



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 05:59 PM UTC

PDB ID : 1P8A / pdb_00001p8a
Title : Solution structure of the low molecular weight protein tyrosine phosphatase from *Tritrichomonas foetus*
Authors : Gustafson, C.L.; Stauffacher, C.V.; Hallenga, K.; Van Etten, R.L.
Deposited on : 2003-05-06

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

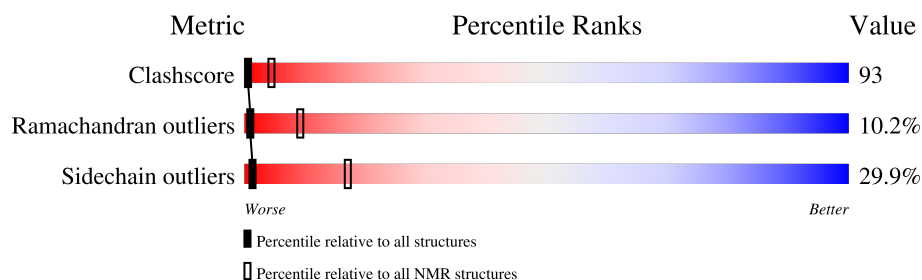
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

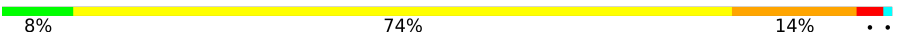
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	146	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 21 as representative, based on the following criterion: *20 lowest energy and average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:146 (144)	1.31	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 2 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2216 atoms, of which 1111 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called protein tyrosine phosphatase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	146	Total	C	H	N	O	S	0
			2216	691	1111	191	213	10	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ALA	SER	engineered mutation	UNP O00810

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: protein tyrosine phosphatase

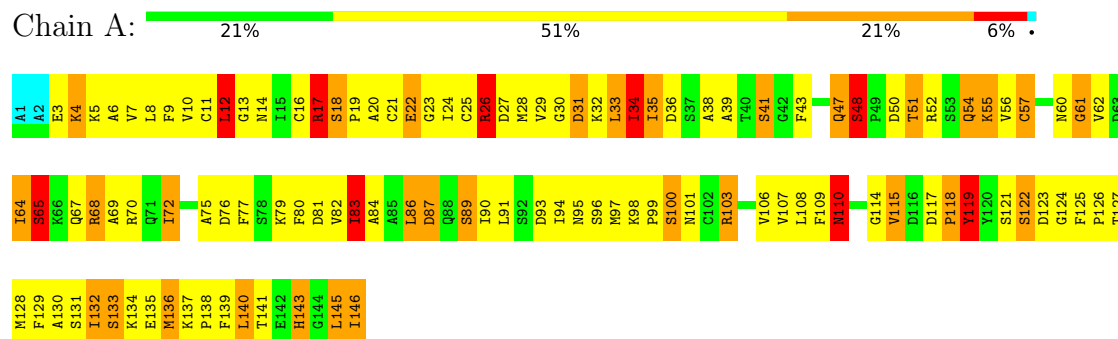


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

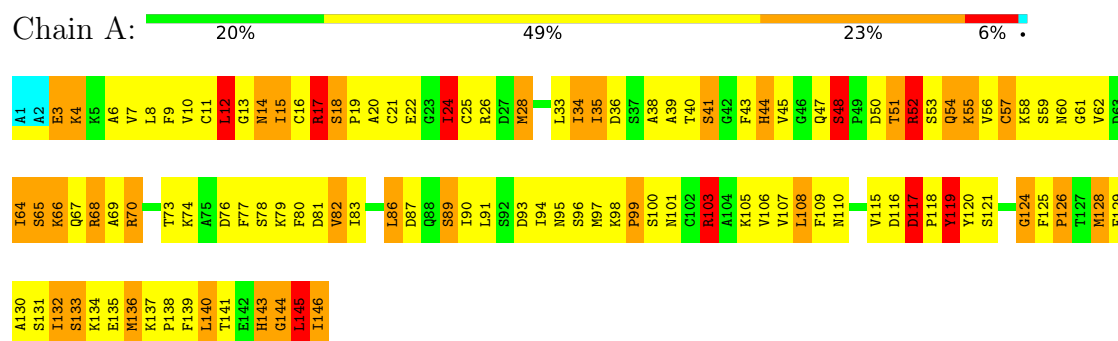
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase

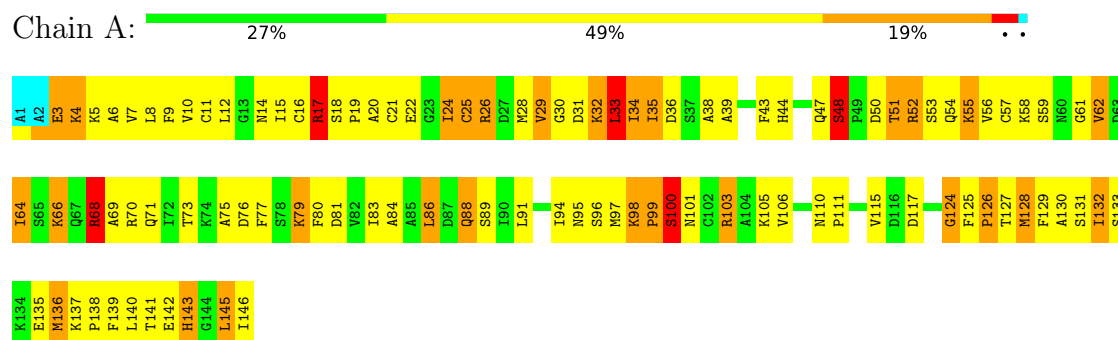


4.2.2 Score per residue for model 2

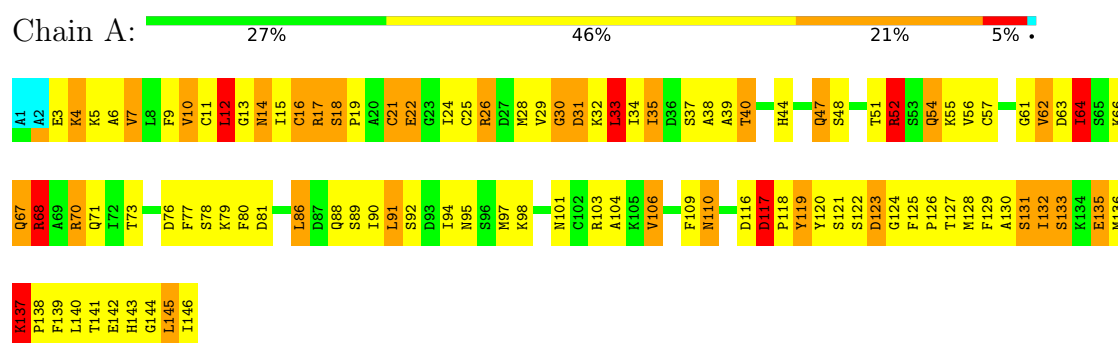
- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase

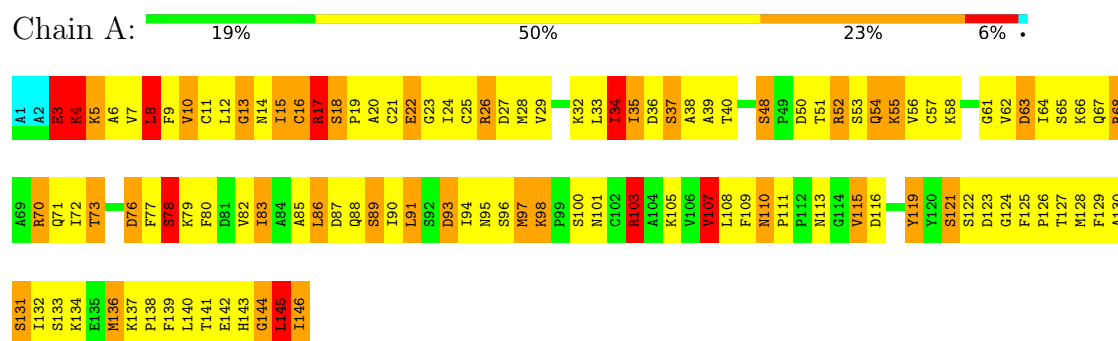


- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



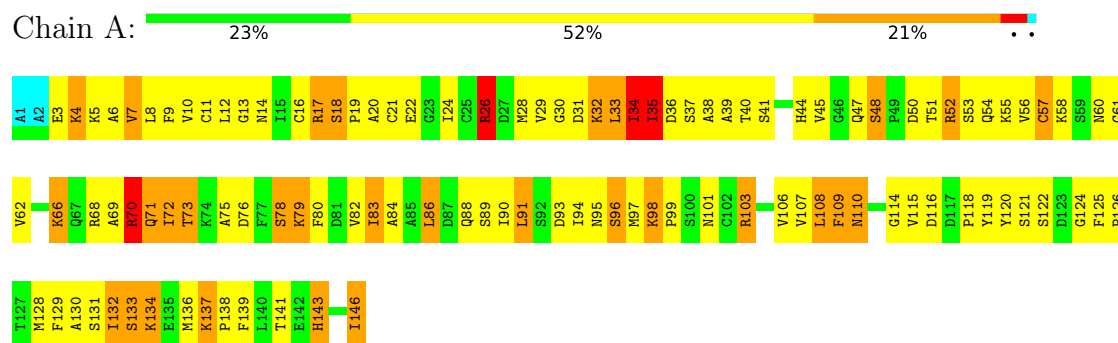
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



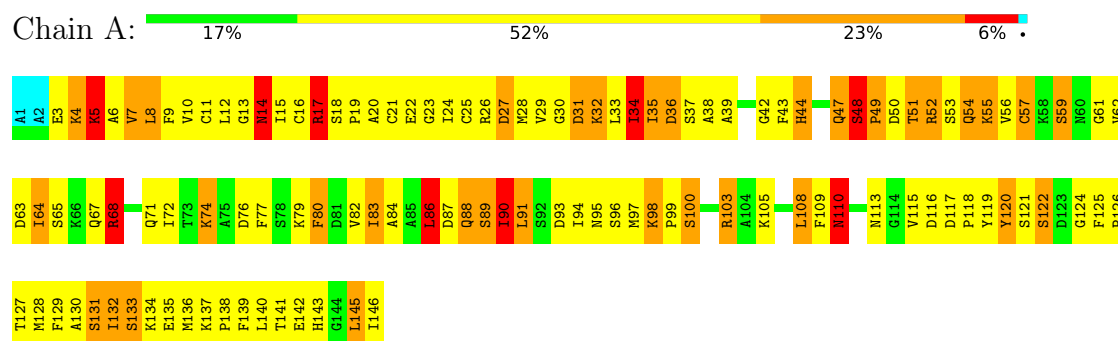
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



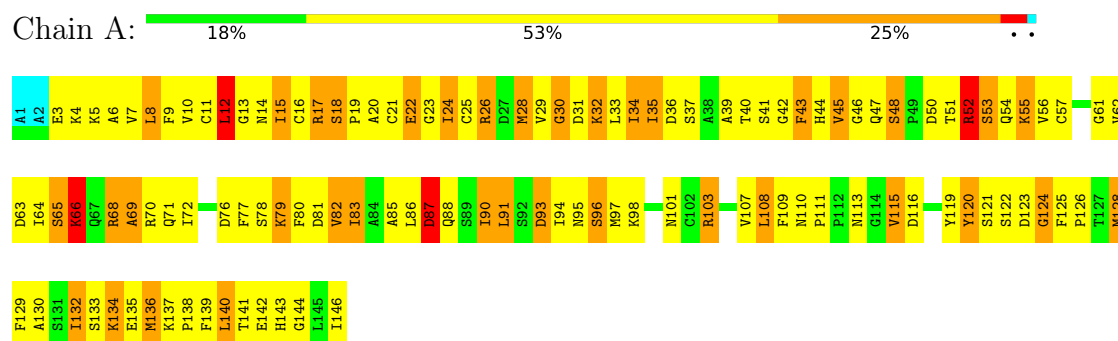
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



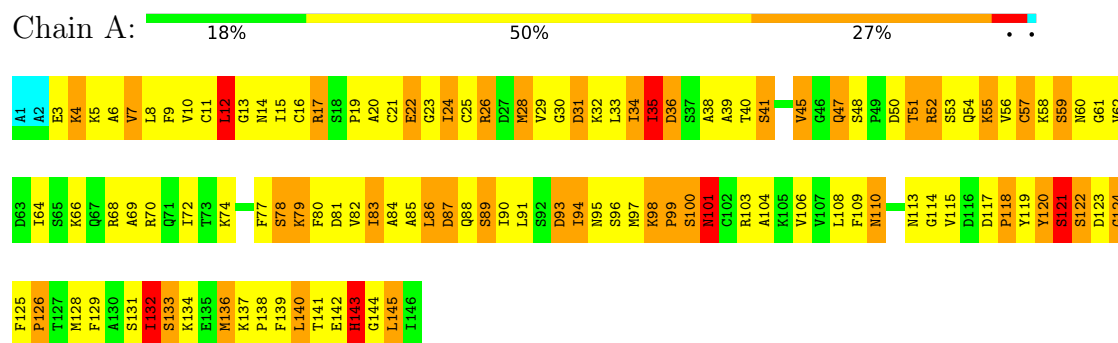
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



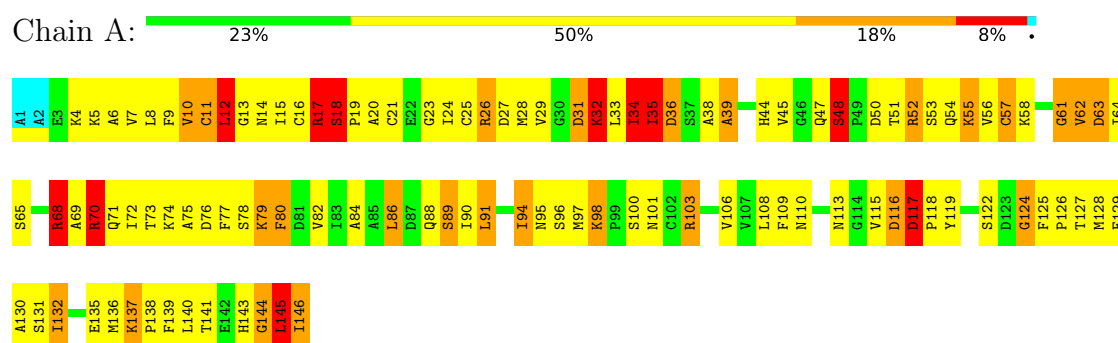
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



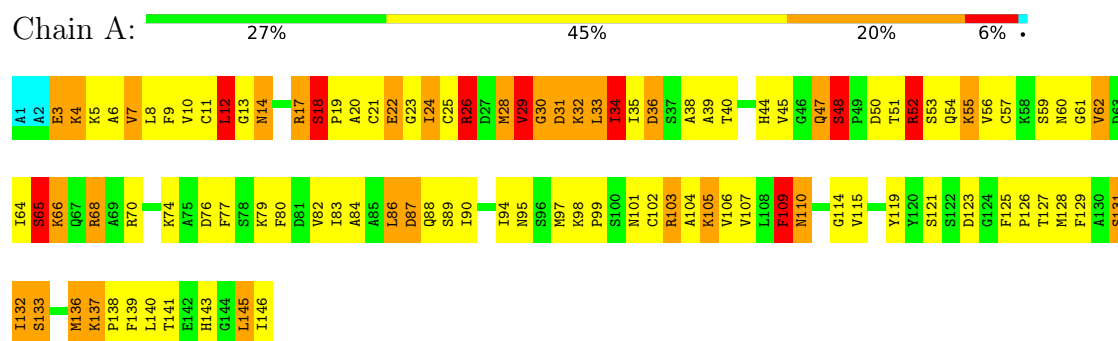
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



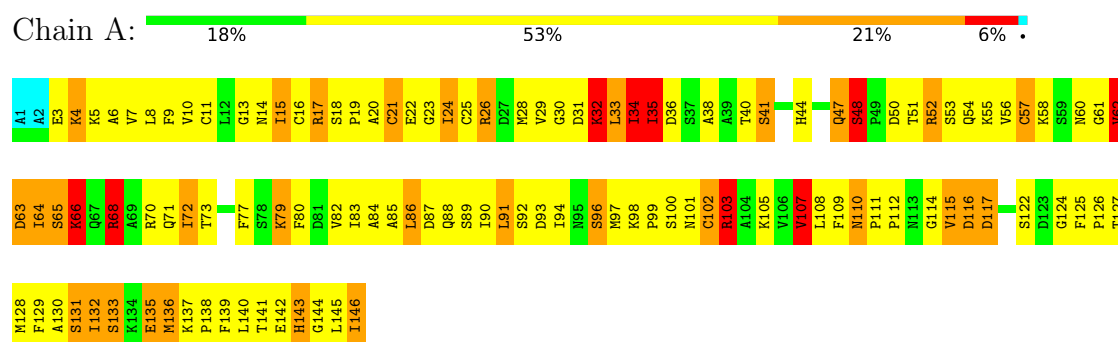
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



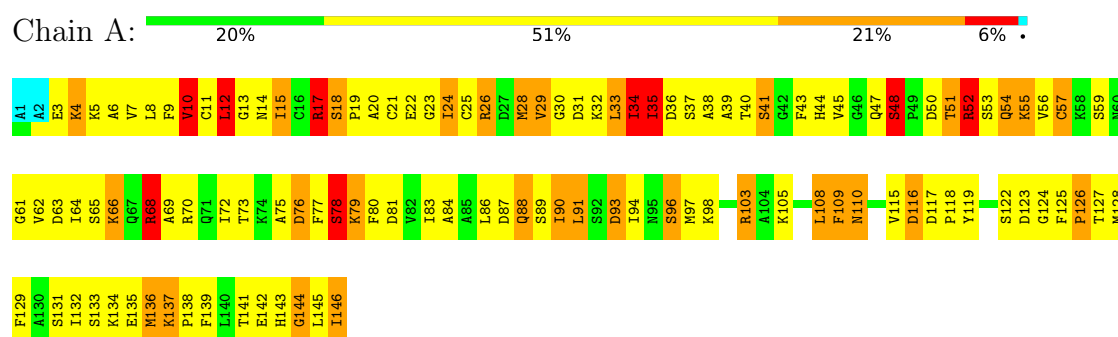
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



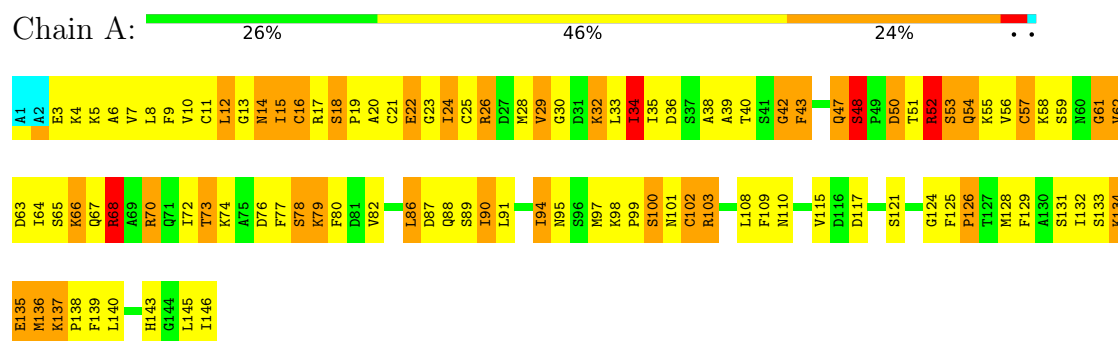
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



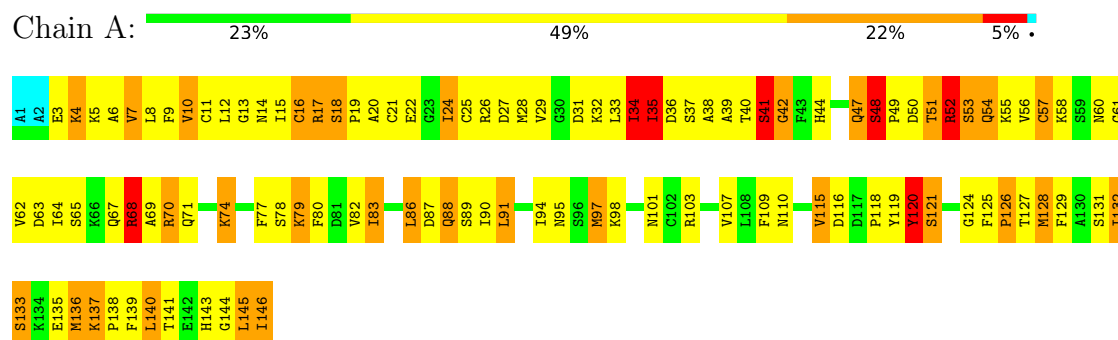
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



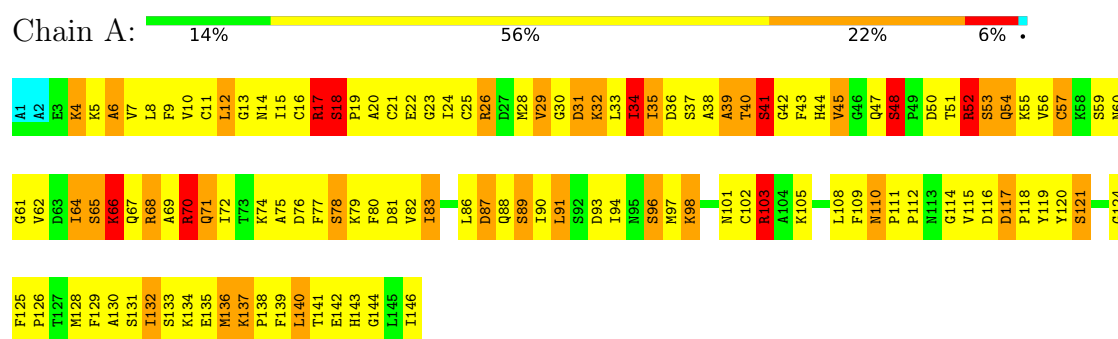
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



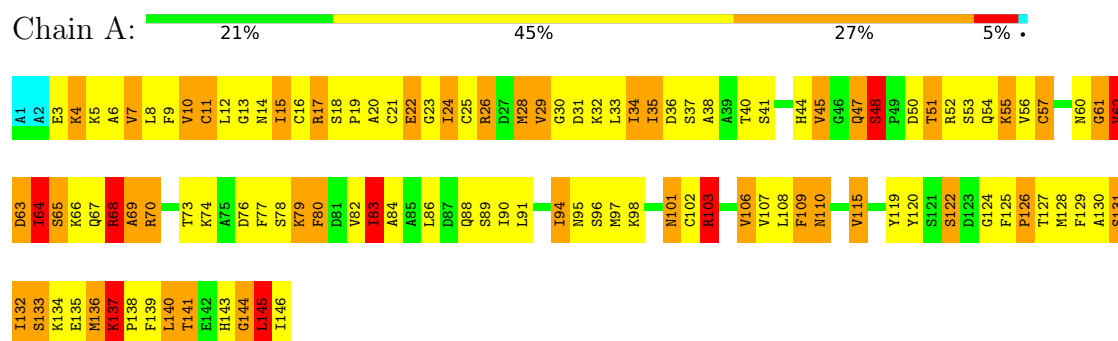
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



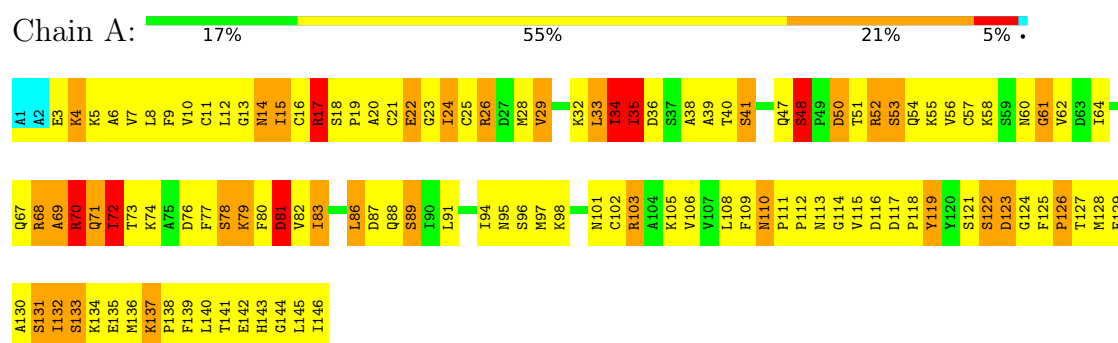
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



4.2.19 Score per residue for model 19

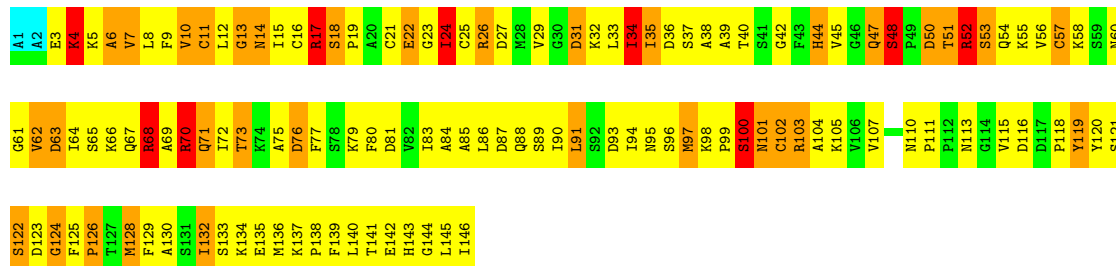
- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase

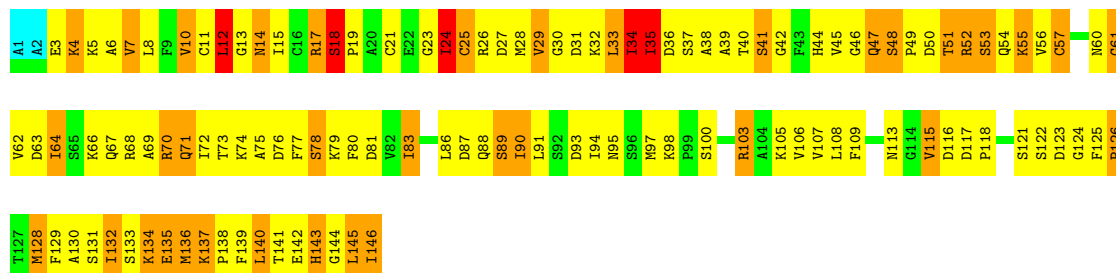
Chain A:  14% 56% 23% 6%



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: protein tyrosine phosphatase

Chain A:  16% 53% 25%



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 100 calculated structures, 21 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	3.851
X-PLOR	refinement	3.851

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	1.43±0.01	0±0/1114 (0.0± 0.0%)	1.60±0.02	5±2/1499 (0.3± 0.1%)
All	All	1.43	3/23394 (0.0%)	1.60	96/31479 (0.3%)

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	5.6±0.6
All	All	0	118

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	32	LYS	N-CA	5.44	1.49	1.46	12	1
1	A	33	LEU	N-CA	5.34	1.49	1.46	19	2

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	33	LEU	N-CA-CB	-7.20	104.89	111.59	1	2
1	A	35	ILE	N-CA-CB	-7.14	105.13	112.06	18	13
1	A	10	VAL	N-CA-CB	-6.75	104.89	112.45	17	7
1	A	117	ASP	N-CA-CB	-6.66	105.01	111.27	12	1
1	A	115	VAL	N-CA-CB	-6.63	105.00	111.89	21	7
1	A	106	VAL	N-CA-CB	-6.42	105.03	112.34	17	5
1	A	64	ILE	N-CA-CB	-6.41	105.03	112.34	7	4
1	A	18	SER	N-CA-CB	-5.97	105.03	111.66	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	83	ILE	N-CA-CB	-5.92	105.13	111.46	19	6
1	A	7	VAL	N-CA-CB	-5.85	105.07	112.15	7	8
1	A	14	ASN	N-CA-CB	-5.79	105.14	113.65	21	5
1	A	110	ASN	N-CA-CB	-5.78	105.03	111.10	13	2
1	A	121	SER	N-CA-CB	-5.76	105.18	113.65	9	1
1	A	107	VAL	N-CA-CB	-5.75	105.18	112.60	12	2
1	A	15	ILE	N-CA-CB	-5.74	104.90	112.36	19	4
1	A	122	SER	N-CA-CB	-5.69	104.96	111.79	17	1
1	A	70	ARG	N-CA-CB	-5.69	104.96	111.79	6	1
1	A	119	TYR	N-CA-CB	-5.65	105.01	111.79	5	1
1	A	32	LYS	N-CA-CB	-5.62	105.05	111.79	3	1
1	A	132	ILE	N-CA-CB	-5.61	104.73	110.62	9	1
1	A	82	VAL	N-CA-CB	-5.48	105.00	111.90	2	2
1	A	32	LYS	CA-C-O	5.41	121.08	117.94	12	1
1	A	17	ARG	N-CA-CB	-5.39	105.73	113.65	1	3
1	A	29	VAL	N-CA-CB	-5.34	104.91	112.12	17	3
1	A	45	VAL	N-CA-CB	-5.34	105.05	112.52	8	3
1	A	18	SER	O-C-N	5.31	123.97	121.53	4	1
1	A	72	ILE	N-CA-CB	-5.28	104.96	110.82	19	3
1	A	90	ILE	N-CA-CB	-5.14	105.02	110.62	18	4
1	A	24	ILE	N-CA-CB	-5.09	104.86	110.51	21	3

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	68	ARG	Sidechain	21
1	A	103	ARG	Sidechain	21
1	A	52	ARG	Sidechain	20
1	A	26	ARG	Sidechain	19
1	A	70	ARG	Sidechain	19
1	A	17	ARG	Sidechain	18

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1095	1099	1099	203±19
All	All	22995	23079	23079	4271

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:VAL:HG22	1:A:38:ALA:HB3	1.06	1.15	3	8
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CD2	1.03	1.87	2	5
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:HA	1.03	1.29	15	19
1:A:140:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HD13	1.02	1.23	14	3
1:A:9:PHE:CD1	1:A:35:ILE:HG23	1.01	1.90	3	2
1:A:140:LEU:HD11	1:A:145:LEU:HD22	1.01	1.32	7	2
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CE1	1.00	1.90	14	8
1:A:34:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	0.97	1.36	1	3
1:A:5:LYS:C	1:A:34:ILE:HG22	0.96	1.86	10	7
1:A:140:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD22	0.96	1.90	7	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:90:ILE:CD1	0.96	1.91	5	2
1:A:140:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD13	0.95	1.91	11	3
1:A:10:VAL:HG22	1:A:38:ALA:C	0.95	1.87	1	7
1:A:10:VAL:CG1	1:A:90:ILE:HD11	0.95	1.92	5	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:133:SER:CB	0.95	1.92	2	9
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CE2	0.94	1.96	20	7
1:A:10:VAL:CG2	1:A:38:ALA:HB3	0.94	1.92	16	9
1:A:6:ALA:HB1	1:A:34:ILE:HD11	0.93	1.37	3	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:90:ILE:HD11	0.92	1.36	12	4
1:A:24:ILE:HD11	1:A:133:SER:HB2	0.90	1.43	15	7
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ILE:HD12	0.90	1.66	20	11
1:A:24:ILE:HD11	1:A:133:SER:HB3	0.90	1.38	2	4
1:A:7:VAL:HG22	1:A:34:ILE:O	0.90	1.66	20	3
1:A:10:VAL:HG13	1:A:38:ALA:O	0.89	1.67	6	6
1:A:20:ALA:HB2	1:A:57:CYS:SG	0.89	2.07	3	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:69:ALA:HB3	0.89	1.39	6	2
1:A:9:PHE:CE1	1:A:35:ILE:HG23	0.88	2.03	4	1
1:A:62:VAL:O	1:A:64:ILE:HG23	0.88	1.69	4	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:133:SER:OG	0.88	1.67	11	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:9:PHE:CZ	0.87	2.05	10	4
1:A:34:ILE:HD12	1:A:35:ILE:N	0.87	1.84	8	4
1:A:17:ARG:HG2	1:A:86:LEU:HD22	0.87	1.47	15	2
1:A:24:ILE:HD11	1:A:129:PHE:CD1	0.87	2.05	21	1
1:A:136:MET:HE1	1:A:139:PHE:CD1	0.87	2.04	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ARG:CB	1:A:86:LEU:HD23	0.86	2.00	21	6
1:A:8:LEU:HD12	1:A:36:ASP:HB3	0.86	1.47	17	4
1:A:10:VAL:HG22	1:A:38:ALA:O	0.85	1.71	9	6
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:HG23	0.85	1.47	12	7
1:A:11:CYS:O	1:A:90:ILE:HD12	0.85	1.72	4	4
1:A:5:LYS:O	1:A:33:LEU:HD12	0.85	1.71	11	1
1:A:10:VAL:HB	1:A:38:ALA:HB3	0.85	1.47	10	5
1:A:57:CYS:SG	1:A:62:VAL:HG11	0.85	2.11	2	9
1:A:85:ALA:HB1	1:A:90:ILE:HG23	0.85	1.48	5	2
1:A:146:ILE:OXT	1:A:146:ILE:HD13	0.84	1.70	1	2
1:A:14:ASN:HB2	1:A:39:ALA:HB2	0.84	1.48	15	7
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:HD11	0.84	2.02	11	6
1:A:57:CYS:O	1:A:62:VAL:HG12	0.84	1.72	16	4
1:A:141:THR:HG23	1:A:146:ILE:OXT	0.84	1.73	6	3
1:A:145:LEU:HG	1:A:146:ILE:HG22	0.84	1.47	2	2
1:A:8:LEU:HD13	1:A:80:PHE:CE2	0.84	2.07	9	4
1:A:8:LEU:HD13	1:A:36:ASP:O	0.84	1.73	5	1
1:A:24:ILE:N	1:A:62:VAL:HG23	0.84	1.87	12	2
1:A:85:ALA:HB1	1:A:90:ILE:HG21	0.84	1.49	20	1
1:A:21:CYS:HA	1:A:132:ILE:HD11	0.83	1.48	8	5
1:A:20:ALA:O	1:A:24:ILE:HG22	0.83	1.74	12	4
1:A:87:ASP:O	1:A:108:LEU:HD21	0.83	1.71	8	1
1:A:20:ALA:HB3	1:A:132:ILE:HG13	0.82	1.49	7	3
1:A:33:LEU:C	1:A:34:ILE:HG23	0.82	1.99	7	4
1:A:94:ILE:HA	1:A:97:MET:HE2	0.82	1.51	13	18
1:A:25:CYS:HB3	1:A:35:ILE:HD11	0.82	1.50	1	4
1:A:32:LYS:HB3	1:A:145:LEU:HD11	0.82	1.51	4	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:38:ALA:HB2	0.81	1.51	3	6
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:HD12	0.81	1.73	16	4
1:A:7:VAL:HG12	1:A:82:VAL:HG11	0.81	1.52	11	2
1:A:5:LYS:HB3	1:A:34:ILE:HG22	0.81	1.49	16	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:34:ILE:HD12	0.81	1.48	18	7
1:A:140:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HB3	0.81	1.51	17	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:34:ILE:HD11	0.80	2.06	3	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HB3	0.80	1.51	4	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:90:ILE:CG2	0.80	2.06	20	2
1:A:6:ALA:HB1	1:A:36:ASP:OD1	0.80	1.76	19	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:143:HIS:CD2	0.80	2.10	1	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:128:MET:HE3	0.80	1.54	16	6
1:A:110:ASN:HB3	1:A:115:VAL:HG21	0.80	1.50	15	1
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:HD23	0.80	1.76	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:MET:HA	1:A:136:MET:HE2	0.80	1.53	15	4
1:A:25:CYS:O	1:A:29:VAL:HG22	0.80	1.77	15	4
1:A:13:GLY:O	1:A:69:ALA:HB1	0.79	1.78	1	2
1:A:40:THR:OG1	1:A:72:ILE:HD12	0.79	1.78	5	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:69:ALA:CB	0.79	2.07	6	1
1:A:21:CYS:SG	1:A:132:ILE:HD11	0.79	2.18	18	3
1:A:144:GLY:C	1:A:145:LEU:HD12	0.79	2.01	13	2
1:A:10:VAL:HG13	1:A:39:ALA:HA	0.79	1.53	14	8
1:A:9:PHE:HA	1:A:84:ALA:HB3	0.79	1.52	9	2
1:A:11:CYS:C	1:A:90:ILE:HD12	0.79	2.02	4	3
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:HD22	0.79	1.78	9	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	0.79	1.53	19	1
1:A:21:CYS:HB3	1:A:35:ILE:HG22	0.79	1.53	4	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:HD22	0.78	2.18	2	3
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:HG22	0.78	1.78	7	7
1:A:8:LEU:HD21	1:A:38:ALA:CB	0.78	2.08	6	4
1:A:91:LEU:HD22	1:A:108:LEU:HD23	0.78	1.55	7	1
1:A:107:VAL:HG11	1:A:143:HIS:CD2	0.78	2.13	18	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:132:ILE:HG12	0.78	1.54	2	1
1:A:21:CYS:CB	1:A:132:ILE:HD11	0.78	2.07	3	1
1:A:5:LYS:O	1:A:34:ILE:HG22	0.78	1.78	13	8
1:A:82:VAL:HG21	1:A:143:HIS:CD2	0.78	2.14	16	1
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:HG13	0.78	1.77	7	13
1:A:83:ILE:HG21	1:A:94:ILE:CD1	0.77	2.09	8	3
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:CA	0.77	2.09	19	18
1:A:21:CYS:HB3	1:A:35:ILE:HG21	0.77	1.54	3	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:38:ALA:C	0.77	2.04	10	4
1:A:15:ILE:HD13	1:A:48:SER:HB2	0.77	1.56	8	2
1:A:15:ILE:HG22	1:A:15:ILE:O	0.77	1.78	5	4
1:A:34:ILE:HD12	1:A:34:ILE:O	0.77	1.79	5	7
1:A:52:ARG:O	1:A:56:VAL:HG22	0.77	1.79	10	3
1:A:6:ALA:HB1	1:A:36:ASP:OD2	0.77	1.79	2	12
1:A:32:LYS:CB	1:A:145:LEU:HD11	0.76	2.09	4	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:106:VAL:HG12	0.76	1.54	9	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:128:MET:CE	0.76	2.11	5	4
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:HG23	0.76	1.55	17	2
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:CB	0.76	2.09	18	1
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:CG1	0.76	2.33	7	5
1:A:34:ILE:HD11	1:A:35:ILE:CD1	0.76	2.10	17	3
1:A:35:ILE:HG23	1:A:35:ILE:O	0.76	1.79	8	1
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:HG22	0.76	1.78	18	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:HD12	0.76	2.04	13	3
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:CG1	0.76	2.11	4	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:N	0.76	1.95	20	2
1:A:28:MET:O	1:A:29:VAL:HG13	0.76	1.81	11	4
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:CD1	0.76	2.16	5	3
1:A:83:ILE:O	1:A:107:VAL:HG22	0.76	1.80	15	4
1:A:77:PHE:CZ	1:A:97:MET:HE3	0.75	2.16	21	9
1:A:10:VAL:HG13	1:A:38:ALA:C	0.75	2.05	3	5
1:A:136:MET:HE1	1:A:139:PHE:CD2	0.75	2.16	8	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:128:MET:HA	0.75	1.56	13	1
1:A:18:SER:OG	1:A:86:LEU:HD21	0.75	1.82	4	2
1:A:8:LEU:HD22	1:A:36:ASP:HB2	0.75	1.58	5	1
1:A:25:CYS:SG	1:A:34:ILE:HD11	0.75	2.22	16	2
1:A:11:CYS:HB2	1:A:86:LEU:HD22	0.74	1.59	6	3
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:HG23	0.74	1.82	8	12
1:A:128:MET:O	1:A:132:ILE:HG22	0.74	1.82	3	6
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:HD12	0.74	1.82	21	1
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:HA	0.74	1.58	7	1
1:A:83:ILE:HG21	1:A:94:ILE:HD11	0.74	1.57	8	1
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:HG13	0.74	1.83	4	1
1:A:4:LYS:HE2	1:A:33:LEU:HD21	0.74	1.60	11	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:140:LEU:CD1	0.73	2.12	1	2
1:A:57:CYS:O	1:A:62:VAL:HG22	0.73	1.84	4	1
1:A:20:ALA:CB	1:A:128:MET:HE3	0.73	2.13	16	7
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:HD11	0.73	1.60	3	4
1:A:146:ILE:C	1:A:146:ILE:HD13	0.73	2.07	12	1
1:A:21:CYS:SG	1:A:132:ILE:HD12	0.73	2.24	14	4
1:A:17:ARG:HB3	1:A:86:LEU:HD23	0.73	1.60	21	6
1:A:8:LEU:CG	1:A:38:ALA:HB2	0.73	2.13	15	3
1:A:23:GLY:HA3	1:A:62:VAL:HG13	0.73	1.60	21	7
1:A:24:ILE:HG12	1:A:132:ILE:HG22	0.73	1.60	5	4
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:HB3	0.73	1.61	19	3
1:A:17:ARG:CB	1:A:86:LEU:HD22	0.73	2.14	18	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:82:VAL:CG1	0.73	2.13	11	2
1:A:40:THR:HG21	1:A:90:ILE:HG13	0.73	1.60	13	1
1:A:136:MET:HE2	1:A:139:PHE:CD2	0.73	2.19	20	1
1:A:77:PHE:CE2	1:A:97:MET:HE3	0.73	2.19	17	4
1:A:4:LYS:HG3	1:A:33:LEU:HD11	0.72	1.61	11	1
1:A:18:SER:HB2	1:A:86:LEU:HD21	0.72	1.59	19	4
1:A:54:GLN:HG3	1:A:64:ILE:HD11	0.72	1.60	8	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:86:LEU:HD22	0.72	1.60	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:C	1:A:34:ILE:HG13	0.72	2.09	21	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:CB	0.72	2.15	19	2
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CD1	0.72	2.20	14	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:145:LEU:CD1	0.72	2.11	14	2
1:A:40:THR:O	1:A:40:THR:HG23	0.72	1.84	14	4
1:A:17:ARG:HD2	1:A:86:LEU:HD23	0.72	1.60	6	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:84:ALA:HB2	0.71	2.15	1	2
1:A:62:VAL:HG12	1:A:62:VAL:O	0.71	1.85	10	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:C	0.71	2.10	12	3
1:A:19:PRO:O	1:A:64:ILE:HG22	0.71	1.85	16	1
1:A:6:ALA:HB1	1:A:36:ASP:CG	0.71	2.09	19	1
1:A:7:VAL:N	1:A:34:ILE:HA	0.71	2.01	9	5
1:A:136:MET:HE3	1:A:136:MET:HA	0.71	1.60	20	3
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HG23	0.71	1.85	9	5
1:A:40:THR:CG2	1:A:90:ILE:HG23	0.71	2.15	21	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:38:ALA:HB3	0.71	2.15	15	2
1:A:34:ILE:HD11	1:A:35:ILE:HD12	0.70	1.62	17	2
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:N	0.70	2.01	15	1
1:A:34:ILE:C	1:A:34:ILE:HD12	0.70	2.12	3	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:131:SER:CB	0.70	2.16	10	4
1:A:14:ASN:HB2	1:A:39:ALA:HB3	0.70	1.64	16	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:129:PHE:CD2	0.70	2.75	20	4
1:A:139:PHE:CE1	1:A:143:HIS:CD2	0.70	2.80	5	5
1:A:8:LEU:HD22	1:A:36:ASP:CB	0.69	2.17	5	1
1:A:115:VAL:HG13	1:A:131:SER:CB	0.69	2.17	11	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:38:ALA:HB2	0.69	2.16	5	4
1:A:39:ALA:HB3	1:A:70:ARG:O	0.69	1.85	15	1
1:A:73:THR:HG22	1:A:76:ASP:OD1	0.69	1.88	3	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:64:ILE:HD11	0.69	2.27	11	1
1:A:139:PHE:CE2	1:A:143:HIS:CE1	0.69	2.81	1	2
1:A:94:ILE:HG13	1:A:97:MET:HE2	0.69	1.65	1	5
1:A:84:ALA:HB1	1:A:109:PHE:CD2	0.69	2.23	6	1
1:A:40:THR:HG23	1:A:40:THR:O	0.69	1.86	17	2
1:A:5:LYS:CD	1:A:145:LEU:HD12	0.69	2.18	3	1
1:A:14:ASN:CB	1:A:39:ALA:HB3	0.69	2.18	16	1
1:A:11:CYS:CB	1:A:86:LEU:HD22	0.69	2.17	19	3
1:A:115:VAL:HG12	1:A:131:SER:HB2	0.69	1.63	6	3
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:HD13	0.68	1.65	3	1
1:A:110:ASN:CB	1:A:115:VAL:HG21	0.68	2.19	15	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:143:HIS:CD2	0.68	2.80	7	8
1:A:24:ILE:HD13	1:A:129:PHE:CE1	0.68	2.22	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:LYS:CB	1:A:34:ILE:HG22	0.68	2.19	16	1
1:A:64:ILE:HG23	1:A:65:SER:N	0.68	2.02	17	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:69:ALA:HB1	0.68	1.64	2	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:38:ALA:O	0.68	1.89	12	6
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:CG2	0.68	2.19	12	9
1:A:52:ARG:O	1:A:56:VAL:HG12	0.68	1.89	12	2
1:A:109:PHE:CZ	1:A:136:MET:HE3	0.68	2.24	15	1
1:A:17:ARG:CG	1:A:86:LEU:HD22	0.68	2.19	20	4
1:A:136:MET:HA	1:A:136:MET:HE3	0.67	1.63	11	7
1:A:141:THR:HG23	1:A:146:ILE:HD12	0.67	1.66	3	2
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:CG2	0.67	2.42	18	8
1:A:21:CYS:CA	1:A:132:ILE:HD11	0.67	2.19	8	2
1:A:17:ARG:HB3	1:A:86:LEU:HD21	0.67	1.66	6	1
1:A:115:VAL:HG13	1:A:128:MET:HA	0.67	1.66	10	2
1:A:82:VAL:HG11	1:A:143:HIS:NE2	0.67	2.05	1	1
1:A:115:VAL:HG23	1:A:115:VAL:O	0.67	1.86	8	4
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CG	0.67	2.25	2	1
1:A:29:VAL:CB	1:A:33:LEU:HD21	0.67	2.20	3	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:129:PHE:CE1	0.67	2.77	19	11
1:A:6:ALA:CA	1:A:34:ILE:HA	0.67	2.20	16	14
1:A:56:VAL:HG22	1:A:60:ASN:OD1	0.67	1.90	16	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:129:PHE:CE2	0.67	2.24	20	1
1:A:19:PRO:HB3	1:A:64:ILE:HD12	0.67	1.67	13	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:146:ILE:HG22	0.67	2.20	17	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:80:PHE:CD1	0.66	2.78	11	4
1:A:8:LEU:HD13	1:A:80:PHE:CD2	0.66	2.25	16	5
1:A:8:LEU:HD12	1:A:38:ALA:HB2	0.66	1.66	5	1
1:A:77:PHE:HZ	1:A:97:MET:HE3	0.66	1.51	21	6
1:A:72:ILE:HD11	1:A:76:ASP:HB3	0.66	1.68	21	3
1:A:126:PRO:O	1:A:130:ALA:HB2	0.66	1.90	12	5
1:A:115:VAL:HG13	1:A:128:MET:HG2	0.66	1.68	13	1
1:A:14:ASN:CG	1:A:69:ALA:HB1	0.66	2.14	20	1
1:A:34:ILE:CD1	1:A:140:LEU:HD22	0.66	2.21	19	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:109:PHE:CD1	0.65	2.26	10	2
1:A:5:LYS:O	1:A:34:ILE:HG23	0.65	1.91	9	4
1:A:38:ALA:O	1:A:39:ALA:HB2	0.65	1.92	16	3
1:A:22:GLU:HG3	1:A:35:ILE:HG21	0.65	1.68	11	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:86:LEU:HD13	0.65	1.68	18	1
1:A:146:ILE:OXT	1:A:146:ILE:HG23	0.65	1.91	21	2
1:A:56:VAL:CG2	1:A:125:PHE:CG	0.65	2.79	7	1
1:A:11:CYS:CA	1:A:90:ILE:HD12	0.65	2.20	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:SER:CB	1:A:86:LEU:HD21	0.65	2.22	12	2
1:A:94:ILE:HD13	1:A:106:VAL:HG11	0.65	1.68	17	1
1:A:24:ILE:CG1	1:A:132:ILE:HG22	0.65	2.20	5	6
1:A:137:LYS:N	1:A:138:PRO:CD	0.65	2.59	15	18
1:A:45:VAL:HG13	1:A:69:ALA:O	0.65	1.91	9	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:HG22	0.65	1.91	12	1
1:A:52:ARG:CB	1:A:125:PHE:CZ	0.65	2.80	12	7
1:A:129:PHE:HA	1:A:132:ILE:HG23	0.65	1.68	2	6
1:A:83:ILE:CD1	1:A:106:VAL:HG12	0.65	2.22	9	1
1:A:141:THR:HG23	1:A:146:ILE:HD13	0.65	1.67	11	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:69:ALA:HB3	0.65	1.69	16	1
1:A:106:VAL:O	1:A:106:VAL:HG23	0.65	1.92	4	3
1:A:24:ILE:CD1	1:A:129:PHE:CD1	0.65	2.79	21	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:9:PHE:CE1	0.65	2.27	13	2
1:A:94:ILE:CG1	1:A:97:MET:HE2	0.65	2.21	11	5
1:A:13:GLY:H	1:A:39:ALA:HB1	0.65	1.49	19	2
1:A:34:ILE:CD1	1:A:35:ILE:HD12	0.65	2.21	17	3
1:A:24:ILE:HG12	1:A:132:ILE:HG23	0.65	1.69	16	5
1:A:94:ILE:HG23	1:A:97:MET:CE	0.65	2.22	16	2
1:A:24:ILE:CD1	1:A:129:PHE:CE2	0.64	2.80	1	5
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:C	0.64	2.73	21	3
1:A:80:PHE:CD1	1:A:80:PHE:N	0.64	2.64	10	5
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ILE:N	0.64	2.31	9	17
1:A:8:LEU:HD21	1:A:38:ALA:HB2	0.64	1.69	12	3
1:A:22:GLU:HB3	1:A:64:ILE:HG23	0.64	1.70	7	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PHE:CZ	0.64	2.81	3	4
1:A:56:VAL:HG11	1:A:125:PHE:HD2	0.64	1.52	14	1
1:A:17:ARG:CB	1:A:86:LEU:HD21	0.64	2.23	6	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:32:LYS:HG3	0.64	1.70	13	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:CYS:N	0.64	2.07	20	7
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG23	0.64	1.91	11	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:136:MET:HE1	0.64	1.70	9	1
1:A:18:SER:HB2	1:A:86:LEU:HD11	0.64	1.70	4	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:7:VAL:O	0.63	1.91	5	1
1:A:36:ASP:CG	1:A:80:PHE:CD2	0.63	2.76	1	2
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:HA	0.63	1.68	13	6
1:A:17:ARG:HB3	1:A:86:LEU:HD22	0.63	1.70	18	2
1:A:47:GLN:O	1:A:48:SER:CB	0.63	2.44	8	11
1:A:84:ALA:HB1	1:A:109:PHE:CE2	0.63	2.29	6	1
1:A:139:PHE:CE1	1:A:143:HIS:NE2	0.63	2.66	11	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:143:HIS:CE1	0.63	2.87	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ARG:CD	1:A:86:LEU:HD23	0.63	2.23	6	2
1:A:17:ARG:C	1:A:86:LEU:HD22	0.63	2.19	17	2
1:A:15:ILE:HG23	1:A:50:ASP:OD2	0.63	1.94	2	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:36:ASP:HB2	0.63	1.71	1	2
1:A:4:LYS:C	1:A:5:LYS:CG	0.63	2.72	7	8
1:A:33:LEU:C	1:A:34:ILE:CG2	0.63	2.72	7	1
1:A:11:CYS:HA	1:A:90:ILE:HD12	0.62	1.69	5	3
1:A:53:SER:N	1:A:125:PHE:CZ	0.62	2.67	14	1
1:A:137:LYS:CB	1:A:138:PRO:CD	0.62	2.77	4	9
1:A:139:PHE:CE2	1:A:143:HIS:NE2	0.62	2.67	5	3
1:A:38:ALA:HB1	1:A:72:ILE:HD12	0.62	1.71	12	2
1:A:10:VAL:HG11	1:A:38:ALA:HB3	0.62	1.70	15	2
1:A:79:LYS:CG	1:A:80:PHE:CE1	0.62	2.82	8	4
1:A:31:ASP:OD1	1:A:35:ILE:HD13	0.62	1.95	21	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:143:HIS:NE2	0.62	2.68	21	5
1:A:10:VAL:HG22	1:A:38:ALA:CB	0.62	2.14	11	6
1:A:18:SER:CB	1:A:19:PRO:CD	0.62	2.78	20	10
1:A:32:LYS:HG3	1:A:34:ILE:HD11	0.62	1.71	8	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:HD11	0.62	1.72	15	2
1:A:8:LEU:O	1:A:10:VAL:HG23	0.62	1.95	18	2
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:HD11	0.62	1.71	8	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:132:ILE:CG2	0.62	2.24	14	8
1:A:57:CYS:C	1:A:62:VAL:HG12	0.62	2.20	6	2
1:A:86:LEU:HG	1:A:115:VAL:HG21	0.62	1.72	11	2
1:A:129:PHE:C	1:A:129:PHE:CD1	0.61	2.77	3	5
1:A:15:ILE:O	1:A:15:ILE:CG2	0.61	2.48	5	4
1:A:15:ILE:HD13	1:A:48:SER:OG	0.61	1.95	7	1
1:A:17:ARG:HB2	1:A:86:LEU:HD23	0.61	1.72	8	1
1:A:4:LYS:HG3	1:A:33:LEU:HD13	0.61	1.71	21	1
1:A:18:SER:N	1:A:19:PRO:CD	0.61	2.63	17	16
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:HD23	0.61	2.19	3	2
1:A:57:CYS:CB	1:A:62:VAL:HG21	0.61	2.25	8	2
1:A:10:VAL:CB	1:A:38:ALA:HB3	0.61	2.25	15	2
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:HD23	0.61	2.35	9	1
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:HB3	0.61	1.72	18	3
1:A:10:VAL:O	1:A:86:LEU:HD13	0.61	1.96	5	2
1:A:20:ALA:HB3	1:A:132:ILE:HD12	0.61	1.72	11	2
1:A:125:PHE:CD1	1:A:125:PHE:N	0.61	2.67	13	1
1:A:12:LEU:O	1:A:14:ASN:N	0.61	2.34	5	1
1:A:133:SER:O	1:A:136:MET:HE2	0.61	1.95	5	1
1:A:21:CYS:HB2	1:A:132:ILE:HD11	0.61	1.72	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ILE:HG23	0.61	1.95	15	1
1:A:24:ILE:CG2	1:A:25:CYS:N	0.61	2.64	14	19
1:A:79:LYS:C	1:A:80:PHE:CD1	0.61	2.79	1	16
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:CE	0.61	2.84	5	3
1:A:125:PHE:N	1:A:126:PRO:HD2	0.60	2.11	12	21
1:A:79:LYS:O	1:A:80:PHE:CD1	0.60	2.54	20	10
1:A:94:ILE:HD13	1:A:94:ILE:O	0.60	1.95	14	1
1:A:28:MET:SD	1:A:140:LEU:HD22	0.60	2.35	2	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:38:ALA:HB3	0.60	1.71	16	3
1:A:23:GLY:C	1:A:62:VAL:HG23	0.60	2.20	12	2
1:A:17:ARG:HD3	1:A:86:LEU:HD22	0.60	1.71	16	2
1:A:36:ASP:OD2	1:A:80:PHE:CE1	0.60	2.54	19	3
1:A:15:ILE:HD11	1:A:44:HIS:O	0.60	1.97	21	1
1:A:18:SER:N	1:A:19:PRO:HD2	0.60	2.10	5	10
1:A:82:VAL:HG13	1:A:143:HIS:NE2	0.60	2.11	14	1
1:A:24:ILE:CB	1:A:132:ILE:CG2	0.60	2.79	5	6
1:A:8:LEU:HG	1:A:38:ALA:HB2	0.60	1.73	20	2
1:A:40:THR:HG22	1:A:40:THR:O	0.60	1.97	15	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:CYS:N	0.60	2.11	9	11
1:A:36:ASP:CG	1:A:80:PHE:CD1	0.60	2.80	20	7
1:A:56:VAL:HG11	1:A:125:PHE:CD2	0.60	2.31	14	1
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:CD1	0.60	2.50	21	1
1:A:79:LYS:C	1:A:80:PHE:CG	0.60	2.80	5	6
1:A:79:LYS:C	1:A:80:PHE:CD2	0.60	2.80	2	4
1:A:7:VAL:HG22	1:A:82:VAL:CG1	0.60	2.27	16	2
1:A:20:ALA:HB1	1:A:129:PHE:HB2	0.60	1.72	16	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:68:ARG:HB3	0.60	1.74	17	1
1:A:15:ILE:HG23	1:A:48:SER:OG	0.59	1.97	8	2
1:A:36:ASP:OD1	1:A:80:PHE:CE1	0.59	2.56	16	8
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PHE:CE1	0.59	2.32	4	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:34:ILE:O	0.59	2.50	8	1
1:A:17:ARG:CA	1:A:86:LEU:HD23	0.59	2.26	21	2
1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CD	0.59	2.65	6	2
1:A:57:CYS:CB	1:A:62:VAL:CG1	0.59	2.81	6	1
1:A:5:LYS:C	1:A:34:ILE:HG23	0.59	2.23	21	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:18:SER:O	0.59	2.55	6	1
1:A:36:ASP:OD2	1:A:80:PHE:CE2	0.59	2.56	10	2
1:A:4:LYS:HG2	1:A:33:LEU:HD13	0.59	1.73	10	2
1:A:107:VAL:HG11	1:A:143:HIS:NE2	0.59	2.12	18	4
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:CD2	0.59	2.31	14	1
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CE2	0.59	2.33	8	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:C	0.59	2.43	8	15
1:A:17:ARG:C	1:A:86:LEU:CD2	0.59	2.75	14	4
1:A:9:PHE:CG	1:A:21:CYS:SG	0.59	2.96	14	7
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:CG	0.59	2.33	11	2
1:A:64:ILE:CG2	1:A:65:SER:N	0.59	2.65	17	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:CG1	0.58	2.81	9	5
1:A:9:PHE:CE2	1:A:21:CYS:SG	0.58	2.96	3	2
1:A:9:PHE:CD2	1:A:21:CYS:SG	0.58	2.96	11	8
1:A:36:ASP:OD2	1:A:80:PHE:CZ	0.58	2.56	7	2
1:A:17:ARG:CB	1:A:86:LEU:CD2	0.58	2.81	2	10
1:A:24:ILE:CG1	1:A:132:ILE:CG2	0.58	2.81	12	13
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.58	2.52	5	2
1:A:12:LEU:CB	1:A:17:ARG:NH1	0.58	2.65	9	1
1:A:61:GLY:C	1:A:62:VAL:HG23	0.58	2.22	7	13
1:A:139:PHE:C	1:A:139:PHE:CD1	0.58	2.81	6	4
1:A:7:VAL:HG21	1:A:9:PHE:CE2	0.58	2.33	20	2
1:A:20:ALA:C	1:A:132:ILE:HD13	0.58	2.23	6	2
1:A:23:GLY:CA	1:A:62:VAL:CG1	0.58	2.82	7	1
1:A:24:ILE:HB	1:A:132:ILE:HG21	0.58	1.73	5	4
1:A:29:VAL:HG11	1:A:32:LYS:HB2	0.58	1.75	7	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASN:CB	0.58	2.52	12	14
1:A:4:LYS:C	1:A:5:LYS:HG3	0.58	2.22	19	5
1:A:57:CYS:CA	1:A:62:VAL:CG2	0.58	2.81	4	1
1:A:119:TYR:CG	1:A:119:TYR:O	0.58	2.57	5	1
1:A:85:ALA:O	1:A:108:LEU:HD12	0.58	1.99	9	1
1:A:79:LYS:CG	1:A:80:PHE:CE2	0.58	2.87	2	4
1:A:36:ASP:OD2	1:A:80:PHE:CD1	0.58	2.57	6	6
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:C	0.58	2.23	1	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:143:HIS:O	0.58	2.56	10	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:47:GLN:NE2	0.58	2.71	16	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:47:GLN:CD	0.58	2.82	18	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:135:GLU:O	0.58	2.57	12	3
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:CG	0.58	2.57	1	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:38:ALA:CB	0.58	2.29	7	2
1:A:45:VAL:HG22	1:A:69:ALA:HB3	0.58	1.74	18	3
1:A:36:ASP:OD1	1:A:80:PHE:CE2	0.58	2.57	11	1
1:A:57:CYS:CB	1:A:62:VAL:HG13	0.58	2.29	12	4
1:A:15:ILE:HD13	1:A:48:SER:CB	0.58	2.29	21	2
1:A:137:LYS:N	1:A:138:PRO:HD2	0.58	2.14	8	18
1:A:9:PHE:CG	1:A:35:ILE:HG23	0.58	2.33	4	2
1:A:9:PHE:CE1	1:A:37:SER:CB	0.58	2.87	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:SER:N	0.57	2.13	9	5
1:A:5:LYS:HD2	1:A:145:LEU:HD12	0.57	1.75	3	1
1:A:61:GLY:C	1:A:62:VAL:HG13	0.57	2.23	20	2
1:A:9:PHE:HZ	1:A:136:MET:HE1	0.57	1.59	13	2
1:A:10:VAL:HB	1:A:90:ILE:HD11	0.57	1.74	16	1
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CZ	0.57	2.34	9	10
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:CB	0.57	2.52	4	5
1:A:36:ASP:CG	1:A:80:PHE:CE1	0.57	2.82	6	4
1:A:32:LYS:CG	1:A:34:ILE:CG1	0.57	2.81	8	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:129:PHE:HD1	0.57	1.55	21	1
1:A:125:PHE:N	1:A:126:PRO:CD	0.57	2.67	2	19
1:A:24:ILE:CD1	1:A:133:SER:CB	0.57	2.78	2	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:CG	0.57	2.52	20	8
1:A:24:ILE:CG1	1:A:132:ILE:HG23	0.57	2.29	16	4
1:A:53:SER:CB	1:A:125:PHE:CD1	0.57	2.87	20	3
1:A:5:LYS:H	1:A:34:ILE:HG22	0.57	1.57	6	5
1:A:29:VAL:HG12	1:A:32:LYS:HD3	0.57	1.76	6	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:139:PHE:CE2	0.57	2.34	17	2
1:A:15:ILE:HD13	1:A:48:SER:HB3	0.57	1.75	18	1
1:A:9:PHE:CZ	1:A:136:MET:SD	0.57	2.97	19	1
1:A:136:MET:CE	1:A:139:PHE:CD2	0.57	2.87	20	2
1:A:4:LYS:C	1:A:5:LYS:HG2	0.57	2.22	7	2
1:A:139:PHE:O	1:A:143:HIS:CG	0.57	2.58	5	2
1:A:24:ILE:HD13	1:A:129:PHE:CE2	0.57	2.34	6	1
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ILE:CD1	0.57	2.52	6	7
1:A:53:SER:CB	1:A:125:PHE:CE1	0.57	2.87	20	2
1:A:140:LEU:O	1:A:145:LEU:N	0.57	2.37	17	2
1:A:124:GLY:O	1:A:125:PHE:C	0.57	2.48	7	14
1:A:18:SER:CB	1:A:19:PRO:HD3	0.57	2.30	20	8
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PHE:CE1	0.57	2.88	4	4
1:A:39:ALA:O	1:A:72:ILE:HG22	0.57	2.00	13	2
1:A:61:GLY:O	1:A:129:PHE:CZ	0.57	2.56	16	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:77:PHE:CE1	0.57	2.58	14	4
1:A:77:PHE:CE1	1:A:98:LYS:CE	0.57	2.88	16	3
1:A:79:LYS:HB3	1:A:80:PHE:CD1	0.57	2.35	17	5
1:A:52:ARG:HB2	1:A:125:PHE:CZ	0.57	2.34	16	5
1:A:78:SER:C	1:A:79:LYS:CD	0.57	2.78	13	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:64:ILE:CD1	0.57	2.68	15	1
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:HG13	0.57	1.77	3	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:33:LEU:HD23	0.57	1.75	4	1
1:A:54:GLN:HB3	1:A:64:ILE:HD13	0.57	1.76	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:VAL:CG2	1:A:131:SER:CB	0.57	2.83	16	2
1:A:82:VAL:HG21	1:A:143:HIS:HD2	0.57	1.56	16	1
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CD2	0.56	2.35	5	3
1:A:42:GLY:O	1:A:43:PHE:CD2	0.56	2.59	14	2
1:A:8:LEU:HA	1:A:36:ASP:O	0.56	2.00	8	15
1:A:36:ASP:CG	1:A:80:PHE:CZ	0.56	2.83	7	2
1:A:117:ASP:CB	1:A:118:PRO:CD	0.56	2.83	2	2
1:A:137:LYS:CB	1:A:138:PRO:HD3	0.56	2.30	4	11
1:A:29:VAL:O	1:A:31:ASP:N	0.56	2.38	4	2
1:A:109:PHE:CZ	1:A:135:GLU:O	0.56	2.59	13	3
1:A:140:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD23	0.56	1.77	12	1
1:A:146:ILE:N	1:A:146:ILE:CD1	0.56	2.67	15	1
1:A:33:LEU:N	1:A:33:LEU:CD1	0.56	2.66	20	1
1:A:33:LEU:C	1:A:34:ILE:CG1	0.56	2.77	21	1
1:A:107:VAL:CG2	1:A:108:LEU:N	0.56	2.68	5	2
1:A:87:ASP:CB	1:A:90:ILE:HD11	0.56	2.31	21	2
1:A:146:ILE:HD12	1:A:146:ILE:N	0.56	2.15	14	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:HG21	0.56	1.76	1	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:HG13	0.56	2.31	9	3
1:A:18:SER:N	1:A:19:PRO:HD3	0.56	2.16	14	7
1:A:10:VAL:CG2	1:A:11:CYS:N	0.56	2.69	15	5
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:C	0.56	2.25	5	2
1:A:52:ARG:CB	1:A:125:PHE:CE2	0.56	2.89	8	3
1:A:140:LEU:HD13	1:A:144:GLY:HA3	0.56	1.78	17	1
1:A:5:LYS:O	1:A:33:LEU:CB	0.56	2.53	16	3
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:C	0.56	2.49	7	2
1:A:6:ALA:HB1	1:A:80:PHE:HD2	0.56	1.61	1	1
1:A:79:LYS:O	1:A:80:PHE:CG	0.56	2.58	5	4
1:A:124:GLY:O	1:A:128:MET:N	0.56	2.38	18	10
1:A:83:ILE:HB	1:A:106:VAL:HG12	0.56	1.78	19	3
1:A:25:CYS:O	1:A:29:VAL:HG13	0.56	2.01	12	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:35:ILE:CG2	0.56	2.82	4	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:140:LEU:CB	0.56	2.28	4	1
1:A:146:ILE:HG22	1:A:146:ILE:O	0.56	2.01	19	1
1:A:14:ASN:CB	1:A:39:ALA:HB2	0.56	2.31	20	3
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:LYS:N	0.56	2.54	3	3
1:A:14:ASN:ND2	1:A:16:CYS:N	0.56	2.54	5	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:131:SER:CB	0.56	2.84	21	2
1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CD1	0.55	2.70	17	6
1:A:128:MET:O	1:A:132:ILE:CG2	0.55	2.54	8	6
1:A:20:ALA:CB	1:A:62:VAL:HG11	0.55	2.31	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ILE:HD12	1:A:104:ALA:CB	0.55	2.32	11	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:38:ALA:C	0.55	2.79	15	4
1:A:91:LEU:HD13	1:A:108:LEU:HG	0.55	1.77	13	2
1:A:4:LYS:HA	1:A:145:LEU:HD21	0.55	1.78	1	1
1:A:38:ALA:HB1	1:A:72:ILE:HG12	0.55	1.75	5	1
1:A:61:GLY:C	1:A:62:VAL:HG12	0.55	2.26	12	2
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:CB	0.55	2.55	1	8
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:CD2	0.55	2.59	1	1
1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:PRO:HD3	0.55	1.78	21	21
1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:THR:N	0.55	2.16	12	3
1:A:6:ALA:HB1	1:A:80:PHE:CD1	0.55	2.37	14	7
1:A:139:PHE:CD2	1:A:140:LEU:N	0.55	2.74	15	5
1:A:91:LEU:HD22	1:A:108:LEU:CD1	0.55	2.32	13	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:CD2	0.55	2.54	11	5
1:A:119:TYR:O	1:A:121:SER:N	0.55	2.40	7	3
1:A:82:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HZ	0.55	1.62	7	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:HE2	0.55	2.02	7	3
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:HD3	0.55	2.35	17	2
1:A:52:ARG:HG2	1:A:125:PHE:CE2	0.55	2.36	21	1
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:CG2	0.55	2.55	5	13
1:A:130:ALA:O	1:A:134:LYS:CB	0.55	2.55	6	7
1:A:146:ILE:C	1:A:146:ILE:CD1	0.55	2.80	12	2
1:A:35:ILE:HD12	1:A:35:ILE:N	0.55	2.16	3	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:CB	0.55	2.95	17	3
1:A:136:MET:HE2	1:A:140:LEU:HB2	0.55	1.79	14	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:69:ALA:HB3	0.55	2.30	16	1
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:HB2	0.55	1.79	18	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:83:ILE:HG23	0.55	1.79	7	2
1:A:9:PHE:CD2	1:A:21:CYS:CB	0.55	2.90	10	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:CG	0.55	2.55	16	2
1:A:72:ILE:C	1:A:72:ILE:HD13	0.55	2.27	19	1
1:A:94:ILE:HG23	1:A:95:ASN:N	0.55	2.17	6	14
1:A:53:SER:O	1:A:56:VAL:CG1	0.55	2.55	21	3
1:A:30:GLY:O	1:A:31:ASP:CB	0.55	2.54	4	3
1:A:29:VAL:HG12	1:A:32:LYS:CD	0.55	2.32	6	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:39:ALA:N	0.55	2.16	10	1
1:A:127:THR:O	1:A:130:ALA:HB3	0.55	2.02	18	4
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CD1	0.55	2.53	11	5
1:A:131:SER:O	1:A:135:GLU:CB	0.55	2.54	10	1
1:A:136:MET:O	1:A:140:LEU:HD23	0.55	2.02	15	1
1:A:17:ARG:HB2	1:A:20:ALA:HB3	0.55	1.78	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:HD22	1:A:108:LEU:HD12	0.55	1.77	13	2
1:A:117:ASP:N	1:A:118:PRO:CD	0.55	2.69	13	2
1:A:57:CYS:CA	1:A:62:VAL:HG13	0.55	2.32	12	4
1:A:20:ALA:CB	1:A:128:MET:CE	0.55	2.85	12	2
1:A:125:PHE:CB	1:A:126:PRO:CD	0.54	2.84	7	5
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:HG23	0.54	1.77	6	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:35:ILE:HG23	0.54	1.79	18	2
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:CG	0.54	2.55	17	10
1:A:124:GLY:O	1:A:128:MET:CB	0.54	2.55	17	7
1:A:66:LYS:O	1:A:68:ARG:N	0.54	2.40	4	1
1:A:16:CYS:O	1:A:18:SER:N	0.54	2.40	8	3
1:A:146:ILE:CD1	1:A:146:ILE:C	0.54	2.80	10	1
1:A:7:VAL:N	1:A:36:ASP:OD1	0.54	2.41	19	1
1:A:94:ILE:CG2	1:A:95:ASN:N	0.54	2.70	5	16
1:A:50:ASP:O	1:A:54:GLN:CG	0.54	2.55	7	6
1:A:17:ARG:NH1	1:A:86:LEU:HD22	0.54	2.18	5	1
1:A:133:SER:O	1:A:136:MET:CE	0.54	2.56	16	2
1:A:25:CYS:O	1:A:30:GLY:N	0.54	2.41	14	1
1:A:34:ILE:CD1	1:A:140:LEU:HD11	0.54	2.32	21	1
1:A:51:THR:O	1:A:55:LYS:CB	0.54	2.55	20	15
1:A:55:LYS:HG3	1:A:56:VAL:N	0.54	2.18	11	12
1:A:6:ALA:C	1:A:34:ILE:HA	0.54	2.27	9	3
1:A:21:CYS:SG	1:A:132:ILE:CD1	0.54	2.96	14	7
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:HE3	0.54	2.36	5	5
1:A:79:LYS:HG2	1:A:80:PHE:CE2	0.54	2.38	2	2
1:A:134:LYS:O	1:A:138:PRO:CD	0.54	2.56	9	2
1:A:101:ASN:O	1:A:102:CYS:CB	0.54	2.56	12	2
1:A:34:ILE:HG21	1:A:145:LEU:HD11	0.54	1.79	13	2
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:HD12	0.54	1.79	4	1
1:A:7:VAL:O	1:A:34:ILE:O	0.54	2.25	8	2
1:A:136:MET:HA	1:A:136:MET:CE	0.54	2.31	15	11
1:A:21:CYS:CB	1:A:35:ILE:HG22	0.54	2.28	4	1
1:A:20:ALA:HB3	1:A:132:ILE:CD1	0.54	2.33	11	2
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CG1	0.54	2.56	14	5
1:A:32:LYS:HG3	1:A:34:ILE:CG1	0.54	2.33	8	1
1:A:140:LEU:O	1:A:145:LEU:CB	0.54	2.55	7	3
1:A:120:TYR:O	1:A:121:SER:CB	0.54	2.56	9	2
1:A:10:VAL:HG13	1:A:39:ALA:CA	0.54	2.33	11	2
1:A:53:SER:HB3	1:A:125:PHE:CE1	0.54	2.37	20	1
1:A:36:ASP:CG	1:A:80:PHE:CE2	0.54	2.86	10	3
1:A:82:VAL:CG1	1:A:143:HIS:NE2	0.54	2.71	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:ALA:O	1:A:134:LYS:CG	0.54	2.56	2	2
1:A:25:CYS:C	1:A:35:ILE:HD11	0.54	2.28	17	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:34:ILE:HB	0.54	1.80	19	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:LYS:CA	0.53	2.71	3	3
1:A:57:CYS:O	1:A:62:VAL:CG2	0.53	2.56	4	1
1:A:52:ARG:HB2	1:A:125:PHE:CE2	0.53	2.38	5	1
1:A:5:LYS:NZ	1:A:144:GLY:O	0.53	2.40	15	1
1:A:62:VAL:HG22	1:A:63:ASP:N	0.53	2.18	18	1
1:A:3:GLU:OE1	1:A:32:LYS:CB	0.53	2.56	19	1
1:A:3:GLU:CD	1:A:34:ILE:CG2	0.53	2.80	19	1
1:A:140:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HB2	0.53	1.80	21	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:111:PRO:O	0.53	2.41	19	3
1:A:10:VAL:HG22	1:A:11:CYS:N	0.53	2.17	20	7
1:A:28:MET:HE3	1:A:137:LYS:HE3	0.53	1.80	12	1
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:CD	0.53	2.90	17	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:73:THR:O	0.53	2.56	19	1
1:A:14:ASN:ND2	1:A:39:ALA:HB2	0.53	2.18	21	1
1:A:17:ARG:HB3	1:A:86:LEU:CD2	0.53	2.34	7	8
1:A:17:ARG:O	1:A:115:VAL:CG2	0.53	2.56	7	1
1:A:79:LYS:O	1:A:80:PHE:C	0.53	2.51	10	2
1:A:136:MET:O	1:A:140:LEU:CD2	0.53	2.57	15	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:69:ALA:CB	0.53	2.33	2	1
1:A:54:GLN:HB2	1:A:64:ILE:HD13	0.53	1.80	3	1
1:A:15:ILE:O	1:A:16:CYS:O	0.53	2.27	5	1
1:A:146:ILE:CG2	1:A:146:ILE:O	0.53	2.56	10	1
1:A:136:MET:CE	1:A:139:PHE:CG	0.53	2.92	20	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:CD1	0.53	2.86	1	2
1:A:9:PHE:CG	1:A:21:CYS:HB3	0.53	2.39	6	2
1:A:34:ILE:CD1	1:A:35:ILE:N	0.53	2.67	8	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:CD2	0.53	2.56	9	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:129:PHE:CE2	0.53	2.39	11	1
1:A:34:ILE:HG13	1:A:35:ILE:HD12	0.53	1.80	19	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:129:PHE:CE2	0.53	2.90	20	1
1:A:77:PHE:CZ	1:A:98:LYS:HG2	0.53	2.39	8	11
1:A:11:CYS:CA	1:A:90:ILE:CD1	0.53	2.87	10	1
1:A:28:MET:C	1:A:29:VAL:HG13	0.53	2.29	19	5
1:A:44:HIS:O	1:A:47:GLN:CG	0.53	2.57	16	3
1:A:7:VAL:HG22	1:A:82:VAL:HG11	0.53	1.79	16	1
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:CD1	0.53	2.55	18	2
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:CD2	0.53	2.97	9	2
1:A:29:VAL:O	1:A:30:GLY:C	0.53	2.52	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:CYS:HA	1:A:132:ILE:HD12	0.53	1.80	17	2
1:A:54:GLN:NE2	1:A:64:ILE:HD12	0.53	2.19	15	1
1:A:5:LYS:C	1:A:34:ILE:CG2	0.53	2.82	21	1
1:A:15:ILE:HG21	1:A:48:SER:OG	0.53	2.04	16	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:17:ARG:NE	0.53	2.72	20	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:116:ASP:HB2	0.53	1.80	20	1
1:A:40:THR:HG21	1:A:90:ILE:HG23	0.53	1.79	21	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:62:VAL:CG1	0.53	2.96	7	7
1:A:7:VAL:HG12	1:A:82:VAL:CB	0.53	2.33	5	2
1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:OE1	0.53	2.57	6	1
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:ND2	0.53	2.55	9	1
1:A:20:ALA:HB1	1:A:132:ILE:HG13	0.53	1.79	13	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:HG23	0.53	2.04	15	1
1:A:11:CYS:CB	1:A:16:CYS:O	0.53	2.57	2	1
1:A:16:CYS:SG	1:A:119:TYR:CE1	0.53	2.98	2	1
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:CG1	0.53	2.55	4	2
1:A:57:CYS:O	1:A:62:VAL:N	0.53	2.41	7	4
1:A:87:ASP:O	1:A:90:ILE:CG2	0.53	2.57	13	3
1:A:7:VAL:N	1:A:36:ASP:OD2	0.52	2.42	8	2
1:A:87:ASP:CB	1:A:90:ILE:CD1	0.52	2.87	9	4
1:A:90:ILE:HG23	1:A:91:LEU:N	0.52	2.19	12	8
1:A:14:ASN:O	1:A:15:ILE:C	0.52	2.52	17	2
1:A:24:ILE:CG2	1:A:136:MET:HE1	0.52	2.34	10	1
1:A:61:GLY:C	1:A:62:VAL:CG1	0.52	2.82	20	1
1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:OD1	0.52	2.43	11	5
1:A:108:LEU:CG	1:A:110:ASN:OD1	0.52	2.57	2	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:34:ILE:CD1	0.52	2.85	3	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:9:PHE:CE1	0.52	2.39	3	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:CE	0.52	2.57	4	1
1:A:142:GLU:O	1:A:143:HIS:C	0.52	2.50	9	10
1:A:146:ILE:CG2	1:A:146:ILE:OXT	0.52	2.56	4	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:69:ALA:O	0.52	2.57	10	2
1:A:18:SER:OG	1:A:86:LEU:HD22	0.52	2.04	14	1
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:N	0.52	2.19	2	8
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:CB	0.52	2.57	1	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:HB	0.52	2.35	4	1
1:A:109:PHE:CZ	1:A:135:GLU:HB3	0.52	2.40	18	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:82:VAL:HB	0.52	1.81	5	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:PHE:N	0.52	2.19	7	1
1:A:140:LEU:O	1:A:146:ILE:N	0.52	2.43	10	3
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:CG2	0.52	2.58	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:LYS:O	1:A:34:ILE:CG2	0.52	2.56	13	4
1:A:8:LEU:CG	1:A:38:ALA:HB3	0.52	2.35	9	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:HD13	0.52	2.04	18	1
1:A:78:SER:OG	1:A:103:ARG:NH2	0.52	2.42	16	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HB2	0.52	1.81	4	1
1:A:24:ILE:HB	1:A:132:ILE:CG2	0.52	2.33	5	3
1:A:42:GLY:O	1:A:44:HIS:N	0.52	2.42	16	2
1:A:77:PHE:CE1	1:A:98:LYS:HE3	0.52	2.39	16	4
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:CG1	0.52	2.35	17	4
1:A:4:LYS:CD	1:A:4:LYS:C	0.52	2.80	4	3
1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:VAL:N	0.52	2.19	4	9
1:A:142:GLU:O	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	9	7
1:A:139:PHE:CD1	1:A:139:PHE:C	0.52	2.87	5	2
1:A:12:LEU:HD23	1:A:87:ASP:OD2	0.52	2.04	14	1
1:A:94:ILE:HG23	1:A:97:MET:HE2	0.52	1.79	16	1
1:A:17:ARG:HB2	1:A:86:LEU:CD2	0.52	2.34	6	5
1:A:94:ILE:HG13	1:A:97:MET:CE	0.52	2.35	4	9
1:A:19:PRO:HA	1:A:64:ILE:HG21	0.52	1.80	5	1
1:A:79:LYS:HB3	1:A:80:PHE:CE2	0.52	2.40	5	2
1:A:61:GLY:C	1:A:62:VAL:CG2	0.52	2.83	7	4
1:A:144:GLY:C	1:A:145:LEU:CD1	0.52	2.81	13	1
1:A:55:LYS:C	1:A:55:LYS:CE	0.52	2.82	5	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:37:SER:HB2	0.52	2.38	6	1
1:A:24:ILE:CB	1:A:132:ILE:HG23	0.52	2.35	6	4
1:A:5:LYS:CA	1:A:34:ILE:HG22	0.52	2.35	10	3
1:A:32:LYS:O	1:A:34:ILE:HG23	0.52	2.04	18	1
1:A:11:CYS:O	1:A:17:ARG:NH1	0.52	2.42	20	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:77:PHE:N	0.52	2.43	7	2
1:A:106:VAL:O	1:A:106:VAL:CG2	0.52	2.58	4	1
1:A:7:VAL:CB	1:A:34:ILE:HD12	0.52	2.33	10	2
1:A:60:ASN:HB3	1:A:129:PHE:CE2	0.52	2.40	21	1
1:A:16:CYS:C	1:A:17:ARG:CG	0.52	2.82	3	5
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CG2	0.52	2.57	19	5
1:A:77:PHE:CE1	1:A:98:LYS:HG2	0.52	2.40	3	3
1:A:128:MET:HG2	1:A:129:PHE:N	0.52	2.20	20	8
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:CB	0.52	2.98	4	3
1:A:8:LEU:HD21	1:A:38:ALA:HB3	0.52	1.82	9	1
1:A:40:THR:O	1:A:40:THR:CG2	0.52	2.58	9	3
1:A:118:PRO:HB2	1:A:125:PHE:CZ	0.52	2.39	9	1
1:A:17:ARG:CA	1:A:86:LEU:CD2	0.52	2.88	17	3
1:A:28:MET:O	1:A:29:VAL:CG1	0.52	2.57	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:PHE:CD1	1:A:84:ALA:CB	0.52	2.93	12	1
1:A:107:VAL:HG22	1:A:108:LEU:N	0.52	2.20	5	2
1:A:14:ASN:O	1:A:14:ASN:CG	0.52	2.52	7	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:125:PHE:CD1	0.52	2.40	8	2
1:A:75:ALA:O	1:A:79:LYS:CE	0.52	2.58	13	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:135:GLU:O	0.52	2.63	14	1
1:A:77:PHE:CG	1:A:98:LYS:HD2	0.52	2.40	17	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:132:ILE:CG2	0.51	2.34	18	13
1:A:75:ALA:O	1:A:79:LYS:N	0.51	2.43	1	3
1:A:32:LYS:HG3	1:A:34:ILE:CD1	0.51	2.35	8	1
1:A:79:LYS:CB	1:A:80:PHE:CD1	0.51	2.93	10	2
1:A:79:LYS:CD	1:A:79:LYS:N	0.51	2.71	13	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:63:ASP:N	0.51	2.73	18	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:38:ALA:CB	0.51	2.83	1	1
1:A:141:THR:CG2	1:A:146:ILE:OXT	0.51	2.58	1	3
1:A:11:CYS:CB	1:A:17:ARG:HB3	0.51	2.36	18	3
1:A:136:MET:SD	1:A:137:LYS:N	0.51	2.83	5	1
1:A:139:PHE:CE1	1:A:143:HIS:CG	0.51	2.99	19	2
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:CG2	0.51	2.58	11	2
1:A:9:PHE:CD1	1:A:21:CYS:SG	0.51	2.98	1	3
1:A:17:ARG:NH2	1:A:117:ASP:O	0.51	2.43	1	1
1:A:129:PHE:HA	1:A:132:ILE:CG2	0.51	2.35	2	3
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:HD2	0.51	1.83	4	1
1:A:94:ILE:CG1	1:A:97:MET:CE	0.51	2.87	4	2
1:A:121:SER:O	1:A:123:ASP:N	0.51	2.43	9	2
1:A:139:PHE:O	1:A:143:HIS:ND1	0.51	2.43	6	2
1:A:7:VAL:HG22	1:A:34:ILE:C	0.51	2.30	8	1
1:A:22:GLU:O	1:A:35:ILE:HD11	0.51	2.06	8	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:CB	0.51	2.58	11	1
1:A:14:ASN:ND2	1:A:37:SER:OG	0.51	2.43	15	1
1:A:131:SER:O	1:A:135:GLU:CG	0.51	2.58	19	1
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:CG2	0.51	2.59	21	6
1:A:136:MET:CG	1:A:136:MET:O	0.51	2.57	3	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:82:VAL:HG11	0.51	2.31	11	1
1:A:11:CYS:O	1:A:90:ILE:CG1	0.51	2.59	11	2
1:A:45:VAL:HG23	1:A:68:ARG:CA	0.51	2.36	17	1
1:A:28:MET:SD	1:A:28:MET:N	0.51	2.83	18	1
1:A:13:GLY:N	1:A:39:ALA:HB1	0.51	2.20	19	1
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:CD2	0.51	2.55	7	3
1:A:88:GLN:O	1:A:89:SER:C	0.51	2.53	18	16
1:A:3:GLU:O	1:A:145:LEU:CD2	0.51	2.59	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LYS:O	1:A:34:ILE:N	0.51	2.43	8	1
1:A:82:VAL:CG1	1:A:143:HIS:CE1	0.51	2.94	12	1
1:A:83:ILE:O	1:A:107:VAL:CG1	0.51	2.59	12	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:CD1	0.51	2.59	18	1
1:A:21:CYS:HA	1:A:24:ILE:CG2	0.51	2.35	19	7
1:A:62:VAL:CG1	1:A:63:ASP:N	0.51	2.73	8	1
1:A:79:LYS:HB3	1:A:80:PHE:CE1	0.51	2.41	17	2
1:A:22:GLU:CG	1:A:35:ILE:HG21	0.51	2.35	11	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:33:LEU:HD12	0.51	2.36	15	1
1:A:14:ASN:OD1	1:A:71:GLN:N	0.51	2.44	20	2
1:A:93:ASP:O	1:A:96:SER:N	0.51	2.43	1	7
1:A:6:ALA:HA	1:A:34:ILE:CD1	0.51	2.35	3	2
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:CD1	0.51	2.35	16	5
1:A:29:VAL:HB	1:A:33:LEU:HD21	0.51	1.82	3	1
1:A:23:GLY:HA3	1:A:62:VAL:HG22	0.51	1.81	13	2
1:A:5:LYS:CE	1:A:144:GLY:O	0.51	2.58	13	1
1:A:71:GLN:CG	1:A:72:ILE:N	0.51	2.74	21	1
1:A:99:PRO:O	1:A:100:SER:CB	0.51	2.57	20	3
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:HG23	0.51	2.06	7	1
1:A:95:ASN:OD1	1:A:96:SER:N	0.51	2.44	17	2
1:A:56:VAL:CG2	1:A:125:PHE:HB3	0.51	2.36	18	1
1:A:18:SER:OG	1:A:132:ILE:HD11	0.51	2.06	19	1
1:A:8:LEU:HG	1:A:38:ALA:CB	0.51	2.36	20	1
1:A:87:ASP:O	1:A:90:ILE:HD12	0.51	2.06	1	1
1:A:117:ASP:CB	1:A:118:PRO:HD3	0.51	2.35	2	2
1:A:145:LEU:CG	1:A:146:ILE:N	0.51	2.70	17	3
1:A:31:ASP:C	1:A:32:LYS:CG	0.51	2.83	3	2
1:A:9:PHE:CE1	1:A:35:ILE:HG12	0.51	2.41	4	1
1:A:5:LYS:N	1:A:34:ILE:HG22	0.51	2.20	6	5
1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:PRO:CD	0.51	2.36	7	8
1:A:45:VAL:HG12	1:A:46:GLY:N	0.51	2.21	8	1
1:A:116:ASP:OD1	1:A:117:ASP:N	0.51	2.43	10	1
1:A:139:PHE:CE2	1:A:143:HIS:O	0.51	2.64	10	1
1:A:40:THR:OG1	1:A:41:SER:N	0.51	2.44	12	2
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ILE:CG2	0.51	2.58	15	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:115:VAL:HG11	0.51	2.21	15	1
1:A:34:ILE:CD1	1:A:35:ILE:CD1	0.51	2.85	17	1
1:A:49:PRO:O	1:A:51:THR:N	0.51	2.43	21	1
1:A:139:PHE:O	1:A:143:HIS:N	0.51	2.39	19	6
1:A:106:VAL:C	1:A:107:VAL:HG13	0.51	2.31	17	3
1:A:90:ILE:CG2	1:A:91:LEU:N	0.51	2.73	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ILE:HD12	1:A:104:ALA:HB1	0.51	1.82	11	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:139:PHE:CE1	0.51	2.99	16	1
1:A:9:PHE:CD2	1:A:21:CYS:HB3	0.50	2.41	1	3
1:A:36:ASP:HB3	1:A:80:PHE:CE2	0.50	2.41	13	7
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:CA	0.50	2.33	7	1
1:A:115:VAL:HG11	1:A:131:SER:CB	0.50	2.36	7	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:C	0.50	2.52	18	2
1:A:43:PHE:O	1:A:45:VAL:HG23	0.50	2.06	18	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:131:SER:OG	0.50	2.05	18	1
1:A:49:PRO:O	1:A:50:ASP:CB	0.50	2.56	7	2
1:A:47:GLN:O	1:A:48:SER:HB2	0.50	2.04	8	2
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:CG	0.50	2.59	17	2
1:A:20:ALA:HB2	1:A:128:MET:SD	0.50	2.46	11	1
1:A:68:ARG:O	1:A:70:ARG:N	0.50	2.45	17	1
1:A:77:PHE:CE2	1:A:99:PRO:HD3	0.50	2.42	2	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:HB3	0.50	2.06	4	2
1:A:18:SER:O	1:A:22:GLU:CB	0.50	2.60	5	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:80:PHE:CA	0.50	2.36	17	4
1:A:12:LEU:O	1:A:39:ALA:HB1	0.50	2.06	10	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:84:ALA:O	0.50	2.06	12	2
1:A:45:VAL:HG23	1:A:68:ARG:CB	0.50	2.35	17	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:9:PHE:N	0.50	2.80	4	1
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:HB2	0.50	2.05	4	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:38:ALA:CB	0.50	2.34	5	1
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:ILE:CG2	0.50	2.37	5	2
1:A:77:PHE:CE1	1:A:98:LYS:HD2	0.50	2.41	7	4
1:A:64:ILE:O	1:A:65:SER:CB	0.50	2.59	20	2
1:A:140:LEU:CD1	1:A:146:ILE:HG22	0.50	2.36	12	1
1:A:25:CYS:SG	1:A:34:ILE:CD1	0.50	2.98	16	2
1:A:86:LEU:HD11	1:A:115:VAL:HB	0.50	1.83	17	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:MET:C	0.50	2.55	17	11
1:A:79:LYS:HB3	1:A:80:PHE:CD2	0.50	2.42	2	5
1:A:8:LEU:HD13	1:A:80:PHE:HE2	0.50	1.63	9	2
1:A:118:PRO:CB	1:A:125:PHE:CE1	0.50	2.94	9	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:N	0.50	2.78	15	3
1:A:76:ASP:HA	1:A:80:PHE:CE1	0.50	2.41	10	2
1:A:29:VAL:CG2	1:A:32:LYS:HD3	0.50	2.36	11	2
1:A:92:SER:O	1:A:96:SER:N	0.50	2.45	18	2
1:A:122:SER:O	1:A:126:PRO:CD	0.50	2.59	12	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:HD12	0.50	2.06	13	2
1:A:50:ASP:OD1	1:A:54:GLN:NE2	0.50	2.44	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ILE:HD13	1:A:73:THR:N	0.50	2.22	19	1
1:A:5:LYS:HB2	1:A:34:ILE:HG22	0.50	1.84	20	1
1:A:100:SER:O	1:A:101:ASN:CG	0.50	2.54	20	1
1:A:8:LEU:O	1:A:84:ALA:O	0.50	2.30	11	5
1:A:119:TYR:O	1:A:120:TYR:CB	0.50	2.60	8	3
1:A:140:LEU:CD1	1:A:146:ILE:HD12	0.50	2.36	4	1
1:A:11:CYS:HB2	1:A:86:LEU:HD13	0.50	1.81	7	1
1:A:29:VAL:O	1:A:30:GLY:O	0.50	2.29	8	1
1:A:72:ILE:CG1	1:A:76:ASP:OD2	0.50	2.60	10	1
1:A:32:LYS:CG	1:A:33:LEU:N	0.50	2.74	11	2
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:CB	0.50	2.60	12	4
1:A:36:ASP:HB3	1:A:80:PHE:CE1	0.50	2.42	2	1
1:A:4:LYS:C	1:A:4:LYS:CE	0.50	2.85	3	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:33:LEU:CD2	0.50	2.36	4	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:131:SER:HB3	0.50	2.37	7	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB3	0.50	2.37	9	1
1:A:136:MET:O	1:A:140:LEU:CB	0.50	2.60	9	1
1:A:109:PHE:CG	1:A:135:GLU:OE1	0.50	2.65	12	1
1:A:101:ASN:O	1:A:101:ASN:ND2	0.50	2.43	17	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:109:PHE:CE2	0.50	3.00	19	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:CB	0.50	2.59	9	5
1:A:7:VAL:HA	1:A:82:VAL:O	0.50	2.07	19	12
1:A:100:SER:O	1:A:101:ASN:ND2	0.50	2.44	2	2
1:A:145:LEU:HG	1:A:146:ILE:N	0.50	2.21	17	3
1:A:24:ILE:HG23	1:A:136:MET:HE1	0.50	1.83	3	1
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:HB3	0.50	2.06	3	1
1:A:91:LEU:HD13	1:A:108:LEU:CG	0.50	2.37	6	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:125:PHE:CE1	0.50	2.41	19	3
1:A:20:ALA:O	1:A:24:ILE:CG2	0.50	2.60	13	2
1:A:83:ILE:HD12	1:A:83:ILE:N	0.50	2.21	19	1
1:A:53:SER:O	1:A:56:VAL:HG12	0.50	2.07	21	4
1:A:12:LEU:O	1:A:14:ASN:OD1	0.50	2.29	5	1
1:A:5:LYS:O	1:A:34:ILE:CA	0.50	2.60	6	6
1:A:68:ARG:O	1:A:69:ALA:HB2	0.50	2.06	8	1
1:A:110:ASN:CB	1:A:111:PRO:HD2	0.50	2.37	8	1
1:A:11:CYS:CB	1:A:17:ARG:O	0.50	2.60	21	1
1:A:109:PHE:O	1:A:109:PHE:CG	0.49	2.66	2	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:HG3	0.49	2.07	5	4
1:A:11:CYS:O	1:A:90:ILE:HD11	0.49	2.07	9	3
1:A:133:SER:OG	1:A:134:LYS:N	0.49	2.43	7	1
1:A:64:ILE:CD1	1:A:67:GLN:NE2	0.49	2.75	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:VAL:HG22	1:A:38:ALA:CA	0.49	2.37	16	3
1:A:32:LYS:O	1:A:145:LEU:HD13	0.49	2.07	3	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:O	0.49	2.30	7	2
1:A:52:ARG:CB	1:A:125:PHE:CD2	0.49	2.95	5	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:139:PHE:CE2	0.49	2.42	9	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:VAL:C	0.49	2.55	11	1
1:A:90:ILE:HG23	1:A:91:LEU:H	0.49	1.67	16	2
1:A:14:ASN:ND2	1:A:38:ALA:O	0.49	2.42	17	1
1:A:17:ARG:HB2	1:A:86:LEU:HD22	0.49	1.84	2	2
1:A:7:VAL:O	1:A:9:PHE:CD1	0.49	2.65	3	1
1:A:12:LEU:HB3	1:A:17:ARG:NH1	0.49	2.22	4	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:38:ALA:CB	0.49	2.88	6	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:109:PHE:CE2	0.49	2.95	6	1
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:HA	0.49	1.84	17	3
1:A:5:LYS:CE	1:A:140:LEU:HD21	0.49	2.38	16	1
1:A:131:SER:O	1:A:132:ILE:C	0.49	2.54	12	11
1:A:6:ALA:CA	1:A:34:ILE:CD1	0.49	2.90	3	1
1:A:25:CYS:HB3	1:A:33:LEU:HD12	0.49	1.83	3	1
1:A:57:CYS:C	1:A:62:VAL:CG2	0.49	2.86	4	1
1:A:57:CYS:HA	1:A:62:VAL:HG21	0.49	1.84	4	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:17:ARG:HB3	0.49	2.38	5	1
1:A:23:GLY:HA3	1:A:62:VAL:CG1	0.49	2.38	7	2
1:A:24:ILE:CG1	1:A:136:MET:HE1	0.49	2.35	9	1
1:A:17:ARG:CD	1:A:86:LEU:HD22	0.49	2.36	13	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:86:LEU:CB	0.49	2.38	17	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ILE:CB	0.49	2.59	17	1
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:O	0.49	2.31	19	5
1:A:97:MET:O	1:A:98:LYS:C	0.49	2.54	17	13
1:A:126:PRO:O	1:A:127:THR:C	0.49	2.53	3	2
1:A:10:VAL:O	1:A:86:LEU:CD1	0.49	2.59	5	1
1:A:17:ARG:O	1:A:20:ALA:N	0.49	2.41	6	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:136:MET:SD	0.49	3.06	7	1
1:A:11:CYS:CB	1:A:18:SER:OG	0.49	2.60	8	1
1:A:24:ILE:CG2	1:A:132:ILE:HG23	0.49	2.30	12	1
1:A:126:PRO:O	1:A:130:ALA:CB	0.49	2.60	12	2
1:A:14:ASN:HB3	1:A:69:ALA:HB1	0.49	1.83	16	2
1:A:17:ARG:NH2	1:A:38:ALA:O	0.49	2.42	13	1
1:A:56:VAL:HG21	1:A:125:PHE:CG	0.49	2.42	14	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:GLN:NE2	0.49	2.46	20	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:132:ILE:HG22	0.49	1.84	11	6
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:HB2	0.49	2.08	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:LYS:HG2	1:A:5:LYS:N	0.49	2.22	13	3
1:A:136:MET:O	1:A:136:MET:CG	0.49	2.61	10	1
1:A:40:THR:O	1:A:41:SER:CB	0.49	2.60	13	3
1:A:5:LYS:HD2	1:A:145:LEU:CD1	0.49	2.38	7	1
1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:HD3	0.49	2.23	8	1
1:A:72:ILE:CG1	1:A:76:ASP:CG	0.49	2.86	8	1
1:A:10:VAL:CA	1:A:18:SER:OG	0.49	2.61	10	1
1:A:79:LYS:CB	1:A:80:PHE:CE1	0.49	2.96	10	2
1:A:53:SER:CA	1:A:125:PHE:CZ	0.49	2.95	14	1
1:A:45:VAL:CB	1:A:69:ALA:HB3	0.49	2.38	16	1
1:A:62:VAL:HB	1:A:129:PHE:CE1	0.49	2.43	16	1
1:A:6:ALA:O	1:A:82:VAL:HG12	0.49	2.07	17	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:65:SER:HA	0.49	1.85	17	1
1:A:6:ALA:C	1:A:36:ASP:OD2	0.49	2.55	16	4
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:NZ	0.49	2.76	1	2
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:CA	0.49	2.37	10	6
1:A:17:ARG:HH11	1:A:86:LEU:HD22	0.49	1.66	5	1
1:A:77:PHE:O	1:A:78:SER:CB	0.49	2.60	5	3
1:A:14:ASN:CG	1:A:38:ALA:O	0.49	2.55	10	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:33:LEU:HD11	0.49	2.36	11	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:129:PHE:CD1	0.49	2.42	17	1
1:A:119:TYR:O	1:A:119:TYR:CD1	0.49	2.65	17	1
1:A:13:GLY:O	1:A:69:ALA:CB	0.49	2.57	1	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:132:ILE:HG22	0.49	2.37	1	5
1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:HD2	0.49	2.22	6	1
1:A:44:HIS:NE2	1:A:48:SER:OG	0.49	2.45	6	1
1:A:77:PHE:CD1	1:A:98:LYS:HE2	0.49	2.43	9	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:PRO:CG	0.49	2.61	9	1
1:A:19:PRO:C	1:A:57:CYS:SG	0.49	2.96	16	1
1:A:92:SER:O	1:A:96:SER:CB	0.49	2.61	18	1
1:A:131:SER:O	1:A:133:SER:N	0.49	2.46	21	1
1:A:94:ILE:O	1:A:97:MET:CG	0.49	2.61	1	4
1:A:10:VAL:C	1:A:11:CYS:HG	0.49	2.15	2	1
1:A:53:SER:N	1:A:125:PHE:CD1	0.49	2.81	2	1
1:A:21:CYS:SG	1:A:35:ILE:CG2	0.49	3.01	4	1
1:A:73:THR:O	1:A:77:PHE:CE2	0.49	2.66	5	1
1:A:136:MET:SD	1:A:136:MET:C	0.49	2.96	5	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:CD1	0.49	2.38	8	1
1:A:11:CYS:C	1:A:90:ILE:CD1	0.49	2.85	10	1
1:A:38:ALA:O	1:A:39:ALA:CB	0.49	2.60	16	2
1:A:114:GLY:N	1:A:116:ASP:OD2	0.49	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:3:GLU:CD	1:A:34:ILE:HG23	0.49	2.33	19	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:34:ILE:CG2	0.49	2.37	21	1
1:A:48:SER:CB	1:A:49:PRO:HD2	0.49	2.38	21	1
1:A:129:PHE:O	1:A:130:ALA:C	0.48	2.56	7	10
1:A:14:ASN:O	1:A:15:ILE:HB	0.48	2.07	12	3
1:A:63:ASP:C	1:A:64:ILE:HG23	0.48	2.33	15	3
1:A:57:CYS:O	1:A:62:VAL:CG1	0.48	2.61	18	2
1:A:141:THR:N	1:A:146:ILE:OXT	0.48	2.46	16	1
1:A:10:VAL:O	1:A:11:CYS:CB	0.48	2.61	17	1
1:A:117:ASP:N	1:A:118:PRO:HD2	0.48	2.24	10	2
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:LEU:CD2	0.48	2.38	3	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:35:ILE:CG2	0.48	2.90	4	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:THR:OG1	0.48	2.32	12	8
1:A:30:GLY:O	1:A:31:ASP:C	0.48	2.54	8	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:62:VAL:HG21	0.48	2.48	8	3
1:A:133:SER:O	1:A:136:MET:SD	0.48	2.72	16	1
1:A:64:ILE:HD13	1:A:67:GLN:NE2	0.48	2.22	21	1
1:A:5:LYS:O	1:A:33:LEU:HB2	0.48	2.08	16	3
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:C	0.48	2.56	17	8
1:A:145:LEU:O	1:A:146:ILE:C	0.48	2.55	3	1
1:A:9:PHE:CZ	1:A:139:PHE:CE2	0.48	3.02	5	1
1:A:32:LYS:CG	1:A:34:ILE:HG13	0.48	2.39	8	1
1:A:139:PHE:CD1	1:A:143:HIS:CE1	0.48	3.01	11	1
1:A:140:LEU:C	1:A:140:LEU:CD1	0.48	2.81	12	2
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:OXT	0.48	2.07	12	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:TYR:C	0.48	2.57	16	1
1:A:146:ILE:OXT	1:A:146:ILE:CG2	0.48	2.61	21	1
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:HB2	0.48	2.08	19	10
1:A:24:ILE:HG12	1:A:133:SER:CB	0.48	2.38	3	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:139:PHE:CZ	0.48	2.43	5	1
1:A:57:CYS:C	1:A:62:VAL:O	0.48	2.56	9	2
1:A:17:ARG:CA	1:A:86:LEU:HD22	0.48	2.39	11	1
1:A:19:PRO:CG	1:A:128:MET:SD	0.48	3.01	14	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:LYS:CB	0.48	2.61	17	2
1:A:71:GLN:HG2	1:A:72:ILE:N	0.48	2.22	21	1
1:A:33:LEU:C	1:A:35:ILE:N	0.48	2.71	21	16
1:A:68:ARG:O	1:A:69:ALA:C	0.48	2.57	2	6
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:HD13	0.48	2.48	2	1
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:O	0.48	2.31	3	1
1:A:34:ILE:C	1:A:34:ILE:CD1	0.48	2.83	3	1
1:A:21:CYS:O	1:A:22:GLU:C	0.48	2.56	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:GLN:CD	1:A:55:LYS:N	0.48	2.71	9	1
1:A:139:PHE:O	1:A:143:HIS:HB2	0.48	2.09	9	2
1:A:39:ALA:O	1:A:40:THR:C	0.48	2.56	20	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:36:ASP:CB	0.48	2.36	1	2
1:A:57:CYS:HA	1:A:62:VAL:CG2	0.48	2.38	4	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:90:ILE:HB	0.48	1.84	5	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:39:ALA:HA	0.48	2.38	11	4
1:A:57:CYS:CA	1:A:62:VAL:CG1	0.48	2.92	18	3
1:A:78:SER:O	1:A:79:LYS:C	0.48	2.57	19	5
1:A:93:ASP:OD1	1:A:93:ASP:N	0.48	2.46	7	1
1:A:107:VAL:HG12	1:A:108:LEU:N	0.48	2.23	8	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ILE:C	0.48	2.56	8	2
1:A:83:ILE:HD13	1:A:106:VAL:CG1	0.48	2.32	9	1
1:A:17:ARG:C	1:A:86:LEU:HD21	0.48	2.32	12	2
1:A:5:LYS:O	1:A:33:LEU:HB3	0.48	2.08	20	2
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASN:C	0.48	2.56	18	2
1:A:24:ILE:CD1	1:A:133:SER:HB2	0.48	2.38	3	4
1:A:7:VAL:O	1:A:36:ASP:HB2	0.48	2.09	8	6
1:A:89:SER:O	1:A:93:ASP:CG	0.48	2.57	6	3
1:A:131:SER:C	1:A:133:SER:N	0.48	2.71	21	3
1:A:92:SER:O	1:A:95:ASN:ND2	0.48	2.47	4	1
1:A:125:PHE:CB	1:A:126:PRO:HD3	0.48	2.39	7	2
1:A:10:VAL:HG23	1:A:39:ALA:CA	0.48	2.39	10	1
1:A:31:ASP:O	1:A:32:LYS:O	0.48	2.31	10	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:80:PHE:CE2	0.48	2.97	13	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:89:SER:CB	0.48	2.39	21	1
1:A:20:ALA:CA	1:A:62:VAL:HG11	0.48	2.38	3	1
1:A:14:ASN:OD1	1:A:38:ALA:C	0.48	2.57	4	1
1:A:77:PHE:CG	1:A:98:LYS:CE	0.48	2.96	5	1
1:A:50:ASP:O	1:A:54:GLN:HG3	0.48	2.09	15	6
1:A:23:GLY:C	1:A:62:VAL:CG1	0.48	2.87	7	2
1:A:6:ALA:CB	1:A:80:PHE:HA	0.48	2.39	16	3
1:A:10:VAL:CG2	1:A:38:ALA:O	0.48	2.61	20	2
1:A:16:CYS:HB3	1:A:17:ARG:NE	0.48	2.24	20	2
1:A:10:VAL:C	1:A:11:CYS:SG	0.48	2.96	17	2
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CG	0.48	2.44	2	1
1:A:133:SER:HA	1:A:136:MET:CE	0.48	2.39	3	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:O	0.48	2.32	4	2
1:A:17:ARG:HB3	1:A:17:ARG:NH2	0.48	2.24	5	1
1:A:91:LEU:O	1:A:95:ASN:CB	0.48	2.62	7	1
1:A:40:THR:HG23	1:A:41:SER:N	0.48	2.24	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:ASP:N	1:A:123:ASP:OD1	0.48	2.45	13	1
1:A:11:CYS:O	1:A:11:CYS:SG	0.48	2.71	20	1
1:A:33:LEU:C	1:A:35:ILE:H	0.48	2.17	19	3
1:A:116:ASP:O	1:A:117:ASP:CB	0.48	2.62	4	2
1:A:11:CYS:CB	1:A:86:LEU:HB2	0.48	2.39	5	1
1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CD	0.48	2.77	12	2
1:A:62:VAL:HG12	1:A:63:ASP:N	0.48	2.24	8	2
1:A:115:VAL:CG1	1:A:135:GLU:OE2	0.48	2.61	7	1
1:A:25:CYS:HB3	1:A:35:ILE:CG1	0.48	2.38	9	2
1:A:77:PHE:CD2	1:A:98:LYS:HG2	0.48	2.44	10	1
1:A:18:SER:HB2	1:A:86:LEU:CD1	0.48	2.39	12	1
1:A:23:GLY:CA	1:A:63:ASP:O	0.48	2.61	18	2
1:A:63:ASP:OD1	1:A:63:ASP:N	0.48	2.45	21	2
1:A:107:VAL:CG1	1:A:143:HIS:NE2	0.48	2.77	18	1
1:A:28:MET:C	1:A:29:VAL:CG1	0.48	2.86	19	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.48	2.46	20	1
1:A:60:ASN:CB	1:A:129:PHE:CE2	0.48	2.96	21	1
1:A:51:THR:O	1:A:55:LYS:HB3	0.47	2.09	8	11
1:A:43:PHE:O	1:A:45:VAL:N	0.47	2.47	2	2
1:A:87:ASP:O	1:A:90:ILE:HG22	0.47	2.09	20	4
1:A:8:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB2	0.47	2.39	15	2
1:A:136:MET:HE2	1:A:139:PHE:CD1	0.47	2.43	6	1
1:A:33:LEU:O	1:A:36:ASP:OD1	0.47	2.32	8	1
1:A:87:ASP:HB3	1:A:90:ILE:CD1	0.47	2.39	21	2
1:A:11:CYS:CB	1:A:17:ARG:HB2	0.47	2.39	14	2
1:A:100:SER:O	1:A:102:CYS:N	0.47	2.47	14	1
1:A:16:CYS:O	1:A:128:MET:SD	0.47	2.72	15	1
1:A:136:MET:HG2	1:A:137:LYS:N	0.47	2.22	16	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:90:ILE:CG2	0.47	2.62	20	1
1:A:87:ASP:N	1:A:90:ILE:CD1	0.47	2.77	1	2
1:A:6:ALA:CA	1:A:34:ILE:HD11	0.47	2.38	3	2
1:A:21:CYS:HB2	1:A:132:ILE:CD1	0.47	2.39	3	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:136:MET:HE2	0.47	1.86	4	1
1:A:61:GLY:O	1:A:62:VAL:HB	0.47	2.08	12	5
1:A:86:LEU:HD12	1:A:109:PHE:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:17:ARG:C	1:A:19:PRO:HD3	0.47	2.34	9	3
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ASP:C	0.47	2.57	7	1
1:A:17:ARG:NH1	1:A:87:ASP:OD2	0.47	2.47	8	2
1:A:39:ALA:O	1:A:72:ILE:CG2	0.47	2.62	13	1
1:A:86:LEU:HD23	1:A:116:ASP:HB3	0.47	1.84	15	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:86:LEU:HB2	0.47	1.86	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLN:O	1:A:69:ALA:N	0.47	2.47	17	1
1:A:3:GLU:OE1	1:A:32:LYS:HB3	0.47	2.09	19	1
1:A:75:ALA:O	1:A:78:SER:N	0.47	2.44	21	1
1:A:93:ASP:O	1:A:94:ILE:C	0.47	2.57	6	8
1:A:129:PHE:CA	1:A:132:ILE:HG23	0.47	2.37	2	2
1:A:21:CYS:O	1:A:24:ILE:HG22	0.47	2.09	4	4
1:A:53:SER:HA	1:A:125:PHE:CE1	0.47	2.44	3	1
1:A:127:THR:HG23	1:A:128:MET:N	0.47	2.22	3	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:HB3	0.47	1.85	4	1
1:A:95:ASN:OD1	1:A:95:ASN:C	0.47	2.57	4	3
1:A:76:ASP:O	1:A:78:SER:N	0.47	2.43	5	1
1:A:77:PHE:CE2	1:A:98:LYS:HG2	0.47	2.44	5	2
1:A:52:ARG:CB	1:A:125:PHE:CE1	0.47	2.97	6	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:76:ASP:N	0.47	2.46	7	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:HB3	0.47	2.50	17	2
1:A:117:ASP:N	1:A:118:PRO:HD3	0.47	2.24	13	1
1:A:53:SER:CA	1:A:125:PHE:CD1	0.47	2.97	20	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:HD23	0.47	2.08	1	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:16:CYS:O	0.47	2.72	1	2
1:A:122:SER:O	1:A:123:ASP:CB	0.47	2.61	8	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:59:SER:OG	0.47	2.62	9	1
1:A:77:PHE:O	1:A:104:ALA:CB	0.47	2.63	9	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:SD	0.47	2.72	20	2
1:A:30:GLY:O	1:A:31:ASP:HB2	0.47	2.10	11	3
1:A:75:ALA:O	1:A:76:ASP:C	0.47	2.57	16	6
1:A:5:LYS:CD	1:A:145:LEU:HD11	0.47	2.39	7	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HD12	0.47	2.10	20	2
1:A:115:VAL:HG11	1:A:131:SER:HB3	0.47	1.86	7	1
1:A:116:ASP:N	1:A:116:ASP:OD1	0.47	2.47	8	1
1:A:121:SER:O	1:A:122:SER:C	0.47	2.56	9	1
1:A:93:ASP:O	1:A:96:SER:HB2	0.47	2.09	16	2
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:NE	0.47	2.24	15	1
1:A:15:ILE:O	1:A:16:CYS:C	0.47	2.57	16	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:140:LEU:CD2	0.47	2.33	19	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:ASP:OD1	0.47	2.33	1	2
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ILE:OXT	0.47	2.32	1	1
1:A:21:CYS:HA	1:A:24:ILE:HG22	0.47	1.87	10	2
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:C	0.47	2.57	11	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:30:GLY:N	0.47	2.78	12	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:123:ASP:O	0.47	2.33	20	2
1:A:22:GLU:HG2	1:A:35:ILE:CG2	0.47	2.39	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:CYS:SG	1:A:58:LYS:N	0.47	2.86	18	1
1:A:4:LYS:HD2	1:A:4:LYS:N	0.47	2.24	13	5
1:A:25:CYS:O	1:A:26:ARG:C	0.47	2.56	5	4
1:A:41:SER:O	1:A:43:PHE:N	0.47	2.47	1	2
1:A:107:VAL:HG11	1:A:143:HIS:CE1	0.47	2.45	1	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:135:GLU:CD	0.47	2.57	1	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:CD1	0.47	2.38	15	2
1:A:24:ILE:CG1	1:A:133:SER:HB2	0.47	2.40	2	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:35:ILE:HG13	0.47	2.44	3	1
1:A:20:ALA:HA	1:A:62:VAL:HG11	0.47	1.87	3	1
1:A:120:TYR:O	1:A:121:SER:C	0.47	2.58	4	2
1:A:137:LYS:O	1:A:141:THR:CB	0.47	2.63	20	9
1:A:14:ASN:HB2	1:A:17:ARG:NH2	0.47	2.25	5	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:18:SER:O	0.47	2.68	6	1
1:A:115:VAL:HG12	1:A:131:SER:CB	0.47	2.37	6	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:O	0.47	2.32	7	2
1:A:32:LYS:CG	1:A:34:ILE:HD11	0.47	2.39	8	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:PHE:CB	0.47	2.63	8	2
1:A:15:ILE:O	1:A:16:CYS:CB	0.47	2.60	9	1
1:A:20:ALA:HB3	1:A:128:MET:HE3	0.47	1.86	12	3
1:A:45:VAL:CG1	1:A:69:ALA:O	0.47	2.62	9	1
1:A:17:ARG:HG2	1:A:86:LEU:CD2	0.47	2.40	10	1
1:A:24:ILE:HD12	1:A:129:PHE:CZ	0.47	2.44	13	1
1:A:77:PHE:CG	1:A:98:LYS:HE3	0.47	2.45	15	1
1:A:122:SER:HA	1:A:125:PHE:CE2	0.47	2.45	1	2
1:A:74:LYS:HA	1:A:77:PHE:CD2	0.47	2.44	7	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:O	0.47	2.73	10	2
1:A:53:SER:O	1:A:56:VAL:HG22	0.47	2.09	15	2
1:A:64:ILE:O	1:A:65:SER:HB2	0.47	2.08	17	1
1:A:124:GLY:C	1:A:126:PRO:HD2	0.47	2.35	18	13
1:A:7:VAL:HB	1:A:34:ILE:O	0.47	2.10	4	5
1:A:18:SER:CB	1:A:86:LEU:HD11	0.47	2.38	4	2
1:A:10:VAL:O	1:A:90:ILE:CD1	0.47	2.63	5	1
1:A:18:SER:O	1:A:22:GLU:HB2	0.47	2.10	5	1
1:A:23:GLY:O	1:A:24:ILE:C	0.47	2.56	17	3
1:A:119:TYR:O	1:A:120:TYR:O	0.47	2.33	15	1
1:A:14:ASN:O	1:A:16:CYS:N	0.47	2.47	17	1
1:A:47:GLN:O	1:A:48:SER:O	0.47	2.33	10	2
1:A:19:PRO:CB	1:A:67:GLN:OE1	0.47	2.63	4	1
1:A:146:ILE:OXT	1:A:146:ILE:HG22	0.47	2.09	4	1
1:A:44:HIS:O	1:A:44:HIS:CG	0.47	2.66	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:CD2	1:A:83:ILE:HG12	0.47	2.40	16	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:11:CYS:N	0.47	2.24	21	3
1:A:72:ILE:HD11	1:A:76:ASP:CB	0.47	2.40	21	2
1:A:109:PHE:CZ	1:A:132:ILE:HA	0.46	2.45	2	1
1:A:128:MET:O	1:A:129:PHE:C	0.46	2.58	19	6
1:A:132:ILE:O	1:A:132:ILE:HG13	0.46	2.10	3	2
1:A:36:ASP:OD1	1:A:80:PHE:CZ	0.46	2.68	5	3
1:A:77:PHE:CG	1:A:98:LYS:HE2	0.46	2.45	5	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:HD12	0.46	2.09	5	1
1:A:74:LYS:HA	1:A:77:PHE:CE2	0.46	2.45	7	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:80:PHE:HB3	0.46	2.40	10	3
1:A:18:SER:HB2	1:A:86:LEU:CD2	0.46	2.39	12	2
1:A:52:ARG:C	1:A:125:PHE:CE2	0.46	2.93	14	1
1:A:5:LYS:CE	1:A:140:LEU:CD2	0.46	2.93	16	1
1:A:36:ASP:OD1	1:A:80:PHE:CD1	0.46	2.68	20	2
1:A:145:LEU:CG	1:A:146:ILE:HG22	0.46	2.40	17	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:143:HIS:CG	0.46	3.03	19	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:33:LEU:HD21	0.46	2.39	3	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:39:ALA:HA	0.46	2.40	4	3
1:A:67:GLN:O	1:A:68:ARG:CB	0.46	2.63	4	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:9:PHE:CD2	0.46	2.45	5	2
1:A:85:ALA:HB3	1:A:91:LEU:HD12	0.46	1.87	12	1
1:A:14:ASN:OD1	1:A:38:ALA:O	0.46	2.33	14	1
1:A:26:ARG:HA	1:A:30:GLY:CA	0.46	2.40	16	2
1:A:52:ARG:CG	1:A:125:PHE:CE2	0.46	2.97	21	1
1:A:97:MET:HG3	1:A:98:LYS:N	0.46	2.25	3	4
1:A:14:ASN:ND2	1:A:17:ARG:CZ	0.46	2.79	5	1
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:HG	0.46	2.35	6	4
1:A:10:VAL:CG1	1:A:38:ALA:O	0.46	2.57	16	2
1:A:55:LYS:HG2	1:A:125:PHE:CE2	0.46	2.45	7	1
1:A:72:ILE:HG12	1:A:76:ASP:OD2	0.46	2.11	10	1
1:A:115:VAL:HG13	1:A:131:SER:HB2	0.46	1.86	11	1
1:A:52:ARG:HD2	1:A:125:PHE:CE2	0.46	2.44	13	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:109:PHE:N	0.46	2.25	19	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:33:LEU:HD13	0.46	2.39	20	1
1:A:17:ARG:O	1:A:21:CYS:SG	0.46	2.74	1	2
1:A:48:SER:OG	1:A:119:TYR:OH	0.46	2.34	1	1
1:A:135:GLU:O	1:A:135:GLU:CD	0.46	2.59	3	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:36:ASP:OD2	0.46	2.63	5	2
1:A:136:MET:O	1:A:140:LEU:HB3	0.46	2.10	9	5
1:A:140:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HD22	0.46	1.83	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:CYS:HB3	1:A:62:VAL:HG21	0.46	1.86	8	1
1:A:17:ARG:CG	1:A:86:LEU:CD2	0.46	2.94	10	1
1:A:17:ARG:O	1:A:18:SER:CB	0.46	2.64	16	3
1:A:97:MET:CG	1:A:98:LYS:N	0.46	2.79	14	3
1:A:17:ARG:CG	1:A:86:LEU:HD23	0.46	2.39	21	2
1:A:100:SER:C	1:A:101:ASN:OD1	0.46	2.59	12	1
1:A:55:LYS:HE3	1:A:56:VAL:HG23	0.46	1.87	18	1
1:A:124:GLY:O	1:A:128:MET:HB2	0.46	2.10	4	12
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:HB2	0.46	2.11	8	7
1:A:29:VAL:HG12	1:A:32:LYS:HG3	0.46	1.88	5	2
1:A:77:PHE:HE2	1:A:97:MET:HE3	0.46	1.71	5	1
1:A:65:SER:O	1:A:66:LYS:O	0.46	2.32	16	5
1:A:14:ASN:HA	1:A:39:ALA:HB3	0.46	1.87	9	1
1:A:11:CYS:HB2	1:A:17:ARG:O	0.46	2.11	21	2
1:A:17:ARG:HA	1:A:86:LEU:CD2	0.46	2.40	21	2
1:A:29:VAL:HB	1:A:32:LYS:CG	0.46	2.40	21	2
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:O	0.46	2.34	19	2
1:A:86:LEU:HD11	1:A:115:VAL:CB	0.46	2.40	17	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:O	0.46	2.34	21	2
1:A:21:CYS:O	1:A:25:CYS:SG	0.46	2.73	1	6
1:A:139:PHE:O	1:A:140:LEU:C	0.46	2.55	3	4
1:A:9:PHE:O	1:A:37:SER:HA	0.46	2.10	4	4
1:A:21:CYS:CB	1:A:35:ILE:CG2	0.46	2.94	4	1
1:A:24:ILE:CG2	1:A:132:ILE:CG2	0.46	2.93	12	3
1:A:9:PHE:CZ	1:A:109:PHE:CE2	0.46	3.03	7	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:CG	0.46	2.64	21	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PHE:CE2	0.46	2.98	18	2
1:A:11:CYS:O	1:A:13:GLY:N	0.46	2.49	17	1
1:A:28:MET:O	1:A:28:MET:SD	0.46	2.74	17	1
1:A:4:LYS:HE3	1:A:5:LYS:CA	0.46	2.41	3	1
1:A:26:ARG:O	1:A:30:GLY:CA	0.46	2.64	3	4
1:A:31:ASP:C	1:A:32:LYS:HG3	0.46	2.35	3	1
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:O	0.46	2.33	4	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:71:GLN:N	0.46	2.26	5	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:131:SER:HB2	0.46	2.41	21	3
1:A:29:VAL:CG1	1:A:32:LYS:HB3	0.46	2.41	8	1
1:A:123:ASP:O	1:A:127:THR:OG1	0.46	2.34	11	1
1:A:17:ARG:CG	1:A:128:MET:HG3	0.46	2.40	1	1
1:A:5:LYS:CD	1:A:145:LEU:CD1	0.46	2.93	3	1
1:A:53:SER:O	1:A:57:CYS:SG	0.46	2.74	3	2
1:A:124:GLY:HA2	1:A:127:THR:HG22	0.46	1.87	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:PRO:HD2	1:A:115:VAL:CG2	0.46	2.40	5	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:TYR:HB3	0.46	2.11	7	1
1:A:117:ASP:HB2	1:A:119:TYR:CE2	0.46	2.46	9	1
1:A:10:VAL:HA	1:A:18:SER:OG	0.46	2.11	10	2
1:A:83:ILE:O	1:A:105:LYS:O	0.46	2.34	11	1
1:A:25:CYS:SG	1:A:136:MET:SD	0.46	3.14	17	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:64:ILE:O	0.46	2.74	17	1
1:A:124:GLY:O	1:A:128:MET:HB3	0.46	2.11	3	3
1:A:4:LYS:N	1:A:4:LYS:HD3	0.46	2.26	3	3
1:A:15:ILE:HG12	1:A:69:ALA:HB2	0.46	1.86	3	1
1:A:51:THR:HA	1:A:54:GLN:CG	0.46	2.41	3	3
1:A:124:GLY:HA2	1:A:127:THR:CG2	0.46	2.41	3	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:HB2	0.46	2.51	5	2
1:A:66:LYS:CD	1:A:66:LYS:C	0.46	2.89	6	1
1:A:130:ALA:O	1:A:134:LYS:HB3	0.46	2.11	8	4
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:HG2	0.46	2.11	15	3
1:A:29:VAL:HG23	1:A:30:GLY:N	0.46	2.25	12	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:ALA:HB2	0.46	2.11	16	2
1:A:9:PHE:CZ	1:A:25:CYS:SG	0.46	3.09	2	1
1:A:14:ASN:HB2	1:A:39:ALA:CB	0.46	2.41	20	5
1:A:29:VAL:CG1	1:A:32:LYS:HG3	0.46	2.40	13	2
1:A:15:ILE:C	1:A:16:CYS:SG	0.46	2.98	7	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:129:PHE:CG	0.46	2.99	20	2
1:A:5:LYS:HD2	1:A:144:GLY:O	0.46	2.11	12	1
1:A:18:SER:O	1:A:22:GLU:HB3	0.46	2.11	16	1
1:A:72:ILE:HD13	1:A:73:THR:O	0.46	2.09	19	1
1:A:15:ILE:O	1:A:19:PRO:CG	0.46	2.64	21	1
1:A:54:GLN:CD	1:A:64:ILE:HD11	0.45	2.36	1	1
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:HG3	0.45	2.11	6	6
1:A:108:LEU:HD11	1:A:110:ASN:OD1	0.45	2.10	2	1
1:A:49:PRO:C	1:A:50:ASP:CG	0.45	2.81	7	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:CYS:SG	0.45	2.73	10	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:ASP:OD1	0.45	2.33	10	1
1:A:94:ILE:HG12	1:A:97:MET:CE	0.45	2.41	14	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:11:CYS:H	0.45	1.71	17	1
1:A:5:LYS:HD2	1:A:145:LEU:CD2	0.45	2.41	18	1
1:A:15:ILE:HD11	1:A:45:VAL:HA	0.45	1.86	20	1
1:A:139:PHE:CD1	1:A:140:LEU:N	0.45	2.84	1	1
1:A:79:LYS:HG2	1:A:80:PHE:CE1	0.45	2.46	4	3
1:A:10:VAL:C	1:A:90:ILE:CD1	0.45	2.89	5	1
1:A:14:ASN:ND2	1:A:68:ARG:O	0.45	2.49	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:LYS:CE	1:A:59:SER:HB2	0.45	2.42	7	1
1:A:6:ALA:O	1:A:81:ASP:CB	0.45	2.64	8	1
1:A:11:CYS:N	1:A:18:SER:OG	0.45	2.49	8	1
1:A:50:ASP:O	1:A:54:GLN:HB2	0.45	2.11	8	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:HB2	0.45	2.51	11	4
1:A:44:HIS:O	1:A:47:GLN:HG2	0.45	2.11	15	2
1:A:79:LYS:O	1:A:80:PHE:O	0.45	2.34	17	1
1:A:3:GLU:OE1	1:A:34:ILE:HG23	0.45	2.11	19	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:OXT	0.45	2.34	20	1
1:A:129:PHE:CE1	1:A:133:SER:HB2	0.45	2.46	21	1
1:A:89:SER:O	1:A:93:ASP:OD1	0.45	2.34	1	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:61:GLY:O	0.45	2.35	7	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:109:PHE:CE1	0.45	3.00	7	1
1:A:122:SER:HG	1:A:125:PHE:HE2	0.45	1.54	19	2
1:A:57:CYS:CB	1:A:62:VAL:HB	0.45	2.42	10	2
1:A:90:ILE:O	1:A:91:LEU:C	0.45	2.56	18	1
1:A:140:LEU:O	1:A:141:THR:C	0.45	2.56	3	3
1:A:15:ILE:HG22	1:A:16:CYS:N	0.45	2.26	10	2
1:A:17:ARG:O	1:A:18:SER:C	0.45	2.56	6	4
1:A:56:VAL:CG2	1:A:125:PHE:CD2	0.45	2.99	7	1
1:A:133:SER:O	1:A:134:LYS:C	0.45	2.60	14	3
1:A:110:ASN:CB	1:A:111:PRO:CD	0.45	2.95	8	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:111:PRO:CD	0.45	2.64	8	1
1:A:11:CYS:HA	1:A:90:ILE:CD1	0.45	2.41	10	1
1:A:32:LYS:HG3	1:A:33:LEU:N	0.45	2.26	20	2
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:CD1	0.45	2.83	13	2
1:A:90:ILE:CG1	1:A:94:ILE:HD11	0.45	2.41	16	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:83:ILE:HG23	0.45	1.88	13	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:CB	0.45	2.65	13	2
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:CZ	0.45	2.42	15	1
1:A:110:ASN:CG	1:A:115:VAL:HG11	0.45	2.36	15	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:HG2	0.45	2.10	16	1
1:A:115:VAL:CG2	1:A:131:SER:HB3	0.45	2.41	16	1
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:HG2	0.45	2.11	17	1
1:A:91:LEU:CA	1:A:94:ILE:HD12	0.45	2.41	18	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:129:PHE:CE2	0.45	3.00	15	3
1:A:128:MET:O	1:A:131:SER:N	0.45	2.47	3	1
1:A:72:ILE:HG23	1:A:73:THR:N	0.45	2.25	6	1
1:A:58:LYS:N	1:A:62:VAL:O	0.45	2.50	9	1
1:A:15:ILE:O	1:A:19:PRO:HG3	0.45	2.11	21	1
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CD1	0.45	2.46	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:THR:CG2	1:A:128:MET:N	0.45	2.79	3	1
1:A:6:ALA:C	1:A:7:VAL:HG13	0.45	2.36	8	1
1:A:83:ILE:CG2	1:A:94:ILE:CD1	0.45	2.92	8	1
1:A:117:ASP:O	1:A:117:ASP:CG	0.45	2.60	9	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:32:LYS:CG	0.45	2.95	13	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:139:PHE:CE1	0.45	3.05	16	1
1:A:64:ILE:HD12	1:A:67:GLN:HE21	0.45	1.72	1	1
1:A:19:PRO:HB3	1:A:67:GLN:NE2	0.45	2.26	2	1
1:A:67:GLN:O	1:A:68:ARG:C	0.45	2.58	2	2
1:A:57:CYS:HB3	1:A:62:VAL:HG23	0.45	1.88	4	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:133:SER:HB3	0.45	2.41	16	2
1:A:72:ILE:O	1:A:73:THR:CB	0.45	2.64	5	2
1:A:24:ILE:HG12	1:A:132:ILE:O	0.45	2.12	16	3
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:CB	0.45	2.64	17	2
1:A:11:CYS:SG	1:A:87:ASP:OD1	0.45	2.75	13	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:81:ASP:N	0.45	2.49	13	1
1:A:87:ASP:C	1:A:90:ILE:HG22	0.45	2.37	16	1
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:CG2	0.45	2.41	18	1
1:A:130:ALA:O	1:A:134:LYS:HB2	0.45	2.11	6	5
1:A:137:LYS:O	1:A:141:THR:HB	0.45	2.12	11	10
1:A:49:PRO:O	1:A:50:ASP:HB2	0.45	2.12	7	2
1:A:113:ASN:O	1:A:114:GLY:C	0.45	2.58	9	1
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:HG3	0.45	2.11	10	1
1:A:16:CYS:C	1:A:128:MET:SD	0.45	2.99	10	1
1:A:63:ASP:C	1:A:64:ILE:CG2	0.45	2.89	10	1
1:A:135:GLU:CG	1:A:138:PRO:HG2	0.45	2.41	16	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:64:ILE:HG21	0.45	2.12	17	1
1:A:122:SER:O	1:A:124:GLY:N	0.45	2.49	20	1
1:A:11:CYS:O	1:A:90:ILE:HG12	0.45	2.12	11	3
1:A:10:VAL:HG13	1:A:39:ALA:N	0.45	2.26	3	1
1:A:14:ASN:ND2	1:A:16:CYS:H	0.45	2.10	5	1
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:ILE:HG22	0.45	1.89	5	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ILE:O	0.45	2.35	16	2
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:CG	0.45	2.65	6	1
1:A:73:THR:N	1:A:76:ASP:OD2	0.45	2.43	10	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:34:ILE:HD11	0.45	2.42	16	1
1:A:19:PRO:HD2	1:A:128:MET:CG	0.45	2.42	17	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:LYS:HB2	0.45	2.11	21	2
1:A:87:ASP:HB3	1:A:90:ILE:HD11	0.45	1.89	21	1
1:A:129:PHE:O	1:A:133:SER:HB2	0.45	2.12	3	2
1:A:116:ASP:OD1	1:A:116:ASP:O	0.45	2.36	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:PRO:HB3	1:A:124:GLY:CA	0.45	2.42	7	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:34:ILE:HD12	0.45	2.41	15	3
1:A:83:ILE:O	1:A:107:VAL:HG12	0.45	2.12	12	1
1:A:67:GLN:O	1:A:68:ARG:O	0.45	2.34	14	1
1:A:11:CYS:HB2	1:A:17:ARG:CB	0.45	2.42	18	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:90:ILE:HB	0.45	1.88	18	1
1:A:16:CYS:HB3	1:A:17:ARG:CZ	0.44	2.42	1	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:40:THR:OG1	0.44	2.11	4	1
1:A:52:ARG:HD2	1:A:125:PHE:CD2	0.44	2.46	6	1
1:A:110:ASN:N	1:A:135:GLU:CD	0.44	2.75	10	1
1:A:56:VAL:HG11	1:A:125:PHE:HB3	0.44	1.88	12	2
1:A:75:ALA:O	1:A:79:LYS:HE2	0.44	2.12	13	1
1:A:116:ASP:O	1:A:117:ASP:C	0.44	2.58	13	1
1:A:145:LEU:N	1:A:146:ILE:HD13	0.44	2.27	15	1
1:A:18:SER:OG	1:A:86:LEU:HD11	0.44	2.13	18	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:36:ASP:OD1	0.44	2.60	19	1
1:A:20:ALA:HB1	1:A:62:VAL:HG11	0.44	1.90	19	2
1:A:142:GLU:C	1:A:144:GLY:N	0.44	2.75	8	8
1:A:11:CYS:HB2	1:A:86:LEU:HB2	0.44	1.89	5	2
1:A:16:CYS:SG	1:A:38:ALA:HA	0.44	2.53	5	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:HG2	0.44	2.13	20	5
1:A:19:PRO:O	1:A:67:GLN:NE2	0.44	2.50	7	1
1:A:32:LYS:HG2	1:A:34:ILE:HG13	0.44	1.88	8	1
1:A:70:ARG:HG2	1:A:71:GLN:N	0.44	2.27	10	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:128:MET:SD	0.44	2.53	14	1
1:A:49:PRO:HD2	1:A:119:TYR:CE1	0.44	2.47	15	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:SD	0.44	2.75	18	1
1:A:136:MET:O	1:A:136:MET:HG3	0.44	2.11	11	4
1:A:137:LYS:HB2	1:A:138:PRO:HD3	0.44	1.90	16	3
1:A:57:CYS:HB3	1:A:62:VAL:CG1	0.44	2.42	6	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:ASP:C	0.44	2.60	9	2
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:O	0.44	2.12	10	1
1:A:44:HIS:N	1:A:44:HIS:CD2	0.44	2.86	11	1
1:A:16:CYS:SG	1:A:117:ASP:OD1	0.44	2.75	12	1
1:A:77:PHE:CD2	1:A:98:LYS:HD2	0.44	2.47	12	1
1:A:4:LYS:HG2	1:A:33:LEU:HD12	0.44	1.89	15	1
1:A:54:GLN:O	1:A:55:LYS:C	0.44	2.59	18	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:ASP:CB	0.44	2.66	20	1
1:A:5:LYS:O	1:A:34:ILE:HA	0.44	2.13	14	5
1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:ILE:HD11	0.44	1.89	5	1
1:A:3:GLU:CA	1:A:3:GLU:OE1	0.44	2.65	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:LYS:CD	1:A:4:LYS:O	0.44	2.66	9	1
1:A:90:ILE:HG12	1:A:94:ILE:CD1	0.44	2.43	12	2
1:A:14:ASN:HA	1:A:17:ARG:NH2	0.44	2.27	13	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:HG2	0.44	2.13	14	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:GLN:C	0.44	2.60	14	1
1:A:11:CYS:HB2	1:A:17:ARG:NE	0.44	2.28	16	1
1:A:53:SER:N	1:A:125:PHE:CE1	0.44	2.86	16	1
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:C	0.44	2.37	17	2
1:A:131:SER:O	1:A:135:GLU:HG2	0.44	2.13	19	1
1:A:48:SER:O	1:A:48:SER:OG	0.44	2.35	20	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:132:ILE:CG2	0.44	2.95	17	4
1:A:47:GLN:HG3	1:A:48:SER:N	0.44	2.27	11	6
1:A:109:PHE:O	1:A:109:PHE:CD2	0.44	2.71	2	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:HB2	0.44	2.12	14	4
1:A:21:CYS:N	1:A:132:ILE:HD13	0.44	2.28	11	2
1:A:6:ALA:C	1:A:7:VAL:CG1	0.44	2.89	8	1
1:A:12:LEU:O	1:A:41:SER:HB2	0.44	2.12	15	1
1:A:8:LEU:HA	1:A:36:ASP:CB	0.44	2.43	17	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:146:ILE:HG22	0.44	1.90	17	1
1:A:22:GLU:CG	1:A:35:ILE:HG23	0.44	2.43	18	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:CB	0.44	2.65	2	3
1:A:4:LYS:CE	1:A:4:LYS:O	0.44	2.66	3	1
1:A:10:VAL:C	1:A:86:LEU:HD13	0.44	2.37	5	1
1:A:40:THR:OG1	1:A:72:ILE:CD1	0.44	2.60	5	1
1:A:16:CYS:C	1:A:19:PRO:HD3	0.44	2.38	14	4
1:A:22:GLU:CA	1:A:35:ILE:HD11	0.44	2.40	8	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:VAL:O	0.44	2.34	12	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:32:LYS:CG	0.44	2.42	13	1
1:A:93:ASP:O	1:A:96:SER:CB	0.44	2.66	13	2
1:A:32:LYS:HE2	1:A:140:LEU:HD11	0.44	1.88	14	1
1:A:10:VAL:HG22	1:A:90:ILE:HD11	0.44	1.90	15	1
1:A:141:THR:O	1:A:146:ILE:HD12	0.44	2.12	15	1
1:A:40:THR:CG2	1:A:90:ILE:HG13	0.44	2.43	20	1
1:A:50:ASP:OD1	1:A:119:TYR:OH	0.44	2.34	20	1
1:A:140:LEU:HD21	1:A:145:LEU:HD22	0.44	1.88	21	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:84:ALA:HB2	0.44	1.86	1	1
1:A:54:GLN:O	1:A:57:CYS:HB2	0.44	2.13	14	13
1:A:136:MET:CE	1:A:139:PHE:CD1	0.44	3.01	2	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:LEU:HD21	0.44	1.88	3	1
1:A:26:ARG:HD3	1:A:63:ASP:O	0.44	2.13	5	1
1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:O	0.44	2.65	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:VAL:HG13	1:A:60:ASN:ND2	0.44	2.28	6	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:109:PHE:CD1	0.44	2.99	10	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:133:SER:HG	0.44	1.65	11	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:HD12	0.44	1.90	12	1
1:A:14:ASN:HA	1:A:17:ARG:CZ	0.44	2.43	13	1
1:A:86:LEU:O	1:A:110:ASN:O	0.44	2.35	13	1
1:A:125:PHE:H	1:A:126:PRO:CD	0.44	2.25	13	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:CG	0.44	2.66	14	1
1:A:19:PRO:CB	1:A:54:GLN:NE2	0.44	2.81	15	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:MET:CG	0.44	2.66	21	3
1:A:7:VAL:H	1:A:34:ILE:C	0.44	2.20	19	1
1:A:83:ILE:HG21	1:A:94:ILE:HD12	0.44	1.86	19	1
1:A:112:PRO:O	1:A:113:ASN:CG	0.44	2.61	19	1
1:A:10:VAL:O	1:A:11:CYS:HB2	0.44	2.12	20	1
1:A:15:ILE:HG21	1:A:48:SER:HB3	0.44	1.90	2	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:CG	0.44	2.66	5	1
1:A:91:LEU:O	1:A:95:ASN:HB2	0.44	2.13	7	2
1:A:118:PRO:HB2	1:A:125:PHE:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:72:ILE:HG13	1:A:76:ASP:CG	0.44	2.38	13	1
1:A:77:PHE:HE1	1:A:94:ILE:HD11	0.44	1.73	14	1
1:A:94:ILE:HD13	1:A:94:ILE:C	0.44	2.37	14	1
1:A:4:LYS:HG2	1:A:33:LEU:CG	0.44	2.43	15	1
1:A:15:ILE:CA	1:A:19:PRO:HB3	0.44	2.42	19	1
1:A:39:ALA:HB3	1:A:71:GLN:HA	0.44	1.88	20	1
1:A:45:VAL:O	1:A:46:GLY:C	0.44	2.60	21	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:HB2	0.44	2.13	4	5
1:A:16:CYS:O	1:A:116:ASP:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:16:CYS:O	1:A:116:ASP:HB2	0.44	2.13	4	1
1:A:26:ARG:CD	1:A:63:ASP:O	0.44	2.66	5	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LYS:HB2	0.44	2.13	11	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:64:ILE:CD1	0.44	3.04	11	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:135:GLU:OE1	0.44	2.71	12	1
1:A:54:GLN:OE1	1:A:64:ILE:O	0.44	2.36	14	1
1:A:94:ILE:O	1:A:97:MET:HG3	0.44	2.13	15	1
1:A:25:CYS:CB	1:A:35:ILE:HG12	0.44	2.43	16	1
1:A:20:ALA:CB	1:A:65:SER:HA	0.44	2.43	17	1
1:A:106:VAL:O	1:A:107:VAL:CG1	0.44	2.66	17	1
1:A:8:LEU:HA	1:A:36:ASP:C	0.44	2.38	18	1
1:A:83:ILE:O	1:A:107:VAL:CG2	0.44	2.64	20	1
1:A:140:LEU:HD23	1:A:145:LEU:CB	0.44	2.43	21	1
1:A:19:PRO:HB3	1:A:67:GLN:OE1	0.43	2.13	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:CYS:SG	1:A:33:LEU:CD1	0.43	3.06	3	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:16:CYS:C	1:A:37:SER:HB2	0.43	2.38	5	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASN:HB3	0.43	2.12	16	4
1:A:50:ASP:O	1:A:54:GLN:CB	0.43	2.65	8	1
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:N	0.43	2.51	8	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:32:LYS:HG3	0.43	2.43	10	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:132:ILE:CG1	0.43	2.43	15	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:9:PHE:CE2	0.43	3.01	20	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:89:SER:HB3	0.43	1.89	21	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:135:GLU:HB3	0.43	2.48	21	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:84:ALA:CB	0.43	2.43	1	1
1:A:129:PHE:HA	1:A:132:ILE:HB	0.43	1.89	4	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:NH1	0.43	2.29	20	3
1:A:26:ARG:O	1:A:30:GLY:C	0.43	2.61	6	1
1:A:24:ILE:CB	1:A:132:ILE:HG21	0.43	2.42	7	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:18:SER:OG	0.43	2.12	8	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:CB	0.43	2.66	9	3
1:A:119:TYR:O	1:A:119:TYR:CG	0.43	2.70	17	1
1:A:11:CYS:CB	1:A:17:ARG:CB	0.43	2.96	18	1
1:A:57:CYS:SG	1:A:62:VAL:O	0.43	2.74	18	1
1:A:113:ASN:C	1:A:113:ASN:OD1	0.43	2.60	20	1
1:A:145:LEU:O	1:A:146:ILE:HB	0.43	2.13	2	6
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:HG3	0.43	2.13	2	2
1:A:30:GLY:O	1:A:31:ASP:CG	0.43	2.62	4	1
1:A:70:ARG:CD	1:A:71:GLN:O	0.43	2.67	4	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:55:LYS:O	0.43	2.66	5	1
1:A:52:ARG:HB2	1:A:125:PHE:CE1	0.43	2.49	6	1
1:A:11:CYS:HB2	1:A:17:ARG:CD	0.43	2.44	13	2
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:O	0.43	2.13	12	1
1:A:89:SER:O	1:A:90:ILE:C	0.43	2.59	16	2
1:A:141:THR:O	1:A:145:LEU:O	0.43	2.36	13	1
1:A:145:LEU:H	1:A:146:ILE:HD13	0.43	1.73	15	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:131:SER:HB3	0.43	1.89	16	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:90:ILE:HG21	0.43	2.43	1	2
1:A:64:ILE:HG13	1:A:65:SER:N	0.43	2.29	1	1
1:A:94:ILE:O	1:A:97:MET:HG2	0.43	2.13	2	3
1:A:146:ILE:OXT	1:A:146:ILE:CD1	0.43	2.57	1	1
1:A:54:GLN:CD	1:A:54:GLN:C	0.43	2.87	9	2
1:A:77:PHE:CE1	1:A:98:LYS:CG	0.43	3.02	3	2
1:A:34:ILE:O	1:A:35:ILE:HG13	0.43	2.13	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ASP:O	1:A:77:PHE:C	0.43	2.61	8	1
1:A:140:LEU:O	1:A:145:LEU:HB3	0.43	2.13	14	2
1:A:44:HIS:HA	1:A:47:GLN:NE2	0.43	2.29	10	1
1:A:24:ILE:N	1:A:62:VAL:CG2	0.43	2.74	12	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:143:HIS:CE1	0.43	2.49	12	1
1:A:44:HIS:O	1:A:47:GLN:HG3	0.43	2.13	16	1
1:A:114:GLY:O	1:A:116:ASP:N	0.43	2.50	19	1
1:A:14:ASN:CB	1:A:39:ALA:CB	0.43	2.96	20	1
1:A:121:SER:OG	1:A:123:ASP:CG	0.43	2.61	20	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.67	5	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:32:LYS:HB2	0.43	2.41	7	1
1:A:31:ASP:N	1:A:32:LYS:NZ	0.43	2.66	8	1
1:A:47:GLN:O	1:A:47:GLN:HG3	0.43	2.11	8	1
1:A:12:LEU:HB2	1:A:17:ARG:NH1	0.43	2.28	9	1
1:A:4:LYS:HD2	1:A:4:LYS:O	0.43	2.14	12	1
1:A:17:ARG:NH2	1:A:116:ASP:OD1	0.43	2.51	12	1
1:A:117:ASP:O	1:A:119:TYR:CE2	0.43	2.72	13	1
1:A:18:SER:CB	1:A:67:GLN:OE1	0.43	2.66	16	1
1:A:47:GLN:CG	1:A:48:SER:N	0.43	2.81	16	1
1:A:53:SER:OG	1:A:54:GLN:N	0.43	2.52	2	2
1:A:22:GLU:OE1	1:A:26:ARG:NH1	0.43	2.52	3	1
1:A:50:ASP:OD1	1:A:50:ASP:N	0.43	2.50	6	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:139:PHE:CZ	0.43	2.47	7	1
1:A:118:PRO:HG3	1:A:128:MET:SD	0.43	2.54	7	1
1:A:111:PRO:HB2	1:A:112:PRO:HD2	0.43	1.90	12	2
1:A:25:CYS:O	1:A:29:VAL:HB	0.43	2.13	13	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:117:ASP:OD2	0.43	2.67	14	1
1:A:19:PRO:O	1:A:64:ILE:CG2	0.43	2.61	16	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:133:SER:HB2	0.43	2.48	21	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:32:LYS:HD2	0.43	1.89	1	1
1:A:79:LYS:HG3	1:A:80:PHE:CE1	0.43	2.47	1	1
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:HB	0.43	2.13	5	4
1:A:12:LEU:HD13	1:A:40:THR:O	0.43	2.14	5	1
1:A:57:CYS:C	1:A:62:VAL:HB	0.43	2.39	13	4
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:CG1	0.43	2.43	8	1
1:A:32:LYS:O	1:A:35:ILE:CD1	0.43	2.67	10	1
1:A:146:ILE:O	1:A:146:ILE:HG23	0.43	2.12	10	2
1:A:18:SER:HB2	1:A:19:PRO:HD3	0.43	1.91	11	1
1:A:78:SER:C	1:A:79:LYS:HD2	0.43	2.39	13	1
1:A:15:ILE:HG23	1:A:66:LYS:HE3	0.43	1.90	17	1
1:A:102:CYS:C	1:A:103:ARG:HD2	0.43	2.39	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:SER:O	1:A:80:PHE:N	0.43	2.51	19	1
1:A:73:THR:N	1:A:76:ASP:OD1	0.43	2.51	20	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:PHE:N	0.43	2.29	1	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:34:ILE:HA	0.43	1.91	2	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:110:ASN:OD1	0.43	2.13	2	1
1:A:24:ILE:CG1	1:A:133:SER:CB	0.43	2.96	3	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:139:PHE:CZ	0.43	2.49	4	1
1:A:75:ALA:O	1:A:79:LYS:HD3	0.43	2.14	13	1
1:A:133:SER:C	1:A:135:GLU:N	0.43	2.76	14	1
1:A:10:VAL:O	1:A:11:CYS:HB3	0.43	2.14	17	1
1:A:92:SER:O	1:A:96:SER:HB3	0.43	2.13	18	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:89:SER:OG	0.43	2.13	21	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:25:CYS:SG	0.43	2.97	2	2
1:A:25:CYS:HB3	1:A:35:ILE:HG13	0.43	1.91	2	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:54:GLN:CA	0.43	2.79	2	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:GLN:HB2	0.43	2.14	4	1
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:HD13	0.43	1.90	7	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:HD3	0.43	2.14	9	1
1:A:23:GLY:CA	1:A:62:VAL:HG23	0.43	2.44	11	1
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:HB3	0.43	2.13	19	3
1:A:24:ILE:CG2	1:A:132:ILE:HD11	0.43	2.41	15	1
1:A:146:ILE:HD12	1:A:146:ILE:OXT	0.43	2.13	2	1
1:A:5:LYS:C	1:A:33:LEU:HA	0.43	2.39	3	1
1:A:15:ILE:O	1:A:50:ASP:OD2	0.43	2.37	15	2
1:A:28:MET:O	1:A:28:MET:HG3	0.43	2.13	5	2
1:A:33:LEU:O	1:A:34:ILE:CB	0.43	2.67	7	1
1:A:8:LEU:HA	1:A:36:ASP:HB2	0.43	1.91	8	1
1:A:138:PRO:O	1:A:142:GLU:CD	0.43	2.62	8	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:MET:CB	0.43	2.67	9	2
1:A:29:VAL:HG21	1:A:32:LYS:HD3	0.43	1.90	11	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASN:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:89:SER:O	1:A:93:ASP:OD2	0.43	2.37	12	1
1:A:14:ASN:C	1:A:16:CYS:N	0.43	2.76	17	1
1:A:66:LYS:C	1:A:67:GLN:HG2	0.43	2.39	17	1
1:A:20:ALA:O	1:A:24:ILE:HB	0.42	2.14	13	4
1:A:79:LYS:CB	1:A:80:PHE:CE2	0.42	3.02	5	1
1:A:7:VAL:H	1:A:34:ILE:HA	0.42	1.71	9	1
1:A:100:SER:O	1:A:101:ASN:CB	0.42	2.67	9	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:115:VAL:HG11	0.42	1.89	10	1
1:A:57:CYS:HA	1:A:62:VAL:CG1	0.42	2.44	18	2
1:A:9:PHE:CZ	1:A:136:MET:HE1	0.42	2.46	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ASN:OD1	1:A:135:GLU:OE2	0.42	2.37	17	1
1:A:29:VAL:C	1:A:31:ASP:N	0.42	2.77	18	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:14:ASN:HA	0.42	2.54	19	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:HB3	0.42	2.13	19	1
1:A:139:PHE:O	1:A:143:HIS:CD2	0.42	2.73	4	1
1:A:55:LYS:C	1:A:55:LYS:HE2	0.42	2.39	5	1
1:A:144:GLY:O	1:A:145:LEU:HG	0.42	2.15	5	2
1:A:72:ILE:CG1	1:A:76:ASP:OD1	0.42	2.66	8	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:135:GLU:OE2	0.42	2.52	8	1
1:A:21:CYS:O	1:A:25:CYS:HB2	0.42	2.14	12	2
1:A:8:LEU:HD21	1:A:72:ILE:CD1	0.42	2.43	13	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:40:THR:HG23	0.42	2.45	13	1
1:A:116:ASP:C	1:A:118:PRO:HD3	0.42	2.39	21	2
1:A:19:PRO:O	1:A:62:VAL:CG1	0.42	2.67	15	1
1:A:73:THR:C	1:A:74:LYS:HG3	0.42	2.39	17	1
1:A:140:LEU:HD13	1:A:144:GLY:CA	0.42	2.44	17	1
1:A:81:ASP:O	1:A:104:ALA:HA	0.42	2.14	20	1
1:A:16:CYS:C	1:A:17:ARG:HG3	0.42	2.39	8	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:10:VAL:CG2	0.42	2.44	8	1
1:A:107:VAL:HG21	1:A:143:HIS:NE2	0.42	2.30	8	1
1:A:58:LYS:CA	1:A:62:VAL:O	0.42	2.67	9	1
1:A:71:GLN:O	1:A:72:ILE:C	0.42	2.62	12	1
1:A:88:GLN:NE2	1:A:108:LEU:HD11	0.42	2.30	13	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:N	0.42	2.27	13	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:86:LEU:CD1	0.42	2.44	14	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:35:ILE:HG21	0.42	2.39	14	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:82:VAL:HG13	0.42	1.90	16	1
1:A:10:VAL:CB	1:A:90:ILE:HD11	0.42	2.43	16	1
1:A:94:ILE:CA	1:A:97:MET:HE2	0.42	2.37	17	1
1:A:139:PHE:C	1:A:141:THR:N	0.42	2.77	19	1
1:A:14:ASN:CG	1:A:39:ALA:HB2	0.42	2.39	20	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:128:MET:HA	0.42	2.44	21	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:11:CYS:N	0.42	2.83	1	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:64:ILE:HG12	0.42	2.29	2	1
1:A:137:LYS:H	1:A:138:PRO:HD2	0.42	1.74	17	6
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:CD2	0.42	2.91	3	1
1:A:23:GLY:HA2	1:A:26:ARG:CD	0.42	2.44	5	2
1:A:110:ASN:ND2	1:A:135:GLU:CD	0.42	2.77	8	1
1:A:13:GLY:C	1:A:39:ALA:CB	0.42	2.93	14	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:82:VAL:CG1	0.42	2.45	16	1
1:A:8:LEU:CB	1:A:83:ILE:HA	0.42	2.44	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ARG:HD3	1:A:86:LEU:CD2	0.42	2.44	16	1
1:A:23:GLY:HA3	1:A:62:VAL:CG2	0.42	2.44	16	1
1:A:86:LEU:HG	1:A:115:VAL:O	0.42	2.14	16	1
1:A:133:SER:HA	1:A:136:MET:HB2	0.42	1.92	17	1
1:A:52:ARG:HB3	1:A:125:PHE:CE1	0.42	2.50	2	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:9:PHE:CD2	0.42	3.02	5	2
1:A:6:ALA:N	1:A:81:ASP:OD1	0.42	2.52	9	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:110:ASN:OD1	0.42	2.67	10	1
1:A:9:PHE:O	1:A:17:ARG:NH1	0.42	2.53	16	1
1:A:71:GLN:HG3	1:A:72:ILE:N	0.42	2.29	16	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:83:ILE:HA	0.42	1.89	19	1
1:A:55:LYS:HE2	1:A:56:VAL:HG13	0.42	1.91	19	1
1:A:16:CYS:HB2	1:A:17:ARG:CZ	0.42	2.44	20	1
1:A:48:SER:OG	1:A:50:ASP:OD1	0.42	2.37	20	1
1:A:64:ILE:HB	1:A:67:GLN:NE2	0.42	2.30	20	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:77:PHE:CD1	0.42	2.73	1	1
1:A:31:ASP:C	1:A:32:LYS:HG2	0.42	2.39	4	1
1:A:131:SER:HA	1:A:134:LYS:HB3	0.42	1.91	5	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:ASP:HB2	0.42	2.15	10	1
1:A:4:LYS:HG3	1:A:33:LEU:HD21	0.42	1.90	11	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:NH1	0.42	2.93	11	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:19:PRO:HD3	0.42	1.91	15	1
1:A:16:CYS:CB	1:A:17:ARG:CZ	0.42	2.96	20	1
1:A:64:ILE:O	1:A:65:SER:HB3	0.42	2.14	20	1
1:A:121:SER:OG	1:A:122:SER:N	0.42	2.53	21	1
1:A:100:SER:C	1:A:101:ASN:CG	0.42	2.88	1	1
1:A:116:ASP:CG	1:A:117:ASP:N	0.42	2.77	2	1
1:A:17:ARG:C	1:A:37:SER:HB3	0.42	2.39	5	1
1:A:23:GLY:HA3	1:A:62:VAL:HG11	0.42	1.91	7	1
1:A:139:PHE:O	1:A:142:GLU:N	0.42	2.52	7	1
1:A:139:PHE:HA	1:A:143:HIS:HB2	0.42	1.90	9	1
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:HG	0.42	2.15	13	2
1:A:63:ASP:O	1:A:63:ASP:CG	0.42	2.62	13	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:HB2	0.42	2.15	2	3
1:A:11:CYS:SG	1:A:86:LEU:HB3	0.42	2.55	4	1
1:A:140:LEU:O	1:A:145:LEU:HB2	0.42	2.15	15	2
1:A:23:GLY:C	1:A:62:VAL:HG11	0.42	2.40	7	1
1:A:86:LEU:O	1:A:87:ASP:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:47:GLN:O	1:A:48:SER:HB3	0.42	2.15	9	1
1:A:128:MET:HE2	1:A:128:MET:HB3	0.42	1.75	9	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:69:ALA:O	0.42	2.15	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:SER:HB2	1:A:19:PRO:CD	0.42	2.45	11	1
1:A:109:PHE:HZ	1:A:136:MET:HE3	0.42	1.69	15	1
1:A:16:CYS:SG	1:A:117:ASP:O	0.42	2.78	16	1
1:A:17:ARG:HB2	1:A:17:ARG:CZ	0.42	2.45	16	1
1:A:18:SER:OG	1:A:132:ILE:CD1	0.42	2.67	17	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:66:LYS:HG2	0.42	1.91	17	1
1:A:50:ASP:O	1:A:54:GLN:HB3	0.42	2.15	13	5
1:A:22:GLU:CD	1:A:26:ARG:HD2	0.42	2.39	2	1
1:A:122:SER:O	1:A:122:SER:OG	0.42	2.36	6	1
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ASP:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:19:PRO:HD2	1:A:128:MET:SD	0.42	2.55	14	1
1:A:78:SER:C	1:A:80:PHE:N	0.42	2.76	19	3
1:A:45:VAL:CG2	1:A:68:ARG:HB3	0.42	2.42	17	1
1:A:54:GLN:O	1:A:57:CYS:CB	0.42	2.68	18	1
1:A:3:GLU:CG	1:A:4:LYS:N	0.42	2.83	19	1
1:A:8:LEU:O	1:A:10:VAL:HG12	0.42	2.14	20	1
1:A:122:SER:O	1:A:126:PRO:HD2	0.42	2.15	4	1
1:A:115:VAL:HG13	1:A:131:SER:OG	0.42	2.15	5	1
1:A:139:PHE:O	1:A:141:THR:N	0.42	2.53	7	2
1:A:110:ASN:CG	1:A:111:PRO:HD2	0.42	2.39	8	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:ARG:HG2	0.42	2.15	10	2
1:A:101:ASN:O	1:A:102:CYS:SG	0.42	2.77	11	1
1:A:19:PRO:CG	1:A:53:SER:HB2	0.42	2.45	16	1
1:A:55:LYS:O	1:A:58:LYS:N	0.42	2.53	18	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:90:ILE:CG2	0.41	2.98	1	1
1:A:56:VAL:HG13	1:A:57:CYS:N	0.41	2.30	4	2
1:A:145:LEU:O	1:A:145:LEU:HD13	0.41	2.15	4	1
1:A:3:GLU:C	1:A:4:LYS:HD2	0.41	2.40	5	2
1:A:133:SER:O	1:A:136:MET:HG3	0.41	2.15	5	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:132:ILE:HA	0.41	2.50	8	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:LEU:HG	0.41	2.15	15	1
1:A:73:THR:C	1:A:74:LYS:CG	0.41	2.88	17	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:HD2	0.41	2.15	21	1
1:A:7:VAL:CB	1:A:9:PHE:CE1	0.41	3.02	3	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:35:ILE:HA	0.41	2.50	3	2
1:A:23:GLY:CA	1:A:62:VAL:HG11	0.41	2.45	7	1
1:A:85:ALA:O	1:A:109:PHE:HB2	0.41	2.14	8	1
1:A:87:ASP:C	1:A:90:ILE:CG2	0.41	2.94	16	1
1:A:112:PRO:C	1:A:116:ASP:OD2	0.41	2.63	16	1
1:A:15:ILE:CG2	1:A:66:LYS:HE3	0.41	2.45	17	1
1:A:106:VAL:O	1:A:107:VAL:HG13	0.41	2.15	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:GLN:O	1:A:57:CYS:SG	0.41	2.79	18	1
1:A:87:ASP:HB2	1:A:90:ILE:HD11	0.41	1.92	1	2
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ASP:HB2	0.41	2.15	2	1
1:A:4:LYS:C	1:A:4:LYS:HE3	0.41	2.40	3	1
1:A:128:MET:O	1:A:132:ILE:HB	0.41	2.14	10	2
1:A:26:ARG:HD3	1:A:63:ASP:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:55:LYS:CA	0.41	2.98	5	1
1:A:55:LYS:O	1:A:55:LYS:HE2	0.41	2.16	5	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:39:ALA:HB1	0.41	2.46	14	1
1:A:57:CYS:C	1:A:62:VAL:CG1	0.41	2.92	16	1
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:HG13	0.41	1.90	17	1
1:A:70:ARG:O	1:A:71:GLN:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:129:PHE:CE1	0.41	2.50	21	1
1:A:36:ASP:OD2	1:A:80:PHE:CG	0.41	2.73	21	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:PRO:HD3	0.41	2.15	7	1
1:A:6:ALA:O	1:A:82:VAL:HB	0.41	2.15	11	1
1:A:16:CYS:O	1:A:17:ARG:NE	0.41	2.54	18	1
1:A:5:LYS:CD	1:A:81:ASP:CB	0.41	2.98	19	1
1:A:72:ILE:C	1:A:72:ILE:CD1	0.41	2.93	19	1
1:A:117:ASP:OD1	1:A:123:ASP:O	0.41	2.38	19	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:54:GLN:HA	0.41	2.30	2	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:130:ALA:N	0.41	2.89	3	1
1:A:79:LYS:HG2	1:A:80:PHE:CZ	0.41	2.50	4	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:82:VAL:C	0.41	2.39	5	1
1:A:26:ARG:CG	1:A:27:ASP:N	0.41	2.83	5	1
1:A:86:LEU:C	1:A:110:ASN:OD1	0.41	2.63	5	1
1:A:101:ASN:O	1:A:101:ASN:CG	0.41	2.63	6	2
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ILE:OXT	0.41	2.16	6	1
1:A:40:THR:CG2	1:A:41:SER:N	0.41	2.83	8	1
1:A:108:LEU:HD21	1:A:110:ASN:OD1	0.41	2.15	10	1
1:A:98:LYS:CE	1:A:99:PRO:HD2	0.41	2.45	12	1
1:A:133:SER:O	1:A:135:GLU:N	0.41	2.53	14	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:102:CYS:SG	0.41	2.93	16	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:84:ALA:HB3	0.41	2.51	17	1
1:A:4:LYS:HB2	1:A:32:LYS:O	0.41	2.14	18	1
1:A:19:PRO:CB	1:A:67:GLN:CD	0.41	2.94	18	1
1:A:79:LYS:HG3	1:A:80:PHE:CZ	0.41	2.50	20	1
1:A:57:CYS:CB	1:A:62:VAL:HG11	0.41	2.42	6	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:64:ILE:HB	0.41	2.31	7	1
1:A:31:ASP:O	1:A:32:LYS:HD3	0.41	2.15	9	1
1:A:110:ASN:C	1:A:135:GLU:OE1	0.41	2.64	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:SER:O	1:A:66:LYS:HB2	0.41	2.16	12	2
1:A:140:LEU:CD1	1:A:141:THR:N	0.41	2.83	12	1
1:A:131:SER:O	1:A:134:LYS:HG3	0.41	2.16	14	1
1:A:10:VAL:HA	1:A:17:ARG:NH1	0.41	2.29	16	1
1:A:56:VAL:CG1	1:A:57:CYS:N	0.41	2.83	16	1
1:A:19:PRO:HG2	1:A:65:SER:O	0.41	2.16	17	1
1:A:91:LEU:HD13	1:A:108:LEU:HB2	0.41	1.91	18	1
1:A:25:CYS:HB3	1:A:35:ILE:CD1	0.41	2.34	1	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:35:ILE:HA	0.41	2.51	3	1
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:CG	0.41	2.93	7	2
1:A:73:THR:HG23	1:A:75:ALA:H	0.41	1.75	3	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:35:ILE:HG13	0.41	1.93	5	1
1:A:12:LEU:O	1:A:13:GLY:C	0.41	2.64	5	1
1:A:54:GLN:HA	1:A:64:ILE:CD1	0.41	2.44	5	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:CYS:H	0.41	1.75	8	1
1:A:90:ILE:H	1:A:90:ILE:HD12	0.41	1.75	11	1
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ILE:HG13	0.41	2.15	14	1
1:A:94:ILE:CD1	1:A:97:MET:HE3	0.41	2.46	14	1
1:A:17:ARG:HD3	1:A:115:VAL:HG23	0.41	1.93	21	1
1:A:63:ASP:OD1	1:A:63:ASP:O	0.41	2.38	21	1
1:A:77:PHE:C	1:A:78:SER:OG	0.41	2.61	5	1
1:A:54:GLN:CB	1:A:64:ILE:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:54:GLN:CB	1:A:64:ILE:HD13	0.41	2.46	9	1
1:A:77:PHE:CD2	1:A:99:PRO:HD3	0.41	2.50	9	1
1:A:40:THR:O	1:A:41:SER:HB3	0.41	2.16	13	2
1:A:76:ASP:O	1:A:79:LYS:HG2	0.41	2.15	13	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:9:PHE:O	0.41	2.74	15	1
1:A:19:PRO:HB3	1:A:67:GLN:CD	0.41	2.41	1	1
1:A:22:GLU:HA	1:A:35:ILE:CG2	0.41	2.46	1	1
1:A:136:MET:HE3	1:A:136:MET:CA	0.41	2.46	1	2
1:A:108:LEU:CD1	1:A:110:ASN:OD1	0.41	2.69	2	1
1:A:129:PHE:O	1:A:133:SER:HB3	0.41	2.16	2	1
1:A:34:ILE:C	1:A:35:ILE:HD12	0.41	2.40	3	1
1:A:4:LYS:HD3	1:A:4:LYS:N	0.41	2.31	4	1
1:A:21:CYS:C	1:A:24:ILE:HG22	0.41	2.41	4	2
1:A:25:CYS:SG	1:A:34:ILE:HG12	0.41	2.56	5	1
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:OD1	0.41	2.39	5	1
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:HB2	0.41	2.15	6	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:C	0.41	2.95	6	1
1:A:23:GLY:C	1:A:62:VAL:HG13	0.41	2.40	9	1
1:A:100:SER:O	1:A:101:ASN:HB2	0.41	2.16	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HA	0.41	1.72	9	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:CG1	0.41	2.57	10	1
1:A:116:ASP:O	1:A:117:ASP:OD2	0.41	2.38	10	1
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ILE:CG1	0.41	2.68	11	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:80:PHE:CD2	0.41	3.03	16	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:76:ASP:HB2	0.41	2.46	14	1
1:A:137:LYS:HG2	1:A:138:PRO:HD3	0.41	1.92	15	1
1:A:5:LYS:HE3	1:A:140:LEU:CD2	0.41	2.46	16	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:PHE:N	0.41	2.79	16	1
1:A:141:THR:CA	1:A:146:ILE:C	0.41	2.93	16	1
1:A:22:GLU:CA	1:A:35:ILE:HG23	0.41	2.38	17	1
1:A:3:GLU:OE1	1:A:33:LEU:N	0.41	2.40	19	1
1:A:118:PRO:O	1:A:119:TYR:C	0.41	2.63	20	1
1:A:4:LYS:H	1:A:4:LYS:CD	0.41	2.29	2	1
1:A:25:CYS:HB2	1:A:35:ILE:HG12	0.41	1.93	2	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:129:PHE:O	0.41	2.16	3	1
1:A:83:ILE:O	1:A:106:VAL:HA	0.41	2.16	17	2
1:A:140:LEU:O	1:A:142:GLU:N	0.41	2.54	3	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:39:ALA:HA	0.41	1.93	4	1
1:A:11:CYS:O	1:A:90:ILE:CD1	0.41	2.56	4	1
1:A:19:PRO:O	1:A:57:CYS:SG	0.41	2.74	5	1
1:A:82:VAL:O	1:A:83:ILE:HG13	0.41	2.16	5	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:36:ASP:O	0.41	2.74	6	1
1:A:21:CYS:N	1:A:132:ILE:CD1	0.41	2.84	6	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:136:MET:SD	0.41	2.56	7	1
1:A:75:ALA:HB1	1:A:79:LYS:HD2	0.41	1.93	10	1
1:A:17:ARG:HD2	1:A:86:LEU:HD13	0.41	1.92	13	1
1:A:29:VAL:HB	1:A:32:LYS:CD	0.41	2.46	14	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:69:ALA:O	0.41	2.16	16	1
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ILE:HG22	0.41	2.16	17	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:CYS:SG	0.41	2.56	20	1
1:A:57:CYS:HG	1:A:62:VAL:HG11	0.40	1.72	2	1
1:A:131:SER:O	1:A:135:GLU:HB2	0.40	2.16	3	3
1:A:146:ILE:O	1:A:146:ILE:HD12	0.40	2.16	5	1
1:A:9:PHE:HB3	1:A:21:CYS:SG	0.40	2.56	8	1
1:A:66:LYS:N	1:A:66:LYS:HD3	0.40	2.32	8	1
1:A:17:ARG:CD	1:A:86:LEU:CD2	0.40	3.00	10	1
1:A:101:ASN:C	1:A:102:CYS:SG	0.40	3.05	11	1
1:A:77:PHE:CE2	1:A:98:LYS:HD2	0.40	2.50	12	1
1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:HD2	0.40	2.32	12	1
1:A:53:SER:O	1:A:56:VAL:CG2	0.40	2.69	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:PRO:HB3	1:A:54:GLN:NE2	0.40	2.31	16	1
1:A:90:ILE:HG22	1:A:94:ILE:HD11	0.40	1.92	18	1
1:A:109:PHE:O	1:A:110:ASN:HB2	0.40	2.16	18	1
1:A:45:VAL:C	1:A:47:GLN:N	0.40	2.78	21	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:33:LEU:HD21	0.40	2.46	3	1
1:A:90:ILE:O	1:A:94:ILE:CB	0.40	2.70	21	2
1:A:109:PHE:C	1:A:110:ASN:ND2	0.40	2.80	6	1
1:A:43:PHE:O	1:A:44:HIS:CB	0.40	2.68	7	1
1:A:5:LYS:CD	1:A:144:GLY:O	0.40	2.69	13	1
1:A:19:PRO:HB3	1:A:64:ILE:CD1	0.40	2.43	13	1
1:A:29:VAL:O	1:A:32:LYS:HG2	0.40	2.16	14	1
1:A:5:LYS:HD3	1:A:145:LEU:CD1	0.40	2.46	15	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:17:ARG:CD	0.40	2.46	15	1
1:A:14:ASN:O	1:A:18:SER:HB3	0.40	2.16	15	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:90:ILE:HB	0.40	2.16	20	1
1:A:34:ILE:HD12	1:A:34:ILE:C	0.40	2.42	4	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:ARG:HB3	0.40	2.16	5	1
1:A:4:LYS:HE2	1:A:32:LYS:CB	0.40	2.46	7	1
1:A:53:SER:HA	1:A:128:MET:HE1	0.40	1.93	7	1
1:A:67:GLN:O	1:A:67:GLN:HG3	0.40	2.16	7	1
1:A:93:ASP:O	1:A:96:SER:HB3	0.40	2.17	12	1
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:GLU:N	0.40	2.31	14	1
1:A:41:SER:O	1:A:42:GLY:O	0.40	2.39	15	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:111:PRO:HD2	0.40	2.31	16	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:C	0.40	2.97	17	1
1:A:4:LYS:C	1:A:4:LYS:HD3	0.40	2.42	18	1
1:A:64:ILE:O	1:A:66:LYS:N	0.40	2.52	20	1
1:A:140:LEU:CD2	1:A:145:LEU:CB	0.40	3.00	21	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:64:ILE:CG2	0.40	2.47	3	1
1:A:140:LEU:C	1:A:142:GLU:N	0.40	2.78	3	2
1:A:92:SER:HA	1:A:95:ASN:ND2	0.40	2.31	4	1
1:A:77:PHE:CZ	1:A:97:MET:CE	0.40	3.04	5	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:59:SER:CB	0.40	3.00	7	1
1:A:117:ASP:OD1	1:A:117:ASP:N	0.40	2.52	7	1
1:A:133:SER:O	1:A:136:MET:N	0.40	2.54	7	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:72:ILE:HD12	0.40	2.42	12	1
1:A:92:SER:O	1:A:93:ASP:C	0.40	2.65	12	1
1:A:20:ALA:CB	1:A:129:PHE:HB2	0.40	2.44	16	1
1:A:97:MET:HE3	1:A:97:MET:HB2	0.40	1.73	19	1
1:A:53:SER:HA	1:A:125:PHE:CD1	0.40	2.52	20	1
1:A:15:ILE:HG23	1:A:50:ASP:CG	0.40	2.41	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASP:O	1:A:104:ALA:CA	0.40	2.70	4	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:17:ARG:HG3	0.40	2.56	7	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:12:LEU:N	0.40	2.95	10	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:107:VAL:O	0.40	2.16	11	1
1:A:21:CYS:SG	1:A:22:GLU:N	0.40	2.95	19	1
1:A:23:GLY:CA	1:A:62:VAL:HG13	0.40	2.46	19	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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	143/146 (98%)	93±5 (65±4%)	36±5 (25±3%)	15±3 (10±2%)	1	9
All	All	3003/3066 (98%)	1948 (65%)	749 (25%)	306 (10%)	1	9

All 70 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	34	ILE	20
1	A	48	SER	16
1	A	12	LEU	11
1	A	47	GLN	11
1	A	126	PRO	10
1	A	31	ASP	9
1	A	66	LYS	9
1	A	62	VAL	9
1	A	99	PRO	8
1	A	110	ASN	8
1	A	65	SER	7
1	A	41	SER	7
1	A	124	GLY	7
1	A	68	ARG	7
1	A	61	GLY	6
1	A	64	ILE	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	LEU	6
1	A	118	PRO	6
1	A	128	MET	6
1	A	144	GLY	6
1	A	33	LEU	6
1	A	71	GLN	6
1	A	29	VAL	6
1	A	115	VAL	5
1	A	119	TYR	5
1	A	145	LEU	5
1	A	11	CYS	4
1	A	18	SER	4
1	A	116	ASP	4
1	A	42	GLY	4
1	A	117	ASP	3
1	A	100	SER	3
1	A	30	GLY	3
1	A	137	LYS	3
1	A	4	LYS	3
1	A	39	ALA	3
1	A	78	SER	3
1	A	122	SER	3
1	A	32	LYS	3
1	A	80	PHE	3
1	A	69	ALA	3
1	A	101	ASN	3
1	A	15	ILE	3
1	A	43	PHE	3
1	A	114	GLY	2
1	A	44	HIS	2
1	A	63	ASP	2
1	A	67	GLN	2
1	A	5	LYS	2
1	A	8	LEU	2
1	A	13	GLY	2
1	A	17	ARG	2
1	A	120	TYR	2
1	A	35	ILE	2
1	A	40	THR	2
1	A	72	ILE	2
1	A	74	LYS	2
1	A	6	ALA	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	123	ASP	1
1	A	3	GLU	1
1	A	16	CYS	1
1	A	49	PRO	1
1	A	87	ASP	1
1	A	143	HIS	1
1	A	109	PHE	1
1	A	73	THR	1
1	A	121	SER	1
1	A	141	THR	1
1	A	45	VAL	1
1	A	81	ASP	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	125/125 (100%)	88±3 (70±3%)	37±3 (30±3%)	1	17
All	All	2625/2625 (100%)	1841 (70%)	784 (30%)	1	17

All 101 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	4	LYS	20
1	A	91	LEU	19
1	A	103	ARG	18
1	A	132	ILE	18
1	A	48	SER	17
1	A	3	GLU	16
1	A	51	THR	16
1	A	12	LEU	15
1	A	34	ILE	15
1	A	57	CYS	15
1	A	136	MET	15
1	A	18	SER	14
1	A	145	LEU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	68	ARG	14
1	A	22	GLU	13
1	A	24	ILE	13
1	A	35	ILE	13
1	A	53	SER	13
1	A	55	LYS	12
1	A	133	SER	12
1	A	137	LYS	12
1	A	52	ARG	11
1	A	58	LYS	11
1	A	66	LYS	11
1	A	105	LYS	11
1	A	79	LYS	11
1	A	78	SER	11
1	A	28	MET	10
1	A	54	GLN	10
1	A	60	ASN	10
1	A	65	SER	10
1	A	89	SER	10
1	A	17	ARG	10
1	A	108	LEU	10
1	A	86	LEU	10
1	A	41	SER	9
1	A	83	ILE	9
1	A	121	SER	9
1	A	143	HIS	9
1	A	146	ILE	9
1	A	59	SER	9
1	A	73	THR	9
1	A	96	SER	9
1	A	100	SER	8
1	A	140	LEU	8
1	A	44	HIS	8
1	A	70	ARG	8
1	A	74	LYS	8
1	A	135	GLU	8
1	A	37	SER	8
1	A	87	ASP	7
1	A	122	SER	7
1	A	117	ASP	7
1	A	88	GLN	7
1	A	98	LYS	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	131	SER	7
1	A	134	LYS	7
1	A	81	ASP	6
1	A	110	ASN	6
1	A	101	ASN	6
1	A	63	ASP	6
1	A	32	LYS	6
1	A	119	TYR	5
1	A	33	LEU	5
1	A	50	ASP	5
1	A	93	ASP	5
1	A	113	ASN	5
1	A	94	ILE	5
1	A	31	ASP	5
1	A	102	CYS	5
1	A	27	ASP	4
1	A	123	ASP	4
1	A	14	ASN	4
1	A	71	GLN	4
1	A	109	PHE	4
1	A	36	ASP	4
1	A	120	TYR	4
1	A	26	ARG	3
1	A	16	CYS	3
1	A	47	GLN	3
1	A	76	ASP	3
1	A	97	MET	3
1	A	90	ILE	3
1	A	62	VAL	3
1	A	10	VAL	3
1	A	25	CYS	2
1	A	43	PHE	2
1	A	21	CYS	2
1	A	40	THR	2
1	A	64	ILE	2
1	A	8	LEU	2
1	A	67	GLN	2
1	A	107	VAL	2
1	A	45	VAL	2
1	A	15	ILE	1
1	A	116	ASP	1
1	A	5	LYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	29	VAL	1
1	A	142	GLU	1
1	A	72	ILE	1
1	A	7	VAL	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