82:PHE:CA	0.51	2.58	24	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD1	0.51	2.64	1	1
1:A:60:ASP:O	1:A:61:VAL:O	0.51	2.29	5	3
1:A:14:VAL:HG23	1:A:59:ILE:HA	0.51	1.81	2	2
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:OG1	0.51	2.29	6	4
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:N	0.51	2.21	2	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:54:PHE:C	0.51	2.86	10	4
1:A:100:ILE:CD1	1:A:117:VAL:HB	0.51	2.36	5	2
1:A:90:SER:OG	1:A:102:LEU:HD13	0.51	2.06	8	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HG	0.51	2.06	14	1
1:A:10:ARG:NH2	1:A:34:GLU:OE2	0.51	2.43	1	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:HB2	0.51	2.05	16	5
1:A:10:ARG:NH1	1:A:33:HIS:CB	0.51	2.74	6	2
1:A:59:ILE:HD13	1:A:69:TYR:CE2	0.51	2.41	3	1
1:A:85:ALA:C	1:A:103:LEU:O	0.51	2.54	6	3
1:A:78:ARG:C	1:A:79:ASN:CG	0.51	2.78	17	3
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:HB3	0.51	2.06	14	2
1:A:78:ARG:CG	1:A:78:ARG:O	0.51	2.57	22	2
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:HA	0.51	1.83	9	1
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:N	0.51	2.39	24	6
1:A:31:LEU:HB3	1:A:33:HIS:CE1	0.51	2.41	20	1
1:A:59:ILE:HG12	1:A:84:PHE:CE2	0.51	2.40	21	1
1:A:50:ARG:HD2	1:A:50:ARG:N	0.51	2.19	25	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:CG2	0.50	2.36	21	7
1:A:106:PRO:HA	1:A:110:SER:HB3	0.50	1.83	3	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:TYR:HB2	0.50	1.84	15	4
1:A:10:ARG:CZ	1:A:34:GLU:HB2	0.50	2.37	11	2
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CD1	0.50	2.56	11	2
1:A:112:LEU:O	1:A:115:VAL:N	0.50	2.43	14	2
1:A:82:PHE:HZ	1:A:93:LEU:HD12	0.50	1.63	22	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HZ1	0.50	1.67	1	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:C	0.50	2.31	12	9
1:A:84:PHE:CD1	1:A:85:ALA:N	0.50	2.79	5	1
1:A:73:ASP:O	1:A:76:ALA:N	0.50	2.42	9	5
1:A:28:LEU:CD2	1:A:33:HIS:N	0.50	2.74	8	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:CB	0.50	2.36	15	1
1:A:98:SER:C	1:A:99:ASN:CG	0.50	2.77	16	2
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:CD2	0.50	2.34	24	1
1:A:20:ILE:O	1:A:20:ILE:CG1	0.50	2.60	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:VAL:HB	1:A:40:SER:HA	0.50	1.83	7	17
1:A:79:ASN:HB3	1:A:82:PHE:CZ	0.50	2.41	12	6
1:A:99:ASN:ND2	1:A:99:ASN:N	0.50	2.56	4	3
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:N	0.50	2.22	3	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:HE1	0.50	1.63	6	3
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:CG2	0.50	2.57	8	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:91:LYS:CB	0.50	2.95	17	1
1:A:76:ALA:CB	1:A:91:LYS:HE3	0.50	2.34	6	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:33:HIS:ND1	0.50	2.22	20	4
1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:HD2	0.50	2.20	16	1
1:A:71:VAL:CG1	1:A:72:ALA:N	0.50	2.74	22	1
1:A:87:GLY:O	1:A:104:THR:OG1	0.50	2.28	24	1
1:A:100:ILE:N	1:A:102:LEU:HD21	0.50	2.22	3	2
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:N	0.50	2.44	26	11
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HD2	0.50	1.84	10	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:106:PRO:HD3	0.50	2.37	11	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:34:GLU:HB2	0.50	2.21	5	4
1:A:15:GLU:OE1	1:A:17:GLU:N	0.50	2.44	26	4
1:A:103:LEU:CD1	1:A:110:SER:OG	0.50	2.56	7	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:CA	0.50	2.28	9	1
1:A:89:GLY:C	1:A:102:LEU:HD23	0.50	2.31	11	1
1:A:62:ASN:C	1:A:62:ASN:ND2	0.50	2.69	24	2
1:A:15:GLU:OE1	1:A:60:ASP:OD2	0.50	2.30	18	1
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:HB2	0.50	2.07	20	2
1:A:23:LEU:HD11	1:A:111:GLU:CD	0.50	2.31	1	1
1:A:31:LEU:HB2	1:A:33:HIS:CE1	0.50	2.42	19	2
1:A:79:ASN:OD1	1:A:95:THR:CA	0.50	2.60	8	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:O	0.50	2.30	9	3
1:A:14:VAL:HG12	1:A:59:ILE:HA	0.50	1.83	11	1
1:A:64:ASP:O	1:A:64:ASP:CG	0.50	2.54	12	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:117:VAL:HG22	0.50	1.83	13	1
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:CD2	0.50	2.37	16	2
1:A:98:SER:CB	1:A:100:ILE:HD12	0.50	2.35	25	2
1:A:60:ASP:CB	1:A:105:LYS:HD2	0.50	2.36	18	1
1:A:80:VAL:C	1:A:95:THR:OG1	0.50	2.54	21	1
1:A:118:GLN:NE2	1:A:118:GLN:CA	0.50	2.75	23	1
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:CD2	0.50	2.36	17	5
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HG2	0.50	2.07	3	1
1:A:75:LEU:C	1:A:79:ASN:ND2	0.50	2.70	4	2
1:A:62:ASN:HA	1:A:66:GLU:CD	0.50	2.32	6	1
1:A:76:ALA:O	1:A:77:GLU:C	0.50	2.54	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:GLU:HG3	1:A:117:VAL:CG2	0.50	2.37	9	2
1:A:24:ILE:CG1	1:A:36:ALA:HB1	0.50	2.34	17	2
1:A:32:GLY:O	1:A:33:HIS:C	0.50	2.55	21	6
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:CB	0.50	2.60	20	2
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:HG	0.50	2.32	15	4
1:A:75:LEU:CD2	1:A:79:ASN:OD1	0.50	2.59	9	1
1:A:93:LEU:O	1:A:99:ASN:OD1	0.50	2.30	24	5
1:A:65:GLY:C	1:A:66:GLU:HG2	0.50	2.31	25	2
1:A:98:SER:HB3	1:A:100:ILE:CG1	0.49	2.37	1	4
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:OG1	0.49	2.30	3	1
1:A:16:ASP:N	1:A:40:SER:HB3	0.49	2.21	13	7
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:HD3	0.49	2.32	14	8
1:A:93:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD12	0.49	2.37	5	1
1:A:34:GLU:OE1	1:A:35:VAL:CG1	0.49	2.56	6	1
1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:HD1	0.49	2.03	7	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:67:PRO:O	0.49	2.60	8	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:86:THR:OG1	0.49	2.30	9	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:34:GLU:CB	0.49	2.90	11	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:LEU:HG	0.49	2.07	18	2
1:A:15:GLU:CD	1:A:61:VAL:HB	0.49	2.32	18	2
1:A:23:LEU:O	1:A:27:THR:CG2	0.49	2.59	22	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:16:ASP:OD2	0.49	2.30	2	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HG12	0.49	2.06	12	7
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:N	0.49	2.68	8	1
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:CG	0.49	2.60	25	2
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:CG2	0.49	2.57	16	2
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD13	0.49	2.22	13	1
1:A:109:ASP:C	1:A:109:ASP:OD1	0.49	2.54	15	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:C	0.49	2.54	22	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:105:LYS:HD3	0.49	1.83	23	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:CB	0.49	2.37	24	1
1:A:17:GLU:C	1:A:17:GLU:OE1	0.49	2.56	1	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ASP:OD1	0.49	2.30	24	11
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:ASN:OD1	0.49	2.08	12	4
1:A:103:LEU:HD11	1:A:110:SER:HA	0.49	1.85	3	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:CG	0.49	2.56	5	3
1:A:68:SER:O	1:A:72:ALA:CB	0.49	2.60	14	5
1:A:59:ILE:HG12	1:A:69:TYR:CZ	0.49	2.43	8	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HD2	0.49	1.84	11	1
1:A:103:LEU:O	1:A:104:THR:O	0.49	2.29	14	3
1:A:54:PHE:CE1	1:A:80:VAL:CG2	0.49	2.95	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:ASP:C	0.49	2.55	20	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:C	0.49	2.55	13	6
1:A:105:LYS:HB2	1:A:107:PHE:CD1	0.49	2.42	3	2
1:A:79:ASN:O	1:A:95:THR:HG22	0.49	2.07	6	1
1:A:88:TYR:CZ	1:A:90:SER:HA	0.49	2.42	7	1
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:CG	0.49	2.66	9	2
1:A:51:LYS:HG3	1:A:54:PHE:N	0.49	2.22	15	2
1:A:105:LYS:HG2	3:A:202:BEF:F1	0.49	1.96	10	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:85:ALA:C	0.49	2.31	14	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:HB3	0.49	2.42	24	1
1:A:102:LEU:O	1:A:113:GLU:CD	0.49	2.56	26	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:HIS:O	0.49	2.30	17	17
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:N	0.49	2.78	6	21
1:A:101:PRO:HB3	1:A:117:VAL:CG2	0.49	2.34	23	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:46:LEU:O	0.49	2.07	4	2
1:A:9:LEU:HB3	1:A:33:HIS:CD2	0.49	2.42	9	2
1:A:60:ASP:C	1:A:61:VAL:CG1	0.49	2.85	7	3
1:A:10:ARG:NE	1:A:36:ALA:N	0.49	2.60	15	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:28:LEU:HB2	0.49	2.37	20	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:HA	0.49	2.43	1	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:113:GLU:N	0.49	2.70	1	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:LEU:C	0.49	2.56	24	10
1:A:21:ALA:CA	1:A:38:THR:HG23	0.49	2.37	10	2
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:OD2	0.49	2.31	17	4
1:A:100:ILE:HB	1:A:101:PRO:CD	0.49	2.36	11	2
1:A:103:LEU:CD2	1:A:106:PRO:HD2	0.49	2.33	14	2
1:A:10:ARG:CG	1:A:33:HIS:HB3	0.49	2.37	17	1
1:A:47:ASP:O	1:A:48:ILE:C	0.49	2.54	17	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:68:SER:CB	0.49	2.60	22	2
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:HB2	0.49	2.06	21	13
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:N	0.49	2.45	2	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:GLU:C	0.49	2.31	26	4
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ASP:OD2	0.49	2.31	4	5
1:A:11:VAL:HG13	1:A:36:ALA:CB	0.49	2.37	5	1
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:N	0.49	2.22	7	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:N	0.49	2.44	23	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:CZ	0.49	2.42	19	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:CD2	0.49	2.82	21	5
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:CD	0.49	2.38	16	6
1:A:69:TYR:CB	1:A:70:PRO:HD2	0.49	2.38	22	13
1:A:100:ILE:CB	1:A:101:PRO:HD3	0.49	2.37	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:CE2	1:A:84:PHE:HB2	0.49	2.42	4	2
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:CG	0.49	2.85	4	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HG	0.49	2.07	6	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:61:VAL:HG21	0.49	2.08	21	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:HG12	0.49	2.08	15	3
1:A:71:VAL:O	1:A:75:LEU:HB2	0.49	2.08	6	10
1:A:62:ASN:CG	1:A:68:SER:CB	0.49	2.86	4	1
1:A:66:GLU:HB3	1:A:67:PRO:HD3	0.49	1.83	4	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:70:PRO:HD2	0.49	1.85	25	5
1:A:16:ASP:C	1:A:17:GLU:HG3	0.49	2.33	23	3
1:A:58:ILE:HG23	1:A:85:ALA:N	0.49	2.22	6	2
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HB3	0.49	2.07	6	2
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HG13	0.49	2.32	7	4
1:A:100:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG23	0.49	1.81	8	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:CD1	0.49	2.95	10	3
1:A:49:ALA:O	1:A:50:ARG:C	0.49	2.55	13	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:C	0.49	2.56	21	14
1:A:79:ASN:C	1:A:95:THR:CG2	0.49	2.86	6	1
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:CD2	0.49	2.61	7	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:N	0.49	2.23	16	3
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:HB2	0.49	2.36	17	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:N	0.49	2.45	18	1
1:A:83:ILE:HG12	1:A:97:TYR:CD2	0.48	2.43	25	3
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:HB2	0.48	2.08	6	6
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:CB	0.48	2.58	5	7
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HG2	0.48	2.08	4	3
1:A:79:ASN:O	1:A:95:THR:CG2	0.48	2.61	6	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:CYS:C	0.48	2.56	7	4
1:A:51:LYS:CB	1:A:54:PHE:HB3	0.48	2.38	7	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:68:SER:HA	0.48	2.38	13	6
1:A:79:ASN:O	1:A:94:ASP:OD1	0.48	2.30	19	2
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:O	0.48	2.30	12	4
1:A:89:GLY:C	1:A:90:SER:OG	0.48	2.56	4	4
1:A:106:PRO:HA	1:A:110:SER:CB	0.48	2.38	3	1
1:A:110:SER:O	1:A:113:GLU:N	0.48	2.46	4	3
1:A:94:ASP:CG	1:A:94:ASP:O	0.48	2.57	6	1
1:A:77:GLU:CG	1:A:78:ARG:N	0.48	2.76	8	2
1:A:77:GLU:HG2	1:A:78:ARG:N	0.48	2.23	8	1
1:A:27:THR:O	1:A:31:LEU:HD12	0.48	2.08	15	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:71:VAL:HG13	0.48	1.85	17	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:48:ILE:HG22	0.48	2.37	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASP:OD1	1:A:17:GLU:OE2	0.48	2.31	25	1
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:HD13	0.48	2.37	1	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:105:LYS:HD2	0.48	2.09	20	2
1:A:69:TYR:CB	1:A:70:PRO:CD	0.48	2.90	15	6
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HD12	0.48	2.32	2	1
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ALA:C	0.48	2.54	6	19
1:A:91:LYS:HD3	1:A:91:LYS:O	0.48	2.08	3	1
1:A:111:GLU:CD	1:A:112:LEU:CD2	0.48	2.84	14	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:GLY:C	0.48	2.55	21	2
1:A:10:ARG:NH2	1:A:35:VAL:O	0.48	2.45	16	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:55:ASP:OD1	0.48	2.08	17	1
1:A:53:GLN:O	1:A:55:ASP:N	0.48	2.46	18	2
1:A:59:ILE:O	1:A:62:ASN:ND2	0.48	2.35	18	1
1:A:69:TYR:CD1	1:A:71:VAL:HG13	0.48	2.43	18	1
1:A:10:ARG:CG	1:A:35:VAL:C	0.48	2.86	20	1
1:A:106:PRO:CB	1:A:111:GLU:HB2	0.48	2.37	22	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:CB	0.48	2.38	25	1
1:A:18:SER:O	1:A:19:MET:C	0.48	2.56	11	6
1:A:62:ASN:N	1:A:86:THR:HG1	0.48	2.06	6	1
1:A:28:LEU:CB	1:A:33:HIS:HB2	0.48	2.38	9	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:O	0.48	2.31	10	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HG23	0.48	2.32	12	2
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:GLU:CD	0.48	2.82	12	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:36:ALA:HB3	0.48	1.85	13	2
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HB2	0.48	1.85	19	2
1:A:100:ILE:C	1:A:102:LEU:HD13	0.48	2.33	20	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:HB2	0.48	2.08	21	1
1:A:23:LEU:HA	1:A:26:ASP:OD2	0.48	2.09	19	2
1:A:86:THR:HG23	1:A:88:TYR:HE1	0.48	1.69	17	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:13:VAL:HG13	0.48	1.85	24	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:53:GLN:CG	0.48	2.38	25	1
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ARG:CD	0.48	2.62	13	2
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HB	0.48	2.07	6	11
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:CG1	0.48	2.92	7	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.48	2.73	12	1
1:A:16:ASP:O	1:A:16:ASP:CG	0.48	2.57	22	2
1:A:31:LEU:HB2	1:A:33:HIS:ND1	0.48	2.23	19	1
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:CA	0.48	2.38	20	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:72:ALA:CB	0.48	2.38	21	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:99:ASN:HA	0.48	1.85	22	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:OD1	0.48	2.31	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASP:OD2	1:A:61:VAL:HG11	0.48	2.09	26	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:ASN:OD1	0.48	2.31	16	5
1:A:84:PHE:HB3	1:A:90:SER:CB	0.48	2.37	6	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:40:SER:CA	0.48	2.33	9	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:63:LEU:H	0.48	1.66	10	1
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:CD	0.48	2.39	10	4
1:A:107:PHE:C	1:A:108:LEU:CG	0.48	2.87	23	2
1:A:97:TYR:C	1:A:98:SER:OG	0.48	2.56	12	4
1:A:61:VAL:HG21	3:A:202:BEF:F1	0.48	1.98	13	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:28:LEU:CD1	0.48	2.38	14	1
1:A:13:VAL:HG23	1:A:20:ILE:HD11	0.48	1.85	16	1
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:CD1	0.48	2.76	18	2
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:O	0.48	2.31	1	1
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CD	0.48	2.72	1	1
1:A:66:GLU:OE1	1:A:66:GLU:CA	0.48	2.61	1	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:85:ALA:O	0.48	2.09	7	7
1:A:78:ARG:C	1:A:79:ASN:OD1	0.48	2.57	2	2
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:CB	0.48	2.92	7	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:31:LEU:N	0.48	2.23	20	1
1:A:88:TYR:CZ	1:A:90:SER:HB3	0.48	2.43	24	1
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:OG	0.48	2.31	7	6
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HB2	0.48	2.09	2	14
1:A:75:LEU:HD23	1:A:79:ASN:HD21	0.48	1.69	4	1
1:A:113:GLU:CD	1:A:117:VAL:HG21	0.48	2.34	4	1
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:HB3	0.48	2.09	7	4
1:A:10:ARG:NH2	1:A:53:GLN:O	0.48	2.47	9	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:80:VAL:CG1	0.48	2.97	9	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:C	0.48	2.56	10	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:GLU:HB2	0.48	2.24	11	1
1:A:19:MET:HE3	1:A:107:PHE:HE2	0.48	1.67	11	1
1:A:105:LYS:CG	3:A:202:BEF:F3	0.48	2.51	14	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:97:TYR:CE2	0.48	2.97	15	1
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:CD1	0.48	2.22	25	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:HD2	0.48	1.86	1	7
1:A:89:GLY:CA	1:A:103:LEU:CA	0.48	2.91	3	1
1:A:109:ASP:O	1:A:109:ASP:CG	0.48	2.56	8	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HG12	0.48	2.09	9	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:59:ILE:HG13	0.48	1.86	22	2
1:A:21:ALA:CA	1:A:38:THR:HB	0.48	2.39	17	3
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:HD23	0.48	2.39	23	2
1:A:26:ASP:O	1:A:29:CYS:SG	0.48	2.72	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LYS:C	1:A:53:GLN:N	0.48	2.69	21	1
1:A:27:THR:O	1:A:30:GLU:HG3	0.48	2.08	22	2
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:HB2	0.47	2.07	7	2
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:HD23	0.47	2.09	2	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:O	0.47	2.62	2	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:CB	0.47	2.39	23	2
1:A:105:LYS:O	1:A:110:SER:CB	0.47	2.61	3	1
1:A:59:ILE:CG1	1:A:72:ALA:HB2	0.47	2.39	17	2
1:A:98:SER:CB	1:A:100:ILE:HG13	0.47	2.39	5	1
1:A:59:ILE:CG1	1:A:69:TYR:OH	0.47	2.61	8	1
1:A:24:ILE:O	1:A:27:THR:CG2	0.47	2.62	19	1
1:A:28:LEU:HB2	1:A:33:HIS:NE2	0.47	2.24	19	1
1:A:49:ALA:CB	1:A:71:VAL:CG1	0.47	2.92	25	2
1:A:16:ASP:CG	1:A:16:ASP:O	0.47	2.55	20	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:105:LYS:CE	0.47	2.62	20	1
1:A:15:GLU:O	1:A:15:GLU:CG	0.47	2.62	22	2
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:HG23	0.47	1.85	22	1
1:A:60:ASP:CG	3:A:202:BEF:F2	0.47	2.47	23	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:54:PHE:HB2	0.47	1.86	26	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:48:ILE:HG22	0.47	1.86	7	4
1:A:15:GLU:OE1	1:A:61:VAL:HB	0.47	2.08	2	2
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD1	0.47	2.81	10	2
1:A:91:LYS:HD2	1:A:92:GLY:N	0.47	2.23	8	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:CD	0.47	2.57	9	3
1:A:15:GLU:HB3	1:A:60:ASP:OD2	0.47	2.10	26	4
1:A:9:LEU:O	1:A:33:HIS:HB2	0.47	2.09	19	1
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:CD	0.47	2.57	12	2
1:A:106:PRO:HG2	1:A:107:PHE:CZ	0.47	2.44	3	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:HB3	0.47	2.08	23	8
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:CB	0.47	2.63	4	1
1:A:57:ALA:CB	1:A:75:LEU:CD2	0.47	2.89	6	1
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:NE2	0.47	2.47	24	2
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:CG1	0.47	2.62	12	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HG12	0.47	2.32	15	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:111:GLU:OE1	0.47	2.58	17	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:55:ASP:OD1	0.47	2.09	18	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:105:LYS:NZ	0.47	2.77	20	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:71:VAL:HG22	0.47	1.87	26	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:90:SER:N	0.47	2.82	2	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:106:PRO:HD2	0.47	2.39	2	5
1:A:60:ASP:HA	1:A:86:THR:HB	0.47	1.85	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:THR:HG23	1:A:105:LYS:HD3	0.47	1.85	3	1
1:A:10:ARG:NH2	1:A:11:VAL:CG2	0.47	2.76	6	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:C	0.47	2.58	9	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:36:ALA:HB2	0.47	2.24	10	1
1:A:14:VAL:HA	1:A:39:ALA:O	0.47	2.09	11	2
1:A:95:THR:OG1	1:A:96:ARG:N	0.47	2.47	11	4
1:A:10:ARG:NH2	1:A:28:LEU:HB2	0.47	2.24	15	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:CG2	0.47	2.36	16	1
1:A:15:GLU:C	1:A:15:GLU:CD	0.47	2.81	20	1
1:A:107:PHE:C	1:A:108:LEU:HD22	0.47	2.33	26	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:50:ARG:HB2	0.47	2.39	2	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:CD1	0.47	2.39	10	4
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:N	0.47	2.77	9	2
1:A:46:LEU:CD2	1:A:50:ARG:HD2	0.47	2.39	13	1
1:A:10:ARG:HB3	1:A:35:VAL:O	0.47	2.08	17	3
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:HG22	0.47	2.07	16	3
1:A:12:LEU:HG	1:A:36:ALA:HB1	0.47	1.86	9	1
1:A:31:LEU:O	1:A:32:GLY:C	0.47	2.56	14	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:ASP:OD2	0.47	2.32	18	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:102:LEU:CD2	0.47	2.93	19	1
1:A:42:MET:CE	1:A:69:TYR:HB3	0.47	2.38	24	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:OE1	0.47	2.33	25	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:50:ARG:CD	0.47	2.40	4	3
1:A:78:ARG:CZ	1:A:78:ARG:HB3	0.47	2.40	1	1
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:HG12	0.47	2.10	6	13
1:A:62:ASN:ND2	1:A:68:SER:OG	0.47	2.47	7	2
1:A:100:ILE:CD1	1:A:117:VAL:HG21	0.47	2.40	25	2
1:A:61:VAL:O	1:A:63:LEU:N	0.47	2.48	8	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:O	0.47	2.48	8	1
1:A:79:ASN:CG	1:A:94:ASP:C	0.47	2.83	8	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:HG13	0.47	2.10	13	1
1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:TYR:CD2	0.47	2.45	14	1
1:A:54:PHE:HE2	1:A:75:LEU:HD11	0.47	1.66	15	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:106:PRO:HD2	0.47	1.87	15	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:38:THR:HG22	0.47	2.36	16	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:11:VAL:HG22	0.47	2.40	17	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:N	0.47	2.39	17	1
1:A:60:ASP:CB	1:A:105:LYS:CD	0.47	2.93	18	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:19:MET:CG	0.47	2.63	19	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:111:GLU:HG3	0.47	2.40	19	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:102:LEU:CD2	0.47	2.39	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ASP:C	1:A:95:THR:HG22	0.47	2.33	22	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:CB	0.47	2.92	24	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:GLN:CB	0.47	2.63	24	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:OD1	0.47	2.32	2	2
1:A:106:PRO:HG2	1:A:110:SER:OG	0.47	2.10	2	2
1:A:51:LYS:HD2	1:A:53:GLN:CG	0.47	2.40	3	2
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:HB2	0.47	2.10	8	6
1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:HD3	0.47	2.24	4	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:HG13	0.47	2.09	19	4
1:A:83:ILE:HD12	1:A:101:PRO:HG2	0.47	1.86	8	1
1:A:100:ILE:CG1	1:A:117:VAL:CG2	0.47	2.93	13	1
1:A:22:MET:SD	1:A:22:MET:C	0.47	2.98	5	1
1:A:51:LYS:HG2	1:A:54:PHE:N	0.47	2.25	5	3
1:A:86:THR:HG21	1:A:88:TYR:CZ	0.47	2.45	6	1
1:A:23:LEU:C	1:A:26:ASP:OD2	0.47	2.58	8	2
1:A:14:VAL:O	1:A:58:ILE:O	0.47	2.32	16	2
1:A:113:GLU:HA	1:A:116:LEU:HG	0.47	1.86	12	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:HD12	0.47	2.10	15	1
1:A:9:LEU:O	1:A:33:HIS:HB3	0.47	2.10	17	1
1:A:61:VAL:C	1:A:86:THR:OG1	0.47	2.58	23	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:CG	0.47	2.34	24	1
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:HD13	0.47	1.70	25	1
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HB2	0.47	2.10	5	5
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ILE:C	0.47	2.58	9	3
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:N	0.47	2.60	9	2
1:A:11:VAL:C	1:A:36:ALA:CB	0.47	2.89	9	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:N	0.47	2.25	9	1
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:CD2	0.47	2.75	10	1
1:A:9:LEU:O	1:A:10:ARG:HD2	0.47	2.10	12	1
1:A:105:LYS:CD	3:A:202:BEF:F3	0.47	2.53	14	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:HD13	0.47	1.86	21	1
1:A:106:PRO:HD2	1:A:110:SER:OG	0.46	2.09	2	2
1:A:107:PHE:N	1:A:110:SER:HG	0.46	2.09	2	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:N	0.46	2.24	4	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:CG1	0.46	2.88	7	3
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:HD22	0.46	2.08	8	3
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:HB3	0.46	2.10	10	2
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ARG:CD	0.46	2.63	20	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:110:SER:O	0.46	2.09	25	1
1:A:91:LYS:HD3	1:A:92:GLY:N	0.46	2.25	26	1
1:A:100:ILE:H	1:A:101:PRO:HD3	0.46	1.71	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:HB	0.46	2.10	12	12
1:A:100:ILE:H	1:A:101:PRO:HD2	0.46	1.69	2	1
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:HA	0.46	1.86	2	3
1:A:87:GLY:O	1:A:88:TYR:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:HD2	0.46	2.08	26	4
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:OD1	0.46	2.31	15	2
1:A:10:ARG:CZ	1:A:35:VAL:HA	0.46	2.40	18	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:61:VAL:CG1	0.46	2.63	21	1
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HD3	0.46	2.09	24	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:CG	0.46	2.88	24	1
1:A:10:ARG:C	1:A:11:VAL:HG13	0.46	2.35	10	2
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:HB	0.46	2.10	18	8
1:A:16:ASP:OD2	1:A:17:GLU:OE2	0.46	2.33	8	1
1:A:106:PRO:CB	1:A:111:GLU:CB	0.46	2.94	22	1
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:N	0.46	2.49	24	1
1:A:90:SER:OG	1:A:93:LEU:HD12	0.46	2.10	24	1
1:A:10:ARG:HG2	1:A:36:ALA:CA	0.46	2.40	26	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:HG2	0.46	2.11	7	6
1:A:15:GLU:HG3	1:A:17:GLU:HG2	0.46	1.86	2	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CD1	0.46	2.79	2	1
1:A:48:ILE:HG13	1:A:57:ALA:CB	0.46	2.40	20	7
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:HA	0.46	2.11	2	4
1:A:113:GLU:CG	1:A:114:ALA:N	0.46	2.79	2	1
1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CD1	0.46	2.84	3	2
1:A:15:GLU:CD	1:A:17:GLU:HB2	0.46	2.36	23	7
1:A:42:MET:HG2	1:A:69:TYR:CD1	0.46	2.46	14	2
1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:GLN:N	0.46	2.24	13	1
1:A:28:LEU:HD13	1:A:36:ALA:CB	0.46	2.40	14	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:117:VAL:CG1	0.46	2.40	19	1
1:A:104:THR:CG2	1:A:106:PRO:HD3	0.46	2.41	1	2
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:C	0.46	2.55	3	7
1:A:63:LEU:O	1:A:65:GLY:N	0.46	2.48	13	5
1:A:10:ARG:NH2	1:A:11:VAL:CG1	0.46	2.79	6	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:HA	0.46	2.10	8	3
1:A:49:ALA:CB	1:A:75:LEU:CD1	0.46	2.93	13	3
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:CD2	0.46	2.40	11	1
1:A:20:ILE:C	1:A:23:LEU:HB2	0.46	2.35	19	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:60:ASP:OD1	0.46	2.11	20	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:50:ARG:NE	0.46	2.24	21	1
1:A:48:ILE:CG1	1:A:49:ALA:N	0.46	2.79	26	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:N	0.46	2.48	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:OG1	0.46	2.09	14	5
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:HB2	0.46	2.09	4	6
1:A:11:VAL:HG11	1:A:28:LEU:HD21	0.46	1.86	14	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:68:SER:HB2	0.46	2.10	22	1
1:A:48:ILE:HD12	1:A:57:ALA:CB	0.46	2.29	24	1
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:OE1	0.46	2.34	26	1
1:A:77:GLU:HG3	1:A:78:ARG:N	0.46	2.26	1	6
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:PHE:CE1	0.46	2.69	1	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HB2	0.46	2.11	6	3
1:A:76:ALA:O	1:A:91:LYS:HE3	0.46	2.10	3	1
1:A:87:GLY:CA	1:A:104:THR:OG1	0.46	2.64	6	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:C	0.46	2.58	6	2
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:HZ1	0.46	2.18	8	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:OH	0.46	2.63	10	1
1:A:105:LYS:HG2	3:A:202:BEF:F3	0.46	2.01	14	1
1:A:15:GLU:CA	1:A:40:SER:HB3	0.46	2.41	21	3
1:A:109:ASP:O	1:A:110:SER:O	0.46	2.34	24	1
1:A:75:LEU:O	1:A:78:ARG:O	0.46	2.34	26	1
1:A:55:ASP:C	1:A:56:ILE:HG13	0.46	2.35	23	5
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:HG3	0.46	2.10	13	4
1:A:110:SER:C	1:A:112:LEU:N	0.46	2.73	2	5
1:A:98:SER:HB2	1:A:100:ILE:HG23	0.46	1.87	4	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:THR:OG1	0.46	2.10	25	3
1:A:60:ASP:CB	1:A:105:LYS:HZ1	0.46	2.23	8	1
1:A:48:ILE:HG12	1:A:49:ALA:N	0.46	2.25	26	2
1:A:47:ASP:C	1:A:49:ALA:N	0.46	2.74	17	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:CD1	0.46	2.88	19	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:ASP:N	0.46	2.25	20	1
1:A:10:ARG:HG2	1:A:35:VAL:O	0.46	2.10	24	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:C	0.46	2.56	24	1
1:A:38:THR:C	1:A:39:ALA:O	0.46	2.59	10	10
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:CD1	0.46	2.41	2	2
1:A:104:THR:O	1:A:104:THR:OG1	0.46	2.34	2	2
1:A:107:PHE:C	1:A:109:ASP:N	0.46	2.72	23	2
1:A:91:LYS:O	1:A:92:GLY:C	0.46	2.57	11	2
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HG	0.46	2.36	6	1
1:A:62:ASN:CG	1:A:68:SER:OG	0.46	2.58	7	1
1:A:79:ASN:HB2	1:A:94:ASP:OD1	0.46	2.10	10	2
1:A:23:LEU:C	1:A:26:ASP:OD1	0.46	2.59	26	3
1:A:13:VAL:CG2	1:A:37:ALA:O	0.46	2.64	12	1
1:A:20:ILE:O	1:A:23:LEU:CB	0.46	2.64	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:O	0.46	2.11	19	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:55:ASP:OD1	0.46	2.11	3	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:HD13	0.46	1.88	3	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:67:PRO:O	0.46	2.11	8	1
1:A:75:LEU:HG	1:A:79:ASN:OD1	0.46	2.11	9	1
1:A:98:SER:C	1:A:100:ILE:HD13	0.46	2.36	10	1
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:CD	0.46	2.59	15	1
1:A:82:PHE:HZ	1:A:93:LEU:HD23	0.46	1.63	17	1
1:A:24:ILE:O	1:A:25:GLU:C	0.45	2.57	22	6
1:A:10:ARG:NH1	1:A:33:HIS:HB2	0.45	2.26	24	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:11:VAL:O	0.45	2.11	5	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:69:TYR:OH	0.45	2.63	9	1
1:A:61:VAL:CB	3:A:202:BEF:F2	0.45	2.54	9	1
1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:O	0.45	2.11	14	1
1:A:37:ALA:C	1:A:38:THR:CG2	0.45	2.89	16	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:58:ILE:O	0.45	2.10	17	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:50:ARG:HD3	0.45	1.87	1	1
1:A:49:ALA:HB2	1:A:71:VAL:CG1	0.45	2.41	4	2
1:A:61:VAL:CG1	1:A:67:PRO:HG2	0.45	2.41	10	1
1:A:53:GLN:HG3	1:A:53:GLN:O	0.45	2.11	21	2
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:HG3	0.45	1.88	21	1
1:A:99:ASN:HB3	1:A:102:LEU:HD23	0.45	1.87	22	1
1:A:99:ASN:C	1:A:102:LEU:HD23	0.45	2.35	22	1
1:A:87:GLY:HA2	1:A:104:THR:OG1	0.45	2.12	1	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:HB3	0.45	2.12	2	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:CB	0.45	2.41	22	5
1:A:15:GLU:CD	1:A:17:GLU:HG2	0.45	2.37	3	4
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:HG21	0.45	1.88	6	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:O	0.45	2.34	8	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD2	0.45	2.80	9	1
1:A:74:ILE:C	1:A:76:ALA:N	0.45	2.73	25	6
1:A:47:ASP:O	1:A:49:ALA:N	0.45	2.49	17	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HG	0.45	2.42	18	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:ASP:OD1	0.45	2.34	21	1
1:A:104:THR:C	1:A:105:LYS:HE3	0.45	2.36	26	1
1:A:73:ASP:O	1:A:77:GLU:N	0.45	2.49	2	2
1:A:11:VAL:CB	1:A:56:ILE:HB	0.45	2.42	6	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HG3	0.45	2.12	14	2
1:A:9:LEU:HB3	1:A:55:ASP:CG	0.45	2.36	8	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:17:GLU:CD	0.45	2.59	8	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HD13	0.45	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:105:LYS:HD2	3:A:202:BEF:F3	0.45	2.02	17	1
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:CB	0.45	2.42	22	1
1:A:10:ARG:HG3	1:A:11:VAL:N	0.45	2.26	24	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:103:LEU:H	0.45	1.67	25	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:HA	0.45	2.42	26	1
1:A:18:SER:C	1:A:20:ILE:N	0.45	2.73	11	11
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:HD3	0.45	2.11	17	4
1:A:62:ASN:HB3	1:A:86:THR:OG1	0.45	2.10	24	2
1:A:79:ASN:ND2	1:A:79:ASN:N	0.45	2.63	6	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:HD23	0.45	2.11	6	1
1:A:118:GLN:HG3	1:A:118:GLN:O	0.45	2.10	10	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:26:ASP:OD2	0.45	2.12	13	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:HD22	0.45	2.37	17	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HB3	0.45	2.10	20	3
1:A:53:GLN:C	1:A:55:ASP:N	0.45	2.75	20	2
1:A:25:GLU:HA	1:A:28:LEU:CD2	0.45	2.41	25	1
1:A:96:ARG:CZ	1:A:96:ARG:HB3	0.45	2.40	5	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:CB	0.45	2.64	7	3
1:A:113:GLU:HA	1:A:117:VAL:HG23	0.45	1.89	9	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:99:ASN:ND2	0.45	2.79	10	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:H	0.45	1.72	10	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:33:HIS:NE2	0.45	2.27	14	1
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:HG2	0.45	2.09	19	2
1:A:12:LEU:O	1:A:58:ILE:N	0.45	2.44	18	1
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:HG12	0.45	2.35	20	1
1:A:10:ARG:HE	1:A:35:VAL:HG23	0.45	1.72	23	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:48:ILE:HB	0.45	1.88	1	1
1:A:91:LYS:C	1:A:91:LYS:HD2	0.45	2.37	3	1
1:A:59:ILE:N	1:A:84:PHE:CE1	0.45	2.85	4	3
1:A:62:ASN:C	1:A:66:GLU:HA	0.45	2.37	9	2
1:A:111:GLU:O	1:A:115:VAL:HG23	0.45	2.11	17	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:54:PHE:HD2	0.45	1.72	14	1
1:A:81:PRO:HA	1:A:95:THR:OG1	0.45	2.11	21	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:C	0.45	2.37	22	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:20:ILE:CD1	0.45	2.86	26	1
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HB3	0.45	1.89	13	3
1:A:24:ILE:O	1:A:27:THR:N	0.45	2.49	14	2
1:A:113:GLU:HG3	1:A:117:VAL:CG1	0.45	2.41	1	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:CB	0.45	2.42	4	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:HG2	0.45	2.12	17	2
1:A:56:ILE:HD13	1:A:82:PHE:C	0.45	2.36	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:HG3	0.45	2.12	25	4
1:A:28:LEU:HD11	1:A:36:ALA:CB	0.45	2.42	14	1
1:A:77:GLU:O	1:A:79:ASN:ND2	0.45	2.50	17	1
1:A:10:ARG:HG3	1:A:11:VAL:H	0.45	1.72	18	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:61:VAL:HB	0.45	1.87	20	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:95:THR:OG1	0.45	2.65	3	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:OE2	0.45	2.35	4	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:77:GLU:C	0.45	2.59	5	1
1:A:86:THR:O	1:A:87:GLY:O	0.45	2.34	5	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:16:ASP:N	0.45	2.25	6	1
1:A:38:THR:CG2	1:A:39:ALA:N	0.45	2.80	6	1
1:A:68:SER:OG	1:A:73:ASP:OD1	0.45	2.32	19	1
1:A:108:LEU:C	1:A:109:ASP:CG	0.45	2.85	19	1
1:A:51:LYS:HG2	1:A:53:GLN:C	0.45	2.37	21	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:86:THR:OG1	0.45	2.65	23	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:CB	0.45	3.00	24	1
1:A:66:GLU:OE2	1:A:68:SER:OG	0.45	2.34	1	1
1:A:24:ILE:O	1:A:27:THR:OG1	0.45	2.31	2	3
1:A:72:ALA:O	1:A:76:ALA:N	0.45	2.50	2	1
1:A:112:LEU:HD23	1:A:112:LEU:N	0.45	2.26	2	1
1:A:19:MET:HE1	1:A:107:PHE:CZ	0.45	2.46	7	1
1:A:111:GLU:HA	1:A:114:ALA:CB	0.45	2.41	9	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:CG	0.45	2.65	14	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:HB	0.45	1.89	17	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:ASP:C	0.45	2.58	23	4
1:A:93:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD12	0.45	1.84	17	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:ASP:O	0.45	2.35	20	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:15:GLU:O	0.45	2.11	24	2
1:A:100:ILE:CD1	1:A:117:VAL:HG12	0.44	2.42	2	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HG	0.44	2.12	6	1
1:A:105:LYS:HD3	1:A:105:LYS:C	0.44	2.37	6	1
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:HD23	0.44	2.12	7	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:CG	0.44	2.65	10	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:50:ARG:HD2	0.44	1.87	13	1
1:A:60:ASP:CB	1:A:105:LYS:HD3	0.44	2.42	15	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:61:VAL:CB	0.44	2.64	18	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:28:LEU:HD12	0.44	2.28	26	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:87:GLY:HA3	0.44	2.42	26	1
1:A:60:ASP:CA	1:A:85:ALA:O	0.44	2.65	14	3
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG23	0.44	2.11	4	3
1:A:93:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HG	0.44	1.89	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:PRO:HD2	1:A:110:SER:HB2	0.44	1.90	4	1
1:A:97:TYR:HB3	1:A:101:PRO:HG3	0.44	1.87	23	3
1:A:59:ILE:CG1	1:A:69:TYR:CE2	0.44	2.99	15	2
1:A:100:ILE:C	1:A:102:LEU:HD22	0.44	2.36	7	1
1:A:9:LEU:C	1:A:10:ARG:NE	0.44	2.76	13	1
1:A:14:VAL:HA	1:A:20:ILE:HD13	0.44	1.89	14	1
1:A:41:ARG:O	1:A:45:ALA:HB2	0.44	2.12	17	5
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:HB3	0.44	2.12	17	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:33:HIS:HB2	0.44	1.88	26	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:19:MET:SD	0.44	2.75	19	1
1:A:21:ALA:C	1:A:23:LEU:N	0.44	2.75	19	2
1:A:24:ILE:HD11	1:A:36:ALA:CB	0.44	2.42	19	1
1:A:16:ASP:C	1:A:17:GLU:CG	0.44	2.90	23	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:CA	0.44	3.00	1	1
1:A:62:ASN:HB3	1:A:66:GLU:CG	0.44	2.43	6	1
1:A:66:GLU:CD	1:A:67:PRO:HD2	0.44	2.37	6	1
1:A:74:ILE:O	1:A:75:LEU:C	0.44	2.60	23	5
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HG13	0.44	2.13	16	5
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:HG2	0.44	2.12	10	1
1:A:20:ILE:HG23	1:A:38:THR:OG1	0.44	2.12	11	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:O	0.44	2.34	13	1
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:CB	0.44	2.65	25	2
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:PHE:CD2	0.44	2.70	22	1
1:A:61:VAL:O	1:A:67:PRO:HD2	0.44	2.13	24	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:C	0.44	2.38	24	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:17:GLU:OE2	0.44	2.65	2	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:CB	0.44	2.64	18	2
1:A:89:GLY:CA	1:A:103:LEU:HA	0.44	2.42	3	1
1:A:15:GLU:CB	3:A:202:BEF:F3	0.44	2.54	9	2
1:A:14:VAL:N	1:A:58:ILE:O	0.44	2.44	16	2
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HG13	0.44	2.13	18	5
1:A:59:ILE:O	1:A:60:ASP:O	0.44	2.36	4	2
1:A:91:LYS:HD2	1:A:91:LYS:O	0.44	2.12	7	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:44:GLU:OE1	0.44	2.50	11	1
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:CD2	0.44	2.79	14	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:ARG:CG	0.44	2.42	25	2
1:A:9:LEU:HD22	1:A:53:GLN:O	0.44	2.13	17	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:CE1	0.44	2.48	17	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:N	0.44	2.84	22	2
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD12	0.44	2.27	18	1
1:A:109:ASP:N	1:A:109:ASP:OD1	0.44	2.47	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASN:C	1:A:102:LEU:HD11	0.44	2.38	23	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:112:LEU:HD11	0.44	2.37	25	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:91:LYS:HA	0.44	2.12	1	1
1:A:63:LEU:C	1:A:65:GLY:N	0.44	2.73	5	10
1:A:109:ASP:OD2	1:A:113:GLU:OE2	0.44	2.36	9	1
1:A:62:ASN:C	1:A:63:LEU:HD23	0.44	2.37	17	1
1:A:10:ARG:HG2	1:A:36:ALA:CB	0.44	2.43	26	1
1:A:102:LEU:O	1:A:113:GLU:OE1	0.44	2.34	26	1
1:A:98:SER:O	1:A:100:ILE:HG12	0.44	2.12	2	1
1:A:113:GLU:CA	1:A:117:VAL:CG2	0.44	2.94	2	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:HB3	0.44	2.12	24	3
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:ARG:HD2	0.44	1.89	11	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HB	0.44	2.13	13	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:117:VAL:CG2	0.44	2.43	13	2
1:A:53:GLN:HA	1:A:53:GLN:OE1	0.44	2.11	15	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:33:HIS:HB2	0.44	1.89	17	1
1:A:69:TYR:CD1	1:A:71:VAL:HG12	0.44	2.45	18	1
1:A:99:ASN:C	1:A:101:PRO:HD2	0.44	2.37	22	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:111:GLU:CB	0.44	2.42	23	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:HG3	0.44	2.13	4	1
1:A:26:ASP:O	1:A:29:CYS:HB3	0.44	2.13	19	6
1:A:90:SER:OG	1:A:93:LEU:CD2	0.44	2.60	6	1
1:A:88:TYR:CD2	1:A:91:LYS:HB3	0.44	2.48	7	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:CB	0.44	2.96	8	1
1:A:28:LEU:HB2	1:A:33:HIS:O	0.44	2.13	9	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:O	0.44	2.13	14	2
1:A:37:ALA:C	1:A:38:THR:HG23	0.44	2.36	16	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:HD3	0.44	2.13	18	1
1:A:97:TYR:N	1:A:97:TYR:HD1	0.44	2.11	26	2
1:A:9:LEU:N	1:A:10:ARG:HD2	0.44	2.27	21	1
1:A:12:LEU:CA	1:A:37:ALA:HB3	0.44	2.42	21	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:ALA:HB3	0.44	2.13	22	1
1:A:78:ARG:O	1:A:80:VAL:N	0.44	2.51	25	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:38:THR:HG1	0.44	1.71	26	1
1:A:110:SER:O	1:A:113:GLU:HG2	0.44	2.12	26	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:33:HIS:HB3	0.44	2.28	2	1
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:O	0.44	2.61	13	8
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:C	0.44	2.34	5	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:N	0.44	2.27	7	8
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:O	0.44	2.36	20	3
1:A:12:LEU:CG	1:A:36:ALA:HB1	0.44	2.43	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:HIS:O	1:A:34:GLU:O	0.44	2.36	9	1
1:A:111:GLU:CA	1:A:114:ALA:HB3	0.44	2.42	9	1
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HG	0.44	2.11	10	1
1:A:91:LYS:C	1:A:93:LEU:N	0.44	2.75	11	2
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:HG3	0.44	2.12	15	2
1:A:101:PRO:O	1:A:103:LEU:HG	0.44	2.13	15	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:68:SER:HB3	0.44	2.13	23	4
1:A:29:CYS:O	1:A:30:GLU:C	0.44	2.61	18	1
1:A:90:SER:OG	1:A:102:LEU:CD1	0.44	2.66	19	1
1:A:83:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HB2	0.44	1.88	26	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:HB2	0.43	2.12	13	3
1:A:103:LEU:CD1	1:A:106:PRO:CD	0.43	2.96	23	2
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:CG	0.43	2.64	4	1
1:A:76:ALA:O	1:A:78:ARG:N	0.43	2.50	7	4
1:A:15:GLU:OE2	1:A:17:GLU:HB2	0.43	2.12	9	5
1:A:28:LEU:HB2	1:A:33:HIS:HB2	0.43	1.89	9	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:HD2	0.43	2.38	20	2
1:A:101:PRO:CG	1:A:114:ALA:HA	0.43	2.43	9	2
1:A:24:ILE:O	1:A:26:ASP:N	0.43	2.51	14	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:HD3	0.43	2.13	25	2
1:A:79:ASN:ND2	1:A:93:LEU:HA	0.43	2.28	16	1
1:A:27:THR:HG23	1:A:28:LEU:N	0.43	2.28	19	1
1:A:90:SER:OG	1:A:102:LEU:CB	0.43	2.66	19	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:31:LEU:CD2	0.43	2.40	20	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:HG3	0.43	2.13	21	2
1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:HE3	0.43	2.28	26	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:PHE:CZ	0.43	2.71	1	2
1:A:86:THR:C	1:A:88:TYR:N	0.43	2.74	1	2
1:A:54:PHE:CZ	1:A:57:ALA:HB2	0.43	2.44	7	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:61:VAL:HB	0.43	2.13	15	2
1:A:24:ILE:C	1:A:26:ASP:N	0.43	2.75	14	1
1:A:15:GLU:C	1:A:15:GLU:OE1	0.43	2.61	15	1
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:N	0.43	2.27	17	2
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:N	0.43	2.47	24	1
1:A:105:LYS:O	1:A:110:SER:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:59:ILE:O	1:A:62:ASN:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:63:LEU:O	1:A:66:GLU:N	0.43	2.51	6	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:C	0.43	2.61	14	2
1:A:14:VAL:HG13	1:A:37:ALA:CB	0.43	2.43	18	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:105:LYS:HE2	0.43	1.91	18	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:HG23	0.43	2.13	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:HB2	1:A:107:PHE:CE1	0.43	2.48	3	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:36:ALA:CB	0.43	2.43	24	2
1:A:51:LYS:O	1:A:53:GLN:HG2	0.43	2.13	6	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:10:ARG:CG	0.43	2.80	7	1
1:A:116:LEU:C	1:A:118:GLN:N	0.43	2.77	19	2
1:A:9:LEU:C	1:A:10:ARG:HG3	0.43	2.37	9	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:86:THR:HB	0.43	2.13	9	1
1:A:54:PHE:CE2	1:A:56:ILE:C	0.43	2.96	20	5
1:A:106:PRO:HB2	1:A:108:LEU:CD2	0.43	2.43	12	1
1:A:106:PRO:HA	1:A:111:GLU:N	0.43	2.27	22	1
1:A:106:PRO:CG	1:A:110:SER:OG	0.43	2.65	2	2
1:A:15:GLU:C	1:A:40:SER:HB3	0.43	2.38	8	4
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:CB	0.43	2.67	12	1
1:A:104:THR:C	1:A:105:LYS:HD3	0.43	2.37	20	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:60:ASP:OD1	0.43	2.67	21	1
1:A:27:THR:O	1:A:30:GLU:HG2	0.43	2.12	22	1
1:A:106:PRO:HB2	1:A:111:GLU:HB2	0.43	1.88	22	1
1:A:16:ASP:OD1	3:A:202:BEF:F3	0.43	2.26	24	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:CG2	0.43	2.66	3	1
1:A:57:ALA:CA	1:A:58:ILE:HD12	0.43	2.42	21	3
1:A:16:ASP:N	1:A:16:ASP:OD1	0.43	2.51	24	3
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:OD1	0.43	2.36	5	2
1:A:62:ASN:HB3	1:A:66:GLU:HG2	0.43	1.89	6	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:O	0.43	2.13	8	2
1:A:86:THR:HG23	1:A:88:TYR:CE1	0.43	2.49	17	2
1:A:101:PRO:HB3	1:A:117:VAL:HG11	0.43	1.90	17	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:GLU:C	0.43	2.77	18	1
1:A:17:GLU:OE1	3:A:202:BEF:F2	0.43	2.26	21	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG22	0.43	2.13	4	1
1:A:101:PRO:O	1:A:114:ALA:HA	0.43	2.14	4	1
1:A:76:ALA:C	1:A:78:ARG:N	0.43	2.74	6	5
1:A:79:ASN:N	1:A:94:ASP:OD1	0.43	2.52	7	1
1:A:105:LYS:CD	3:A:202:BEF:F2	0.43	2.57	8	1
1:A:113:GLU:O	1:A:117:VAL:HB	0.43	2.13	12	1
1:A:10:ARG:N	1:A:10:ARG:HD2	0.43	2.27	14	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:53:GLN:HG3	0.43	1.89	25	2
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.43	2.86	18	1
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:HD12	0.43	1.73	18	1
1:A:65:GLY:C	1:A:67:PRO:HD3	0.43	2.39	1	2
1:A:24:ILE:HG21	1:A:38:THR:HG21	0.43	1.89	2	1
1:A:113:GLU:CB	1:A:117:VAL:CG2	0.43	2.97	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ILE:HD13	1:A:69:TYR:HE2	0.43	1.72	3	1
1:A:111:GLU:HG3	1:A:112:LEU:N	0.43	2.28	5	1
1:A:94:ASP:C	1:A:94:ASP:OD1	0.43	2.61	11	1
1:A:83:ILE:HG21	1:A:114:ALA:HB1	0.43	1.91	20	1
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:CD2	0.43	2.79	21	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:113:GLU:CG	0.43	2.44	26	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:HB	0.43	1.91	2	1
1:A:54:PHE:CG	1:A:55:ASP:N	0.43	2.87	2	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:109:ASP:HB2	0.43	2.43	4	1
1:A:15:GLU:O	1:A:15:GLU:HG3	0.43	2.13	8	2
1:A:24:ILE:O	1:A:28:LEU:HB3	0.43	2.13	12	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:CD1	0.43	2.66	14	1
1:A:13:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HD12	0.43	1.91	16	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:ILE:N	0.43	2.87	16	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:109:ASP:N	0.43	2.29	21	1
1:A:84:PHE:O	1:A:85:ALA:HB2	0.43	2.13	3	1
1:A:21:ALA:O	1:A:22:MET:C	0.43	2.61	4	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:O	0.43	2.37	5	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:16:ASP:N	0.43	2.52	21	2
1:A:9:LEU:C	1:A:10:ARG:HD2	0.43	2.39	21	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:36:ALA:CA	0.42	2.44	2	1
1:A:10:ARG:C	1:A:55:ASP:CG	0.42	2.86	2	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:97:TYR:HB2	0.42	2.43	8	3
1:A:43:GLN:O	1:A:44:GLU:C	0.42	2.61	7	1
1:A:49:ALA:CB	1:A:71:VAL:HB	0.42	2.44	15	1
1:A:103:LEU:HG	1:A:106:PRO:CG	0.42	2.44	17	1
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:HG23	0.42	2.14	20	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:60:ASP:OD2	0.42	2.14	2	1
1:A:89:GLY:HA3	1:A:103:LEU:HA	0.42	1.91	3	1
1:A:19:MET:SD	1:A:19:MET:C	0.42	3.02	7	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:17:GLU:HB2	0.42	2.15	20	4
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CE1	0.42	2.55	10	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:HIS:CD2	0.42	2.46	13	1
1:A:68:SER:CB	1:A:73:ASP:OD1	0.42	2.67	15	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:20:ILE:HB	0.42	2.14	17	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:37:ALA:CB	0.42	2.95	18	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:HG3	0.42	2.15	18	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:60:ASP:OD1	0.42	2.14	21	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HG	0.42	1.91	25	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:CD1	0.42	2.67	25	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HB	0.42	1.90	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ARG:HG2	0.42	2.15	13	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:HG12	0.42	2.14	16	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:33:HIS:ND1	0.42	2.29	17	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:10:ARG:HA	0.42	1.56	17	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:77:GLU:CG	0.42	2.44	18	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:HB3	0.42	2.13	18	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HG	0.42	1.90	18	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:17:GLU:OE2	0.42	2.62	25	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD13	0.42	2.14	25	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:CG	0.42	2.93	26	1
1:A:67:PRO:O	1:A:68:SER:CB	0.42	2.66	25	2
1:A:62:ASN:HA	1:A:66:GLU:HA	0.42	1.90	7	3
1:A:118:GLN:O	1:A:118:GLN:CG	0.42	2.67	10	1
1:A:86:THR:N	1:A:104:THR:HA	0.42	2.29	18	2
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:CG	0.42	2.66	12	1
1:A:22:MET:O	1:A:22:MET:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:99:ASN:HA	0.42	2.44	14	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:57:ALA:HB2	0.42	2.50	15	1
1:A:100:ILE:CG1	1:A:117:VAL:HB	0.42	2.43	23	1
1:A:47:ASP:OD1	1:A:47:ASP:C	0.42	2.63	24	1
1:A:91:LYS:CD	1:A:91:LYS:O	0.42	2.67	3	1
1:A:82:PHE:N	1:A:97:TYR:CE1	0.42	2.87	11	2
1:A:57:ALA:C	1:A:58:ILE:CG1	0.42	2.92	8	1
1:A:15:GLU:O	1:A:39:ALA:CA	0.42	2.66	11	1
1:A:67:PRO:O	1:A:68:SER:HB2	0.42	2.14	15	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:ASN:CG	0.42	2.63	18	2
1:A:93:LEU:CG	1:A:102:LEU:HG	0.42	2.44	18	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:19:MET:HG2	0.42	2.14	19	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:HG2	0.42	2.15	22	2
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:HG3	0.42	2.14	22	1
1:A:48:ILE:C	1:A:54:PHE:CD2	0.42	2.98	26	1
1:A:21:ALA:CA	1:A:38:THR:CG2	0.42	2.97	6	1
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:CG2	0.42	2.68	11	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:CG	0.42	2.44	11	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:34:GLU:HB3	0.42	1.91	13	1
1:A:55:ASP:CG	1:A:56:ILE:HG13	0.42	2.39	14	1
1:A:24:ILE:C	1:A:28:LEU:HG	0.42	2.40	18	1
1:A:100:ILE:HD13	1:A:100:ILE:H	0.42	1.71	20	1
1:A:67:PRO:C	1:A:68:SER:OG	0.42	2.60	21	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:102:LEU:O	0.42	2.14	22	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:110:SER:OG	0.42	2.14	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASP:C	1:A:17:GLU:HG2	0.42	2.39	2	1
1:A:100:ILE:C	1:A:100:ILE:CD1	0.42	2.92	5	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:17:GLU:OE1	0.42	2.38	8	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:80:VAL:HG12	0.42	2.49	9	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:55:ASP:N	0.42	2.88	10	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:83:ILE:HA	0.42	1.71	10	1
1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:N	0.42	2.30	13	1
1:A:46:LEU:C	1:A:50:ARG:HD3	0.42	2.39	13	1
1:A:47:ASP:O	1:A:47:ASP:OD1	0.42	2.37	18	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:13:VAL:CG2	0.42	2.97	19	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:61:VAL:HG11	0.42	2.15	21	1
1:A:49:ALA:HB3	1:A:71:VAL:CG1	0.42	2.38	25	1
1:A:54:PHE:CD2	1:A:57:ALA:HB2	0.42	2.47	26	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:NZ	0.42	2.29	1	1
1:A:90:SER:CB	1:A:102:LEU:CD1	0.42	2.98	1	1
1:A:113:GLU:O	1:A:116:LEU:N	0.42	2.53	17	2
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:CA	0.42	2.45	3	1
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:CG2	0.42	2.68	17	2
1:A:94:ASP:O	1:A:94:ASP:OD2	0.42	2.38	6	2
1:A:10:ARG:HD3	1:A:55:ASP:HB2	0.42	1.91	9	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:33:HIS:CG	0.42	2.49	17	1
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:CD2	0.42	2.91	19	1
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:CD1	0.42	2.55	21	1
1:A:13:VAL:O	1:A:38:THR:HA	0.42	2.15	2	2
1:A:112:LEU:C	1:A:116:LEU:HD12	0.42	2.40	11	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:105:LYS:HD3	0.42	2.15	14	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:105:LYS:HE2	0.42	2.14	18	1
1:A:62:ASN:HB2	1:A:66:GLU:OE1	0.42	2.14	1	1
1:A:96:ARG:HB3	1:A:96:ARG:NH1	0.42	2.29	5	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:ASP:N	0.42	2.52	20	2
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:HG2	0.42	2.15	13	2
1:A:87:GLY:O	1:A:88:TYR:C	0.42	2.59	14	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:HE2	0.42	2.40	15	1
1:A:100:ILE:CG1	1:A:101:PRO:HD2	0.42	2.45	15	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:109:ASP:N	0.42	2.30	16	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:CA	0.42	3.02	20	1
1:A:106:PRO:HB2	1:A:111:GLU:HG3	0.42	1.91	22	1
1:A:99:ASN:HD22	1:A:99:ASN:N	0.42	2.13	24	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:CG	0.42	2.45	25	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:GLU:CA	0.41	2.44	25	2
1:A:101:PRO:N	1:A:102:LEU:HD13	0.41	2.30	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:LEU:HD12	1:A:110:SER:HA	0.41	1.90	6	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:102:LEU:HB2	0.41	1.91	7	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:105:LYS:NZ	0.41	2.77	8	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:33:HIS:CD2	0.41	2.50	14	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:35:VAL:O	0.41	2.67	16	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:39:ALA:O	0.41	2.15	16	1
1:A:10:ARG:HE	1:A:11:VAL:HG22	0.41	1.75	17	1
1:A:64:ASP:O	1:A:65:GLY:C	0.41	2.62	18	1
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HD12	0.41	1.92	19	1
1:A:20:ILE:CA	1:A:23:LEU:HB2	0.41	2.44	19	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:OG	0.41	2.14	20	1
1:A:99:ASN:HB3	1:A:102:LEU:CD2	0.41	2.44	22	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:87:GLY:N	0.41	2.68	1	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:17:GLU:HG2	0.41	2.16	3	1
1:A:13:VAL:HB	1:A:24:ILE:CD1	0.41	2.46	5	1
1:A:49:ALA:C	1:A:51:LYS:N	0.41	2.78	6	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HG13	0.41	2.14	6	2
1:A:43:GLN:O	1:A:46:LEU:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:CZ	0.41	3.03	10	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:55:ASP:HB3	0.41	1.92	14	1
1:A:50:ARG:NH1	1:A:71:VAL:HG12	0.41	2.30	26	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:N	0.41	2.89	1	1
1:A:84:PHE:CB	1:A:93:LEU:HD13	0.41	2.44	6	1
1:A:104:THR:O	1:A:104:THR:HG22	0.41	2.14	6	1
1:A:60:ASP:O	1:A:60:ASP:CG	0.41	2.62	14	1
1:A:13:VAL:HG23	1:A:20:ILE:HG12	0.41	1.93	17	1
1:A:113:GLU:C	1:A:115:VAL:N	0.41	2.77	17	1
1:A:10:ARG:O	1:A:12:LEU:CD2	0.41	2.67	20	2
1:A:101:PRO:CB	1:A:113:GLU:C	0.41	2.94	20	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:91:LYS:HB2	0.41	2.15	21	1
1:A:76:ALA:O	1:A:91:LYS:CE	0.41	2.68	3	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:110:SER:CA	0.41	2.44	3	1
1:A:60:ASP:HA	1:A:86:THR:HG22	0.41	1.92	7	1
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:HB2	0.41	2.15	9	3
1:A:103:LEU:HG	1:A:106:PRO:CD	0.41	2.45	17	1
1:A:94:ASP:HA	1:A:99:ASN:OD1	0.41	2.15	20	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:110:SER:OG	0.41	2.16	21	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:53:GLN:C	0.41	2.41	15	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:HB3	0.41	1.90	15	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:O	0.41	2.38	15	1
1:A:62:ASN:CA	1:A:66:GLU:HA	0.41	2.45	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ARG:HG2	1:A:33:HIS:HB3	0.41	1.92	17	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:37:ALA:CB	0.41	2.43	21	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:CD1	0.41	2.46	22	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:ILE:CG2	0.41	2.66	9	1
1:A:25:GLU:O	1:A:28:LEU:HG	0.41	2.16	9	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:88:TYR:OH	0.41	2.73	10	1
1:A:17:GLU:CG	1:A:19:MET:HB2	0.41	2.44	11	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:105:LYS:CE	0.41	2.99	11	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:GLU:OE1	0.41	2.54	13	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:CG	0.41	2.68	13	1
1:A:10:ARG:CD	1:A:33:HIS:CG	0.41	3.04	17	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:102:LEU:CD1	0.41	2.85	17	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:105:LYS:CE	0.41	2.68	18	1
1:A:79:ASN:HA	1:A:82:PHE:CZ	0.41	2.49	6	2
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:HB3	0.41	2.16	10	2
1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:84:PHE:HE2	1:A:86:THR:HG21	0.41	1.76	17	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:93:LEU:H	0.41	2.29	18	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:104:THR:C	0.41	2.40	18	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:THR:CG2	0.41	2.46	19	1
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:CG2	0.41	2.45	22	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CG	0.41	2.68	22	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:113:GLU:OE2	0.41	2.16	26	1
1:A:90:SER:OG	1:A:102:LEU:HD21	0.41	2.15	4	1
1:A:20:ILE:CA	1:A:23:LEU:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:69:TYR:OH	0.41	2.16	8	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:CA	0.41	2.44	8	1
1:A:106:PRO:HB2	1:A:111:GLU:CB	0.41	2.46	22	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:77:GLU:C	0.41	2.89	2	1
1:A:20:ILE:C	1:A:23:LEU:HB3	0.41	2.41	8	1
1:A:112:LEU:C	1:A:114:ALA:N	0.41	2.76	8	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:33:HIS:CG	0.41	3.04	9	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:H	0.41	2.29	9	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:CYS:H	0.41	1.73	10	1
1:A:58:ILE:HA	1:A:84:PHE:CD1	0.41	2.51	10	1
1:A:15:GLU:CD	1:A:105:LYS:NZ	0.41	2.79	12	1
1:A:20:ILE:O	1:A:20:ILE:HG12	0.41	2.16	14	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:28:LEU:HD11	0.41	1.93	14	1
1:A:55:ASP:O	1:A:97:TYR:OH	0.41	2.32	14	1
1:A:49:ALA:HA	1:A:75:LEU:CD1	0.41	2.46	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:HE2	0.41	2.14	24	2
1:A:24:ILE:C	1:A:27:THR:HG22	0.41	2.41	19	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:SER:N	0.41	2.49	19	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:ARG:HD3	0.41	1.91	20	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD23	0.41	2.41	21	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:OD1	0.41	2.68	24	1
1:A:9:LEU:HA	1:A:55:ASP:CG	0.41	2.41	5	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:VAL:HG23	0.41	2.39	7	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:GLU:OE1	0.41	2.38	8	1
1:A:41:ARG:HB3	1:A:44:GLU:CG	0.41	2.46	9	1
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:CE1	0.41	2.51	18	1
1:A:101:PRO:CB	1:A:114:ALA:O	0.41	2.69	19	1
1:A:15:GLU:HA	1:A:40:SER:HB3	0.41	1.93	20	1
1:A:54:PHE:CD2	1:A:56:ILE:O	0.41	2.74	20	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:105:LYS:CD	0.41	2.69	20	1
1:A:9:LEU:HA	1:A:55:ASP:OD2	0.41	2.15	21	1
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:C	0.41	2.64	22	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:62:ASN:HD21	0.40	1.75	4	1
1:A:62:ASN:HA	1:A:66:GLU:OE1	0.40	2.16	6	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:HB2	0.40	2.16	6	1
1:A:88:TYR:HD1	1:A:89:GLY:N	0.40	2.13	10	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:16:ASP:N	0.40	2.83	11	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:OD2	0.40	2.39	11	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:HG3	0.40	2.51	11	1
1:A:113:GLU:HA	1:A:116:LEU:CG	0.40	2.46	12	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:99:ASN:ND2	0.40	2.85	13	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:105:LYS:HE3	0.40	2.16	15	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:93:LEU:HB2	0.40	2.15	19	1
1:A:79:ASN:CG	1:A:93:LEU:HA	0.40	2.41	21	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:89:GLY:O	0.40	2.68	22	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HB2	0.40	1.92	24	1
1:A:10:ARG:HB3	1:A:35:VAL:C	0.40	2.41	26	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:GLU:O	0.40	2.39	26	1
1:A:20:ILE:HG12	1:A:20:ILE:O	0.40	2.16	3	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:28:LEU:N	0.40	2.31	4	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:83:ILE:HG22	0.40	2.47	4	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD12	0.40	1.93	5	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:11:VAL:HG13	0.40	2.46	6	1
1:A:12:LEU:CG	1:A:48:ILE:HG22	0.40	2.46	6	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:61:VAL:HG11	0.40	2.41	6	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:HA	0.40	1.78	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:SER:O	1:A:20:ILE:N	0.40	2.54	9	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:N	0.40	2.44	13	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:36:ALA:HB3	0.40	2.44	14	1
1:A:100:ILE:CB	1:A:117:VAL:HG21	0.40	2.47	15	1
1:A:10:ARG:NH2	1:A:35:VAL:HB	0.40	2.31	16	1
1:A:62:ASN:HA	1:A:67:PRO:HG2	0.40	1.92	18	1
1:A:10:ARG:NH2	1:A:33:HIS:HB3	0.40	2.31	25	1
1:A:28:LEU:HG	1:A:29:CYS:N	0.40	2.31	2	1
1:A:59:ILE:HD12	1:A:72:ALA:HB2	0.40	1.90	3	1
1:A:106:PRO:O	1:A:111:GLU:HB2	0.40	2.16	3	1
1:A:88:TYR:CZ	1:A:90:SER:C	0.40	2.99	4	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:90:SER:HA	0.40	2.16	7	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:93:LEU:CB	0.40	2.46	8	1
1:A:55:ASP:OD1	1:A:56:ILE:HG13	0.40	2.17	11	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:GLU:CB	0.40	2.84	13	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:84:PHE:CZ	0.40	2.52	17	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:75:LEU:HD13	0.40	1.93	25	1
1:A:48:ILE:CA	1:A:54:PHE:CD2	0.40	3.04	26	1
1:A:49:ALA:O	1:A:51:LYS:N	0.40	2.55	7	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD22	0.40	2.37	8	1
1:A:103:LEU:CG	1:A:104:THR:N	0.40	2.81	9	1
1:A:90:SER:CB	1:A:93:LEU:HG	0.40	2.46	11	1
1:A:66:GLU:OE1	1:A:66:GLU:O	0.40	2.40	20	1
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:HG2	0.40	2.15	20	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:110:SER:HB3	0.40	1.93	21	1
1:A:97:TYR:N	1:A:97:TYR:CD1	0.40	2.89	5	1
1:A:90:SER:N	1:A:102:LEU:CD2	0.40	2.78	11	1
1:A:89:GLY:HA3	1:A:102:LEU:HD23	0.40	1.93	25	1
1:A:9:LEU:C	1:A:34:GLU:HB2	0.40	2.42	26	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	110/123 (89%)	70±3 (64±3%)	24±4 (22±3%)	15±3 (14±3%)	0 5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	2860/3198 (89%)	1830 (64%)	636 (22%)	394 (14%)	0 5

All 49 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	61	VAL	26
1	A	69	TYR	26
1	A	82	PHE	25
1	A	39	ALA	23
1	A	33	HIS	22
1	A	16	ASP	17
1	A	60	ASP	16
1	A	79	ASN	15
1	A	100	ILE	15
1	A	98	SER	14
1	A	103	LEU	14
1	A	110	SER	12
1	A	90	SER	12
1	A	80	VAL	11
1	A	108	LEU	11
1	A	86	THR	10
1	A	55	ASP	9
1	A	99	ASN	8
1	A	92	GLY	7
1	A	34	GLU	7
1	A	109	ASP	6
1	A	111	GLU	6
1	A	87	GLY	6
1	A	91	LYS	6
1	A	93	LEU	6
1	A	67	PRO	6
1	A	21	ALA	5
1	A	105	LYS	5
1	A	54	PHE	4
1	A	53	GLN	4
1	A	66	GLU	4
1	A	9	LEU	4
1	A	35	VAL	4
1	A	17	GLU	4
1	A	107	PHE	3
1	A	104	THR	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	36	ALA	2
1	A	83	ILE	2
1	A	117	VAL	2
1	A	64	ASP	2
1	A	101	PRO	2
1	A	88	TYR	1
1	A	106	PRO	1
1	A	112	LEU	1
1	A	114	ALA	1
1	A	118	GLN	1
1	A	14	VAL	1
1	A	11	VAL	1
1	A	95	THR	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	93/105 (89%)	57±4 (61±4%)	36±4 (39±4%)	0 6
All	All	2418/2730 (89%)	1471 (61%)	947 (39%)	0 6

All 82 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	23	LEU	26
1	A	48	ILE	26
1	A	69	TYR	26
1	A	83	ILE	25
1	A	28	LEU	24
1	A	100	ILE	24
1	A	105	LYS	22
1	A	91	LYS	22
1	A	108	LEU	21
1	A	24	ILE	20
1	A	61	VAL	19
1	A	63	LEU	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	THR	19
1	A	93	LEU	19
1	A	102	LEU	19
1	A	60	ASP	18
1	A	82	PHE	18
1	A	80	VAL	18
1	A	98	SER	17
1	A	29	CYS	16
1	A	10	ARG	16
1	A	15	GLU	16
1	A	103	LEU	15
1	A	116	LEU	15
1	A	112	LEU	15
1	A	50	ARG	14
1	A	51	LYS	14
1	A	68	SER	14
1	A	27	THR	14
1	A	104	THR	13
1	A	26	ASP	12
1	A	64	ASP	12
1	A	78	ARG	12
1	A	90	SER	12
1	A	19	MET	12
1	A	17	GLU	11
1	A	41	ARG	11
1	A	38	THR	11
1	A	9	LEU	10
1	A	53	GLN	10
1	A	14	VAL	10
1	A	12	LEU	9
1	A	34	GLU	9
1	A	111	GLU	9
1	A	25	GLU	9
1	A	46	LEU	9
1	A	47	ASP	9
1	A	77	GLU	9
1	A	62	ASN	9
1	A	59	ILE	9
1	A	20	ILE	8
1	A	118	GLN	8
1	A	13	VAL	8
1	A	43	GLN	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	LEU	8
1	A	31	LEU	7
1	A	55	ASP	7
1	A	71	VAL	7
1	A	99	ASN	7
1	A	22	MET	7
1	A	113	GLU	7
1	A	66	GLU	7
1	A	35	VAL	6
1	A	44	GLU	6
1	A	79	ASN	6
1	A	117	VAL	6
1	A	95	THR	6
1	A	88	TYR	6
1	A	96	ARG	6
1	A	30	GLU	6
1	A	42	MET	5
1	A	109	ASP	5
1	A	54	PHE	5
1	A	74	ILE	4
1	A	11	VAL	4
1	A	18	SER	4
1	A	115	VAL	3
1	A	33	HIS	3
1	A	110	SER	3
1	A	16	ASP	2
1	A	73	ASP	2
1	A	56	ILE	2

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

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	BEF	A	202	1	0,3,3	0.00±0.00	-

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	BEF	A	202	1	-	-	-

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 27% for the well-defined parts and 25% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	424
Number of shifts mapped to atoms	424
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	3

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	36	-0.30 ± 0.21	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	18	—	None (insufficient data)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	103	0.22 ± 0.37	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 27%, i.e. 405 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1489. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	274/546 (50%)	144/221 (65%)	36/220 (16%)	94/105 (90%)
Sidechain	116/869 (13%)	81/571 (14%)	35/274 (13%)	0/24 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	15/74 (20%)	15/36 (42%)	0/37 (0%)	0/1 (0%)
Overall	405/1489 (27%)	240/828 (29%)	71/531 (13%)	94/130 (72%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 25%, i.e. 424 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1673. 0 out of 24 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	293/612 (48%)	154/248 (62%)	36/246 (15%)	103/118 (87%)
Sidechain	116/980 (12%)	81/642 (13%)	35/307 (11%)	0/31 (0%)
Aromatic	15/81 (19%)	15/40 (38%)	0/39 (0%)	0/2 (0%)
Overall	424/1673 (25%)	250/930 (27%)	71/592 (12%)	103/151 (68%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	65	GLY	N	133.58	91.59 – 127.52	6.7
1	A	112	LEU	CD1	15.32	16.71 – 32.55	-5.9
1	A	90	SER	H	4.99	5.45 – 11.10	-5.8

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

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

Random coil index (RCI) for chain A:

