



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 05:59 AM UTC

PDB ID : 1MUT / pdb_00001mut
Title : NMR STUDY OF MUTT ENZYME, A NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE
PYROPHOSPHOHYDROLASE
Authors : Abeygunawardana, C.; Weber, D.J.; Gittis, A.G.; Frick, D.N.; Lin, J.; Miller,
A.-F.; Bessman, M.J.; Mildvan, A.S.
Deposited on : 1995-09-14

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

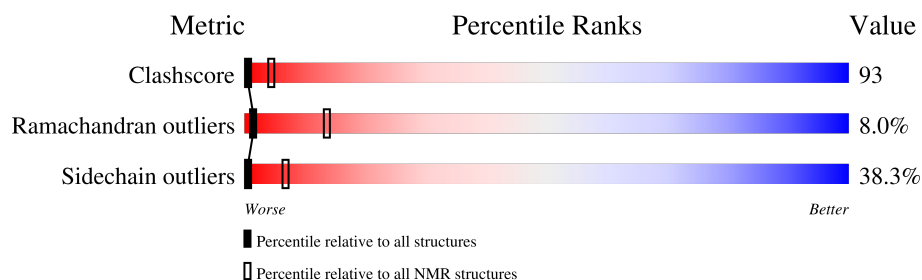
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

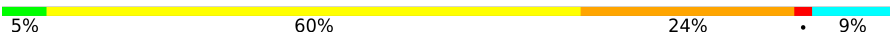
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	129	 5% 60% 24% • 9%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 11 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:4-A:22, A:31-A:129 (118)	1.55	11

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2090 atoms, of which 1035 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE.

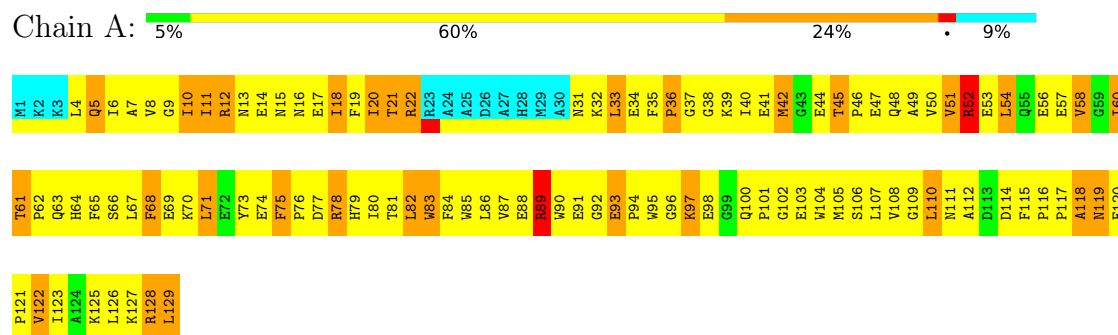
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	129	Total	C	H	N	O	S	0
			2090	679	1035	180	192	4	

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: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

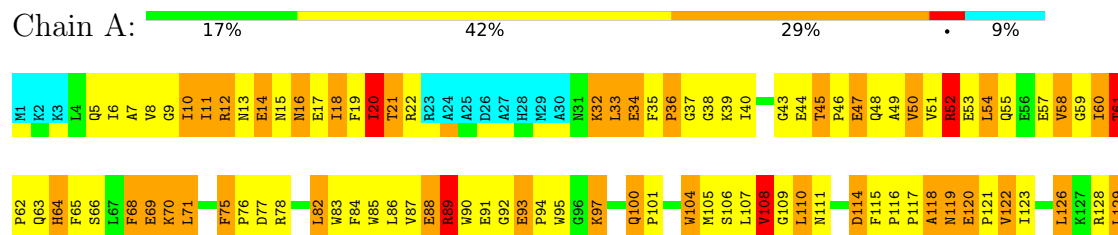


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

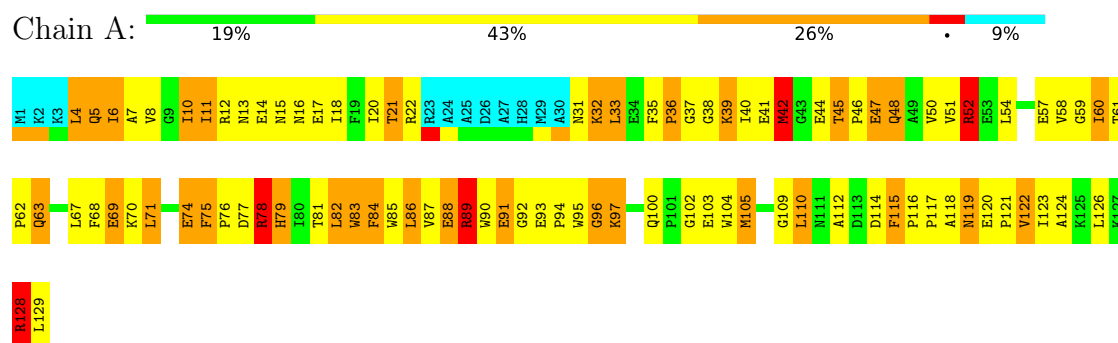
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



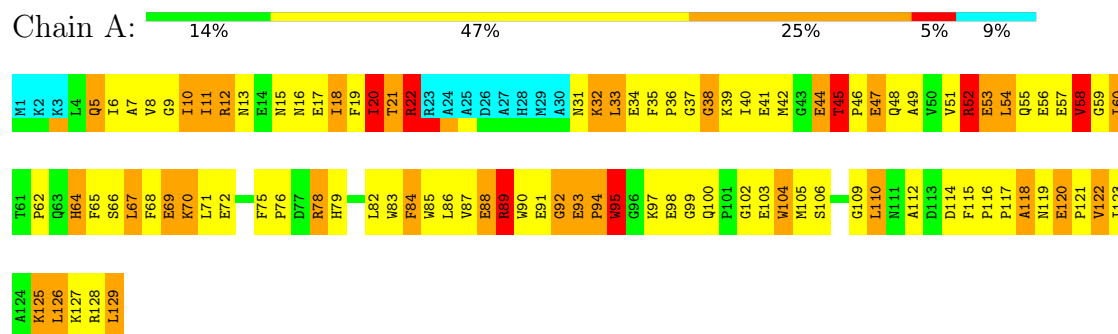
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



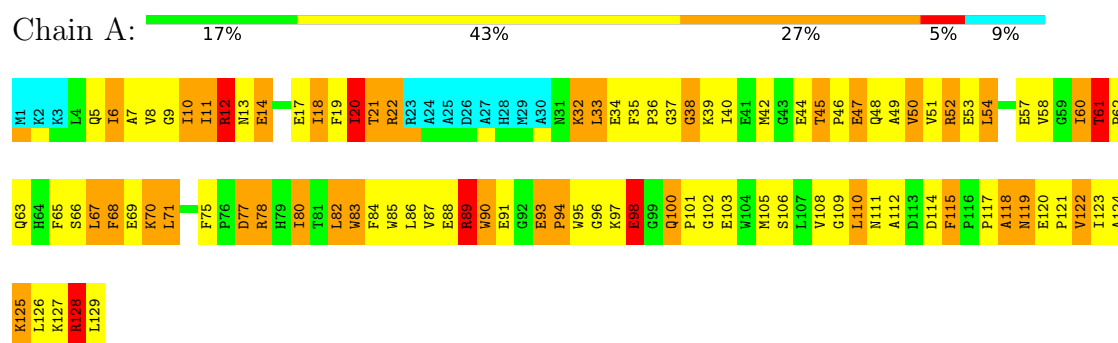
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



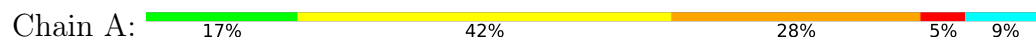
4.2.4 Score per residue for model 4

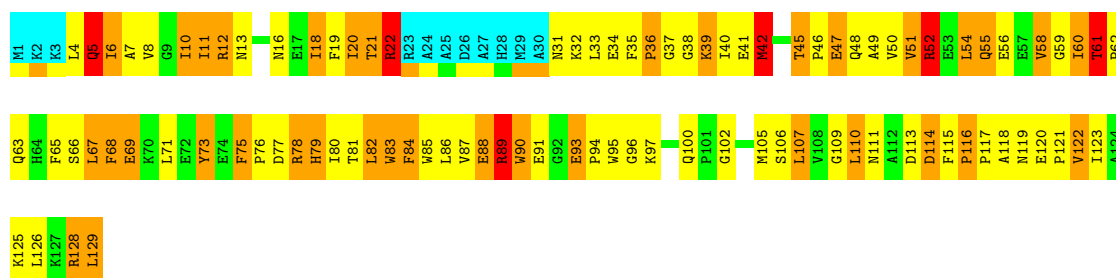
- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

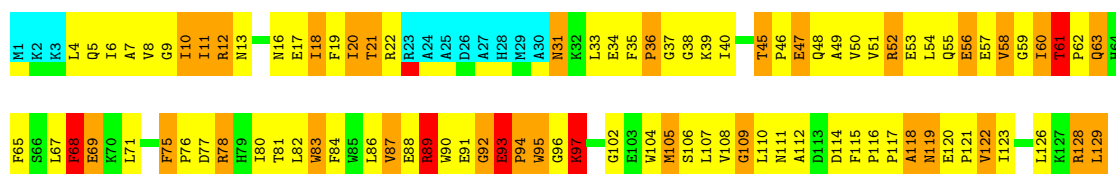




4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

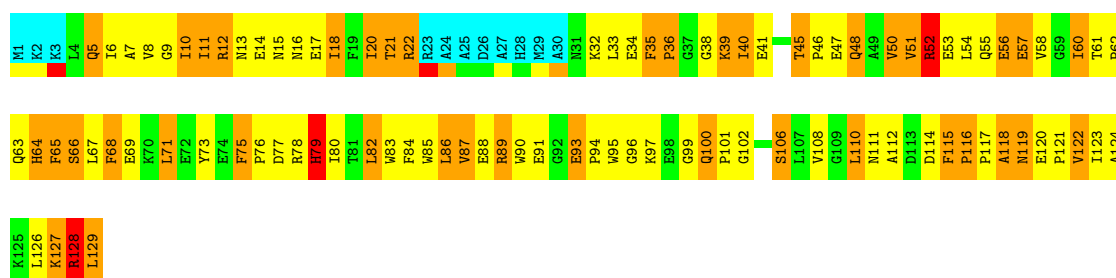
Chain A: 19% 46% 23% 9%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

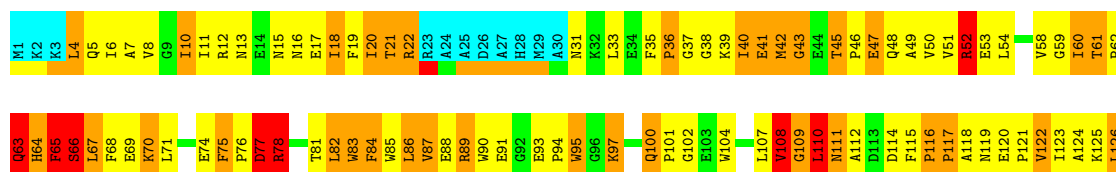
Chain A: 17% 41% 31% 9%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 16% 42% 27% 6% 9%



K127
R128
L129

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 16% 43% 26% 5% 9%

M1 K2 K3 L4 Q5 Q6 A7 V8 G9 I10 I11 E12 R13 N14 E15 N16 E17 E18 F19 I20 T21 R22 R23 A24 A25 D26 A27 H28 M29 A30 A31 K32 L33 E34 F35 P36 G37 G38 K39 E41 E42 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 T61

P62 Q63 H64 F65 S66 L67 F68 E69 R70 K71 L72 E73 Y74 F75 D77 D78 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 E98 G99 W104 M105 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 P116 P117 A118 A119 E120 E121 V122 I123

A124
K125
L126
K127
R128
L129

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 16% 40% 32% 9%

M1 K2 K3 L4 Q5 Q6 A7 V8 G9 I10 I11 E12 R13 N14 E15 N16 E17 E18 F19 I20 T21 R22 R23 A24 A25 D26 A27 H28 M29 A30 A31 K32 L33 E34 F35 P36 G37 K39 E41 E42 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 T61

F65 S66 L67 F68 E69 K70 L71 E72 E73 E74 R75 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 E98 G99 W104 M105 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 P116 P117 A118 A119 E120 E121 V122 I123 K125

L126
K127
R128
L129

4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 15% 45% 27% 5% 9%

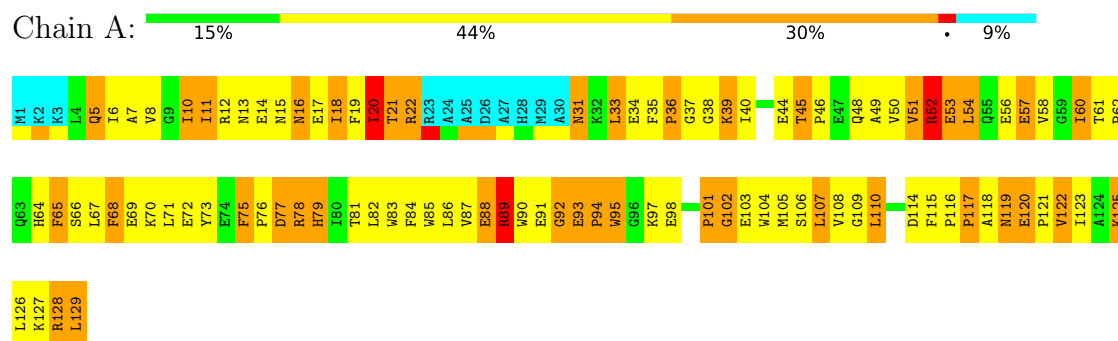
M1 K2 K3 L4 Q5 Q6 A7 V8 G9 I10 I11 E12 R13 N14 E15 N16 E17 E18 F19 I20 T21 R22 R23 A24 A25 D26 A27 H28 M29 A30 A31 K32 L33 E34 F35 P36 G37 T40 E41 M42 G43 E44 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 T61

P62 Q63 H64 F65 S66 L67 F68 E69 R70 K71 L72 E73 Y74 F75 D77 D78 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 Q100 P101 G102 E103 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 P116 P117 A118 A119 E120 E121 V122

I123
A124
K125
L126
K127
R128
L129

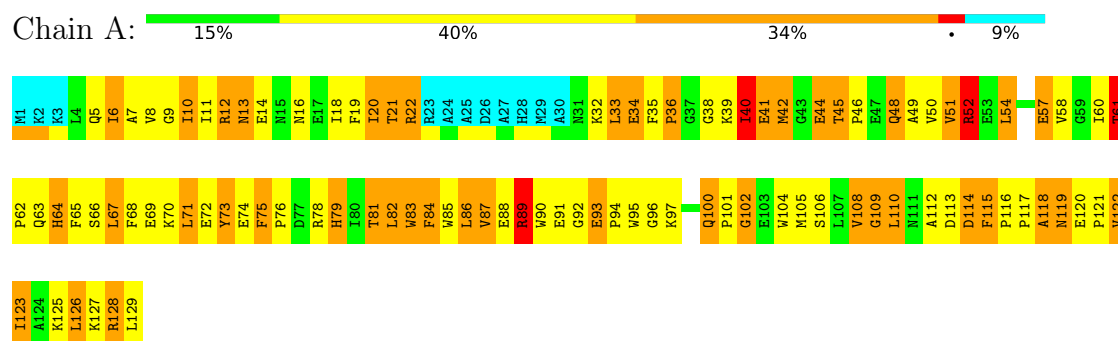
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



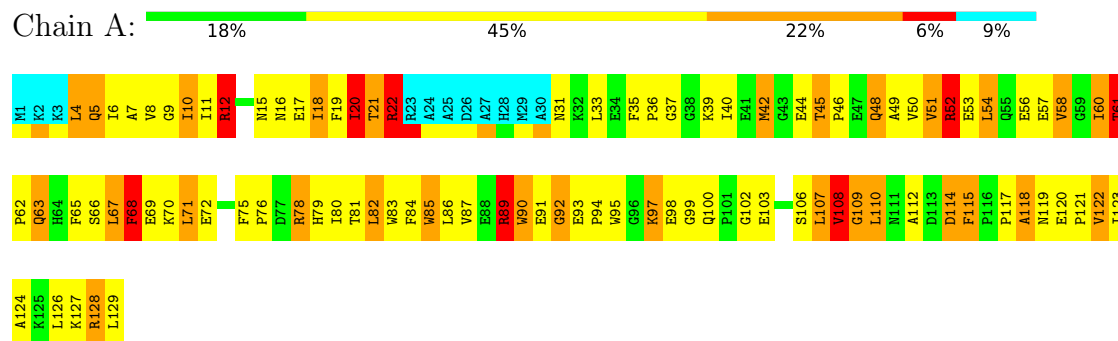
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



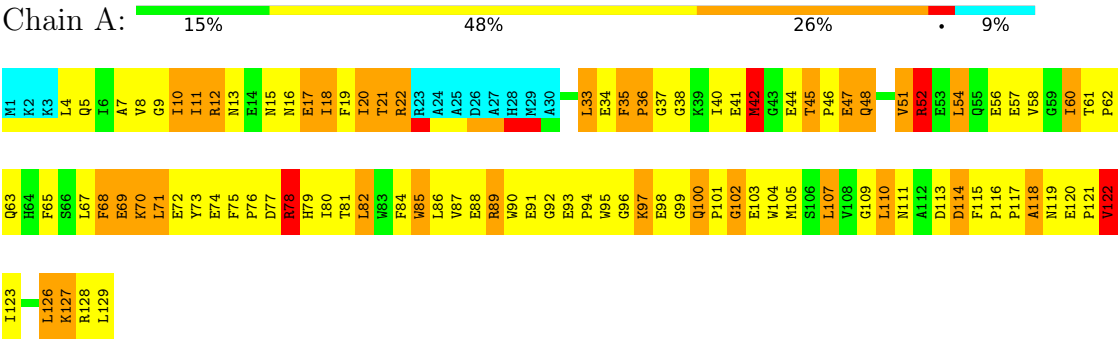
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



4.2.15 Score per residue for model 15

● Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.38±0.01	0±0/1000 (0.0± 0.0%)	1.32±0.02	1±1/1356 (0.1± 0.1%)
All	All	1.38	3/15000 (0.0%)	1.32	16/20340 (0.1%)

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	5.3±0.9
All	All	0	79

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	93	GLU	C-O	-5.72	1.19	1.24	6	1
1	A	43	GLY	N-CA	5.11	1.49	1.44	1	1
1	A	48	GLN	C-N	-5.08	1.27	1.33	13	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	79	HIS	CA-CB-CG	-6.13	107.67	113.80	7	1
1	A	19	PHE	CA-CB-CG	-5.86	107.94	113.80	8	2
1	A	116	PRO	O-C-N	5.63	123.80	121.15	9	2
1	A	51	VAL	N-CA-C	-5.51	105.47	110.82	7	2
1	A	15	ASN	N-CA-C	-5.44	107.20	112.97	11	1
1	A	115	PHE	CA-CB-CG	-5.26	108.54	113.80	10	5
1	A	35	PHE	CA-CB-CG	-5.25	108.55	113.80	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	122	VAL	N-CA-C	-5.02	107.49	111.81	15	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	52	ARG	Sidechain	14
1	A	78	ARG	Sidechain	14
1	A	89	ARG	Sidechain	14
1	A	22	ARG	Sidechain	13
1	A	12	ARG	Sidechain	12
1	A	128	ARG	Sidechain	12

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	972	945	945	178±12
All	All	14580	14175	14175	2676

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 93.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD21	1.06	1.14	1	1
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:CZ2	1.05	1.85	8	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:HD11	1.05	1.21	3	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:HG21	1.05	1.26	2	11
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD11	1.04	1.24	5	3
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CZ3	1.03	1.89	13	12
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:CD1	1.02	1.84	2	7
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD22	1.01	1.32	13	1
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:CD2	1.01	1.86	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:C	0.98	1.83	2	3
1:A:58:VAL:HG21	1:A:93:GLU:O	0.97	1.57	4	11
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD13	0.97	1.31	3	6
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:CG2	0.96	1.90	13	8
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:CD1	0.96	1.95	2	4
1:A:67:LEU:HD22	1:A:85:TRP:CZ3	0.96	1.95	3	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:34:GLU:O	0.94	1.62	15	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HG12	0.94	1.62	6	5
1:A:35:PHE:CE2	1:A:123:ILE:HD11	0.94	1.97	4	3
1:A:67:LEU:HD22	1:A:85:TRP:CE3	0.93	1.98	3	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:HB3	0.93	1.40	11	11
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:OD1	0.92	1.63	13	5
1:A:60:ILE:HD12	1:A:93:GLU:O	0.92	1.65	6	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:CE1	0.91	2.00	14	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD21	0.91	1.39	9	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:HD13	0.91	1.42	4	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:HG11	0.89	2.03	15	6
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:CG	0.88	1.98	3	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CB	0.88	1.97	10	11
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD11	0.88	1.98	2	2
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HD23	0.88	1.68	11	1
1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:VAL:HG12	0.88	1.41	3	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CB	0.88	1.98	3	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:O	0.87	1.67	2	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CZ3	0.87	2.05	13	2
1:A:86:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	0.86	1.43	6	5
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:HB3	0.86	1.45	14	7
1:A:112:ALA:CA	1:A:123:ILE:HG21	0.86	2.01	7	3
1:A:86:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	0.86	1.48	2	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:CG2	0.85	2.01	2	4
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CZ3	0.85	2.07	2	3
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:HG22	0.84	1.72	1	5
1:A:57:GLU:CG	1:A:58:VAL:HG12	0.84	2.02	3	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:95:TRP:C	0.84	1.98	12	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:HA	0.83	1.48	4	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG23	0.83	1.72	1	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:62:PRO:HG3	0.83	1.49	2	3
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD13	0.83	1.73	5	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD12	0.82	2.03	7	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:NE1	0.82	1.89	5	2
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CD2	0.82	2.09	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HG22	0.81	1.75	1	4
1:A:67:LEU:HD12	1:A:84:PHE:O	0.81	1.75	12	6
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:NE1	0.81	1.90	7	3
1:A:71:LEU:HD22	1:A:122:VAL:CG2	0.81	2.06	9	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HG22	0.80	1.52	1	3
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CE3	0.80	2.11	14	8
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:CD1	0.80	2.12	9	6
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:CD	0.80	2.43	12	2
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HB	0.79	1.54	14	8
1:A:107:LEU:HD21	1:A:129:LEU:O	0.79	1.78	10	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD11	0.79	2.07	12	1
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:HD3	0.78	1.93	3	2
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:HD3	0.78	1.54	4	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:CD	0.78	2.09	4	7
1:A:71:LEU:HD22	1:A:122:VAL:HG21	0.78	1.53	9	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	0.78	1.53	12	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD21	0.78	1.55	14	1
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:HD3	0.78	1.55	15	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HD13	0.77	1.56	3	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:114:ASP:OD2	0.77	1.80	13	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:N	0.77	1.94	3	3
1:A:20:ILE:CD1	1:A:105:MET:HE2	0.77	2.10	13	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD12	0.77	1.57	5	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD21	0.76	2.05	1	1
1:A:20:ILE:HG23	1:A:21:THR:N	0.76	1.94	14	6
1:A:11:ILE:HA	1:A:87:VAL:HG22	0.76	1.55	6	10
1:A:58:VAL:HG12	1:A:95:TRP:CD1	0.76	2.15	7	3
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:HG2	0.76	1.58	7	1
1:A:61:THR:N	1:A:62:PRO:CD	0.76	2.49	13	4
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HB2	0.76	1.58	3	1
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:87:VAL:HG12	0.76	2.16	5	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD21	0.75	2.11	6	5
1:A:6:ILE:O	1:A:40:ILE:HD11	0.75	1.80	3	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD21	0.75	2.16	10	4
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD13	0.75	1.57	2	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CD1	0.74	2.18	3	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HG12	0.74	2.12	15	7
1:A:4:LEU:HD13	1:A:81:THR:OG1	0.74	1.83	5	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:83:TRP:O	0.74	1.80	5	5
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CH2	0.74	2.17	5	1
1:A:9:GLY:H	1:A:54:LEU:HD11	0.74	1.40	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:N	0.73	1.98	5	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:HD21	0.73	2.18	5	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG22	0.73	1.59	14	4
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HG21	0.73	1.59	2	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:C	0.73	2.09	6	6
1:A:60:ILE:HG23	1:A:93:GLU:O	0.73	1.84	6	1
1:A:61:THR:O	1:A:61:THR:HG23	0.73	1.82	9	3
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:NE1	0.72	1.99	9	1
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:HG22	0.72	2.09	4	3
1:A:18:ILE:HD13	1:A:110:LEU:HD11	0.72	1.61	5	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:72:GLU:N	0.72	1.99	3	1
1:A:6:ILE:HD13	1:A:80:ILE:HG23	0.72	1.60	5	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD11	0.72	2.12	5	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD12	0.72	1.61	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG12	0.71	1.85	14	3
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD12	0.71	1.60	3	5
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:HG21	0.71	1.61	10	6
1:A:8:VAL:HG13	1:A:8:VAL:O	0.71	1.85	6	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	0.71	1.60	6	1
1:A:18:ILE:HG13	1:A:110:LEU:HD22	0.71	1.62	10	1
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HD12	0.70	2.20	1	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG21	0.70	2.09	14	7
1:A:18:ILE:HD13	1:A:18:ILE:N	0.70	2.01	12	3
1:A:21:THR:HG23	1:A:102:GLY:CA	0.70	2.16	5	2
1:A:18:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HB2	0.70	1.60	4	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HD12	0.70	1.85	12	2
1:A:5:GLN:HG2	1:A:40:ILE:HG21	0.70	1.61	13	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:69:GLU:N	0.70	2.59	7	15
1:A:90:TRP:NE1	1:A:92:GLY:O	0.70	2.25	3	2
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CB	0.70	2.16	8	2
1:A:21:THR:HG23	1:A:102:GLY:HA2	0.70	1.62	3	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:O	0.70	1.86	11	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:123:ILE:HD11	0.70	2.21	4	3
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:NE1	0.69	2.02	6	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE1	0.69	2.80	8	4
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CG	0.69	2.44	11	9
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:CD	0.69	2.55	12	15
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD11	0.69	2.12	3	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:85:TRP:CH2	0.69	2.22	11	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CZ	0.69	2.80	3	5
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:O	0.69	2.46	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CZ	0.69	2.80	6	5
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:CZ2	0.69	2.22	15	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:HB2	0.69	1.63	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:HA	0.69	1.65	2	7
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:CZ2	0.69	2.23	3	1
1:A:106:SER:O	1:A:108:VAL:HG23	0.69	1.88	7	2
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD12	0.68	1.61	7	2
1:A:6:ILE:CD1	1:A:80:ILE:HG23	0.68	2.17	5	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:85:TRP:CH2	0.68	2.81	15	1
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.68	2.62	13	5
1:A:58:VAL:HG11	1:A:93:GLU:O	0.68	1.87	11	5
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CE3	0.68	2.22	13	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:8:VAL:O	0.68	1.88	9	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:N	0.68	2.60	13	1
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD2	0.68	1.66	11	2
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HB3	0.68	1.65	3	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:93:GLU:O	0.68	2.41	6	1
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.68	2.19	6	5
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HD11	0.68	2.18	5	3
1:A:58:VAL:HG22	1:A:60:ILE:HD13	0.68	1.63	6	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:HE1	0.68	1.48	5	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HD21	0.67	2.23	1	4
1:A:95:TRP:CE3	1:A:95:TRP:C	0.67	2.72	8	1
1:A:69:GLU:O	1:A:122:VAL:HG21	0.67	1.89	6	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	0.67	1.64	14	1
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:CD	0.67	2.67	5	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:HB3	0.67	1.66	12	4
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:HB3	0.67	1.90	12	5
1:A:75:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HD13	0.67	2.25	4	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:O	0.67	1.89	6	1
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:HD23	0.67	2.05	8	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:HD3	0.67	1.67	10	7
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:HB2	0.67	1.90	9	10
1:A:126:LEU:HD23	1:A:126:LEU:N	0.67	2.05	1	4
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:O	0.67	2.48	9	6
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:CG	0.67	2.78	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:CA	0.67	2.19	13	2
1:A:84:PHE:CG	1:A:122:VAL:HG11	0.67	2.25	14	5
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:HG13	0.67	1.66	7	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CG	0.67	2.19	7	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD21	0.66	2.19	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:HB2	0.66	1.68	9	2
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:HZ2	0.66	1.46	8	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:HD1	0.66	1.50	9	4
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:HE1	0.66	1.48	4	4
1:A:85:TRP:C	1:A:85:TRP:CD1	0.66	2.73	14	2
1:A:11:ILE:HD13	1:A:60:ILE:CD1	0.66	2.20	13	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:TRP:N	0.66	2.06	3	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:HG12	0.66	2.20	11	7
1:A:4:LEU:HG	1:A:80:ILE:HG22	0.66	1.68	10	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:63:GLN:OE1	0.66	1.91	1	1
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:HA	0.66	1.64	2	1
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:CG1	0.66	2.21	6	8
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:CD1	0.66	2.79	2	5
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:HD12	0.66	2.15	5	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG13	0.66	2.25	15	3
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:CE2	0.66	2.26	15	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:HZ3	0.65	1.45	13	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HA	0.65	1.67	6	1
1:A:54:LEU:CB	1:A:95:TRP:CE2	0.65	2.80	6	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:85:TRP:CZ3	0.65	2.83	13	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:TRP:H	0.65	1.51	3	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:CD2	0.65	2.80	6	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:HB3	0.65	1.90	10	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:HG2	0.65	1.67	3	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:CD1	0.65	2.26	5	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:85:TRP:CZ3	0.65	2.27	2	1
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:HD3	0.65	2.17	5	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:87:VAL:CG1	0.65	2.80	14	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:90:TRP:CD1	0.64	2.27	8	7
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:O	0.64	1.91	3	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:HG22	0.64	1.92	13	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:91:GLU:N	0.64	2.65	9	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD22	0.64	2.17	13	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD22	0.64	2.22	15	1
1:A:83:TRP:N	1:A:83:TRP:CD1	0.64	2.66	1	4
1:A:126:LEU:H	1:A:126:LEU:HD23	0.64	1.53	14	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:HD2	0.64	1.69	4	7
1:A:33:LEU:HD11	1:A:105:MET:HE1	0.64	1.69	9	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CD1	0.64	2.81	3	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.64	1.91	14	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:CD1	0.64	2.81	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:HD12	0.64	2.17	4	2
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.64	2.65	12	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:OXT	0.64	1.93	10	1
1:A:33:LEU:N	1:A:33:LEU:CD2	0.64	2.61	5	1
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:87:VAL:CG1	0.64	2.81	5	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB3	0.63	1.70	1	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.28	1	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD13	0.63	2.19	3	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CE2	0.63	2.86	15	4
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CH2	0.63	2.66	6	2
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HG12	0.63	1.68	4	5
1:A:51:VAL:CG1	1:A:52:ARG:N	0.63	2.61	12	13
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HG21	0.63	2.23	9	2
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:HE3	0.63	1.70	4	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CB	0.63	2.23	15	3
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:CH2	0.63	2.82	8	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:CZ2	0.63	2.82	1	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:122:VAL:HG11	0.63	2.28	10	2
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:HB3	0.63	1.93	3	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG12	0.63	2.28	11	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:54:LEU:HD12	0.63	2.23	6	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:HD12	0.63	1.69	7	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:21:THR:N	0.63	2.61	15	5
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB2	0.63	2.24	2	7
1:A:67:LEU:CD2	1:A:85:TRP:CZ3	0.63	2.80	3	1
1:A:100:GLN:N	1:A:101:PRO:CD	0.63	2.61	15	3
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CB	0.62	2.24	2	3
1:A:33:LEU:HD23	1:A:114:ASP:O	0.62	1.94	5	2
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.62	2.63	7	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CH2	0.62	2.77	4	3
1:A:20:ILE:HD11	1:A:34:GLU:O	0.62	1.94	6	2
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HD1	0.62	1.53	14	4
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:HB2	0.62	1.94	12	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CH2	0.62	2.29	13	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:O	0.62	1.94	2	3
1:A:40:ILE:HG23	1:A:40:ILE:O	0.62	1.94	11	9
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:C	0.62	2.72	12	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HD12	0.62	2.29	1	4
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:CD	0.62	2.77	6	5
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:HD22	0.62	2.18	5	1
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ALA:N	0.62	2.09	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLN:N	1:A:101:PRO:HD3	0.62	2.09	7	3
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CB	0.62	2.78	9	8
1:A:89:ARG:O	1:A:90:TRP:HB3	0.62	1.93	4	5
1:A:60:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CD1	0.62	2.82	11	3
1:A:4:LEU:CG	1:A:80:ILE:HG22	0.62	2.25	10	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:82:LEU:HD11	0.61	1.70	7	1
1:A:5:GLN:OE1	1:A:81:THR:HG21	0.61	1.93	11	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CE3	0.61	2.83	14	5
1:A:45:THR:HG22	1:A:47:GLU:H	0.61	1.55	2	2
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HB3	0.61	1.71	15	1
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:CG	0.61	2.53	8	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:35:PHE:O	0.61	2.48	7	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:35:PHE:O	0.61	1.96	10	2
1:A:71:LEU:O	1:A:81:THR:HG23	0.61	1.96	5	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:CD1	0.61	2.30	14	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:92:GLY:N	0.61	2.64	3	2
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:NE1	0.61	2.64	4	2
1:A:50:VAL:CG2	1:A:85:TRP:CE3	0.61	2.83	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:CD1	0.61	2.80	2	1
1:A:35:PHE:CB	1:A:36:PRO:CD	0.61	2.78	10	2
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HA	0.61	1.96	2	8
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:C	0.61	2.20	8	12
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:CG2	0.61	2.78	3	7
1:A:83:TRP:O	1:A:83:TRP:CD1	0.61	2.54	5	2
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:CD2	0.60	2.26	3	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE1	0.60	2.89	3	4
1:A:123:ILE:HD13	1:A:126:LEU:HD12	0.60	1.73	7	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CH2	0.60	2.30	8	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:CB	0.60	2.25	5	2
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:N	0.60	2.69	10	9
1:A:11:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CZ3	0.60	2.82	10	5
1:A:54:LEU:HD21	1:A:63:GLN:HE22	0.60	1.55	4	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:115:PHE:CE2	0.60	2.31	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD12	0.60	1.71	7	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CG	0.60	2.80	7	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:CD1	0.60	2.31	11	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:O	0.60	2.49	7	10
1:A:8:VAL:HG11	1:A:35:PHE:HB3	0.60	1.71	8	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:N	0.60	2.64	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:HG23	0.60	2.26	13	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:CD	0.60	2.80	10	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:PHE:CD2	1:A:19:PHE:O	0.60	2.54	6	6
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG11	0.60	2.32	13	3
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD3	0.60	1.72	3	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:PHE:CE1	0.60	2.31	11	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:84:PHE:CZ	0.60	2.90	3	3
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:CD2	0.60	2.54	8	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:CB	0.60	2.50	13	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CD1	0.59	2.32	8	2
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CD1	0.59	2.32	2	4
1:A:4:LEU:HD12	1:A:4:LEU:O	0.59	1.97	5	2
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:CD	0.59	2.80	10	7
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CA	0.59	2.27	9	4
1:A:65:PHE:CD2	1:A:87:VAL:HG12	0.59	2.32	3	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:60:ILE:H	0.59	1.57	5	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:60:ILE:CD1	0.59	2.28	6	1
1:A:5:GLN:HG3	1:A:40:ILE:HG23	0.59	1.73	10	1
1:A:20:ILE:HD11	1:A:105:MET:HE2	0.59	1.74	13	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:63:GLN:CD	0.59	2.22	4	2
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:CD1	0.59	2.55	3	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:108:VAL:O	0.59	1.98	4	2
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:HG22	0.59	1.95	7	2
1:A:68:PHE:CD1	1:A:68:PHE:C	0.59	2.80	9	6
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:HD2	0.59	2.12	4	15
1:A:6:ILE:O	1:A:83:TRP:CD1	0.59	2.56	7	7
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:CG2	0.59	2.50	11	11
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:HB3	0.59	2.27	5	7
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:HD3	0.59	1.75	5	4
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:C	0.59	2.45	6	3
1:A:14:GLU:CG	1:A:89:ARG:NH1	0.59	2.66	12	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:100:GLN:OE1	0.59	2.56	4	1
1:A:85:TRP:CE3	1:A:87:VAL:HG12	0.59	2.32	5	1
1:A:111:ASN:HB2	1:A:123:ILE:HD12	0.59	1.75	10	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:85:TRP:CH2	0.59	2.91	15	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:GLY:N	0.58	2.66	8	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:H	0.58	1.58	3	2
1:A:61:THR:H	1:A:62:PRO:HD3	0.58	1.58	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:CD2	0.58	2.22	9	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:HD2	0.58	1.74	3	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:ARG:N	0.58	2.13	12	6
1:A:107:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD23	0.58	2.28	6	2
1:A:19:PHE:O	1:A:19:PHE:CG	0.58	2.54	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:CD1	0.58	2.82	8	4
1:A:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:O	0.58	2.56	10	2
1:A:68:PHE:CZ	1:A:69:GLU:O	0.58	2.56	13	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CG1	0.58	2.51	13	14
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:HB3	0.58	1.74	8	1
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:C	0.58	2.46	13	12
1:A:68:PHE:HE2	1:A:122:VAL:HG13	0.58	1.57	5	5
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:CG1	0.58	2.82	6	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:CB	0.58	2.86	7	1
1:A:115:PHE:CE1	1:A:123:ILE:HD12	0.58	2.33	13	1
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:CD1	0.58	2.77	1	12
1:A:90:TRP:CD1	1:A:92:GLY:O	0.58	2.57	3	5
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HG23	0.58	1.99	2	7
1:A:54:LEU:HB2	1:A:95:TRP:CE2	0.58	2.33	6	1
1:A:65:PHE:HB2	1:A:87:VAL:HG12	0.58	1.74	15	4
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:HA	0.58	2.28	12	1
1:A:4:LEU:H	1:A:4:LEU:HD12	0.58	1.59	2	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:CB	0.58	2.52	10	2
1:A:18:ILE:CG1	1:A:110:LEU:HD22	0.58	2.29	10	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:62:PRO:HD3	0.58	1.74	14	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CH2	0.57	2.57	1	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:GLU:N	0.57	2.14	11	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:105:MET:HE2	0.57	1.76	10	2
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG11	0.57	2.34	8	3
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD2	0.57	2.29	10	8
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:HD2	0.57	2.34	1	5
1:A:58:VAL:CB	1:A:93:GLU:O	0.57	2.52	14	4
1:A:60:ILE:HB	1:A:62:PRO:HD3	0.57	1.76	11	2
1:A:112:ALA:CA	1:A:123:ILE:CG2	0.57	2.81	10	1
1:A:78:ARG:C	1:A:79:HIS:CD2	0.57	2.83	2	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:CA	0.57	2.28	13	4
1:A:33:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.57	2.88	8	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:9:GLY:N	0.57	2.14	1	4
1:A:90:TRP:CE3	1:A:90:TRP:N	0.57	2.72	8	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:83:TRP:O	0.57	2.52	2	5
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:N	0.57	2.73	2	2
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:CD	0.57	2.68	4	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CZ2	0.57	2.57	13	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:HB3	0.57	1.76	13	3
1:A:67:LEU:CD2	1:A:83:TRP:CZ3	0.57	2.87	5	3
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:O	0.57	2.57	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.57	2.58	6	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:60:ILE:HG23	0.57	1.77	13	1
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:CB	0.57	2.53	12	2
1:A:12:ARG:C	1:A:13:ASN:ND2	0.57	2.63	7	2
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:CD1	0.57	2.29	10	1
1:A:19:PHE:O	1:A:19:PHE:CD2	0.56	2.58	14	2
1:A:54:LEU:HD11	1:A:95:TRP:O	0.56	1.99	12	1
1:A:72:GLU:HG3	1:A:81:THR:HG23	0.56	1.76	13	2
1:A:63:GLN:HA	1:A:89:ARG:O	0.56	2.00	4	5
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CD1	0.56	2.93	4	1
1:A:61:THR:N	1:A:62:PRO:HD3	0.56	2.14	13	4
1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:ALA:N	0.56	2.15	10	5
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:CB	0.56	2.53	13	14
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:CD1	0.56	2.30	7	2
1:A:33:LEU:CG	1:A:114:ASP:O	0.56	2.54	5	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CZ2	0.56	2.35	8	2
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD2	0.56	2.83	8	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:O	0.56	2.54	3	3
1:A:8:VAL:HG13	1:A:83:TRP:O	0.56	2.00	7	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:52:ARG:N	0.56	2.16	8	8
1:A:45:THR:HG23	1:A:47:GLU:H	0.56	1.59	6	3
1:A:53:GLU:O	1:A:95:TRP:NE1	0.56	2.38	7	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:105:MET:HE2	0.56	1.78	13	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:119:ASN:OD1	0.56	2.59	4	4
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:CD1	0.56	2.88	1	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:7:ALA:N	0.56	2.68	14	9
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:95:TRP:CH2	0.56	2.93	4	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:84:PHE:CE2	0.56	2.94	10	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:CB	0.56	2.30	15	4
1:A:58:VAL:CG1	1:A:93:GLU:O	0.56	2.54	1	4
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:C	0.56	2.49	3	4
1:A:116:PRO:N	1:A:117:PRO:CD	0.56	2.68	5	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CD1	0.56	2.31	8	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:79:HIS:O	0.56	2.00	15	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:91:GLU:O	0.56	2.00	7	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:119:ASN:OD1	0.56	2.59	4	1
1:A:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:NE1	0.56	2.16	7	1
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:HB1	0.56	1.77	11	2
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:CG2	0.56	2.54	13	1
1:A:119:ASN:C	1:A:121:PRO:HD2	0.55	2.26	5	11
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:N	0.55	2.73	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:N	1:A:123:ILE:CG2	0.55	2.69	7	2
1:A:60:ILE:O	1:A:64:HIS:NE2	0.55	2.38	8	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:C	0.55	2.80	12	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:63:GLN:HE22	0.55	1.61	14	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:85:TRP:CZ3	0.55	2.93	14	2
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:HD23	0.55	2.36	15	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HD11	0.55	2.37	2	1
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CD2	0.55	2.59	4	2
1:A:116:PRO:N	1:A:117:PRO:HD3	0.55	2.15	5	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG21	0.55	2.31	7	2
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:CZ2	0.55	2.89	8	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:NE1	0.55	2.17	4	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:N	0.55	2.74	8	7
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:HB2	0.55	2.01	13	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:GLU:CB	0.55	2.54	9	4
1:A:21:THR:HG22	1:A:100:GLN:OE1	0.55	2.01	1	1
1:A:106:SER:O	1:A:107:LEU:C	0.55	2.49	12	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:HB3	0.55	1.78	1	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:HB3	0.55	2.37	7	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:CE2	0.55	2.89	1	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:PHE:O	0.55	2.60	3	1
1:A:46:PRO:O	1:A:83:TRP:CH2	0.55	2.60	4	1
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:CE	0.55	2.31	4	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:20:ILE:N	0.55	2.15	5	1
1:A:123:ILE:CA	1:A:126:LEU:HD12	0.55	2.29	5	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:95:TRP:O	0.55	2.59	8	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:N	0.55	2.17	13	4
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:CD	0.55	2.85	12	11
1:A:10:ILE:C	1:A:11:ILE:CG1	0.55	2.80	2	6
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:CD1	0.55	2.79	4	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:126:LEU:HD21	0.55	2.36	5	1
1:A:18:ILE:HG13	1:A:110:LEU:HD13	0.55	1.78	10	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CZ3	0.55	2.86	13	1
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:CA	0.55	2.55	2	4
1:A:48:GLN:O	1:A:51:VAL:HG12	0.55	2.02	15	6
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:CB	0.55	2.32	3	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:CG1	0.55	2.87	15	4
1:A:67:LEU:CD1	1:A:84:PHE:O	0.55	2.54	4	3
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:CB	0.55	2.32	15	1
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:CG2	0.54	2.55	7	6
1:A:5:GLN:HB2	1:A:40:ILE:HG21	0.54	1.77	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:THR:O	1:A:61:THR:CG2	0.54	2.55	9	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:60:ILE:HD11	0.54	1.78	13	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:HB3	0.54	1.78	7	2
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:CB	0.54	2.55	9	3
1:A:62:PRO:C	1:A:90:TRP:HA	0.54	2.27	14	4
1:A:33:LEU:HD11	1:A:105:MET:CE	0.54	2.31	5	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:117:PRO:HG3	0.54	2.37	5	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:CG	0.54	2.32	9	1
1:A:90:TRP:CZ2	1:A:94:PRO:HG3	0.54	2.38	10	4
1:A:54:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HG13	0.54	1.78	13	1
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CE2	0.54	2.37	4	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:63:GLN:OE1	0.54	2.02	1	1
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:O	0.54	2.23	1	2
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:CB	0.54	2.56	3	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CG	0.54	2.56	11	5
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:O	0.54	2.55	11	2
1:A:20:ILE:HG22	1:A:21:THR:N	0.54	2.17	9	3
1:A:46:PRO:HB2	1:A:83:TRP:CH2	0.54	2.37	2	1
1:A:70:LYS:HD3	1:A:83:TRP:CE3	0.54	2.36	3	2
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CE1	0.54	2.37	5	3
1:A:89:ARG:CZ	1:A:89:ARG:CB	0.54	2.85	4	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:CE3	0.54	2.38	6	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:87:VAL:HG12	0.54	2.37	15	2
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CD	0.54	2.56	15	3
1:A:33:LEU:CD2	1:A:114:ASP:O	0.54	2.56	12	2
1:A:90:TRP:CE2	1:A:94:PRO:HG3	0.54	2.38	5	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.54	2.76	5	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:O	0.54	2.41	12	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CG	0.54	2.55	2	8
1:A:15:ASN:O	1:A:17:GLU:CG	0.54	2.56	12	5
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:C	0.54	2.80	2	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:C	0.54	2.26	2	3
1:A:57:GLU:OE2	1:A:95:TRP:CD1	0.54	2.60	3	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:PRO:HD3	0.54	2.02	6	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG22	0.54	2.38	7	1
1:A:99:GLY:C	1:A:101:PRO:CD	0.54	2.81	15	2
1:A:19:PHE:CZ	1:A:94:PRO:O	0.54	2.61	10	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CG	0.54	2.38	10	3
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:HB2	0.54	2.33	4	5
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:HE1	0.54	1.58	9	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:90:TRP:CZ3	0.54	2.38	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HD12	0.54	2.17	9	1
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:O	0.54	2.26	3	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG13	0.54	2.38	13	3
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.54	2.56	14	2
1:A:4:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HG22	0.53	2.32	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE2	0.53	2.97	14	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:HD2	0.53	2.34	10	7
1:A:20:ILE:HG13	1:A:33:LEU:HD23	0.53	1.78	3	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:CD2	0.53	2.38	6	1
1:A:68:PHE:HB3	1:A:86:LEU:HD23	0.53	1.80	9	1
1:A:54:LEU:O	1:A:59:GLY:N	0.53	2.41	3	2
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:HA	0.53	1.79	3	1
1:A:9:GLY:N	1:A:54:LEU:HD11	0.53	2.16	6	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.53	2.28	10	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:HD23	0.53	2.02	14	2
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:CD1	0.53	2.56	15	2
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:HB2	0.53	2.39	7	3
1:A:21:THR:O	1:A:34:GLU:CG	0.53	2.56	10	1
1:A:44:GLU:CB	1:A:48:GLN:OE1	0.53	2.56	13	1
1:A:75:PHE:CD2	1:A:76:PRO:HD2	0.53	2.39	7	7
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:VAL:H	0.53	1.63	4	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:CD2	0.53	2.56	14	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:CD1	0.53	2.56	15	1
1:A:57:GLU:HB2	1:A:95:TRP:CD1	0.53	2.39	2	2
1:A:122:VAL:CG1	1:A:126:LEU:HD11	0.53	2.34	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG1	0.53	2.56	9	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:95:TRP:N	0.53	2.18	12	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HD13	0.53	1.79	14	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:HD21	0.53	1.81	15	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HG	0.53	1.81	4	1
1:A:4:LEU:C	1:A:5:GLN:CG	0.53	2.80	5	1
1:A:69:GLU:O	1:A:122:VAL:CG2	0.53	2.57	12	2
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:N	0.53	2.19	10	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:85:TRP:CE3	0.53	2.38	12	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:GLU:HB2	0.53	2.04	11	4
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	8	6
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:CE2	0.53	2.38	5	6
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:GLY:H	0.53	1.64	3	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:115:PHE:CD1	0.53	2.39	6	3
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	8	1
1:A:47:GLU:O	1:A:48:GLN:C	0.53	2.51	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:HB2	0.53	2.39	1	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:HB2	0.53	2.33	3	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:C	0.53	2.86	5	3
1:A:17:GLU:CB	1:A:105:MET:O	0.53	2.57	6	2
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CE2	0.53	2.38	6	1
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:CE2	0.53	2.36	8	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:VAL:N	0.53	2.72	1	4
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.53	2.33	1	11
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:CD2	0.53	2.39	2	1
1:A:6:ILE:O	1:A:40:ILE:CD1	0.53	2.56	3	1
1:A:22:ARG:N	1:A:100:GLN:OE1	0.53	2.42	9	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:84:PHE:C	0.53	2.29	12	1
1:A:7:ALA:HB2	1:A:40:ILE:HB	0.53	1.79	13	1
1:A:57:GLU:OE2	1:A:95:TRP:NE1	0.52	2.42	3	1
1:A:66:SER:O	1:A:68:PHE:N	0.52	2.41	4	2
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CA	0.52	2.87	12	1
1:A:109:GLY:O	1:A:114:ASP:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:115:PHE:CE2	0.52	2.40	8	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:125:LYS:HB2	0.52	2.39	9	1
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:CG2	0.52	2.82	13	2
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CD	0.52	2.57	8	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:PHE:HB3	0.52	2.38	3	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:O	0.52	2.57	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG22	0.52	2.34	6	2
1:A:99:GLY:C	1:A:101:PRO:HD3	0.52	2.30	15	2
1:A:111:ASN:HB3	1:A:115:PHE:CD1	0.52	2.38	10	1
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:HD12	0.52	2.30	11	2
1:A:16:ASN:CG	1:A:16:ASN:O	0.52	2.53	9	11
1:A:92:GLY:C	1:A:94:PRO:HD3	0.52	2.30	3	1
1:A:75:PHE:CE2	1:A:80:ILE:CD1	0.52	2.93	4	1
1:A:47:GLU:C	1:A:51:VAL:HG12	0.52	2.28	6	2
1:A:110:LEU:CD2	1:A:114:ASP:OD1	0.52	2.57	8	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:119:ASN:OD1	0.52	2.56	9	1
1:A:110:LEU:HG	1:A:111:ASN:N	0.52	2.20	10	1
1:A:40:ILE:HD13	1:A:83:TRP:CZ2	0.52	2.40	1	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:CB	0.52	2.87	1	3
1:A:58:VAL:HG23	1:A:59:GLY:N	0.52	2.20	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CB	0.52	2.83	3	1
1:A:5:GLN:HB2	1:A:40:ILE:CG2	0.52	2.33	4	4
1:A:12:ARG:O	1:A:13:ASN:ND2	0.52	2.43	7	3
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE1	0.52	2.98	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:CG	0.52	2.57	6	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:HB2	0.52	1.82	1	3
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:CA	0.52	2.58	11	4
1:A:22:ARG:CD	1:A:32:LYS:O	0.52	2.58	3	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:62:PRO:HD3	0.52	2.34	14	2
1:A:66:SER:O	1:A:86:LEU:O	0.52	2.28	13	2
1:A:105:MET:SD	1:A:105:MET:N	0.52	2.82	10	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:ALA:H	0.52	1.64	1	4
1:A:18:ILE:N	1:A:18:ILE:CD1	0.52	2.67	12	3
1:A:50:VAL:O	1:A:53:GLU:N	0.52	2.43	4	5
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:CG	0.52	2.92	1	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CG	0.52	2.35	2	1
1:A:60:ILE:C	1:A:62:PRO:HD3	0.52	2.30	13	2
1:A:12:ARG:CZ	1:A:88:GLU:OE2	0.52	2.57	11	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:CA	0.52	2.35	12	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:CD1	0.52	2.87	12	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:C	0.52	2.30	13	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:C	0.52	2.53	8	11
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD13	0.52	1.81	4	3
1:A:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:CD1	0.52	2.40	15	4
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CD2	0.52	2.97	13	1
1:A:127:LYS:HG3	1:A:128:ARG:N	0.52	2.18	15	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HH2	0.51	1.65	5	2
1:A:4:LEU:HA	1:A:79:HIS:O	0.51	2.05	2	2
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:CB	0.51	2.58	3	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:117:PRO:HG3	0.51	2.40	5	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:CG2	0.51	2.35	10	2
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ALA:C	0.51	2.54	11	6
1:A:13:ASN:CG	1:A:88:GLU:O	0.51	2.52	2	3
1:A:50:VAL:O	1:A:51:VAL:C	0.51	2.54	4	8
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CA	0.51	2.34	11	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:CB	0.51	2.36	1	2
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:C	0.51	2.52	12	3
1:A:5:GLN:CB	1:A:40:ILE:CG2	0.51	2.89	4	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:C	0.51	2.53	8	2
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:O	0.51	2.29	8	9
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:O	0.51	2.28	8	3
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:NE1	0.51	2.20	4	1
1:A:18:ILE:HB	1:A:20:ILE:HD11	0.51	1.82	5	3
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:CG	0.51	2.58	4	1
1:A:126:LEU:CB	1:A:129:LEU:HD13	0.51	2.28	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:CB	0.51	2.88	6	1
1:A:65:PHE:CA	1:A:87:VAL:HG23	0.51	2.36	11	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:N	0.51	2.42	2	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD3	0.51	2.35	3	1
1:A:35:PHE:HB2	1:A:36:PRO:CD	0.51	2.36	7	1
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:HD2	0.51	2.18	12	1
1:A:48:GLN:C	1:A:51:VAL:HG12	0.51	2.31	15	3
1:A:46:PRO:O	1:A:83:TRP:CZ2	0.51	2.63	2	1
1:A:44:GLU:C	1:A:45:THR:HG22	0.51	2.31	3	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:CD1	0.51	2.41	12	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:126:LEU:C	0.51	2.84	15	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:C	0.51	2.54	8	4
1:A:54:LEU:HB2	1:A:95:TRP:CZ2	0.51	2.41	6	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:CG	0.51	2.59	11	2
1:A:112:ALA:N	1:A:123:ILE:HG21	0.51	2.19	7	2
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:HB3	0.51	2.05	15	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG21	0.51	2.41	11	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CZ3	0.50	2.41	9	3
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:CD1	0.50	2.36	11	10
1:A:65:PHE:CG	1:A:85:TRP:CZ3	0.50	3.00	1	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HG22	0.50	2.36	11	2
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CD1	0.50	2.64	1	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:90:TRP:HB2	0.50	2.36	14	3
1:A:119:ASN:HB3	1:A:122:VAL:HG23	0.50	1.83	9	1
1:A:35:PHE:HZ	1:A:123:ILE:HD11	0.50	1.66	12	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:HD1	0.50	1.66	12	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CE3	0.50	2.93	13	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:CE2	0.50	2.95	7	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:N	0.50	2.80	12	2
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CE2	0.50	2.42	12	2
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:HA	0.50	2.06	14	4
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CB	0.50	2.36	4	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CB	0.50	2.36	13	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:93:GLU:HB3	0.50	1.82	6	1
1:A:111:ASN:HB3	1:A:115:PHE:CE1	0.50	2.41	10	1
1:A:62:PRO:HB2	1:A:65:PHE:CE1	0.50	2.41	12	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HG3	0.50	2.06	6	4
1:A:21:THR:HB	1:A:36:PRO:CG	0.50	2.37	3	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:52:ARG:HB2	0.50	2.35	14	1
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:CZ2	0.50	2.41	7	1
1:A:67:LEU:HB2	1:A:85:TRP:CE3	0.50	2.42	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:O	0.50	2.59	12	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:CG1	0.50	2.94	13	1
1:A:16:ASN:ND2	1:A:108:VAL:HG23	0.50	2.22	14	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HG	0.50	2.41	15	1
1:A:97:LYS:O	1:A:98:GLU:C	0.50	2.53	15	2
1:A:6:ILE:HD13	1:A:80:ILE:CG2	0.50	2.34	5	1
1:A:90:TRP:CE2	1:A:94:PRO:HA	0.50	2.41	6	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:CD	0.50	2.37	9	1
1:A:60:ILE:O	1:A:62:PRO:HD3	0.50	2.07	10	2
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:CE2	0.50	2.42	3	2
1:A:4:LEU:CA	1:A:79:HIS:O	0.50	2.60	2	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CG1	0.50	2.36	4	3
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CD1	0.50	2.42	6	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:97:LYS:O	0.50	2.55	15	1
1:A:40:ILE:CG2	1:A:40:ILE:O	0.50	2.60	4	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:84:PHE:C	0.50	2.85	12	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:PRO:CD	0.49	2.60	6	2
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:C	0.49	2.55	5	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB3	0.49	2.28	11	5
1:A:5:GLN:HB3	1:A:40:ILE:HG21	0.49	1.83	9	1
1:A:57:GLU:OE1	1:A:57:GLU:CA	0.49	2.60	12	1
1:A:22:ARG:CD	1:A:33:LEU:HA	0.49	2.37	15	1
1:A:9:GLY:HA3	1:A:95:TRP:CZ3	0.49	2.42	3	2
1:A:62:PRO:CD	1:A:91:GLU:HB2	0.49	2.37	5	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.49	2.90	14	3
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HB	0.49	2.36	11	2
1:A:13:ASN:ND2	1:A:88:GLU:O	0.49	2.45	9	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:115:PHE:CE1	0.49	2.41	10	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:C	0.49	2.32	12	1
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:C	0.49	2.33	2	1
1:A:67:LEU:O	1:A:68:PHE:C	0.49	2.55	4	7
1:A:53:GLU:O	1:A:56:GLU:CG	0.49	2.60	6	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:CD1	0.49	2.85	7	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:86:LEU:HD23	0.49	2.36	9	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:92:GLY:CA	0.49	2.91	3	1
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:HA2	0.49	2.08	11	3
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HG12	0.49	2.23	3	1
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:HG23	0.49	1.85	5	1
1:A:115:PHE:O	1:A:117:PRO:HD2	0.49	2.07	5	1
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:C	0.49	2.56	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:GLU:OE1	1:A:93:GLU:N	0.49	2.46	14	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CB	0.49	2.38	2	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:CD2	0.49	2.90	15	3
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:CE2	0.49	2.43	7	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:31:ASN:OD1	0.49	2.60	8	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:48:GLN:H	0.49	1.68	8	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:33:LEU:HA	0.49	2.38	15	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CB	0.49	2.37	1	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE2	0.49	3.00	7	3
1:A:56:GLU:CD	1:A:56:GLU:O	0.49	2.56	7	3
1:A:58:VAL:HG22	1:A:93:GLU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:HZ	0.49	1.68	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB3	0.49	2.38	2	2
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:CB	0.49	2.61	12	6
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:CD	0.49	2.91	2	3
1:A:12:ARG:O	1:A:13:ASN:CG	0.49	2.54	2	3
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:CG	0.49	2.86	4	1
1:A:47:GLU:O	1:A:49:ALA:N	0.49	2.46	8	4
1:A:63:GLN:HG3	1:A:90:TRP:N	0.49	2.23	13	2
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:HB2	0.49	2.08	11	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CZ2	0.49	2.81	4	2
1:A:83:TRP:CZ2	1:A:85:TRP:HB3	0.49	2.43	4	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:33:LEU:CD2	0.49	2.37	6	1
1:A:70:LYS:CB	1:A:83:TRP:HB3	0.49	2.37	8	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CB	0.49	2.59	9	2
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:HB2	0.49	2.38	15	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CB	0.48	2.37	1	4
1:A:83:TRP:CE2	1:A:85:TRP:HB3	0.48	2.42	4	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:CB	0.48	2.90	8	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:CD2	0.48	2.96	8	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:O	0.48	2.08	12	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:CD	0.48	2.86	1	1
1:A:13:ASN:O	1:A:15:ASN:N	0.48	2.46	2	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:86:LEU:HD22	0.48	2.44	2	1
1:A:41:GLU:CD	1:A:41:GLU:C	0.48	2.82	9	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:62:PRO:HG3	0.48	2.38	10	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:113:ASP:O	0.48	2.57	13	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:34:GLU:O	0.48	2.60	6	3
1:A:70:LYS:CG	1:A:82:LEU:O	0.48	2.61	1	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:95:TRP:HB3	0.48	1.83	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:CG2	0.48	2.39	9	3
1:A:13:ASN:HB2	1:A:17:GLU:C	0.48	2.32	11	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:HD3	0.48	2.08	12	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.39	14	1
1:A:61:THR:HB	1:A:91:GLU:CB	0.48	2.39	2	3
1:A:79:HIS:CD2	1:A:79:HIS:N	0.48	2.82	2	3
1:A:64:HIS:C	1:A:65:PHE:CD1	0.48	2.92	3	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CG	0.48	2.66	4	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:HB2	0.48	2.42	5	3
1:A:93:GLU:CB	1:A:94:PRO:HD2	0.48	2.37	6	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:GLY:N	0.48	2.22	8	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:O	0.48	2.66	13	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.38	11	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CG2	0.48	2.39	11	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:HB2	0.48	1.85	15	1
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:HA3	0.48	2.09	10	4
1:A:110:LEU:O	1:A:110:LEU:CD1	0.48	2.55	4	1
1:A:65:PHE:HA	1:A:87:VAL:HG23	0.48	1.85	11	1
1:A:50:VAL:HA	1:A:53:GLU:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:O	0.48	2.31	13	3
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:N	0.48	2.46	14	1
1:A:11:ILE:CG1	1:A:19:PHE:HB3	0.48	2.38	5	2
1:A:55:GLN:HA	1:A:59:GLY:CA	0.48	2.39	5	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:ND2	0.48	2.46	6	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:VAL:N	0.48	2.24	6	2
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:O	0.48	2.32	7	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:ARG:H	0.48	1.68	14	4
1:A:8:VAL:CG2	1:A:9:GLY:N	0.48	2.76	1	3
1:A:8:VAL:CA	1:A:37:GLY:HA2	0.48	2.39	2	1
1:A:85:TRP:O	1:A:86:LEU:C	0.48	2.57	2	2
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.38	5	1
1:A:83:TRP:H	1:A:83:TRP:CD1	0.48	2.27	8	1
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HB3	0.48	2.09	12	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:114:ASP:OD2	0.48	2.60	13	1
1:A:107:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	0.48	1.85	15	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:46:PRO:HD2	0.48	2.08	5	5
1:A:8:VAL:CG2	1:A:35:PHE:HB3	0.48	2.38	15	2
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:HB3	0.48	2.38	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:CG2	0.48	2.92	14	4
1:A:13:ASN:CB	1:A:17:GLU:HB2	0.48	2.39	11	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:105:MET:O	0.48	2.57	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:SER:OG	1:A:108:VAL:HG23	0.48	2.09	13	1
1:A:10:ILE:C	1:A:11:ILE:HG12	0.48	2.33	3	5
1:A:58:VAL:HG21	1:A:60:ILE:HG12	0.48	1.86	2	1
1:A:122:VAL:O	1:A:123:ILE:C	0.48	2.57	5	3
1:A:57:GLU:CG	1:A:58:VAL:N	0.48	2.77	3	1
1:A:20:ILE:HD11	1:A:115:PHE:CE1	0.48	2.44	7	1
1:A:10:ILE:O	1:A:87:VAL:HG13	0.48	2.09	8	1
1:A:10:ILE:HA	1:A:36:PRO:CG	0.48	2.39	9	1
1:A:37:GLY:O	1:A:96:GLY:O	0.48	2.32	9	1
1:A:15:ASN:O	1:A:17:GLU:HG3	0.48	2.08	12	5
1:A:90:TRP:CD1	1:A:94:PRO:HD3	0.48	2.44	4	1
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:C	0.48	2.32	10	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:O	0.48	2.62	13	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.48	2.39	13	1
1:A:47:GLU:O	1:A:50:VAL:HG12	0.47	2.08	5	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:H	0.47	2.26	5	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:102:GLY:HA2	0.47	2.38	5	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HA	0.47	2.40	6	4
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:O	0.47	2.09	5	1
1:A:54:LEU:CG	1:A:95:TRP:CZ2	0.47	2.97	8	1
1:A:66:SER:C	1:A:86:LEU:O	0.47	2.58	3	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:PHE:HB3	0.47	2.45	3	1
1:A:21:THR:HA	1:A:102:GLY:HA2	0.47	1.85	12	4
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:HA	0.47	1.86	8	1
1:A:7:ALA:HB1	1:A:53:GLU:OE2	0.47	2.10	10	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:62:PRO:CG	0.47	2.38	10	1
1:A:70:LYS:HG2	1:A:71:LEU:N	0.47	2.25	14	1
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:CG1	0.47	2.39	2	4
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:HA3	0.47	2.09	3	4
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:CG	0.47	2.63	3	1
1:A:70:LYS:CD	1:A:83:TRP:CE3	0.47	2.98	11	2
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG3	0.47	2.10	6	1
1:A:35:PHE:CB	1:A:36:PRO:HD3	0.47	2.39	10	2
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CD2	0.47	2.71	8	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:125:LYS:HB3	0.47	2.45	11	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:60:ILE:HD11	0.47	2.40	13	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:90:TRP:C	0.47	2.91	14	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CA	0.47	2.40	2	2
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:H	0.47	1.69	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:O	0.47	2.33	15	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:CD1	0.47	2.54	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:HB2	0.47	1.86	8	2
1:A:35:PHE:O	1:A:36:PRO:O	0.47	2.31	13	4
1:A:66:SER:HB3	1:A:86:LEU:O	0.47	2.09	3	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:21:THR:H	0.47	1.69	5	3
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CD1	0.47	2.92	6	2
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:CD1	0.47	2.93	6	1
1:A:63:GLN:OE1	1:A:95:TRP:NE1	0.47	2.48	6	1
1:A:58:VAL:CB	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.97	8	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:85:TRP:CD2	0.47	2.45	12	1
1:A:22:ARG:HG2	1:A:33:LEU:CD2	0.47	2.40	14	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:CG1	0.47	2.39	7	1
1:A:56:GLU:O	1:A:56:GLU:CG	0.47	2.62	7	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:CD2	0.47	2.98	8	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:85:TRP:CH2	0.47	2.45	13	2
1:A:53:GLU:CD	1:A:95:TRP:CZ3	0.47	2.93	9	1
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:CD2	0.47	2.78	12	1
1:A:65:PHE:CE1	1:A:85:TRP:CH2	0.47	3.02	15	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:C	0.47	2.86	1	3
1:A:8:VAL:HB	1:A:36:PRO:O	0.47	2.10	5	4
1:A:21:THR:CB	1:A:36:PRO:HG3	0.47	2.40	5	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:35:PHE:C	0.47	2.57	9	1
1:A:17:GLU:C	1:A:18:ILE:HD13	0.47	2.35	1	3
1:A:8:VAL:O	1:A:85:TRP:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.98	6	1
1:A:73:TYR:N	1:A:80:ILE:O	0.47	2.48	7	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CH2	0.47	2.45	8	1
1:A:6:ILE:HD13	1:A:39:LYS:HA	0.47	1.87	10	1
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD22	0.47	2.25	12	1
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:HB2	0.46	2.10	9	7
1:A:57:GLU:HB2	1:A:95:TRP:NE1	0.46	2.25	2	1
1:A:18:ILE:O	1:A:104:TRP:HA	0.46	2.10	12	3
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:N	0.46	2.26	3	1
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	1.88	4	2
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:OD1	0.46	2.32	5	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:102:GLY:HA3	0.46	2.45	10	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:HD11	0.46	1.88	15	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HB2	0.46	2.10	10	5
1:A:47:GLU:C	1:A:49:ALA:N	0.46	2.72	8	4
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:HD2	0.46	2.35	5	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:O	0.46	2.33	6	1
1:A:5:GLN:HG2	1:A:83:TRP:CZ2	0.46	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:THR:HB	1:A:91:GLU:HB3	0.46	1.86	15	2
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE2	0.46	2.33	8	1
1:A:63:GLN:O	1:A:65:PHE:CD2	0.46	2.68	1	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG2	0.46	2.55	1	1
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:H	0.46	2.29	2	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:HG2	0.46	2.45	3	1
1:A:126:LEU:O	1:A:127:LYS:C	0.46	2.57	14	2
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:C	0.46	2.57	10	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:100:GLN:NE2	0.46	2.26	11	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:80:ILE:O	0.46	2.09	11	2
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HG13	0.46	2.10	13	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HB	0.46	2.11	1	4
1:A:126:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	0.46	1.88	2	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:HG3	0.46	2.10	5	1
1:A:73:TYR:CB	1:A:80:ILE:O	0.46	2.64	7	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG2	0.46	2.10	7	4
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:CA	0.46	2.39	7	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:88:GLU:N	0.46	2.78	7	2
1:A:73:TYR:HB3	1:A:80:ILE:CG1	0.46	2.40	10	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:HB3	0.46	2.09	11	1
1:A:93:GLU:H	1:A:94:PRO:HD3	0.46	1.71	12	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:CD2	0.46	2.40	13	2
1:A:20:ILE:HG23	1:A:21:THR:H	0.46	1.71	15	1
1:A:11:ILE:HA	1:A:87:VAL:CG2	0.46	2.41	15	8
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:N	0.46	2.49	15	2
1:A:54:LEU:HD12	1:A:60:ILE:H	0.46	1.70	3	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:85:TRP:HA	0.46	2.41	3	3
1:A:20:ILE:HG12	1:A:115:PHE:CZ	0.46	2.46	7	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:85:TRP:CE3	0.46	2.44	12	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HG12	0.46	2.11	9	5
1:A:62:PRO:HA	1:A:90:TRP:HA	0.46	1.87	12	4
1:A:11:ILE:HG21	1:A:90:TRP:CD2	0.46	2.46	3	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:NE1	0.46	2.26	15	2
1:A:53:GLU:O	1:A:95:TRP:CE2	0.46	2.69	7	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:CE2	0.46	2.46	8	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HG2	0.46	2.10	12	3
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CB	0.46	2.41	8	2
1:A:36:PRO:HB3	1:A:97:LYS:N	0.46	2.26	2	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD13	0.46	2.41	2	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:31:ASN:OD1	0.46	2.11	8	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:95:TRP:CH2	0.46	2.45	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:CA	0.46	2.41	11	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:96:GLY:O	0.46	2.11	13	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:63:GLN:OE1	0.46	2.63	1	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:93:GLU:O	0.46	2.11	9	2
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:CG	0.46	2.63	3	3
1:A:109:GLY:O	1:A:114:ASP:HB2	0.46	2.10	4	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:C	0.46	2.56	6	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:94:PRO:HB2	0.46	1.87	7	1
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:HB	0.46	2.10	8	1
1:A:42:MET:O	1:A:43:GLY:O	0.46	2.33	8	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:89:ARG:O	0.46	2.11	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:OE1	0.46	2.64	1	1
1:A:91:GLU:C	1:A:92:GLY:O	0.46	2.59	3	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG21	0.46	1.87	7	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:N	0.46	2.82	8	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:127:LYS:HE2	0.46	1.88	10	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CG1	0.45	2.64	1	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HG3	0.45	2.11	3	3
1:A:32:LYS:HD3	1:A:116:PRO:CG	0.45	2.41	5	1
1:A:5:GLN:CB	1:A:40:ILE:HG21	0.45	2.41	8	2
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CG	0.45	2.46	8	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:95:TRP:CB	0.45	2.41	12	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:21:THR:N	0.45	2.27	14	2
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:N	0.45	2.48	15	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CZ	0.45	3.04	1	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:HD3	0.45	2.41	3	1
1:A:55:GLN:HG3	1:A:56:GLU:N	0.45	2.26	3	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:PRO:CD	0.45	2.89	3	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:C	0.45	2.36	5	2
1:A:62:PRO:HA	1:A:90:TRP:CB	0.45	2.42	9	2
1:A:73:TYR:HB2	1:A:80:ILE:HD11	0.45	1.86	10	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:CG	0.45	2.31	13	2
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:HE1	0.45	1.71	3	1
1:A:110:LEU:O	1:A:127:LYS:O	0.45	2.33	11	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:CD1	0.45	2.99	15	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CB	0.45	2.64	1	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:46:PRO:HD3	0.45	2.11	3	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:69:GLU:HB2	0.45	2.47	5	3
1:A:89:ARG:O	1:A:90:TRP:CB	0.45	2.63	4	2
1:A:73:TYR:OH	1:A:118:ALA:O	0.45	2.32	5	1
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:OXT	0.45	2.34	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:HG3	0.45	1.88	3	1
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:HD2	0.45	1.89	12	8
1:A:91:GLU:HG2	1:A:92:GLY:N	0.45	2.25	3	1
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:HG3	0.45	2.12	4	1
1:A:85:TRP:NE1	1:A:87:VAL:HG13	0.45	2.26	15	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:114:ASP:CG	0.45	2.37	4	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:GLN:O	0.45	2.34	2	1
1:A:16:ASN:C	1:A:17:GLU:HG2	0.45	2.37	8	3
1:A:12:ARG:HA	1:A:17:GLU:O	0.45	2.12	10	2
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:NE1	0.45	2.27	9	4
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:95:TRP:CZ2	0.45	3.04	4	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:VAL:N	0.45	2.27	4	1
1:A:93:GLU:CG	1:A:94:PRO:HD2	0.45	2.42	6	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:80:ILE:N	0.45	2.27	9	1
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:C	0.45	2.92	9	1
1:A:62:PRO:HA	1:A:89:ARG:O	0.45	2.11	11	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HB	0.45	2.12	8	7
1:A:35:PHE:HE2	1:A:123:ILE:HD11	0.45	1.68	7	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HG12	0.45	1.87	7	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:85:TRP:CZ2	0.45	3.05	12	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:85:TRP:CE3	0.45	3.05	13	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:GLU:OE2	0.45	2.34	14	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG2	0.45	2.12	14	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:CD2	0.45	2.42	14	1
1:A:37:GLY:O	1:A:97:LYS:HD3	0.45	2.12	1	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:HB2	0.45	2.42	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HG2	0.45	2.40	2	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:CB	0.45	2.65	2	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG22	0.45	2.47	6	2
1:A:35:PHE:HB2	1:A:36:PRO:HD3	0.45	1.89	7	1
1:A:58:VAL:CB	1:A:95:TRP:HB3	0.45	2.41	8	1
1:A:8:VAL:O	1:A:84:PHE:HB3	0.45	2.12	9	1
1:A:17:GLU:C	1:A:18:ILE:CG1	0.45	2.89	11	1
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:CD	0.44	3.01	1	2
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HB	0.44	2.42	4	2
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CG	0.44	2.66	12	2
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:HG11	0.44	1.89	9	2
1:A:95:TRP:CD2	1:A:95:TRP:O	0.44	2.70	8	1
1:A:110:LEU:HB2	1:A:129:LEU:CD1	0.44	2.42	8	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:88:GLU:C	0.44	2.75	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:ASN:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.44	3.00	10	1
1:A:17:GLU:CG	1:A:105:MET:O	0.44	2.65	12	1
1:A:115:PHE:CB	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.42	13	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:44:GLU:N	0.44	2.51	15	1
1:A:44:GLU:C	1:A:45:THR:CG2	0.44	2.91	3	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:CG	0.44	3.00	3	1
1:A:97:LYS:CG	1:A:98:GLU:N	0.44	2.80	4	2
1:A:33:LEU:HB2	1:A:114:ASP:O	0.44	2.11	5	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:HB	0.44	2.11	13	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CG	0.44	2.42	2	1
1:A:7:ALA:O	1:A:53:GLU:OE2	0.44	2.34	3	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:32:LYS:O	0.44	2.65	3	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:C	0.44	2.94	6	1
1:A:33:LEU:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.44	3.00	9	1
1:A:10:ILE:O	1:A:87:VAL:HG22	0.44	2.11	12	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:92:GLY:C	0.44	2.90	13	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD11	0.44	1.89	15	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:CD2	0.44	2.78	1	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:105:MET:O	0.44	2.13	2	2
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:NE1	0.44	2.81	3	1
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HD12	0.44	2.13	4	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:HD3	0.44	2.27	5	3
1:A:35:PHE:HB3	1:A:82:LEU:HD22	0.44	1.89	5	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:OD1	0.44	2.35	8	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:105:MET:C	0.44	2.60	9	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG3	0.44	2.12	9	2
1:A:89:ARG:NH1	1:A:89:ARG:HG2	0.44	2.27	11	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CD1	0.44	2.99	1	1
1:A:68:PHE:HE2	1:A:122:VAL:HG22	0.44	1.72	3	1
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:N	0.44	2.27	5	1
1:A:35:PHE:O	1:A:36:PRO:C	0.44	2.60	10	2
1:A:73:TYR:CD1	1:A:74:GLU:N	0.44	2.86	11	1
1:A:56:GLU:C	1:A:57:GLU:OE1	0.44	2.60	12	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:CD2	0.44	3.01	15	1
1:A:63:GLN:HA	1:A:90:TRP:HB3	0.44	1.89	1	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:31:ASN:N	0.44	2.51	11	3
1:A:60:ILE:HG22	1:A:91:GLU:C	0.44	2.37	2	1
1:A:44:GLU:HB2	1:A:48:GLN:NE2	0.44	2.28	3	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:126:LEU:HB3	0.44	2.47	4	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CH2	0.44	2.48	5	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:33:LEU:HD12	0.44	2.39	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HD12	1:A:19:PHE:CD2	0.44	2.47	6	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CB	0.44	2.43	7	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:67:LEU:HA	1:A:85:TRP:HA	0.44	1.90	13	2
1:A:110:LEU:HG	1:A:111:ASN:CG	0.44	2.37	10	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.47	10	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.44	2.41	11	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:89:ARG:CG	0.44	2.79	11	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:CA	0.44	2.43	8	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:N	0.44	2.81	8	1
1:A:15:ASN:HB3	1:A:17:GLU:CG	0.44	2.43	10	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:105:MET:HE3	0.44	1.89	13	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.13	15	1
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HB2	0.44	2.12	12	2
1:A:124:ALA:O	1:A:127:LYS:HG3	0.44	2.13	7	2
1:A:46:PRO:HA	1:A:83:TRP:CH2	0.44	2.47	8	1
1:A:106:SER:O	1:A:110:LEU:HB2	0.44	2.13	10	1
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ASP:N	0.44	2.76	15	1
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:HA3	0.44	1.89	9	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CZ3	0.44	2.96	6	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:NE1	0.44	2.27	6	1
1:A:55:GLN:O	1:A:59:GLY:HA2	0.44	2.13	6	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:H	0.44	2.26	8	1
1:A:70:LYS:HE2	1:A:83:TRP:CE3	0.44	2.48	8	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:85:TRP:CE3	0.44	3.01	12	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:114:ASP:O	0.43	2.12	14	6
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CZ	0.43	2.48	1	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:21:THR:CB	1:A:36:PRO:CG	0.43	2.96	3	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:HD3	0.43	1.89	5	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:HA	0.43	2.28	6	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG2	0.43	2.28	8	1
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:HB	0.43	2.38	9	1
1:A:4:LEU:CG	1:A:80:ILE:CG2	0.43	2.96	10	1
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:C	0.43	2.91	10	1
1:A:45:THR:HB	1:A:46:PRO:HD2	0.43	1.90	10	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA3	0.43	1.89	11	1
1:A:37:GLY:N	1:A:97:LYS:HB2	0.43	2.28	11	2
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HD22	0.43	2.13	14	1
1:A:85:TRP:CE2	1:A:87:VAL:CG1	0.43	3.01	15	1
1:A:4:LEU:HD23	1:A:79:HIS:HB2	0.43	1.90	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ARG:CZ	1:A:129:LEU:HD23	0.43	2.43	2	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HB2	0.43	2.43	2	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HD3	0.43	2.13	2	1
1:A:7:ALA:HA	1:A:83:TRP:CD1	0.43	2.48	8	1
1:A:4:LEU:HG	1:A:80:ILE:CG2	0.43	2.41	10	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CA	0.43	2.66	15	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:83:TRP:C	0.43	2.91	2	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:HA3	0.43	2.43	15	2
1:A:53:GLU:HA	1:A:56:GLU:CG	0.43	2.43	14	2
1:A:33:LEU:C	1:A:115:PHE:HB3	0.43	2.38	13	1
1:A:128:ARG:O	1:A:128:ARG:NE	0.43	2.52	14	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:VAL:N	0.43	2.29	1	1
1:A:97:LYS:CB	1:A:100:GLN:HB3	0.43	2.42	2	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HB	0.43	1.91	7	2
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:HD3	0.43	2.28	7	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:129:LEU:HD23	0.43	2.44	9	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HG	0.43	2.13	14	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HG	0.43	2.48	15	1
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:CD1	0.43	2.84	5	1
1:A:35:PHE:N	1:A:36:PRO:HD2	0.43	2.29	10	2
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:HG12	0.43	1.89	11	1
1:A:83:TRP:HB2	1:A:85:TRP:CE2	0.43	2.49	12	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:O	0.43	2.14	13	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:18:ILE:CG1	0.43	2.44	14	1
1:A:98:GLU:OE1	1:A:98:GLU:O	0.43	2.37	14	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:60:ILE:HG12	0.43	2.43	1	2
1:A:21:THR:HG22	1:A:100:GLN:HG2	0.43	1.90	3	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:60:ILE:HG13	0.43	2.43	3	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CB	0.43	2.67	13	7
1:A:93:GLU:O	1:A:94:PRO:C	0.43	2.62	6	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:HB3	0.43	1.91	14	2
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG3	0.43	2.27	15	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CG	0.43	2.43	1	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:CG	0.43	2.66	2	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HG2	0.43	2.14	2	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:72:GLU:N	0.43	2.77	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:HB3	0.43	2.13	10	2
1:A:53:GLU:HG3	1:A:54:LEU:N	0.43	2.28	12	1
1:A:71:LEU:CG	1:A:122:VAL:HB	0.43	2.44	4	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:C	0.43	2.58	7	1
1:A:90:TRP:N	1:A:90:TRP:CD2	0.43	2.86	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HA	1:A:36:PRO:HG3	0.43	1.90	9	1
1:A:97:LYS:HD3	1:A:100:GLN:CB	0.43	2.43	9	1
1:A:20:ILE:CG1	1:A:105:MET:SD	0.43	3.07	10	1
1:A:21:THR:CB	1:A:97:LYS:HB2	0.43	2.44	10	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:NE1	0.43	2.29	14	1
1:A:10:ILE:O	1:A:11:ILE:HG12	0.43	2.14	10	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG23	0.43	2.43	3	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:CD	0.43	2.67	3	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:84:PHE:CZ	0.43	3.07	4	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:63:GLN:NE2	0.43	2.28	5	1
1:A:36:PRO:CA	1:A:82:LEU:HD11	0.43	2.43	7	1
1:A:100:GLN:CB	1:A:101:PRO:CD	0.43	2.96	8	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:CG	0.43	2.67	10	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA2	0.42	1.90	2	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:HG22	0.42	2.14	2	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:59:GLY:H	0.42	1.74	2	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CD1	0.42	2.49	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:CG1	0.42	2.57	6	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CZ	0.42	3.02	7	1
1:A:111:ASN:O	1:A:127:LYS:HE2	0.42	2.14	8	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:60:ILE:CD1	0.42	2.94	13	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:CE2	0.42	2.49	11	1
1:A:12:ARG:HG3	1:A:17:GLU:O	0.42	2.13	15	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:108:VAL:O	0.42	2.36	1	1
1:A:70:LYS:HG2	1:A:82:LEU:O	0.42	2.13	1	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:CB	0.42	2.97	2	1
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:HG12	0.42	2.39	3	1
1:A:4:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG12	0.42	1.91	6	1
1:A:63:GLN:OE1	1:A:95:TRP:CE2	0.42	2.72	6	1
1:A:6:ILE:O	1:A:83:TRP:NE1	0.42	2.52	7	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:CE	0.42	2.82	7	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:83:TRP:CB	0.42	2.43	8	1
1:A:95:TRP:C	1:A:97:LYS:N	0.42	2.76	8	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HD22	0.42	2.44	10	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:N	0.42	2.82	12	1
1:A:87:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CZ3	0.42	2.49	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:HB3	0.42	2.42	15	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:CB	0.42	3.03	7	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:CG	0.42	2.49	8	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:83:TRP:HB3	0.42	1.91	8	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:HA	0.42	1.90	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ARG:HD2	1:A:31:ASN:OD1	0.42	2.15	8	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:17:GLU:HB2	0.42	2.40	11	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HD11	0.42	2.44	2	1
1:A:114:ASP:O	1:A:114:ASP:OD1	0.42	2.37	2	1
1:A:63:GLN:HG3	1:A:89:ARG:O	0.42	2.13	8	2
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CD1	0.42	2.73	5	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:90:TRP:HB2	0.42	1.91	6	1
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:CG2	0.42	2.68	8	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:129:LEU:CD2	0.42	2.44	9	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:105:MET:HE2	0.42	2.44	10	1
1:A:5:GLN:C	1:A:6:ILE:HD13	0.42	2.40	12	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:114:ASP:O	0.42	2.15	13	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HB2	0.42	2.14	15	1
1:A:10:ILE:HG13	1:A:84:PHE:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:52:ARG:HG2	0.42	2.28	9	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:62:PRO:HG3	0.42	1.90	3	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:60:ILE:HD11	0.42	2.44	6	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:123:ILE:CG2	0.42	2.44	6	1
1:A:83:TRP:C	1:A:84:PHE:CD1	0.42	2.97	8	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:125:LYS:CB	0.42	3.03	11	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:92:GLY:HA3	0.42	1.91	12	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:105:MET:CE	0.42	2.93	2	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:103:GLU:O	0.42	2.15	3	1
1:A:66:SER:CB	1:A:86:LEU:O	0.42	2.68	3	1
1:A:4:LEU:N	1:A:79:HIS:HB2	0.42	2.30	5	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:105:MET:HE1	0.42	2.41	9	1
1:A:52:ARG:HB2	1:A:52:ARG:NH2	0.42	2.29	14	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD22	0.42	2.50	14	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:107:LEU:HD12	0.42	1.92	8	1
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:HG12	0.42	2.44	8	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:59:GLY:N	0.42	2.83	9	1
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:HG13	0.42	1.91	10	1
1:A:106:SER:OG	1:A:108:VAL:CG2	0.42	2.68	13	1
1:A:71:LEU:O	1:A:81:THR:CG2	0.41	2.68	2	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD21	0.41	1.92	3	1
1:A:102:GLY:C	1:A:103:GLU:OE1	0.41	2.63	4	1
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:CD1	0.41	2.93	7	2
1:A:45:THR:HG22	1:A:48:GLN:HB2	0.41	1.92	8	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CG	0.41	2.98	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:THR:O	1:A:34:GLU:HB2	0.41	2.14	10	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CA	0.41	2.45	12	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:56:GLU:HG3	0.41	1.92	15	1
1:A:22:ARG:HG2	1:A:32:LYS:O	0.41	2.15	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:N	0.41	2.30	9	2
1:A:22:ARG:CZ	1:A:103:GLU:OE2	0.41	2.68	11	1
1:A:51:VAL:O	1:A:54:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:97:LYS:HD2	1:A:100:GLN:NE2	0.41	2.30	11	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:LEU:C	0.41	2.63	12	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:103:GLU:CD	0.41	2.41	15	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:CG2	0.41	2.98	1	2
1:A:88:GLU:C	1:A:89:ARG:HD2	0.41	2.41	3	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG13	0.41	1.92	8	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:O	0.41	2.37	8	1
1:A:70:LYS:HB2	1:A:82:LEU:O	0.41	2.15	10	1
1:A:6:ILE:HB	1:A:82:LEU:HD22	0.41	1.91	13	1
1:A:48:GLN:O	1:A:51:VAL:N	0.41	2.53	14	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:85:TRP:CH2	0.41	3.08	14	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CB	0.41	2.69	15	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:60:ILE:HG12	0.41	1.92	1	1
1:A:67:LEU:N	1:A:86:LEU:O	0.41	2.53	3	1
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:GLY:H	0.41	2.28	8	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:115:PHE:CZ	0.41	2.51	10	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:HE2	0.41	1.92	13	1
1:A:14:GLU:CA	1:A:14:GLU:OE1	0.41	2.66	1	1
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:HG2	0.41	2.14	3	1
1:A:97:LYS:HB3	1:A:100:GLN:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CD1	0.41	2.68	5	1
1:A:4:LEU:HB3	1:A:79:HIS:CB	0.41	2.45	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HG	0.41	2.15	11	2
1:A:115:PHE:O	1:A:116:PRO:C	0.41	2.62	13	2
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:N	0.41	2.30	1	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:HG3	0.41	2.16	4	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:GLN:CB	0.41	2.67	5	1
1:A:14:GLU:CD	1:A:89:ARG:CZ	0.41	2.93	12	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:105:MET:SD	0.41	3.09	13	1
1:A:115:PHE:CE1	1:A:123:ILE:CD1	0.41	3.03	13	1
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:HD23	0.41	2.40	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:C	1:A:79:HIS:CG	0.41	2.98	15	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:4:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:96:GLY:C	0.41	2.40	2	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CD1	0.41	2.50	6	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:CB	0.41	2.69	8	1
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:91:GLU:HB3	0.41	2.46	11	1
1:A:11:ILE:CG1	1:A:94:PRO:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:32:LYS:C	1:A:32:LYS:CD	0.41	2.93	1	1
1:A:125:LYS:C	1:A:127:LYS:N	0.41	2.78	3	1
1:A:12:ARG:C	1:A:90:TRP:CZ3	0.41	2.98	13	1
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:CA	0.41	2.69	14	1
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:C	0.41	2.63	1	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:CA	0.41	2.99	2	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:HB3	0.41	2.46	2	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:114:ASP:HB2	0.41	1.93	2	1
1:A:37:GLY:HA2	1:A:96:GLY:O	0.41	2.16	4	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HD11	0.41	1.93	6	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CA	0.41	2.45	6	1
1:A:13:ASN:C	1:A:14:GLU:CG	0.41	2.93	7	1
1:A:6:ILE:HG23	1:A:39:LYS:HD2	0.41	1.92	8	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:97:LYS:HB2	0.41	2.43	9	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:129:LEU:CD2	0.41	2.44	10	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	0.41	1.92	12	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:90:TRP:HB2	0.41	1.92	13	1
1:A:113:ASP:O	1:A:113:ASP:OD1	0.41	2.39	13	1
1:A:16:ASN:ND2	1:A:107:LEU:HB2	0.41	2.31	15	1
1:A:22:ARG:HB2	1:A:33:LEU:HA	0.41	1.93	15	1
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:CD	0.41	2.79	15	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:97:LYS:HG2	0.41	1.91	1	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD3	0.41	2.15	6	1
1:A:64:HIS:C	1:A:65:PHE:O	0.41	2.64	7	1
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:HA2	0.41	2.16	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:84:PHE:CD2	0.41	2.50	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG13	0.41	2.15	12	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:HB2	0.41	2.16	13	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:84:PHE:CD1	0.41	3.03	14	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CG	0.40	2.48	3	1
1:A:98:GLU:HG3	1:A:99:GLY:N	0.40	2.31	3	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CB	0.40	2.46	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ARG:HG3	1:A:18:ILE:HG12	0.40	1.93	7	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:103:GLU:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:CB	0.40	2.45	12	1
1:A:101:PRO:C	1:A:102:GLY:O	0.40	2.64	13	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:126:LEU:N	0.40	2.84	13	1
1:A:22:ARG:HD2	1:A:32:LYS:O	0.40	2.17	2	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:114:ASP:CB	0.40	2.45	2	1
1:A:111:ASN:HB3	1:A:113:ASP:OD2	0.40	2.16	5	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:33:LEU:HD23	0.40	1.93	6	1
1:A:51:VAL:O	1:A:55:GLN:HG2	0.40	2.16	6	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:C	0.40	2.42	6	1
1:A:64:HIS:N	1:A:89:ARG:O	0.40	2.54	8	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:HG3	0.40	1.91	9	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG21	0.40	1.90	9	1
1:A:21:THR:HG1	1:A:35:PHE:C	0.40	2.24	9	1
1:A:41:GLU:C	1:A:42:MET:HG2	0.40	2.41	10	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:H	0.40	2.33	10	1
1:A:4:LEU:HG	1:A:79:HIS:O	0.40	2.17	14	1
1:A:4:LEU:C	1:A:5:GLN:HG3	0.40	2.41	2	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:O	0.40	2.16	5	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:NE1	0.40	2.76	5	1
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:O	0.40	2.69	10	1
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:HG12	0.40	2.17	13	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:CG1	0.40	2.95	15	1
1:A:69:GLU:OE1	1:A:125:LYS:NZ	0.40	2.55	4	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:108:VAL:HB	0.40	2.17	8	1
1:A:46:PRO:O	1:A:85:TRP:CH2	0.40	2.75	8	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:LEU:CD1	0.40	2.99	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:N	0.40	2.31	13	1
1:A:72:GLU:HG2	1:A:73:TYR:N	0.40	2.29	13	1
1:A:10:ILE:CG1	1:A:84:PHE:HB2	0.40	2.46	2	1
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:CA	0.40	2.46	2	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:87:VAL:CG1	0.40	3.04	3	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:HA	0.40	1.94	5	1
1:A:55:GLN:HA	1:A:59:GLY:HA2	0.40	1.93	5	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:93:GLU:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:34:GLU:O	0.40	2.69	13	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	117/129 (91%)	78±4 (66±3%)	30±4 (25±3%)	9±2 (8±2%)	1	13
All	All	1755/1935 (91%)	1167 (66%)	447 (25%)	141 (8%)	1	13

All 43 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	36	PRO	13
1	A	118	ALA	10
1	A	42	MET	8
1	A	68	PHE	8
1	A	61	THR	7
1	A	20	ILE	6
1	A	38	GLY	6
1	A	77	ASP	5
1	A	96	GLY	5
1	A	67	LEU	5
1	A	109	GLY	5
1	A	108	VAL	4
1	A	92	GLY	4
1	A	94	PRO	4
1	A	95	TRP	3
1	A	116	PRO	3
1	A	90	TRP	3
1	A	87	VAL	3
1	A	117	PRO	3
1	A	102	GLY	3
1	A	16	ASN	2
1	A	101	PRO	2
1	A	5	GLN	2
1	A	14	GLU	2
1	A	97	LYS	2
1	A	35	PHE	2
1	A	64	HIS	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	PHE	2
1	A	31	ASN	2
1	A	40	ILE	2
1	A	45	THR	1
1	A	58	VAL	1
1	A	98	GLU	1
1	A	43	GLY	1
1	A	63	GLN	1
1	A	66	SER	1
1	A	110	LEU	1
1	A	39	LYS	1
1	A	4	LEU	1
1	A	12	ARG	1
1	A	80	ILE	1
1	A	41	GLU	1
1	A	99	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	103/110 (94%)	64±4 (62±4%)	39±4 (38±4%)	0 7
All	All	1545/1650 (94%)	954 (62%)	591 (38%)	0 7

All 90 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	ILE	15
1	A	21	THR	15
1	A	89	ARG	15
1	A	122	VAL	15
1	A	45	THR	14
1	A	52	ARG	14
1	A	60	ILE	14
1	A	110	LEU	14
1	A	18	ILE	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	LEU	13
1	A	20	ILE	12
1	A	47	GLU	12
1	A	93	GLU	11
1	A	100	GLN	11
1	A	78	ARG	11
1	A	11	ILE	10
1	A	71	LEU	10
1	A	106	SER	10
1	A	129	LEU	10
1	A	32	LYS	9
1	A	33	LEU	9
1	A	54	LEU	9
1	A	70	LYS	9
1	A	75	PHE	9
1	A	97	LYS	9
1	A	114	ASP	9
1	A	83	TRP	9
1	A	39	LYS	8
1	A	44	GLU	8
1	A	58	VAL	8
1	A	119	ASN	8
1	A	5	GLN	8
1	A	125	LYS	8
1	A	105	MET	7
1	A	42	MET	7
1	A	63	GLN	7
1	A	84	PHE	7
1	A	34	GLU	6
1	A	61	THR	6
1	A	68	PHE	6
1	A	69	GLU	6
1	A	4	LEU	6
1	A	48	GLN	6
1	A	74	GLU	6
1	A	79	HIS	6
1	A	13	ASN	6
1	A	22	ARG	6
1	A	77	ASP	6
1	A	51	VAL	6
1	A	64	HIS	5
1	A	66	SER	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	88	GLU	5
1	A	108	VAL	5
1	A	111	ASN	5
1	A	126	LEU	5
1	A	86	LEU	5
1	A	40	ILE	5
1	A	73	TYR	5
1	A	107	LEU	5
1	A	57	GLU	5
1	A	81	THR	5
1	A	104	TRP	4
1	A	6	ILE	4
1	A	128	ARG	4
1	A	98	GLU	4
1	A	41	GLU	4
1	A	14	GLU	3
1	A	50	VAL	3
1	A	55	GLN	3
1	A	120	GLU	3
1	A	31	ASN	3
1	A	12	ARG	3
1	A	80	ILE	3
1	A	56	GLU	3
1	A	127	LYS	3
1	A	72	GLU	3
1	A	85	TRP	3
1	A	53	GLU	2
1	A	95	TRP	2
1	A	87	VAL	2
1	A	65	PHE	2
1	A	17	GLU	2
1	A	103	GLU	2
1	A	15	ASN	1
1	A	91	GLU	1
1	A	8	VAL	1
1	A	35	PHE	1
1	A	67	LEU	1
1	A	115	PHE	1
1	A	123	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided