



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 07:13 PM UTC

PDB ID : 1PJZ / pdb_00001pjz
Title : Solution structure of thiopurine methyltransferase from *Pseudomonas syringae*
Authors : Scheuermann, T.H.; Lolis, E.; Hodsdon, M.E.
Deposited on : 2003-06-04

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
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

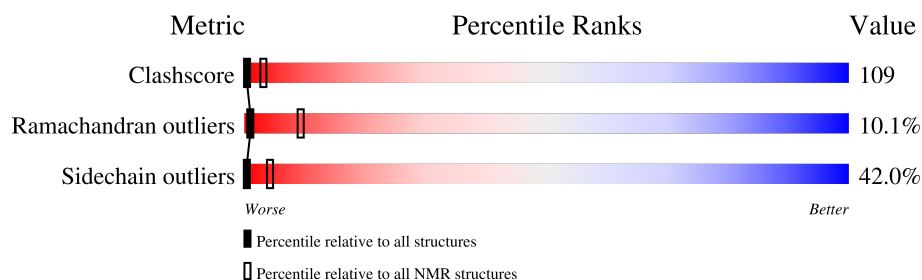
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

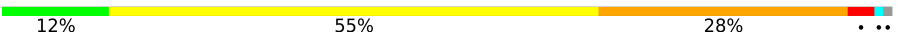
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	203	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:201 (199)	0.72	2

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 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3097 atoms, of which 1520 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Thiopurine S-methyltransferase.

Mol	Chain	Residues	Atoms							Trace
1	A	201	Total	C	H	N	O	S		0
			3097	998	1520	275	294	10		

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

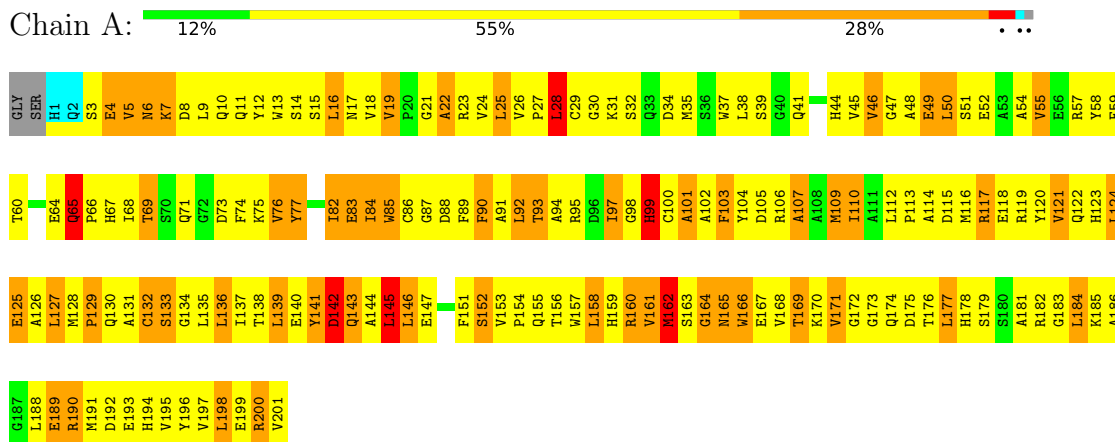
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-1	GLY	-	cloning artifact	UNP O86262
A	0	SER	-	cloning artifact	UNP O86262

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: Thiopurine S-methyltransferase

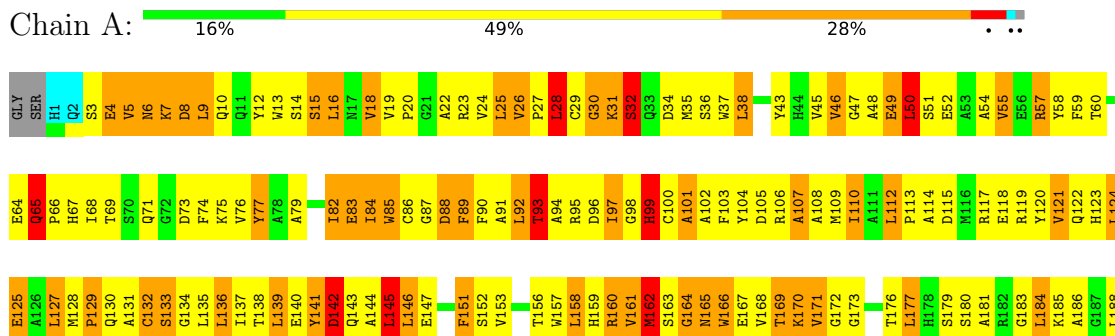


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

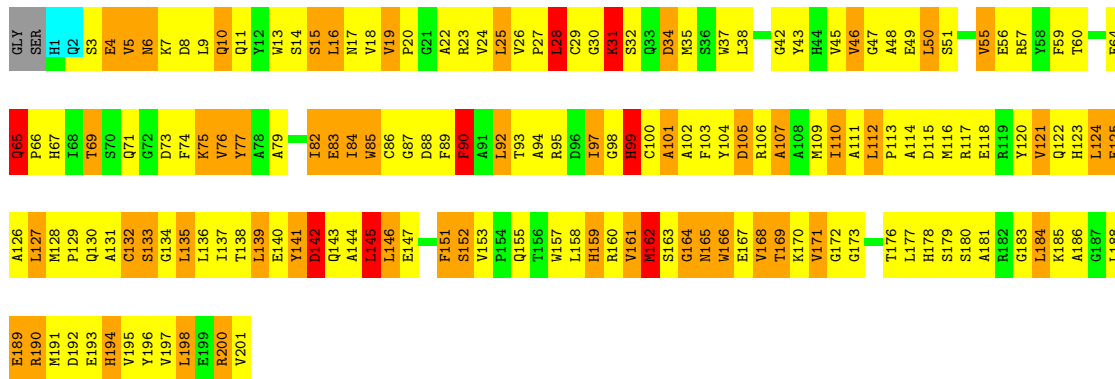


E189
R190
M191
D192
E193
H194
V195
Y196
V197
L198
E199
R200
V201

4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

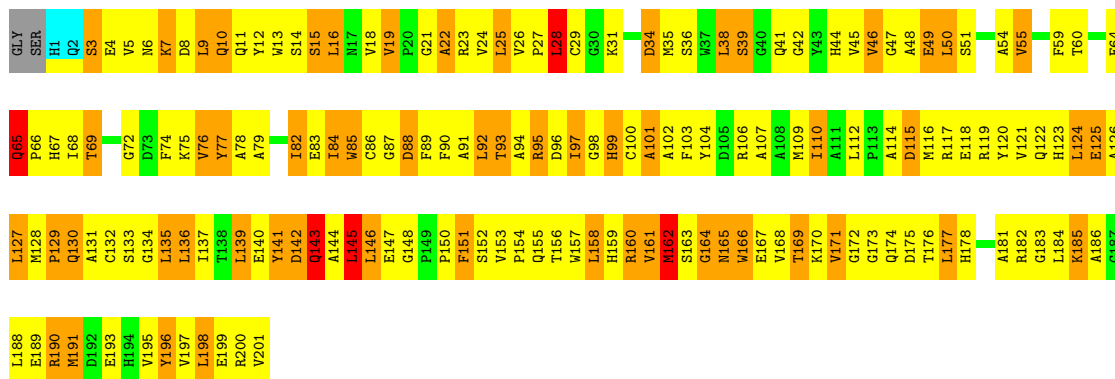
Chain A: 17% 51% 26%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

Chain A: 16% 52% 28%

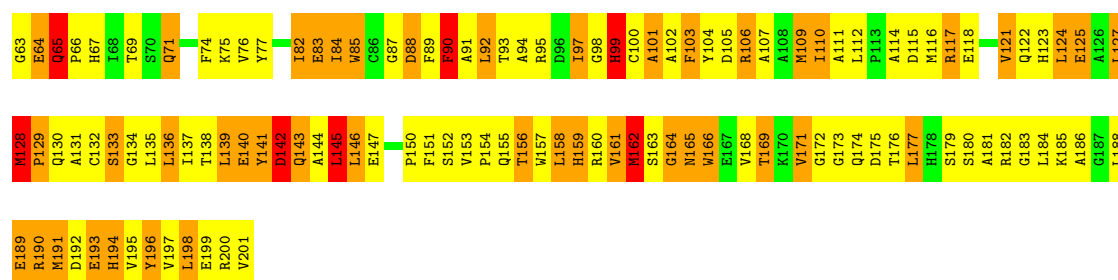


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

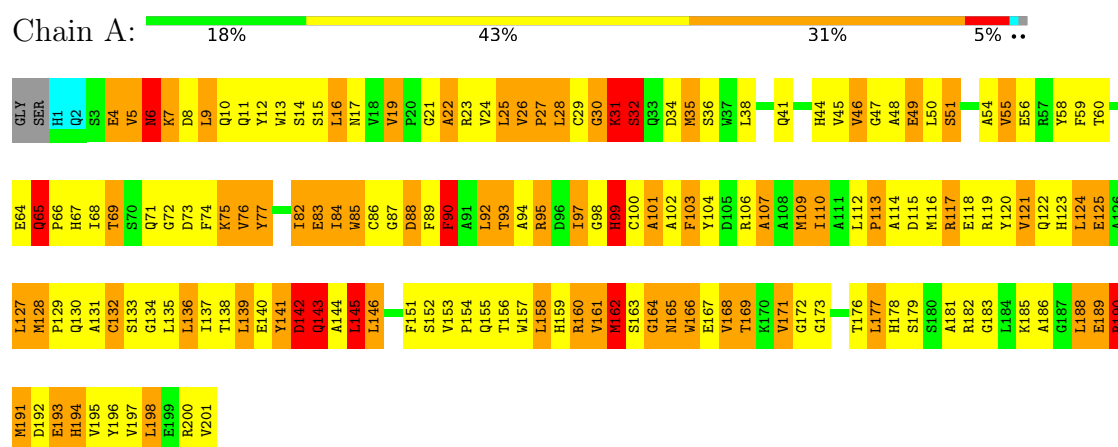
Chain A: 17% 47% 30%





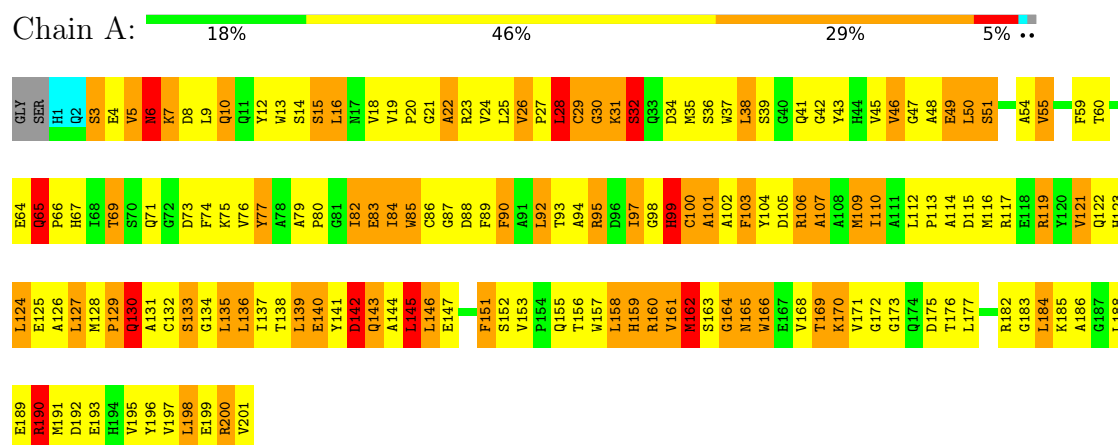
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



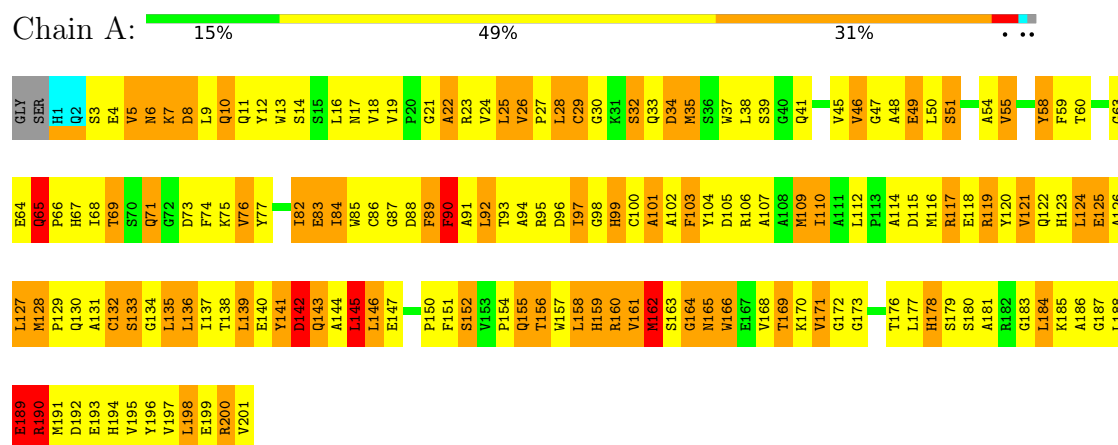
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



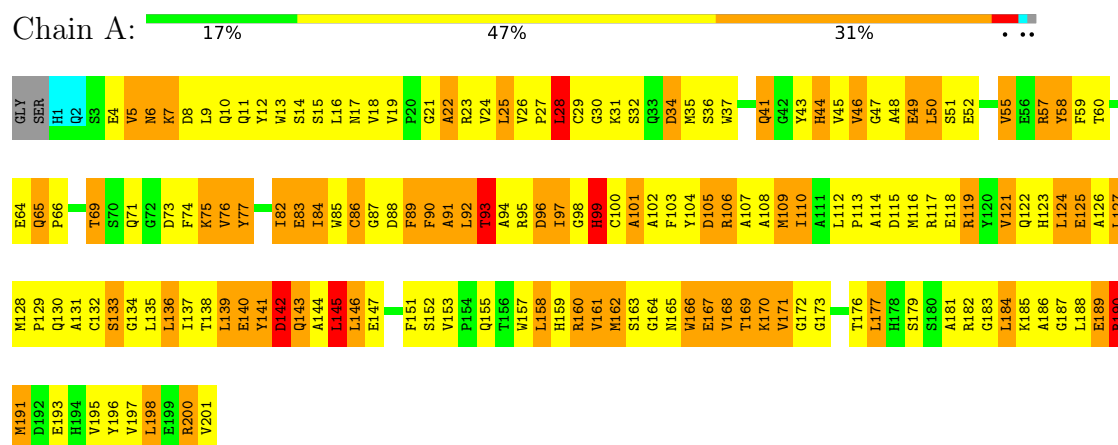
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



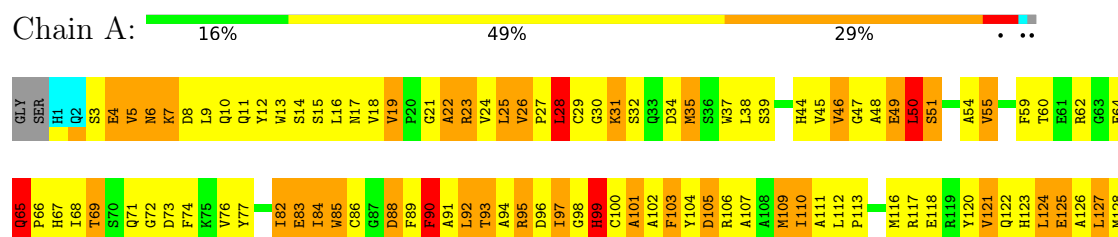
4.2.8 Score per residue for model 8

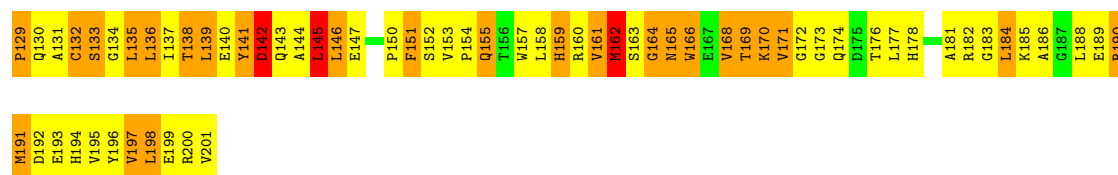
- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

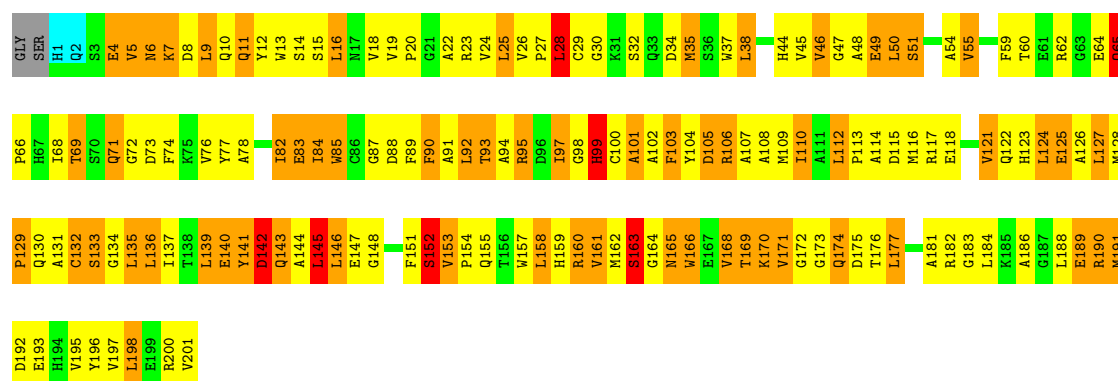




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

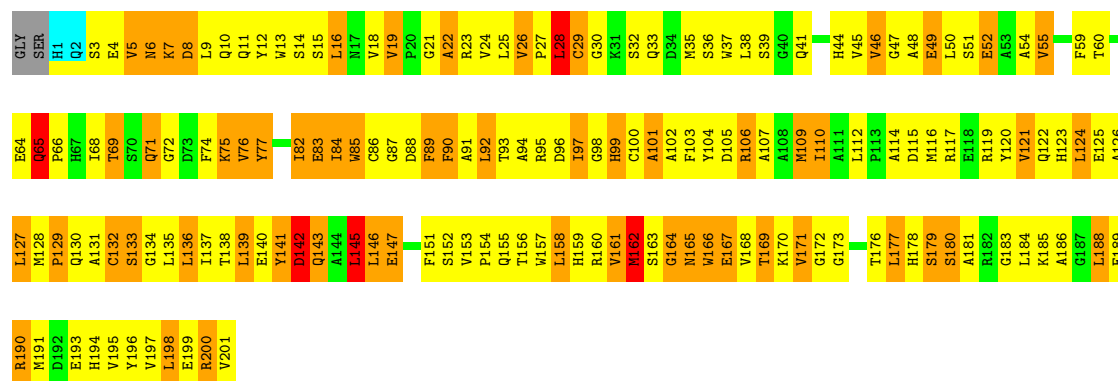
Chain A: 20% 44% 31% ...



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

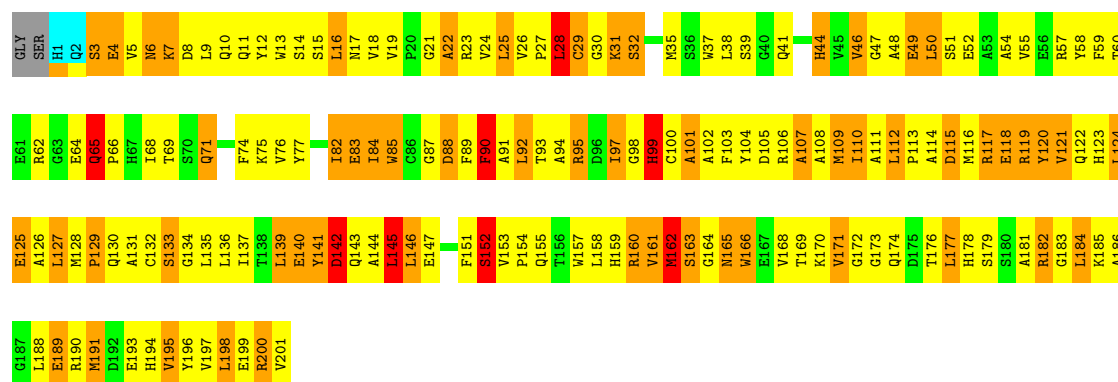
Chain A: 17% 50% 29% ...



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

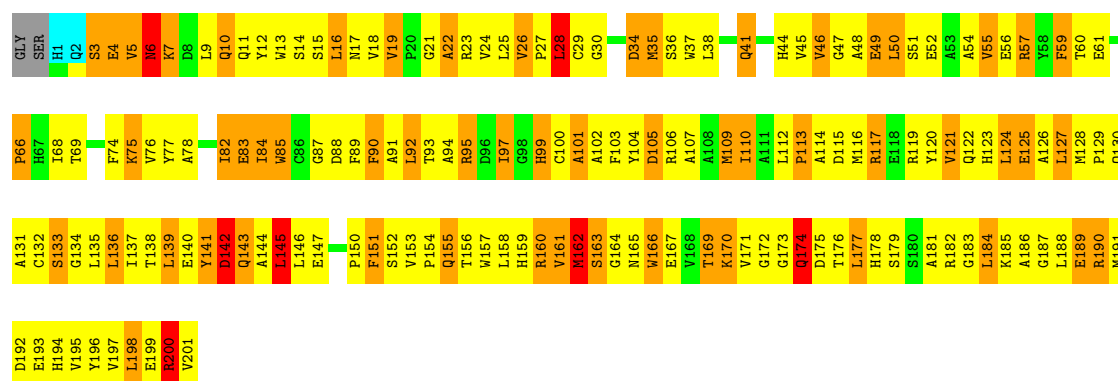
Chain A: 16% 50% 28% ...



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

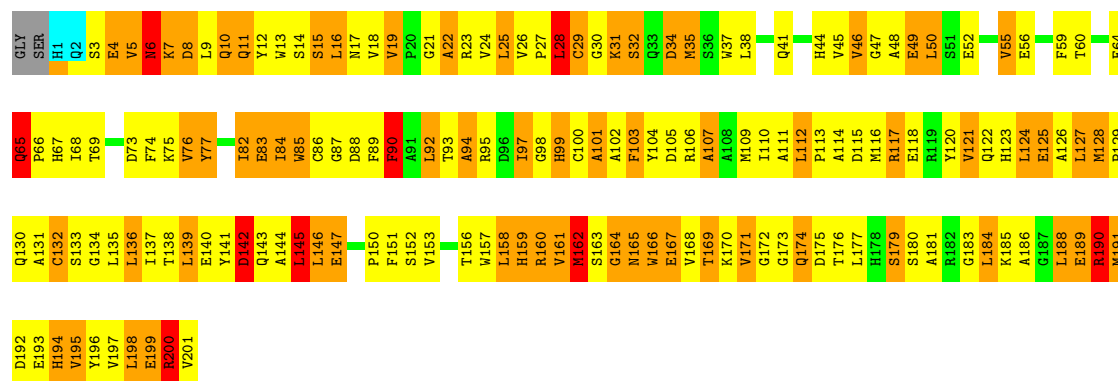
Chain A: 16% 50% 28% ...



4.2.14 Score per residue for model 14

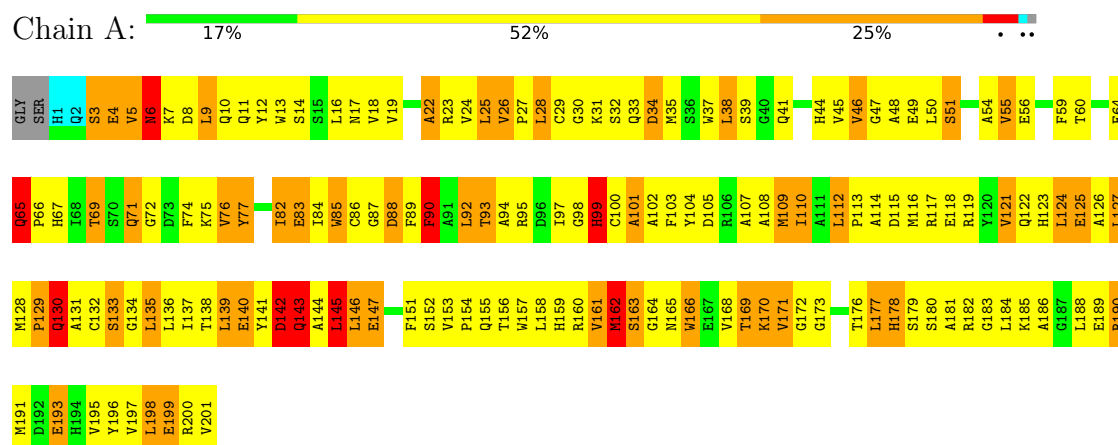
- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase

Chain A: 16% 45% 32% ...



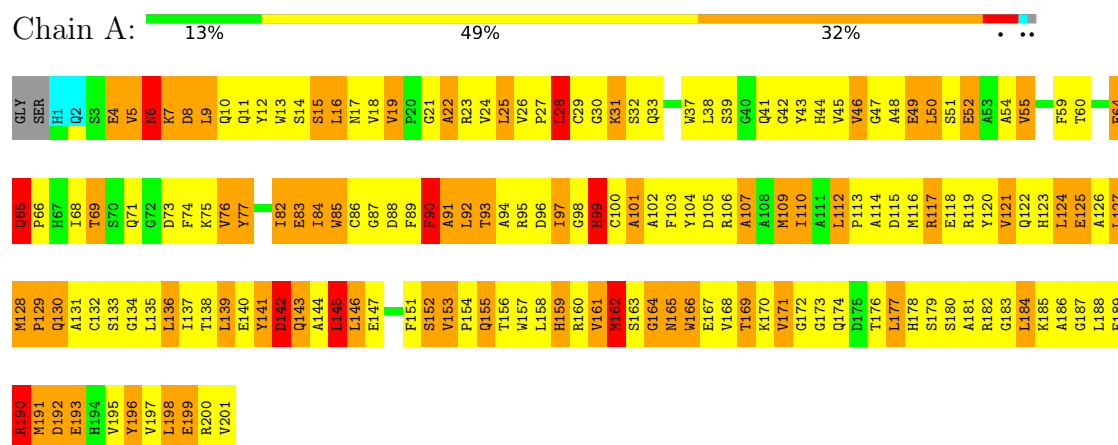
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



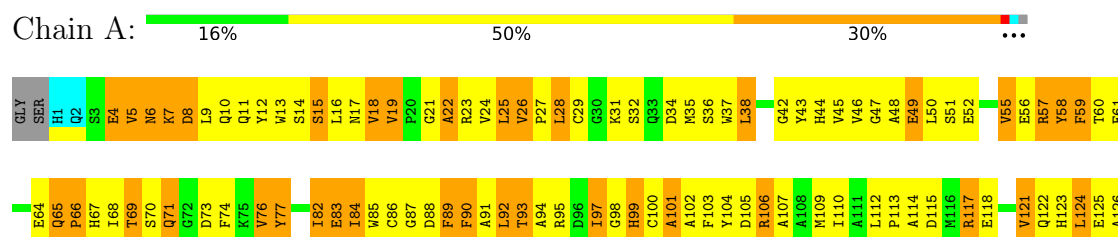
4.2.16 Score per residue for model 16

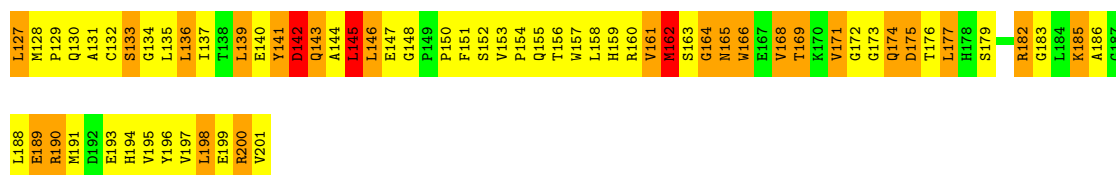
- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



4.2.17 Score per residue for model 17

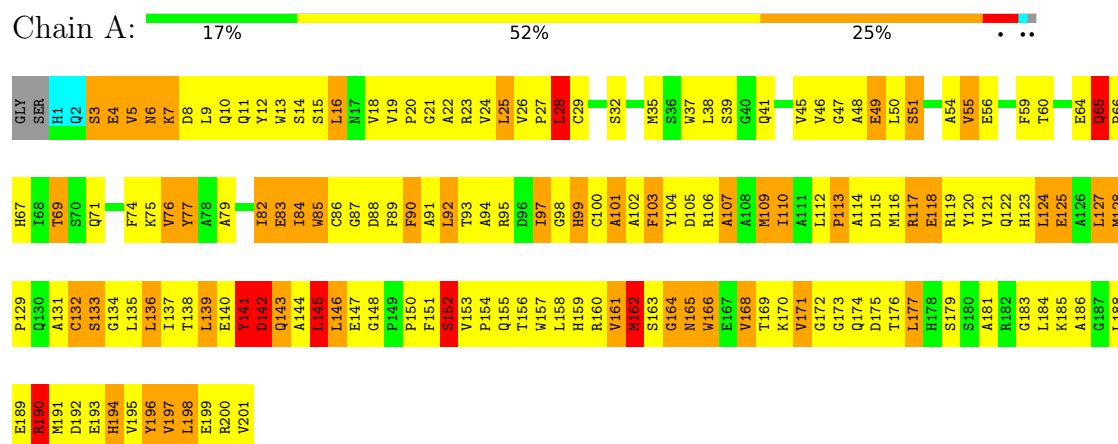
- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase





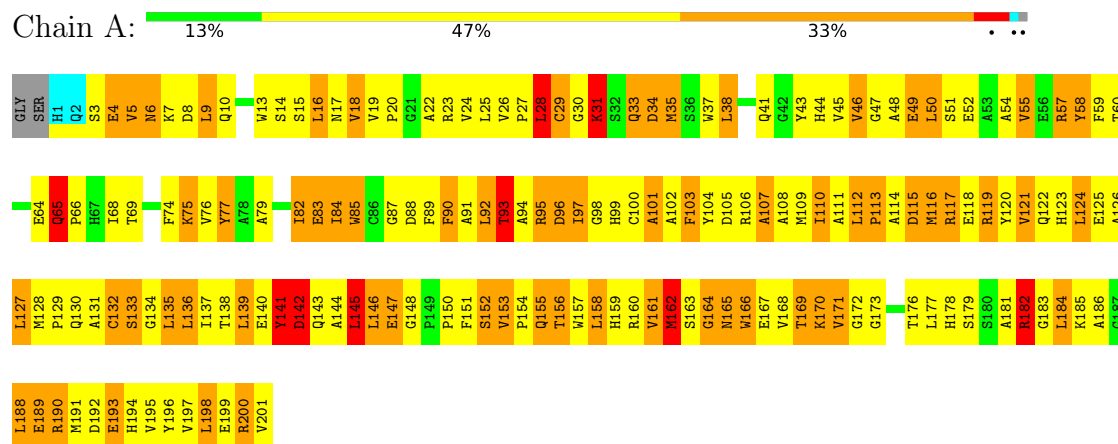
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



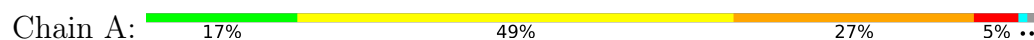
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Thiopurine S-methyltransferase



M191	M128	P66	GLY
D192	P129	P67	SR
E193	Q130	I68	H1
H194	A131	T69	Q2
Y195	C132	S70	S3
Y196	S133	Q71	E4
V197	G134	G72	V5
L198	L135	D73	K7
E199	L136	F74	D8
R200	T137	K75	L9
V201	L138	V76	Q10
	L139	Y77	Q11
	E140		Q12
	Y141	I82	W13
	D142	E83	W14
	Q143	T84	S15
	A144	W85	S16
	L145	C86	L16
	L146	G87	R17
	E147	D88	V18
		F89	V19
	F151	P90	P20
	S152	A91	Q21
	V153	L92	A22
	P154	T93	R23
	Q155	A94	V24
	T156	R95	L25
	W157	D96	L26
	L158	I97	P27
	H159	G98	L28
	R160	H99	C29
	V161	C100	G30
	M162	A101	K31
	G164	A102	S32
	H165	F103	Q33
	W166	Y104	D34
	E167	D105	M35
	L168	R106	S36
	T169	A107	W37
	K170	A108	L38
	V171	M109	S39
	G172	I110	
	G173	A111	G42
	Q174	L112	V45
	T175	P113	V46
	L176	A114	G47
	L177	D115	A48
	H178	M116	E49
	S179	E117	L50
		R118	S51
		R119	E52
		Y120	
	R182	V121	V55
	G183	Q122	E56
	L184	H123	R57
	L185	L124	F58
	A186	E125	F59
	G187	A126	T60
	L188	E127	F61
	R189		
	E190		

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.05
CYANA	refinement	1.05

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	0.74±0.00	0±0/1597 (0.0± 0.0%)	1.08±0.01	0±0/2169 (0.0± 0.0%)
All	All	0.74	0/31940 (0.0%)	1.08	1/43380 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	31	LYS	O-C-N	5.02	124.54	120.83	5	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1558	1505	1505	333±17
All	All	31160	30100	30100	6659

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 109.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:TYR:CE1	1:A:198:LEU:HD22	1.10	1.82	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:VAL:HG23	1:A:22:ALA:HB2	1.09	1.23	5	12
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:HD13	1.08	1.74	4	14
1:A:162:MET:HE2	1:A:166:TRP:CH2	1.07	1.85	19	13
1:A:135:LEU:HD13	1:A:137:ILE:HD11	1.05	1.28	15	2
1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ALA:HB2	1.04	1.21	20	8
1:A:109:MET:HE2	1:A:158:LEU:HD11	1.03	1.28	5	1
1:A:19:VAL:CG1	1:A:22:ALA:HB2	1.03	1.84	1	7
1:A:48:ALA:HB2	1:A:85:TRP:CE2	1.03	1.89	16	20
1:A:13:TRP:CH2	1:A:102:ALA:HB3	1.01	1.90	18	19
1:A:94:ALA:HB3	1:A:127:LEU:HD13	1.01	1.26	15	16
1:A:104:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HD12	1.00	1.90	10	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:38:LEU:HD13	1.00	1.27	12	7
1:A:22:ALA:HB1	1:A:101:ALA:CB	0.98	1.88	18	20
1:A:97:ILE:HD13	1:A:98:GLY:N	0.97	1.75	5	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:82:ILE:HD11	0.96	1.37	13	19
1:A:117:ARG:O	1:A:121:VAL:HG13	0.96	1.59	9	18
1:A:168:VAL:HG13	1:A:198:LEU:HD22	0.96	1.38	14	2
1:A:92:LEU:O	1:A:92:LEU:HD22	0.95	1.59	10	5
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HD13	0.95	1.38	4	12
1:A:104:TYR:CZ	1:A:137:ILE:HD13	0.95	1.95	16	4
1:A:27:PRO:O	1:A:28:LEU:HD22	0.95	1.61	1	13
1:A:177:LEU:HD22	1:A:177:LEU:O	0.95	1.60	17	7
1:A:135:LEU:CD1	1:A:137:ILE:HD11	0.95	1.92	15	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:142:ASP:CG	0.95	1.87	3	1
1:A:158:LEU:HD23	1:A:162:MET:HE3	0.94	1.35	10	1
1:A:136:LEU:O	1:A:137:ILE:HD13	0.94	1.62	15	6
1:A:136:LEU:HD22	1:A:137:ILE:N	0.94	1.77	20	1
1:A:109:MET:HE2	1:A:117:ARG:NH2	0.93	1.77	12	1
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:HD13	0.93	1.89	4	4
1:A:138:THR:O	1:A:139:LEU:HD13	0.93	1.61	9	5
1:A:28:LEU:HD13	1:A:28:LEU:N	0.92	1.79	16	14
1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:ILE:CD1	0.92	1.95	8	4
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:HD22	0.92	1.89	5	16
1:A:190:ARG:O	1:A:191:MET:HE2	0.92	1.65	20	1
1:A:137:ILE:HG23	1:A:195:VAL:HG22	0.91	1.41	20	2
1:A:121:VAL:HG22	1:A:162:MET:HE2	0.91	1.40	17	1
1:A:139:LEU:HD21	1:A:150:PRO:CG	0.90	1.96	3	1
1:A:171:VAL:HG11	1:A:197:VAL:HG23	0.90	1.39	15	7
1:A:109:MET:SD	1:A:136:LEU:HD21	0.90	2.06	13	4
1:A:168:VAL:HG22	1:A:198:LEU:HB3	0.90	1.44	19	3
1:A:23:ARG:O	1:A:101:ALA:HB3	0.90	1.67	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:ALA:HB1	1:A:133:SER:O	0.90	1.67	1	19
1:A:146:LEU:HD12	1:A:147:GLU:N	0.89	1.82	2	8
1:A:26:VAL:HG22	1:A:29:CYS:SG	0.89	2.07	1	2
1:A:24:VAL:HG11	1:A:38:LEU:CD1	0.89	1.98	9	8
1:A:128:MET:SD	1:A:200:ARG:CZ	0.89	2.60	15	1
1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:ILE:HD12	0.89	1.44	2	5
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:HD23	0.89	1.82	14	7
1:A:25:LEU:HD23	1:A:97:ILE:HD11	0.89	1.43	2	5
1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:THR:N	0.89	1.83	3	11
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:CD1	0.88	1.98	6	12
1:A:139:LEU:HD23	1:A:191:MET:CE	0.88	1.99	12	7
1:A:107:ALA:CB	1:A:139:LEU:HD11	0.88	1.98	16	3
1:A:105:ASP:HB2	1:A:136:LEU:HD12	0.87	1.42	2	3
1:A:178:HIS:CD2	1:A:184:LEU:HD21	0.87	2.05	15	1
1:A:158:LEU:CD2	1:A:162:MET:HE3	0.87	1.99	10	4
1:A:34:ASP:O	1:A:38:LEU:HD22	0.87	1.69	6	2
1:A:92:LEU:HD13	1:A:92:LEU:O	0.87	1.70	9	9
1:A:105:ASP:HB3	1:A:136:LEU:HD12	0.87	1.45	12	6
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:HG23	0.87	1.43	16	3
1:A:171:VAL:HG13	1:A:195:VAL:HG23	0.87	1.47	12	2
1:A:27:PRO:C	1:A:28:LEU:HD22	0.86	1.95	19	13
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HG	0.86	1.46	18	4
1:A:97:ILE:HD13	1:A:97:ILE:O	0.86	1.70	19	1
1:A:196:TYR:CD1	1:A:196:TYR:C	0.86	2.52	20	1
1:A:51:SER:O	1:A:55:VAL:HG13	0.86	1.70	16	7
1:A:46:VAL:CG2	1:A:97:ILE:HD12	0.86	1.99	2	5
1:A:186:ALA:HB3	1:A:188:LEU:HD11	0.86	1.47	11	7
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:HD22	0.86	1.96	2	2
1:A:139:LEU:HD12	1:A:142:ASP:CG	0.85	1.95	19	1
1:A:197:VAL:C	1:A:198:LEU:HD23	0.85	1.96	18	4
1:A:92:LEU:CD2	1:A:97:ILE:HG21	0.85	2.00	4	17
1:A:171:VAL:HG13	1:A:195:VAL:CG2	0.85	2.01	12	2
1:A:94:ALA:HB3	1:A:127:LEU:CD1	0.85	2.01	15	9
1:A:112:LEU:HD23	1:A:116:MET:HG2	0.85	1.48	18	8
1:A:162:MET:HE2	1:A:166:TRP:CZ2	0.85	2.06	7	7
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CD1	0.85	2.02	3	16
1:A:112:LEU:HD23	1:A:116:MET:CG	0.84	2.02	16	8
1:A:196:TYR:OH	1:A:198:LEU:HD13	0.84	1.73	18	1
1:A:93:THR:HG22	1:A:95:ARG:HG2	0.84	1.50	1	4
1:A:183:GLY:HA2	1:A:188:LEU:HD23	0.84	1.49	13	12
1:A:196:TYR:CZ	1:A:198:LEU:HD22	0.84	2.07	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:HD23	0.84	1.97	19	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:83:GLU:HB3	0.84	1.47	9	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:128:MET:HE1	0.84	2.01	17	4
1:A:177:LEU:HD13	1:A:178:HIS:N	0.84	1.86	15	1
1:A:168:VAL:HB	1:A:196:TYR:CE1	0.84	2.08	20	1
1:A:19:VAL:CG2	1:A:22:ALA:HB2	0.83	2.02	15	4
1:A:9:LEU:HD13	1:A:9:LEU:C	0.83	1.97	10	20
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:CD1	0.83	2.50	4	9
1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:LEU:HD13	0.83	1.50	5	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:92:LEU:HB3	0.83	2.08	16	9
1:A:165:ASN:O	1:A:201:VAL:HG22	0.83	1.73	8	17
1:A:109:MET:SD	1:A:136:LEU:HD11	0.83	2.13	12	7
1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:GLY:HA3	0.83	1.50	6	3
1:A:139:LEU:HD22	1:A:142:ASP:OD2	0.83	1.73	12	4
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:HD13	0.83	1.98	8	9
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:CG2	0.83	2.04	10	3
1:A:171:VAL:HG12	1:A:196:TYR:HA	0.83	1.51	14	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:89:PHE:CD1	0.82	2.07	1	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:97:ILE:HG21	0.82	1.49	11	12
1:A:35:MET:HE1	1:A:84:ILE:CG1	0.82	2.04	14	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:38:LEU:HG	0.82	1.49	1	4
1:A:82:ILE:HD12	1:A:84:ILE:HB	0.82	1.52	9	14
1:A:25:LEU:HD22	1:A:128:MET:HE1	0.82	1.50	17	5
1:A:97:ILE:C	1:A:97:ILE:HD12	0.82	1.99	10	5
1:A:77:TYR:O	1:A:77:TYR:CD1	0.82	2.33	17	8
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:CZ	0.82	2.58	16	3
1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:PHE:CZ	0.82	2.10	12	12
1:A:136:LEU:HD23	1:A:138:THR:HG23	0.82	1.52	8	4
1:A:90:PHE:CZ	1:A:123:HIS:CE1	0.82	2.67	15	1
1:A:196:TYR:CE1	1:A:198:LEU:HG	0.81	2.10	20	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:HD12	0.81	1.89	19	4
1:A:105:ASP:CG	1:A:136:LEU:HD12	0.81	2.01	4	8
1:A:93:THR:HG22	1:A:95:ARG:HG3	0.81	1.49	15	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:ILE:HG23	0.81	1.76	18	10
1:A:92:LEU:HD21	1:A:97:ILE:HD13	0.81	1.50	18	5
1:A:26:VAL:HG21	1:A:35:MET:HE2	0.80	1.53	14	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:83:GLU:N	0.80	1.91	6	20
1:A:171:VAL:HG22	1:A:172:GLY:H	0.80	1.35	12	2
1:A:105:ASP:CB	1:A:136:LEU:HD12	0.80	2.05	4	9
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:CD2	0.80	2.07	5	4
1:A:27:PRO:O	1:A:28:LEU:HD23	0.80	1.77	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:HB2	1:A:97:ILE:HD11	0.80	1.53	10	2
1:A:26:VAL:HG13	1:A:29:CYS:HB2	0.80	1.52	15	2
1:A:47:GLY:O	1:A:85:TRP:CD1	0.80	2.33	4	20
1:A:135:LEU:HD13	1:A:197:VAL:HG22	0.80	1.54	5	4
1:A:76:VAL:HG13	1:A:85:TRP:HB2	0.80	1.50	6	9
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:CE1	0.80	2.12	9	6
1:A:22:ALA:HB1	1:A:101:ALA:HB2	0.79	1.53	18	20
1:A:89:PHE:CD1	1:A:89:PHE:O	0.79	2.35	1	8
1:A:103:PHE:CE1	1:A:134:GLY:CA	0.79	2.65	15	3
1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:ILE:HD11	0.79	1.53	17	1
1:A:50:LEU:HD21	1:A:89:PHE:HB3	0.79	1.54	15	5
1:A:48:ALA:HB3	1:A:89:PHE:HB2	0.79	1.55	1	5
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD12	0.79	2.03	4	20
1:A:145:LEU:O	1:A:186:ALA:HB1	0.79	1.77	19	3
1:A:46:VAL:HG13	1:A:97:ILE:HD12	0.79	1.54	17	1
1:A:104:TYR:CE2	1:A:137:ILE:HD13	0.79	2.12	18	2
1:A:46:VAL:HG13	1:A:97:ILE:CD1	0.79	2.08	7	2
1:A:169:THR:O	1:A:171:VAL:HG12	0.79	1.78	15	11
1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:ILE:HD13	0.79	1.55	8	4
1:A:139:LEU:HD22	1:A:139:LEU:N	0.79	1.93	4	5
1:A:12:TYR:CE1	1:A:197:VAL:HG21	0.79	2.13	18	2
1:A:77:TYR:CD1	1:A:77:TYR:C	0.78	2.61	8	11
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CG	0.78	2.07	7	5
1:A:162:MET:SD	1:A:198:LEU:HD13	0.78	2.17	5	6
1:A:169:THR:HG22	1:A:197:VAL:HG12	0.78	1.52	14	9
1:A:135:LEU:CD2	1:A:197:VAL:HG22	0.78	2.09	15	1
1:A:100:CYS:HA	1:A:131:ALA:O	0.78	1.79	15	20
1:A:124:LEU:CD2	1:A:128:MET:HE3	0.78	2.08	19	2
1:A:23:ARG:O	1:A:101:ALA:CB	0.78	2.30	7	20
1:A:46:VAL:HG11	1:A:97:ILE:HD12	0.78	1.52	3	2
1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:THR:H	0.78	1.39	13	5
1:A:139:LEU:HD23	1:A:191:MET:HE1	0.78	1.54	17	5
1:A:46:VAL:HG23	1:A:83:GLU:HB3	0.78	1.54	20	9
1:A:25:LEU:HD13	1:A:27:PRO:HD3	0.77	1.53	7	4
1:A:139:LEU:HD21	1:A:150:PRO:HG3	0.77	1.56	3	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:26:VAL:O	0.77	1.76	1	3
1:A:136:LEU:HD23	1:A:138:THR:CG2	0.77	2.08	8	4
1:A:162:MET:O	1:A:166:TRP:CD1	0.77	2.37	2	16
1:A:125:GLU:OE2	1:A:166:TRP:CG	0.77	2.37	19	2
1:A:109:MET:CE	1:A:158:LEU:HD21	0.77	2.08	18	1
1:A:169:THR:CG2	1:A:197:VAL:HG12	0.77	2.09	14	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:O	1:A:97:ILE:HG22	0.77	1.79	14	6
1:A:104:TYR:CZ	1:A:135:LEU:HD12	0.77	2.15	10	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:CE2	0.77	2.14	10	2
1:A:196:TYR:CZ	1:A:198:LEU:HD23	0.77	2.13	20	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:30:GLY:O	0.77	1.79	15	1
1:A:109:MET:HE2	1:A:158:LEU:HD21	0.77	1.56	9	3
1:A:26:VAL:CG2	1:A:35:MET:HE2	0.77	2.10	14	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:171:VAL:HG21	0.77	2.14	14	12
1:A:110:ILE:HD12	1:A:111:ALA:N	0.77	1.95	9	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:137:ILE:CD1	0.77	2.09	15	1
1:A:5:VAL:HG21	1:A:37:TRP:HB2	0.76	1.56	10	10
1:A:177:LEU:HD21	1:A:183:GLY:HA3	0.76	1.58	18	4
1:A:168:VAL:HG23	1:A:196:TYR:CZ	0.76	2.16	15	1
1:A:23:ARG:N	1:A:101:ALA:HB2	0.76	1.95	15	20
1:A:25:LEU:HD13	1:A:26:VAL:N	0.76	1.96	4	11
1:A:48:ALA:HB2	1:A:85:TRP:CZ2	0.76	2.16	5	14
1:A:176:THR:HG23	1:A:176:THR:O	0.76	1.80	19	17
1:A:117:ARG:CG	1:A:157:TRP:CH2	0.76	2.69	12	1
1:A:103:PHE:CG	1:A:200:ARG:NH2	0.76	2.54	15	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:97:ILE:HD13	0.75	1.57	11	4
1:A:93:THR:HG22	1:A:95:ARG:CG	0.75	2.12	15	5
1:A:189:GLU:O	1:A:190:ARG:CB	0.75	2.33	20	16
1:A:24:VAL:HG11	1:A:38:LEU:CD2	0.75	2.11	17	3
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	0.75	2.06	1	7
1:A:90:PHE:CG	1:A:90:PHE:O	0.75	2.40	18	2
1:A:51:SER:OG	1:A:54:ALA:HB3	0.75	1.80	3	2
1:A:166:TRP:N	1:A:166:TRP:CD1	0.75	2.54	10	2
1:A:107:ALA:HB2	1:A:138:THR:HA	0.75	1.56	15	3
1:A:145:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HD13	0.75	2.11	4	12
1:A:55:VAL:O	1:A:59:PHE:CD1	0.74	2.39	13	11
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HA	0.74	2.11	13	2
1:A:103:PHE:O	1:A:103:PHE:CG	0.74	2.39	10	11
1:A:28:LEU:HD12	1:A:50:LEU:HD23	0.74	1.57	10	5
1:A:66:PRO:CG	1:A:77:TYR:CE2	0.74	2.69	20	8
1:A:176:THR:HG23	1:A:193:GLU:HB3	0.74	1.58	15	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:104:TYR:CE2	0.74	2.71	10	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:128:MET:CE	0.74	2.12	20	5
1:A:109:MET:HE2	1:A:117:ARG:HH21	0.74	1.42	12	1
1:A:168:VAL:CG1	1:A:198:LEU:HD22	0.74	2.11	14	2
1:A:168:VAL:HG12	1:A:196:TYR:OH	0.74	1.81	20	1
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ALA:HB2	0.74	1.82	19	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:HG23	1:A:85:TRP:HB2	0.74	1.59	7	6
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:HG2	0.74	1.60	11	2
1:A:135:LEU:HD21	1:A:197:VAL:HG22	0.74	1.59	15	1
1:A:158:LEU:HD13	1:A:196:TYR:CD2	0.73	2.17	2	5
1:A:22:ALA:HB1	1:A:101:ALA:CA	0.73	2.13	7	20
1:A:98:GLY:O	1:A:100:CYS:N	0.73	2.22	18	17
1:A:155:GLN:CG	1:A:196:TYR:CE1	0.73	2.71	4	2
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:HD12	0.73	1.98	16	10
1:A:146:LEU:HG	1:A:188:LEU:HD21	0.73	1.60	6	6
1:A:46:VAL:CG1	1:A:97:ILE:HD13	0.73	2.14	11	4
1:A:35:MET:HE1	1:A:84:ILE:HG13	0.73	1.59	14	1
1:A:168:VAL:CG2	1:A:198:LEU:HB3	0.73	2.12	19	2
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:LEU:HD23	0.73	1.59	14	2
1:A:24:VAL:HG23	1:A:45:VAL:HA	0.73	1.58	8	2
1:A:146:LEU:HD12	1:A:146:LEU:C	0.73	2.08	3	4
1:A:89:PHE:CG	1:A:90:PHE:N	0.73	2.57	19	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:84:ILE:HD12	0.73	1.83	1	2
1:A:13:TRP:CH2	1:A:102:ALA:CB	0.73	2.72	19	19
1:A:177:LEU:HD22	1:A:177:LEU:C	0.73	2.07	15	5
1:A:12:TYR:O	1:A:16:LEU:N	0.73	2.20	12	8
1:A:23:ARG:N	1:A:101:ALA:CB	0.73	2.52	15	20
1:A:162:MET:HE1	1:A:198:LEU:HD22	0.72	1.61	12	2
1:A:177:LEU:HD21	1:A:190:ARG:H	0.72	1.45	11	3
1:A:137:ILE:HG23	1:A:195:VAL:CG2	0.72	2.13	20	2
1:A:168:VAL:HG13	1:A:198:LEU:CD2	0.72	2.14	14	2
1:A:124:LEU:HD13	1:A:128:MET:CG	0.72	2.15	13	15
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:N	0.72	2.18	2	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:142:ASP:OD2	0.72	1.84	19	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:97:ILE:HD13	0.72	2.14	20	6
1:A:159:HIS:O	1:A:163:SER:CB	0.72	2.38	20	20
1:A:25:LEU:HG	1:A:94:ALA:HB1	0.72	1.61	7	12
1:A:162:MET:SD	1:A:166:TRP:CE2	0.72	2.83	10	9
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:HD22	0.72	2.10	11	5
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ALA:CB	0.71	2.38	18	20
1:A:168:VAL:HG23	1:A:196:TYR:CE1	0.71	2.20	15	2
1:A:109:MET:CE	1:A:158:LEU:HD11	0.71	2.11	5	1
1:A:104:TYR:CE2	1:A:135:LEU:CD1	0.71	2.69	10	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:120:TYR:OH	0.71	1.85	13	5
1:A:109:MET:HE1	1:A:136:LEU:CD1	0.71	2.15	5	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ALA:HB2	0.71	1.61	1	3
1:A:35:MET:HG2	1:A:45:VAL:HG11	0.71	1.61	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ILE:HD13	1:A:97:ILE:C	0.71	2.10	19	2
1:A:46:VAL:HG13	1:A:83:GLU:CB	0.71	2.15	9	2
1:A:77:TYR:CD2	1:A:77:TYR:O	0.71	2.43	14	1
1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:ILE:CD1	0.71	2.15	1	10
1:A:76:VAL:HG13	1:A:85:TRP:CB	0.71	2.16	20	9
1:A:189:GLU:O	1:A:190:ARG:CG	0.71	2.38	20	6
1:A:196:TYR:O	1:A:198:LEU:HD23	0.71	1.85	3	4
1:A:89:PHE:O	1:A:89:PHE:CD2	0.71	2.43	11	7
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HD11	0.71	1.63	17	2
1:A:168:VAL:HG13	1:A:198:LEU:HG	0.71	1.62	17	2
1:A:116:MET:HE3	1:A:116:MET:HA	0.71	1.62	18	2
1:A:196:TYR:OH	1:A:198:LEU:HD23	0.71	1.84	20	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:85:TRP:CB	0.70	2.16	2	6
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:CD1	0.70	2.16	10	4
1:A:177:LEU:HD12	1:A:190:ARG:H	0.70	1.44	15	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD1	0.70	2.64	16	12
1:A:137:ILE:HG13	1:A:195:VAL:HG22	0.70	1.62	16	6
1:A:136:LEU:C	1:A:137:ILE:HD13	0.70	2.11	13	4
1:A:27:PRO:O	1:A:28:LEU:C	0.70	2.34	14	18
1:A:85:TRP:CH2	1:A:89:PHE:HA	0.70	2.22	16	20
1:A:28:LEU:HD11	1:A:120:TYR:OH	0.70	1.86	7	3
1:A:137:ILE:HD13	1:A:195:VAL:HB	0.70	1.63	12	2
1:A:8:ASP:OD2	1:A:195:VAL:HG21	0.70	1.86	20	6
1:A:103:PHE:CE1	1:A:134:GLY:HA3	0.70	2.22	1	4
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:CG2	0.70	2.40	11	6
1:A:35:MET:CG	1:A:45:VAL:HG11	0.70	2.17	7	7
1:A:74:PHE:CD1	1:A:88:ASP:CG	0.70	2.70	4	9
1:A:132:CYS:O	1:A:200:ARG:CB	0.70	2.39	15	2
1:A:158:LEU:O	1:A:162:MET:CB	0.69	2.39	19	19
1:A:69:THR:HG22	1:A:76:VAL:CG1	0.69	2.16	8	7
1:A:142:ASP:N	1:A:142:ASP:OD1	0.69	2.24	3	10
1:A:89:PHE:CZ	1:A:127:LEU:HD21	0.69	2.22	8	3
1:A:171:VAL:HG21	1:A:197:VAL:HG23	0.69	1.64	6	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:HG3	0.69	1.63	19	1
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:HD12	0.69	2.12	7	2
1:A:168:VAL:HG22	1:A:198:LEU:CB	0.69	2.16	19	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:139:LEU:N	0.69	2.02	19	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:153:VAL:CG1	0.69	2.18	8	4
1:A:124:LEU:HD21	1:A:128:MET:HE3	0.69	1.61	19	3
1:A:55:VAL:HG23	1:A:59:PHE:CE2	0.69	2.22	13	4
1:A:145:LEU:CD2	1:A:186:ALA:HB1	0.69	2.18	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:VAL:HG13	1:A:195:VAL:C	0.69	2.13	15	2
1:A:109:MET:HE1	1:A:120:TYR:CD1	0.69	2.23	19	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:146:LEU:N	0.69	2.02	5	16
1:A:162:MET:HB3	1:A:168:VAL:HG11	0.69	1.64	5	3
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD12	0.69	2.13	4	5
1:A:19:VAL:HG23	1:A:22:ALA:CB	0.69	2.14	15	6
1:A:117:ARG:HG3	1:A:157:TRP:CH2	0.69	2.22	12	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:200:ARG:NH2	0.69	2.60	15	1
1:A:99:HIS:N	1:A:129:PRO:HB3	0.69	2.02	16	20
1:A:12:TYR:HE2	1:A:171:VAL:HG21	0.69	1.46	12	2
1:A:51:SER:O	1:A:55:VAL:CG1	0.69	2.41	17	7
1:A:26:VAL:HG22	1:A:26:VAL:O	0.69	1.85	17	2
1:A:136:LEU:HB3	1:A:196:TYR:CE2	0.69	2.23	18	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:82:ILE:HG13	0.68	1.63	7	2
1:A:168:VAL:CG2	1:A:196:TYR:CZ	0.68	2.76	15	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:195:VAL:HG22	0.68	2.17	1	5
1:A:49:GLU:CD	1:A:84:ILE:HD12	0.68	2.14	19	1
1:A:22:ALA:HB1	1:A:101:ALA:HA	0.68	1.65	7	20
1:A:74:PHE:CG	1:A:88:ASP:CB	0.68	2.77	8	15
1:A:198:LEU:H	1:A:198:LEU:HD12	0.68	1.49	20	8
1:A:97:ILE:O	1:A:99:HIS:CE1	0.68	2.46	7	1
1:A:196:TYR:CZ	1:A:198:LEU:CD2	0.68	2.76	20	2
1:A:50:LEU:HD21	1:A:89:PHE:CB	0.68	2.18	15	5
1:A:125:GLU:CG	1:A:166:TRP:CE2	0.68	2.77	11	5
1:A:28:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HD23	0.68	1.65	11	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD1	0.68	2.56	3	11
1:A:24:VAL:HG21	1:A:38:LEU:HD13	0.68	1.64	9	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:104:TYR:HB3	0.68	1.64	4	5
1:A:136:LEU:C	1:A:137:ILE:HD12	0.68	2.13	16	5
1:A:6:ASN:ND2	1:A:137:ILE:HD12	0.68	2.03	1	1
1:A:59:PHE:CD1	1:A:59:PHE:N	0.68	2.60	17	6
1:A:157:TRP:CE2	1:A:161:VAL:HG11	0.68	2.24	13	19
1:A:142:ASP:HB3	1:A:188:LEU:HD11	0.68	1.64	15	12
1:A:5:VAL:HG21	1:A:37:TRP:CB	0.68	2.19	4	11
1:A:135:LEU:CD1	1:A:197:VAL:HG22	0.68	2.19	13	4
1:A:168:VAL:HG12	1:A:198:LEU:HD23	0.68	1.65	6	5
1:A:104:TYR:CE1	1:A:135:LEU:CB	0.68	2.77	10	1
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:HG23	0.68	1.65	4	1
1:A:127:LEU:CD1	1:A:127:LEU:C	0.68	2.66	10	8
1:A:12:TYR:CZ	1:A:197:VAL:HG21	0.67	2.24	18	1
1:A:171:VAL:O	1:A:195:VAL:O	0.67	2.11	14	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:CG1	0.67	2.42	1	3
1:A:49:GLU:O	1:A:87:GLY:C	0.67	2.37	17	14
1:A:25:LEU:HD13	1:A:25:LEU:C	0.67	2.14	5	4
1:A:45:VAL:CG1	1:A:82:ILE:HD11	0.67	2.18	9	4
1:A:46:VAL:HG11	1:A:97:ILE:CD1	0.67	2.19	19	2
1:A:165:ASN:OD1	1:A:166:TRP:CD1	0.67	2.47	3	1
1:A:51:SER:HB3	1:A:54:ALA:HB3	0.67	1.66	9	7
1:A:92:LEU:HD22	1:A:97:ILE:HD13	0.67	1.67	20	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:128:MET:CE	0.67	2.72	10	5
1:A:48:ALA:HB2	1:A:85:TRP:CD2	0.67	2.23	20	12
1:A:46:VAL:CG1	1:A:97:ILE:HD12	0.67	2.20	17	2
1:A:162:MET:SD	1:A:166:TRP:CZ2	0.67	2.88	17	7
1:A:92:LEU:CD1	1:A:92:LEU:C	0.67	2.67	20	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:29:CYS:CB	0.67	2.20	17	2
1:A:125:GLU:CD	1:A:166:TRP:CD1	0.67	2.72	19	1
1:A:136:LEU:HD21	1:A:138:THR:CG2	0.67	2.19	18	2
1:A:117:ARG:HB3	1:A:157:TRP:CH2	0.67	2.25	13	18
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:CD2	0.67	2.64	5	16
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:O	0.67	1.88	1	4
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:HG12	0.67	1.67	6	2
1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:ILE:HD12	0.67	1.64	12	3
1:A:27:PRO:CD	1:A:104:TYR:O	0.67	2.43	20	1
1:A:167:GLU:O	1:A:198:LEU:HA	0.67	1.90	19	7
1:A:158:LEU:HD23	1:A:162:MET:CG	0.67	2.20	4	1
1:A:171:VAL:HG22	1:A:172:GLY:N	0.67	2.04	12	3
1:A:178:HIS:CD2	1:A:184:LEU:CD2	0.67	2.77	15	1
1:A:195:VAL:O	1:A:196:TYR:CD1	0.67	2.48	13	14
1:A:103:PHE:CE1	1:A:105:ASP:CG	0.67	2.74	2	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:22:ALA:CB	0.67	2.20	9	6
1:A:92:LEU:HD22	1:A:93:THR:N	0.67	2.05	9	7
1:A:124:LEU:HD13	1:A:128:MET:SD	0.67	2.29	4	3
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:HD21	0.67	1.65	19	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:137:ILE:HD11	0.66	2.26	2	1
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:CD2	0.66	2.19	9	3
1:A:117:ARG:NH1	1:A:157:TRP:CZ3	0.66	2.62	17	2
1:A:171:VAL:HG11	1:A:197:VAL:CG2	0.66	2.20	18	1
1:A:136:LEU:HD22	1:A:137:ILE:H	0.66	1.48	20	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:29:CYS:SG	0.66	2.30	1	1
1:A:160:ARG:HG3	1:A:161:VAL:N	0.66	2.05	1	15
1:A:168:VAL:HG12	1:A:198:LEU:HB3	0.66	1.66	3	12
1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:ILE:HG13	0.66	1.67	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PRO:HB2	1:A:156:THR:HG22	0.66	1.66	13	6
1:A:24:VAL:CG1	1:A:38:LEU:HD13	0.66	2.16	14	3
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:CD1	0.66	2.67	10	11
1:A:30:GLY:C	1:A:35:MET:HE2	0.66	2.15	4	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:104:TYR:CD1	0.66	2.89	5	2
1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ALA:CB	0.66	2.13	20	3
1:A:165:ASN:C	1:A:201:VAL:HG22	0.66	2.14	13	2
1:A:117:ARG:CZ	1:A:153:VAL:HG21	0.66	2.21	17	1
1:A:168:VAL:CB	1:A:196:TYR:CE1	0.66	2.79	20	1
1:A:109:MET:HE1	1:A:136:LEU:HD11	0.66	1.65	5	3
1:A:158:LEU:HD22	1:A:196:TYR:CE2	0.66	2.26	20	1
1:A:89:PHE:O	1:A:89:PHE:CG	0.66	2.47	11	6
1:A:94:ALA:HB3	1:A:127:LEU:HD12	0.66	1.67	4	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:135:LEU:HD23	0.66	1.66	13	2
1:A:146:LEU:CD2	1:A:191:MET:HE1	0.66	2.20	11	1
1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:PRO:HD2	0.66	1.68	18	7
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:88:ASP:O	0.66	2.49	17	18
1:A:107:ALA:HB1	1:A:139:LEU:HD11	0.66	1.68	16	1
1:A:137:ILE:HD13	1:A:195:VAL:HG22	0.66	1.67	11	3
1:A:107:ALA:HB1	1:A:139:LEU:HD21	0.66	1.68	4	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:74:PHE:CZ	0.66	2.78	20	1
1:A:98:GLY:O	1:A:99:HIS:CD2	0.66	2.50	7	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:197:VAL:HG21	0.66	2.26	15	4
1:A:158:LEU:O	1:A:162:MET:N	0.65	2.29	10	11
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:HD11	0.65	1.69	16	3
1:A:24:VAL:HG11	1:A:38:LEU:HD23	0.65	1.67	6	3
1:A:27:PRO:C	1:A:28:LEU:HD23	0.65	2.16	9	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:97:ILE:HD11	0.65	1.67	15	2
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:CB	0.65	2.43	15	18
1:A:189:GLU:O	1:A:190:ARG:HB3	0.65	1.91	20	7
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:CD1	0.65	2.49	14	2
1:A:130:GLN:O	1:A:201:VAL:C	0.65	2.39	15	17
1:A:109:MET:HB3	1:A:117:ARG:CZ	0.65	2.21	16	3
1:A:117:ARG:NE	1:A:153:VAL:HG21	0.65	2.06	17	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:97:ILE:CG2	0.65	2.75	16	5
1:A:28:LEU:HB3	1:A:50:LEU:HD23	0.65	1.67	5	5
1:A:103:PHE:CZ	1:A:134:GLY:HA3	0.65	2.27	12	6
1:A:172:GLY:CA	1:A:195:VAL:HG22	0.65	2.22	14	2
1:A:158:LEU:HD22	1:A:196:TYR:CD2	0.65	2.27	14	1
1:A:95:ARG:N	1:A:127:LEU:O	0.65	2.30	13	19
1:A:157:TRP:CZ2	1:A:161:VAL:HG11	0.65	2.26	13	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:GLY:O	1:A:35:MET:HE2	0.65	1.92	4	1
1:A:158:LEU:HD22	1:A:196:TYR:CZ	0.65	2.27	18	1
1:A:136:LEU:CD1	1:A:162:MET:HE1	0.65	2.22	11	2
1:A:183:GLY:HA2	1:A:191:MET:HE2	0.65	1.66	9	3
1:A:46:VAL:HG11	1:A:97:ILE:CG1	0.65	2.21	4	5
1:A:27:PRO:C	1:A:28:LEU:HD13	0.65	2.16	1	8
1:A:142:ASP:HB3	1:A:146:LEU:HD12	0.65	1.67	18	9
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:CG	0.65	2.50	8	7
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:CD2	0.65	2.56	14	4
1:A:196:TYR:CG	1:A:196:TYR:O	0.65	2.50	18	1
1:A:49:GLU:O	1:A:51:SER:N	0.64	2.31	20	4
1:A:74:PHE:CD2	1:A:88:ASP:CG	0.64	2.75	2	3
1:A:55:VAL:O	1:A:59:PHE:CE1	0.64	2.50	13	2
1:A:121:VAL:HG22	1:A:162:MET:CE	0.64	2.21	17	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:68:ILE:HG21	0.64	2.27	3	3
1:A:35:MET:HA	1:A:38:LEU:HD12	0.64	1.67	13	2
1:A:98:GLY:C	1:A:99:HIS:CG	0.64	2.75	7	2
1:A:172:GLY:N	1:A:195:VAL:HG22	0.64	2.07	14	2
1:A:89:PHE:CG	1:A:89:PHE:O	0.64	2.50	20	1
1:A:141:TYR:O	1:A:142:ASP:C	0.64	2.41	2	20
1:A:173:GLY:O	1:A:193:GLU:O	0.64	2.16	19	20
1:A:128:MET:HB3	1:A:129:PRO:HD2	0.64	1.70	16	18
1:A:161:VAL:C	1:A:163:SER:H	0.64	2.00	19	15
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:CD1	0.64	2.71	8	10
1:A:158:LEU:CD1	1:A:196:TYR:CD2	0.64	2.81	2	2
1:A:59:PHE:CE1	1:A:77:TYR:CD2	0.64	2.85	17	7
1:A:109:MET:HB3	1:A:117:ARG:NE	0.64	2.08	18	2
1:A:162:MET:CE	1:A:166:TRP:CH2	0.64	2.80	7	4
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:N	0.63	2.07	20	6
1:A:117:ARG:HG2	1:A:157:TRP:CH2	0.63	2.28	12	1
1:A:196:TYR:CZ	1:A:198:LEU:HG	0.63	2.29	20	1
1:A:77:TYR:O	1:A:85:TRP:HA	0.63	1.93	7	19
1:A:98:GLY:O	1:A:99:HIS:CG	0.63	2.51	18	2
1:A:26:VAL:HG23	1:A:29:CYS:HB3	0.63	1.68	17	2
1:A:23:ARG:H	1:A:101:ALA:HB2	0.63	1.51	17	20
1:A:136:LEU:HD12	1:A:162:MET:HE1	0.63	1.70	11	3
1:A:140:GLU:O	1:A:141:TYR:C	0.63	2.42	16	19
1:A:160:ARG:HG2	1:A:161:VAL:HG12	0.63	1.70	5	13
1:A:28:LEU:CD2	1:A:89:PHE:CD1	0.63	2.80	7	1
1:A:34:ASP:CG	1:A:104:TYR:CG	0.63	2.76	8	4
1:A:125:GLU:HG2	1:A:166:TRP:CE2	0.63	2.28	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:GLU:O	1:A:55:VAL:HG22	0.63	1.93	16	3
1:A:183:GLY:HA2	1:A:188:LEU:HD13	0.63	1.71	14	3
1:A:10:GLN:O	1:A:14:SER:CB	0.63	2.47	10	20
1:A:124:LEU:HD22	1:A:128:MET:SD	0.63	2.32	4	1
1:A:109:MET:HG3	1:A:117:ARG:CZ	0.63	2.23	12	2
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CD2	0.63	2.24	15	3
1:A:170:LYS:C	1:A:171:VAL:HG12	0.63	2.17	18	10
1:A:34:ASP:OD1	1:A:104:TYR:CE2	0.63	2.51	7	2
1:A:34:ASP:CG	1:A:104:TYR:CD1	0.63	2.77	13	1
1:A:107:ALA:CB	1:A:139:LEU:HD21	0.63	2.24	4	1
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HD21	0.63	1.71	5	4
1:A:33:GLN:HG2	1:A:181:ALA:HB2	0.63	1.71	7	1
1:A:103:PHE:O	1:A:134:GLY:HA2	0.62	1.93	10	8
1:A:117:ARG:NH2	1:A:120:TYR:CG	0.62	2.68	5	1
1:A:100:CYS:HA	1:A:132:CYS:SG	0.62	2.33	6	5
1:A:97:ILE:C	1:A:97:ILE:CD1	0.62	2.71	10	4
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:CD1	0.62	2.62	11	4
1:A:125:GLU:CD	1:A:166:TRP:CG	0.62	2.77	19	1
1:A:196:TYR:CZ	1:A:198:LEU:CG	0.62	2.82	20	1
1:A:51:SER:OG	1:A:54:ALA:HB2	0.62	1.93	11	3
1:A:124:LEU:CD2	1:A:127:LEU:HD11	0.62	2.24	8	9
1:A:176:THR:O	1:A:176:THR:CG2	0.62	2.47	19	14
1:A:12:TYR:CE2	1:A:171:VAL:HG13	0.62	2.29	6	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:104:TYR:N	0.62	2.67	9	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:59:PHE:CZ	0.62	2.28	13	2
1:A:51:SER:HB2	1:A:54:ALA:HB3	0.62	1.70	15	2
1:A:109:MET:SD	1:A:120:TYR:CD1	0.62	2.92	19	1
1:A:136:LEU:HD11	1:A:138:THR:HG23	0.62	1.71	20	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:C	0.62	2.19	1	4
1:A:171:VAL:CG2	1:A:172:GLY:N	0.62	2.63	2	18
1:A:37:TRP:CH2	1:A:41:GLN:NE2	0.62	2.67	4	1
1:A:168:VAL:HG12	1:A:196:TYR:HB3	0.62	1.70	9	2
1:A:26:VAL:CG1	1:A:29:CYS:HB3	0.62	2.23	3	1
1:A:103:PHE:O	1:A:103:PHE:CD1	0.62	2.52	10	2
1:A:125:GLU:CD	1:A:166:TRP:CE2	0.62	2.78	19	1
1:A:162:MET:SD	1:A:198:LEU:CD2	0.62	2.88	11	4
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLY:HA3	0.62	1.95	16	2
1:A:168:VAL:HG13	1:A:198:LEU:CG	0.62	2.23	17	2
1:A:162:MET:O	1:A:166:TRP:NE1	0.62	2.33	15	14
1:A:12:TYR:CE2	1:A:171:VAL:CG1	0.62	2.83	6	1
1:A:65:GLN:N	1:A:66:PRO:CD	0.62	2.62	14	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:PHE:CE1	1:A:88:ASP:CG	0.62	2.78	5	7
1:A:66:PRO:CG	1:A:77:TYR:CE1	0.62	2.83	19	11
1:A:169:THR:C	1:A:196:TYR:CD1	0.62	2.77	3	2
1:A:125:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CE2	0.62	2.30	6	6
1:A:135:LEU:HD13	1:A:197:VAL:HG23	0.62	1.72	11	2
1:A:124:LEU:O	1:A:127:LEU:HD12	0.61	1.95	5	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:26:VAL:H	0.61	1.54	5	2
1:A:162:MET:HE1	1:A:198:LEU:CD1	0.61	2.24	5	3
1:A:50:LEU:CD2	1:A:89:PHE:HB3	0.61	2.25	11	13
1:A:29:CYS:SG	1:A:29:CYS:O	0.61	2.58	16	3
1:A:117:ARG:HD2	1:A:157:TRP:CH2	0.61	2.30	7	1
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG13	0.61	1.93	16	7
1:A:22:ALA:CB	1:A:101:ALA:CB	0.61	2.75	18	20
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:CB	0.61	2.47	8	10
1:A:136:LEU:HB3	1:A:196:TYR:CD2	0.61	2.30	18	1
1:A:158:LEU:HD22	1:A:196:TYR:HE2	0.61	1.54	20	1
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:HB3	0.61	1.94	17	2
1:A:136:LEU:HD11	1:A:138:THR:CG2	0.61	2.25	20	1
1:A:107:ALA:C	1:A:110:ILE:CD1	0.61	2.72	6	13
1:A:46:VAL:CG1	1:A:97:ILE:HD11	0.61	2.26	4	1
1:A:125:GLU:CD	1:A:166:TRP:CD2	0.61	2.78	19	1
1:A:158:LEU:O	1:A:162:MET:HB2	0.61	1.95	17	19
1:A:103:PHE:CE2	1:A:134:GLY:HA3	0.61	2.31	16	11
1:A:74:PHE:CE1	1:A:88:ASP:OD2	0.61	2.54	7	4
1:A:59:PHE:CZ	1:A:68:ILE:HD12	0.61	2.31	14	9
1:A:74:PHE:CE1	1:A:88:ASP:OD1	0.61	2.54	10	7
1:A:97:ILE:C	1:A:99:HIS:CE1	0.61	2.79	7	1
1:A:23:ARG:CG	1:A:97:ILE:O	0.61	2.49	20	16
1:A:166:TRP:CD1	1:A:166:TRP:N	0.61	2.69	18	18
1:A:178:HIS:HA	1:A:184:LEU:HD21	0.61	1.73	3	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:GLY:CA	0.61	2.25	17	3
1:A:74:PHE:CE2	1:A:88:ASP:OD2	0.61	2.53	10	5
1:A:136:LEU:HD22	1:A:138:THR:HG23	0.61	1.70	14	1
1:A:23:ARG:CB	1:A:97:ILE:O	0.61	2.48	7	15
1:A:151:PHE:O	1:A:152:SER:C	0.61	2.43	18	17
1:A:104:TYR:CZ	1:A:135:LEU:CB	0.61	2.84	10	1
1:A:50:LEU:HD13	1:A:74:PHE:CZ	0.61	2.31	20	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:CG	0.60	2.44	19	14
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:92:LEU:HG	0.60	2.31	20	12
1:A:23:ARG:NH1	1:A:44:HIS:CG	0.60	2.69	11	2
1:A:24:VAL:HG21	1:A:38:LEU:HG	0.60	1.72	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:MET:HE1	1:A:120:TYR:HD1	0.60	1.56	19	1
1:A:142:ASP:CB	1:A:146:LEU:HD12	0.60	2.26	1	8
1:A:139:LEU:CD2	1:A:191:MET:CE	0.60	2.79	7	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:LEU:CD2	0.60	2.26	14	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:77:TYR:HB2	0.60	2.31	6	12
1:A:77:TYR:O	1:A:84:ILE:O	0.60	2.19	20	13
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:CG2	0.60	2.48	17	5
1:A:124:LEU:HD22	1:A:128:MET:HG2	0.60	1.73	19	1
1:A:158:LEU:HD23	1:A:162:MET:CE	0.60	2.18	10	1
1:A:188:LEU:HB3	1:A:191:MET:HE3	0.60	1.73	20	1
1:A:34:ASP:CG	1:A:104:TYR:CD2	0.60	2.80	14	4
1:A:198:LEU:HD23	1:A:198:LEU:N	0.60	2.11	18	3
1:A:158:LEU:HD23	1:A:168:VAL:HG11	0.60	1.72	19	2
1:A:27:PRO:HD2	1:A:104:TYR:O	0.60	1.97	7	11
1:A:28:LEU:CD1	1:A:89:PHE:CD1	0.60	2.84	1	1
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:89:PHE:HA	0.60	2.32	14	12
1:A:102:ALA:CB	1:A:133:SER:O	0.60	2.45	1	14
1:A:94:ALA:CB	1:A:127:LEU:CD1	0.60	2.79	4	1
1:A:125:GLU:HG2	1:A:166:TRP:CD2	0.60	2.32	12	3
1:A:119:ARG:CD	1:A:119:ARG:C	0.60	2.75	12	1
1:A:124:LEU:HD22	1:A:127:LEU:HD11	0.60	1.72	1	8
1:A:34:ASP:CG	1:A:104:TYR:CZ	0.59	2.80	4	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:195:VAL:HG22	0.59	1.74	7	2
1:A:125:GLU:CG	1:A:166:TRP:CD2	0.59	2.84	11	5
1:A:48:ALA:CB	1:A:85:TRP:CE2	0.59	2.81	8	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:191:MET:SD	0.59	2.36	14	1
1:A:168:VAL:HA	1:A:196:TYR:HE1	0.59	1.57	20	1
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HD11	0.59	1.73	13	7
1:A:32:SER:HB3	1:A:181:ALA:HB2	0.59	1.73	15	1
1:A:35:MET:HE3	1:A:36:SER:HB2	0.59	1.74	17	1
1:A:49:GLU:O	1:A:87:GLY:O	0.59	2.19	11	17
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:HD22	0.59	2.12	2	6
1:A:154:PRO:O	1:A:157:TRP:N	0.59	2.34	16	13
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:LYS:HD2	0.59	1.74	4	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:86:CYS:SG	0.59	2.38	14	7
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:CD2	0.59	2.55	8	7
1:A:145:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HG	0.59	2.25	7	4
1:A:161:VAL:HG22	1:A:162:MET:N	0.59	2.11	12	8
1:A:145:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HD22	0.59	1.75	15	1
1:A:127:LEU:HD12	1:A:128:MET:N	0.59	2.13	17	13
1:A:104:TYR:CZ	1:A:137:ILE:HD11	0.59	2.33	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD2	0.59	2.65	16	2
1:A:117:ARG:HH11	1:A:153:VAL:HG23	0.59	1.56	11	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:191:MET:HG3	0.59	1.75	20	1
1:A:29:CYS:O	1:A:30:GLY:C	0.59	2.45	20	7
1:A:197:VAL:CG1	1:A:197:VAL:O	0.59	2.50	9	2
1:A:104:TYR:CZ	1:A:137:ILE:CD1	0.59	2.82	16	3
1:A:124:LEU:O	1:A:128:MET:CG	0.59	2.50	5	10
1:A:9:LEU:O	1:A:13:TRP:HB2	0.59	1.97	10	16
1:A:69:THR:HG22	1:A:76:VAL:HG13	0.59	1.74	5	7
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASP:CB	0.59	2.51	20	1
1:A:162:MET:SD	1:A:198:LEU:HD23	0.59	2.38	1	3
1:A:142:ASP:OD2	1:A:146:LEU:HD23	0.59	1.97	20	4
1:A:74:PHE:CZ	1:A:88:ASP:OD2	0.59	2.56	18	3
1:A:103:PHE:CD1	1:A:103:PHE:C	0.59	2.81	9	4
1:A:74:PHE:CZ	1:A:88:ASP:OD1	0.59	2.56	2	2
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:CD2	0.59	2.66	9	4
1:A:139:LEU:HD22	1:A:139:LEU:H	0.59	1.55	4	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:82:ILE:CD1	0.59	2.27	8	5
1:A:139:LEU:CD2	1:A:191:MET:HE3	0.59	2.27	7	1
1:A:108:ALA:N	1:A:110:ILE:CD1	0.59	2.66	10	2
1:A:145:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HD22	0.59	2.27	15	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:196:TYR:CE2	0.59	2.56	19	1
1:A:168:VAL:HA	1:A:196:TYR:CE1	0.59	2.33	20	1
1:A:112:LEU:HD23	1:A:116:MET:HG3	0.59	1.72	16	1
1:A:196:TYR:OH	1:A:198:LEU:CD1	0.59	2.47	18	1
1:A:183:GLY:CA	1:A:191:MET:HE2	0.58	2.28	2	4
1:A:166:TRP:CE3	1:A:198:LEU:HD12	0.58	2.33	2	4
1:A:136:LEU:HD13	1:A:158:LEU:HD21	0.58	1.75	16	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:89:PHE:CD1	0.58	2.32	7	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:135:LEU:HB2	0.58	2.32	10	1
1:A:136:LEU:CD2	1:A:138:THR:HG23	0.58	2.28	18	2
1:A:117:ARG:O	1:A:121:VAL:HB	0.58	1.97	17	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:106:ARG:N	0.58	2.76	20	1
1:A:59:PHE:N	1:A:59:PHE:CD1	0.58	2.69	7	14
1:A:100:CYS:SG	1:A:131:ALA:HB3	0.58	2.38	14	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:87:GLY:O	0.58	2.56	20	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:ASN:O	0.58	2.21	16	15
1:A:34:ASP:OD1	1:A:104:TYR:CG	0.58	2.56	1	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:87:GLY:HA2	0.58	1.74	16	5
1:A:117:ARG:HB3	1:A:157:TRP:CZ2	0.58	2.34	13	6
1:A:94:ALA:H	1:A:127:LEU:HD13	0.58	1.59	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:MET:O	1:A:119:ARG:HG3	0.58	1.98	12	2
1:A:118:GLU:HG2	1:A:161:VAL:HG21	0.58	1.75	16	11
1:A:161:VAL:C	1:A:163:SER:N	0.58	2.62	17	19
1:A:74:PHE:CD2	1:A:88:ASP:OD2	0.58	2.56	3	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:CD2	0.58	2.33	10	2
1:A:66:PRO:HG3	1:A:77:TYR:CE2	0.58	2.32	20	3
1:A:5:VAL:O	1:A:6:ASN:C	0.58	2.45	17	20
1:A:132:CYS:O	1:A:200:ARG:HB3	0.58	1.98	16	9
1:A:26:VAL:HG23	1:A:47:GLY:HA3	0.58	1.73	10	5
1:A:13:TRP:CZ3	1:A:104:TYR:CE1	0.58	2.92	10	1
1:A:66:PRO:HG2	1:A:77:TYR:CD2	0.58	2.33	13	3
1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:PHE:CE2	0.58	2.34	2	9
1:A:177:LEU:HD12	1:A:189:GLU:HA	0.58	1.73	5	2
1:A:136:LEU:HD22	1:A:158:LEU:HD21	0.58	1.74	13	1
1:A:109:MET:HB3	1:A:117:ARG:CG	0.58	2.29	18	1
1:A:198:LEU:HD12	1:A:198:LEU:N	0.58	2.11	20	3
1:A:135:LEU:HG	1:A:197:VAL:HG22	0.58	1.74	2	1
1:A:171:VAL:CG2	1:A:172:GLY:H	0.58	2.11	12	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:128:MET:HE1	0.58	1.76	10	2
1:A:75:LYS:O	1:A:87:GLY:HA3	0.58	1.98	19	13
1:A:7:LYS:O	1:A:11:GLN:CB	0.58	2.52	10	11
1:A:165:ASN:OD1	1:A:166:TRP:CG	0.58	2.57	3	1
1:A:109:MET:SD	1:A:136:LEU:CD2	0.58	2.92	16	2
1:A:159:HIS:O	1:A:163:SER:HB3	0.58	1.98	20	19
1:A:49:GLU:OE2	1:A:84:ILE:HG23	0.58	1.99	7	1
1:A:94:ALA:CB	1:A:127:LEU:HD13	0.58	2.25	9	3
1:A:110:ILE:HD12	1:A:110:ILE:C	0.58	2.23	9	2
1:A:104:TYR:CZ	1:A:135:LEU:HB3	0.58	2.34	10	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:50:LEU:CD2	0.58	2.29	11	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:139:LEU:H	0.58	1.58	16	1
1:A:103:PHE:CD2	1:A:134:GLY:CA	0.58	2.87	6	4
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HD13	0.58	1.76	4	5
1:A:142:ASP:OD2	1:A:191:MET:HE3	0.58	1.98	14	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:LEU:HD23	0.58	2.28	19	1
1:A:155:GLN:HB3	1:A:196:TYR:CE1	0.57	2.33	16	2
1:A:88:ASP:OD1	1:A:90:PHE:CD1	0.57	2.57	18	2
1:A:46:VAL:HG11	1:A:97:ILE:HG12	0.57	1.75	13	1
1:A:57:ARG:C	1:A:57:ARG:CD	0.57	2.77	19	3
1:A:66:PRO:HG2	1:A:77:TYR:CE2	0.57	2.34	13	3
1:A:55:VAL:CG1	1:A:59:PHE:CZ	0.57	2.85	12	1
1:A:109:MET:HE1	1:A:136:LEU:HG	0.57	1.74	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:H	0.57	2.17	11	20
1:A:103:PHE:CD1	1:A:134:GLY:CA	0.57	2.87	7	2
1:A:125:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CD2	0.57	2.33	19	2
1:A:74:PHE:CB	1:A:88:ASP:CG	0.57	2.78	13	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:29:CYS:SG	0.57	2.92	11	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:50:LEU:HG	0.57	1.76	8	2
1:A:162:MET:SD	1:A:166:TRP:CD2	0.57	2.97	12	1
1:A:124:LEU:HD12	1:A:166:TRP:CZ3	0.57	2.34	15	2
1:A:142:ASP:O	1:A:143:GLN:CB	0.57	2.52	7	5
1:A:9:LEU:O	1:A:13:TRP:CB	0.57	2.53	15	8
1:A:142:ASP:OD1	1:A:142:ASP:N	0.57	2.37	20	5
1:A:128:MET:SD	1:A:129:PRO:CD	0.57	2.92	16	19
1:A:74:PHE:CG	1:A:88:ASP:CG	0.57	2.83	10	9
1:A:155:GLN:HG2	1:A:196:TYR:CE1	0.57	2.34	16	2
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:HG22	0.57	2.00	11	2
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD1	0.57	2.77	1	6
1:A:74:PHE:CG	1:A:88:ASP:HB3	0.57	2.34	19	10
1:A:13:TRP:CD1	1:A:37:TRP:CZ3	0.57	2.92	10	4
1:A:107:ALA:CB	1:A:139:LEU:CD1	0.57	2.82	13	5
1:A:171:VAL:HG22	1:A:195:VAL:CG1	0.57	2.29	20	4
1:A:26:VAL:HA	1:A:104:TYR:O	0.57	2.00	10	3
1:A:188:LEU:HD22	1:A:191:MET:SD	0.57	2.40	14	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:LYS:CD	0.57	2.30	12	2
1:A:106:ARG:O	1:A:106:ARG:NH1	0.57	2.37	11	1
1:A:49:GLU:CD	1:A:84:ILE:CD1	0.57	2.78	19	1
1:A:109:MET:CE	1:A:136:LEU:HD11	0.57	2.29	16	6
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:CG1	0.57	2.52	17	4
1:A:135:LEU:HD12	1:A:196:TYR:O	0.56	2.00	13	3
1:A:27:PRO:O	1:A:29:CYS:N	0.56	2.39	14	14
1:A:159:HIS:O	1:A:163:SER:HB2	0.56	2.00	18	18
1:A:18:VAL:O	1:A:19:VAL:C	0.56	2.48	15	17
1:A:119:ARG:O	1:A:123:HIS:CD2	0.56	2.59	20	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:86:CYS:C	0.56	2.78	20	2
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:H	0.56	1.61	9	1
1:A:171:VAL:HG12	1:A:196:TYR:CA	0.56	2.27	14	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:135:LEU:HB3	0.56	2.35	10	1
1:A:188:LEU:HB3	1:A:191:MET:HG3	0.56	1.77	15	1
1:A:197:VAL:C	1:A:198:LEU:CD2	0.56	2.77	18	1
1:A:109:MET:HE3	1:A:120:TYR:CE1	0.56	2.35	1	1
1:A:119:ARG:O	1:A:123:HIS:CG	0.56	2.59	20	5
1:A:157:TRP:O	1:A:160:ARG:HG2	0.56	2.00	4	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD23	0.56	2.16	16	2
1:A:28:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HG	0.56	1.77	9	1
1:A:162:MET:HG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.56	2.36	13	7
1:A:51:SER:HG	1:A:54:ALA:HB3	0.56	1.58	3	1
1:A:101:ALA:C	1:A:132:CYS:HB2	0.56	2.26	19	8
1:A:136:LEU:CD2	1:A:138:THR:CG2	0.56	2.83	8	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:CE	0.56	2.30	18	1
1:A:27:PRO:CG	1:A:104:TYR:O	0.56	2.53	20	1
1:A:139:LEU:CB	1:A:142:ASP:OD2	0.56	2.54	2	5
1:A:192:ASP:OD1	1:A:193:GLU:N	0.56	2.39	14	3
1:A:162:MET:HE2	1:A:166:TRP:CZ3	0.56	2.35	14	4
1:A:121:VAL:HG12	1:A:122:GLN:N	0.56	2.16	17	1
1:A:129:PRO:O	1:A:200:ARG:NE	0.56	2.38	9	6
1:A:110:ILE:HG21	1:A:138:THR:HB	0.56	1.78	18	4
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:HE1	0.56	1.61	6	1
1:A:105:ASP:OD2	1:A:136:LEU:HD12	0.56	2.01	6	1
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:HD3	0.56	1.78	9	1
1:A:117:ARG:HH21	1:A:121:VAL:HG12	0.56	1.61	12	1
1:A:162:MET:CE	1:A:198:LEU:CD1	0.56	2.84	14	3
1:A:124:LEU:O	1:A:128:MET:N	0.55	2.39	9	15
1:A:128:MET:SD	1:A:129:PRO:HD2	0.55	2.41	5	18
1:A:144:ALA:O	1:A:145:LEU:HB3	0.55	2.01	15	16
1:A:12:TYR:CE2	1:A:171:VAL:CG2	0.55	2.89	4	3
1:A:122:GLN:CG	1:A:123:HIS:N	0.55	2.69	6	20
1:A:160:ARG:CG	1:A:161:VAL:HG12	0.55	2.31	13	17
1:A:103:PHE:CD1	1:A:103:PHE:N	0.55	2.74	12	5
1:A:92:LEU:HD22	1:A:93:THR:H	0.55	1.60	4	1
1:A:109:MET:O	1:A:117:ARG:CD	0.55	2.54	15	5
1:A:27:PRO:C	1:A:28:LEU:HG	0.55	2.26	7	5
1:A:89:PHE:HZ	1:A:127:LEU:HD21	0.55	1.59	8	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:139:LEU:N	0.55	2.14	7	1
1:A:50:LEU:HA	1:A:87:GLY:O	0.55	2.02	16	6
1:A:188:LEU:O	1:A:190:ARG:N	0.55	2.40	7	4
1:A:77:TYR:CG	1:A:77:TYR:O	0.55	2.59	6	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:197:VAL:HG21	0.55	2.37	1	2
1:A:77:TYR:O	1:A:77:TYR:CG	0.55	2.59	8	12
1:A:139:LEU:HD23	1:A:142:ASP:OD1	0.55	2.00	3	1
1:A:95:ARG:CD	1:A:128:MET:O	0.55	2.55	5	5
1:A:124:LEU:HD22	1:A:128:MET:CG	0.55	2.32	19	1
1:A:4:GLU:O	1:A:4:GLU:CG	0.55	2.55	11	11
1:A:32:SER:O	1:A:36:SER:CB	0.55	2.55	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:PHE:CG	1:A:88:ASP:HB2	0.55	2.37	20	6
1:A:71:GLN:CG	1:A:71:GLN:O	0.55	2.54	12	3
1:A:158:LEU:CD1	1:A:196:TYR:CE2	0.55	2.89	2	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:PHE:CD1	0.55	2.59	5	3
1:A:188:LEU:O	1:A:189:GLU:C	0.55	2.48	15	7
1:A:162:MET:HE2	1:A:166:TRP:CE2	0.55	2.36	7	1
1:A:64:GLU:O	1:A:65:GLN:CB	0.55	2.54	14	17
1:A:175:ASP:CB	1:A:191:MET:C	0.55	2.79	13	2
1:A:109:MET:SD	1:A:136:LEU:CD1	0.55	2.95	16	3
1:A:134:GLY:O	1:A:198:LEU:HD12	0.55	2.01	9	3
1:A:124:LEU:O	1:A:128:MET:HG2	0.55	2.01	15	10
1:A:103:PHE:CE1	1:A:105:ASP:HB2	0.55	2.36	9	5
1:A:89:PHE:CD1	1:A:89:PHE:C	0.55	2.84	8	2
1:A:124:LEU:HD12	1:A:166:TRP:HZ3	0.55	1.61	13	2
1:A:49:GLU:OE2	1:A:84:ILE:HD12	0.55	2.02	19	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:139:LEU:C	0.55	2.27	3	1
1:A:34:ASP:HB3	1:A:104:TYR:CE2	0.55	2.37	9	3
1:A:110:ILE:C	1:A:110:ILE:CD1	0.55	2.80	9	1
1:A:93:THR:C	1:A:95:ARG:N	0.54	2.65	14	20
1:A:141:TYR:O	1:A:142:ASP:O	0.54	2.25	18	17
1:A:169:THR:O	1:A:196:TYR:HA	0.54	2.01	19	11
1:A:135:LEU:HD21	1:A:195:VAL:CG1	0.54	2.32	10	2
1:A:124:LEU:CD1	1:A:128:MET:SD	0.54	2.95	4	1
1:A:132:CYS:HB2	1:A:200:ARG:CZ	0.54	2.32	6	1
1:A:48:ALA:HB2	1:A:85:TRP:NE1	0.54	2.16	8	2
1:A:6:ASN:OD1	1:A:137:ILE:HG21	0.54	2.03	15	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:HB	0.54	1.80	15	1
1:A:109:MET:HG3	1:A:153:VAL:HG21	0.54	1.78	16	1
1:A:136:LEU:CD1	1:A:138:THR:HG23	0.54	2.31	20	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:50:LEU:HD23	0.54	2.31	11	1
1:A:157:TRP:O	1:A:161:VAL:HG12	0.54	2.02	10	7
1:A:188:LEU:O	1:A:189:GLU:CG	0.54	2.55	1	8
1:A:34:ASP:HB2	1:A:104:TYR:CE2	0.54	2.37	8	2
1:A:103:PHE:N	1:A:200:ARG:HH22	0.54	2.00	6	1
1:A:125:GLU:OE2	1:A:166:TRP:CD1	0.54	2.59	19	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:97:ILE:CD1	0.54	2.85	20	1
1:A:51:SER:OG	1:A:54:ALA:CB	0.54	2.56	11	3
1:A:74:PHE:CB	1:A:88:ASP:HB3	0.54	2.32	6	5
1:A:146:LEU:HA	1:A:186:ALA:HB1	0.54	1.80	4	5
1:A:95:ARG:CB	1:A:127:LEU:O	0.54	2.56	3	1
1:A:13:TRP:HH2	1:A:102:ALA:HB3	0.54	1.55	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:LEU:CG	1:A:188:LEU:HD13	0.54	2.33	4	10
1:A:25:LEU:HD22	1:A:26:VAL:N	0.54	2.16	7	3
1:A:103:PHE:CD2	1:A:134:GLY:HA3	0.54	2.38	6	4
1:A:29:CYS:O	1:A:31:LYS:N	0.54	2.41	20	4
1:A:157:TRP:HE3	1:A:158:LEU:HD12	0.54	1.62	13	2
1:A:140:GLU:OE2	1:A:194:HIS:CD2	0.54	2.61	7	1
1:A:103:PHE:CE1	1:A:134:GLY:N	0.54	2.76	12	2
1:A:177:LEU:CD2	1:A:191:MET:SD	0.54	2.96	14	1
1:A:8:ASP:O	1:A:12:TYR:N	0.54	2.38	3	11
1:A:145:LEU:CD1	1:A:188:LEU:CD1	0.54	2.82	13	10
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:CD1	0.54	2.80	3	3
1:A:26:VAL:O	1:A:47:GLY:CA	0.54	2.55	5	1
1:A:117:ARG:NH2	1:A:120:TYR:CD1	0.54	2.75	5	2
1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:ILE:HG12	0.54	1.78	9	1
1:A:13:TRP:CE3	1:A:104:TYR:CE1	0.54	2.95	10	1
1:A:114:ALA:O	1:A:117:ARG:N	0.54	2.41	16	6
1:A:101:ALA:O	1:A:132:CYS:HA	0.54	2.02	15	11
1:A:168:VAL:HB	1:A:196:TYR:CE2	0.54	2.38	4	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:76:VAL:HB	0.54	1.77	10	4
1:A:74:PHE:CD2	1:A:88:ASP:HB3	0.54	2.37	12	1
1:A:104:TYR:CE2	1:A:137:ILE:CD1	0.54	2.90	18	1
1:A:125:GLU:OE1	1:A:166:TRP:NE1	0.54	2.41	19	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:LEU:CD2	0.54	2.85	19	1
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:N	0.54	2.75	20	19
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:HG23	0.54	2.02	12	6
1:A:107:ALA:C	1:A:110:ILE:HD12	0.54	2.27	6	7
1:A:157:TRP:CE3	1:A:158:LEU:HD12	0.54	2.38	6	3
1:A:178:HIS:O	1:A:179:SER:C	0.54	2.50	15	2
1:A:166:TRP:H	1:A:166:TRP:CD1	0.54	2.20	13	2
1:A:66:PRO:HG3	1:A:77:TYR:CE1	0.54	2.37	19	6
1:A:104:TYR:CE1	1:A:137:ILE:HD13	0.54	2.38	5	2
1:A:134:GLY:C	1:A:198:LEU:HD12	0.54	2.27	6	7
1:A:13:TRP:CH2	1:A:24:VAL:HG13	0.54	2.38	18	4
1:A:139:LEU:HD23	1:A:191:MET:SD	0.54	2.43	13	2
1:A:195:VAL:C	1:A:196:TYR:CD1	0.54	2.86	14	5
1:A:99:HIS:N	1:A:129:PRO:HG3	0.54	2.18	15	1
1:A:196:TYR:CE1	1:A:198:LEU:CG	0.54	2.89	20	1
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:GLY:N	0.54	2.18	6	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:162:MET:HE2	0.54	2.32	10	1
1:A:125:GLU:OE2	1:A:165:ASN:CB	0.54	2.55	19	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:197:VAL:HG21	0.53	2.38	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:LEU:CD2	1:A:162:MET:SD	0.53	2.96	3	8
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:CD	0.53	2.32	9	1
1:A:109:MET:HB2	1:A:117:ARG:NH2	0.53	2.17	19	2
1:A:26:VAL:HB	1:A:29:CYS:CB	0.53	2.33	18	1
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:HG22	0.53	2.02	14	16
1:A:161:VAL:O	1:A:163:SER:N	0.53	2.42	20	18
1:A:135:LEU:CD2	1:A:195:VAL:CG1	0.53	2.87	6	3
1:A:71:GLN:NE2	1:A:91:ALA:HB2	0.53	2.18	4	2
1:A:158:LEU:HD23	1:A:162:MET:SD	0.53	2.43	4	2
1:A:95:ARG:CG	1:A:128:MET:O	0.53	2.57	5	4
1:A:121:VAL:HG21	1:A:161:VAL:CG2	0.53	2.34	10	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:GLU:H	0.53	1.64	6	6
1:A:103:PHE:CZ	1:A:105:ASP:HB2	0.53	2.38	9	2
1:A:198:LEU:HD12	1:A:198:LEU:H	0.53	1.63	6	1
1:A:106:ARG:C	1:A:106:ARG:HD2	0.53	2.29	11	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:PHE:HB2	0.53	1.80	17	2
1:A:13:TRP:HH2	1:A:24:VAL:HG13	0.53	1.63	18	2
1:A:105:ASP:CG	1:A:136:LEU:CD2	0.53	2.81	19	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:13:TRP:CD1	0.53	2.39	1	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:104:TYR:CE1	0.53	2.89	6	2
1:A:121:VAL:HG21	1:A:161:VAL:HG22	0.53	1.80	3	4
1:A:121:VAL:O	1:A:166:TRP:CZ2	0.53	2.61	8	7
1:A:50:LEU:HD21	1:A:89:PHE:H	0.53	1.63	7	2
1:A:139:LEU:CD2	1:A:142:ASP:OD2	0.53	2.56	8	2
1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:OE1	0.53	2.55	15	2
1:A:25:LEU:HD22	1:A:94:ALA:HB1	0.53	1.80	10	2
1:A:46:VAL:CG2	1:A:97:ILE:HD13	0.53	2.33	9	2
1:A:103:PHE:CE1	1:A:105:ASP:CB	0.53	2.91	9	1
1:A:105:ASP:C	1:A:105:ASP:OD1	0.53	2.51	9	2
1:A:125:GLU:HG2	1:A:166:TRP:CE3	0.53	2.38	12	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:157:TRP:CZ2	0.53	2.92	16	1
1:A:200:ARG:HH11	1:A:201:VAL:N	0.53	2.02	10	2
1:A:64:GLU:O	1:A:65:GLN:CG	0.53	2.57	14	9
1:A:28:LEU:HD13	1:A:28:LEU:H	0.53	1.58	8	3
1:A:51:SER:O	1:A:55:VAL:HG23	0.53	2.04	12	2
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:HD12	0.53	1.79	5	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:137:ILE:HG13	0.53	2.39	15	3
1:A:121:VAL:O	1:A:125:GLU:CG	0.53	2.57	16	7
1:A:136:LEU:HB2	1:A:198:LEU:HD21	0.53	1.80	3	2
1:A:46:VAL:HG13	1:A:97:ILE:HD11	0.53	1.79	4	1
1:A:125:GLU:CB	1:A:200:ARG:NH2	0.53	2.72	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:HIS:O	1:A:126:ALA:HB3	0.53	2.04	15	4
1:A:8:ASP:OD1	1:A:171:VAL:HG22	0.53	2.03	12	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:47:GLY:HA3	0.53	2.34	8	9
1:A:162:MET:CE	1:A:166:TRP:CZ2	0.53	2.88	7	1
1:A:162:MET:HE1	1:A:198:LEU:CD2	0.53	2.32	12	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:197:VAL:CG2	0.53	2.87	13	1
1:A:168:VAL:HG22	1:A:198:LEU:HD22	0.53	1.79	14	2
1:A:29:CYS:SG	1:A:104:TYR:O	0.53	2.67	15	2
1:A:113:PRO:HD2	1:A:116:MET:CB	0.53	2.34	16	11
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:CG2	0.53	2.34	19	2
1:A:95:ARG:CB	1:A:128:MET:O	0.53	2.57	19	4
1:A:69:THR:CG2	1:A:71:GLN:OE1	0.53	2.57	15	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HB2	0.52	2.34	20	4
1:A:128:MET:HB3	1:A:129:PRO:CD	0.52	2.32	16	16
1:A:18:VAL:CG1	1:A:22:ALA:CB	0.52	2.86	9	3
1:A:145:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HD23	0.52	1.81	7	3
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:ARG:CZ	0.52	2.57	11	1
1:A:64:GLU:O	1:A:65:GLN:C	0.52	2.52	17	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:87:GLY:CA	0.52	2.34	6	5
1:A:22:ALA:CB	1:A:101:ALA:HB2	0.52	2.33	18	6
1:A:103:PHE:CZ	1:A:105:ASP:CB	0.52	2.92	9	1
1:A:177:LEU:HD21	1:A:189:GLU:N	0.52	2.19	20	1
1:A:122:GLN:HG3	1:A:123:HIS:N	0.52	2.18	19	18
1:A:174:GLN:O	1:A:175:ASP:CB	0.52	2.56	18	3
1:A:124:LEU:CD2	1:A:128:MET:SD	0.52	2.97	4	1
1:A:50:LEU:HD21	1:A:89:PHE:N	0.52	2.19	7	2
1:A:74:PHE:CB	1:A:88:ASP:CB	0.52	2.88	1	3
1:A:102:ALA:N	1:A:132:CYS:HB2	0.52	2.19	16	8
1:A:196:TYR:O	1:A:198:LEU:CD2	0.52	2.57	3	2
1:A:177:LEU:CD2	1:A:189:GLU:C	0.52	2.83	13	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:49:GLU:CD	0.52	2.83	8	3
1:A:125:GLU:HB2	1:A:166:TRP:CZ2	0.52	2.40	8	1
1:A:165:ASN:CA	1:A:201:VAL:HG22	0.52	2.34	13	2
1:A:174:GLN:CB	1:A:192:ASP:CG	0.52	2.82	10	2
1:A:9:LEU:CD1	1:A:10:GLN:N	0.52	2.72	10	1
1:A:128:MET:SD	1:A:200:ARG:NE	0.52	2.82	15	1
1:A:6:ASN:CG	1:A:104:TYR:OH	0.52	2.53	2	7
1:A:118:GLU:HG2	1:A:157:TRP:CZ2	0.52	2.40	17	13
1:A:152:SER:O	1:A:153:VAL:C	0.52	2.52	15	11
1:A:25:LEU:O	1:A:103:PHE:HA	0.52	2.03	16	8
1:A:59:PHE:CZ	1:A:77:TYR:HB2	0.52	2.39	6	11

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:146:LEU:H	0.52	1.64	18	4
1:A:94:ALA:HB1	1:A:128:MET:CE	0.52	2.34	15	1
1:A:117:ARG:HA	1:A:117:ARG:NH1	0.52	2.19	16	1
1:A:109:MET:CE	1:A:120:TYR:CD1	0.52	2.92	19	1
1:A:155:GLN:HB2	1:A:196:TYR:CE1	0.52	2.40	9	7
1:A:158:LEU:HD23	1:A:162:MET:HG3	0.52	1.81	4	2
1:A:145:LEU:CD2	1:A:186:ALA:CB	0.52	2.87	5	3
1:A:173:GLY:O	1:A:176:THR:HG22	0.52	2.04	8	3
1:A:135:LEU:HD11	1:A:195:VAL:CG1	0.52	2.35	19	3
1:A:190:ARG:O	1:A:190:ARG:CG	0.52	2.56	20	2
1:A:188:LEU:C	1:A:189:GLU:OE1	0.52	2.53	11	1
1:A:157:TRP:CH2	1:A:161:VAL:HG11	0.52	2.40	12	1
1:A:158:LEU:HD22	1:A:162:MET:SD	0.52	2.44	2	2
1:A:74:PHE:CD1	1:A:88:ASP:CB	0.52	2.93	16	6
1:A:155:GLN:CB	1:A:196:TYR:CE1	0.52	2.93	4	2
1:A:175:ASP:HA	1:A:191:MET:O	0.52	2.03	4	2
1:A:30:GLY:O	1:A:31:LYS:C	0.52	2.53	19	2
1:A:141:TYR:CD2	1:A:191:MET:HA	0.52	2.40	5	5
1:A:118:GLU:O	1:A:121:VAL:HG22	0.52	2.04	10	2
1:A:171:VAL:CG1	1:A:197:VAL:HG23	0.52	2.30	18	1
1:A:98:GLY:C	1:A:129:PRO:HB3	0.52	2.29	5	8
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:H	0.52	1.63	16	4
1:A:103:PHE:CZ	1:A:134:GLY:CA	0.52	2.93	3	5
1:A:26:VAL:HG22	1:A:47:GLY:HA3	0.52	1.81	12	4
1:A:178:HIS:CG	1:A:184:LEU:HD21	0.52	2.40	15	1
1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:ILE:HD12	0.52	1.83	1	4
1:A:105:ASP:CG	1:A:136:LEU:CD1	0.52	2.83	9	4
1:A:146:LEU:HB2	1:A:188:LEU:HD21	0.52	1.81	11	2
1:A:35:MET:SD	1:A:35:MET:C	0.52	2.93	17	1
1:A:142:ASP:OD2	1:A:150:PRO:CG	0.52	2.58	19	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:50:LEU:CD2	0.51	2.36	16	3
1:A:113:PRO:O	1:A:117:ARG:HB2	0.51	2.05	5	4
1:A:130:GLN:CG	1:A:131:ALA:N	0.51	2.74	5	1
1:A:169:THR:CG2	1:A:197:VAL:CG1	0.51	2.88	16	7
1:A:117:ARG:HB2	1:A:157:TRP:CZ2	0.51	2.40	16	1
1:A:26:VAL:HG21	1:A:35:MET:SD	0.51	2.45	19	1
1:A:106:ARG:CG	1:A:107:ALA:N	0.51	2.73	2	4
1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:ILE:HD11	0.51	1.78	8	1
1:A:12:TYR:CG	1:A:197:VAL:HG21	0.51	2.40	12	2
1:A:28:LEU:HA	1:A:48:ALA:O	0.51	2.05	10	2
1:A:137:ILE:CD1	1:A:195:VAL:CG2	0.51	2.87	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PRO:C	1:A:29:CYS:N	0.51	2.67	11	10
1:A:180:SER:HB3	1:A:191:MET:HE3	0.51	1.83	2	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:38:LEU:HD11	0.51	2.41	19	4
1:A:74:PHE:CD1	1:A:88:ASP:HB3	0.51	2.40	3	1
1:A:109:MET:HE1	1:A:136:LEU:HD21	0.51	1.82	3	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:186:ALA:HB1	0.51	1.81	7	3
1:A:59:PHE:CE1	1:A:77:TYR:CB	0.51	2.92	6	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:86:CYS:SG	0.51	2.45	16	2
1:A:117:ARG:NH2	1:A:121:VAL:HG12	0.51	2.20	12	1
1:A:109:MET:CA	1:A:117:ARG:HD3	0.51	2.35	13	1
1:A:23:ARG:NE	1:A:97:ILE:O	0.51	2.43	14	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:HE3	0.51	1.81	18	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HB2	0.51	1.82	20	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:86:CYS:O	0.51	2.58	20	1
1:A:97:ILE:CG1	1:A:98:GLY:N	0.51	2.73	15	6
1:A:177:LEU:C	1:A:179:SER:N	0.51	2.68	19	4
1:A:135:LEU:CD2	1:A:196:TYR:O	0.51	2.59	10	1
1:A:136:LEU:HD12	1:A:162:MET:CE	0.51	2.36	3	2
1:A:154:PRO:O	1:A:155:GLN:C	0.51	2.53	13	10
1:A:184:LEU:H	1:A:184:LEU:HD22	0.51	1.65	13	5
1:A:125:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CZ2	0.51	2.40	4	1
1:A:155:GLN:HB3	1:A:196:TYR:CZ	0.51	2.41	4	2
1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:ILE:CG1	0.51	2.36	9	1
1:A:155:GLN:HG3	1:A:196:TYR:CE1	0.51	2.40	19	2
1:A:64:GLU:O	1:A:66:PRO:N	0.51	2.42	17	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:97:ILE:HG21	0.51	1.82	19	3
1:A:109:MET:CE	1:A:136:LEU:CD1	0.51	2.89	5	1
1:A:162:MET:SD	1:A:198:LEU:CD1	0.51	2.99	14	1
1:A:103:PHE:CE1	1:A:124:LEU:HD11	0.51	2.41	19	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:171:VAL:HG21	0.51	2.40	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:LEU:C	0.51	2.53	9	15
1:A:12:TYR:CZ	1:A:171:VAL:HG13	0.51	2.40	6	1
1:A:100:CYS:CA	1:A:132:CYS:SG	0.51	2.98	6	2
1:A:46:VAL:HG13	1:A:83:GLU:CG	0.51	2.36	9	1
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:CZ	0.51	2.36	16	1
1:A:100:CYS:CA	1:A:131:ALA:O	0.51	2.58	19	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:30:GLY:N	0.51	2.73	20	1
1:A:34:ASP:CB	1:A:104:TYR:CE2	0.51	2.93	9	3
1:A:109:MET:HB2	1:A:117:ARG:CG	0.51	2.36	5	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:97:ILE:HG12	0.51	1.83	7	1
1:A:44:HIS:O	1:A:46:VAL:HG12	0.51	2.05	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG21	1:A:35:MET:CE	0.51	2.30	14	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:89:PHE:N	0.51	2.21	20	1
1:A:189:GLU:O	1:A:190:ARG:CD	0.51	2.58	20	1
1:A:189:GLU:C	1:A:190:ARG:CG	0.51	2.83	1	2
1:A:104:TYR:CZ	1:A:137:ILE:HG13	0.51	2.40	14	8
1:A:142:ASP:CG	1:A:191:MET:SD	0.51	2.94	3	2
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:HB3	0.51	2.05	3	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:134:GLY:HA3	0.51	2.41	7	2
1:A:162:MET:HB2	1:A:168:VAL:HG11	0.51	1.83	10	1
1:A:146:LEU:HD13	1:A:186:ALA:CB	0.51	2.35	16	2
1:A:146:LEU:HG	1:A:186:ALA:HB3	0.51	1.82	9	5
1:A:30:GLY:O	1:A:31:LYS:CB	0.51	2.59	2	1
1:A:109:MET:O	1:A:117:ARG:CG	0.51	2.59	3	4
1:A:183:GLY:CA	1:A:191:MET:CE	0.51	2.89	9	1
1:A:8:ASP:CG	1:A:195:VAL:HG21	0.51	2.31	14	2
1:A:28:LEU:CB	1:A:50:LEU:HB2	0.50	2.35	12	6
1:A:16:LEU:HD13	1:A:133:SER:CB	0.50	2.36	15	2
1:A:117:ARG:HG2	1:A:157:TRP:CZ2	0.50	2.41	12	1
1:A:141:TYR:CD1	1:A:191:MET:SD	0.50	3.03	15	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:153:VAL:CG2	0.50	2.75	17	1
1:A:170:LYS:C	1:A:171:VAL:CG1	0.50	2.84	18	2
1:A:107:ALA:N	1:A:137:ILE:O	0.50	2.43	5	4
1:A:110:ILE:O	1:A:151:PHE:N	0.50	2.43	9	7
1:A:125:GLU:HG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.50	2.41	11	2
1:A:23:ARG:HG3	1:A:99:HIS:CE1	0.50	2.41	7	1
1:A:94:ALA:HB1	1:A:128:MET:HE1	0.50	1.81	15	1
1:A:109:MET:CA	1:A:117:ARG:CZ	0.50	2.90	16	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:85:TRP:HB3	0.50	1.81	2	2
1:A:183:GLY:CA	1:A:188:LEU:HD23	0.50	2.36	3	2
1:A:34:ASP:CG	1:A:104:TYR:CE2	0.50	2.89	15	2
1:A:25:LEU:HD13	1:A:27:PRO:CD	0.50	2.33	7	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:26:VAL:N	0.50	2.21	16	4
1:A:57:ARG:HG3	1:A:58:TYR:N	0.50	2.21	19	3
1:A:74:PHE:CD1	1:A:88:ASP:HB2	0.50	2.41	2	5
1:A:158:LEU:HD21	1:A:162:MET:HE3	0.50	1.83	4	1
1:A:97:ILE:HD13	1:A:98:GLY:H	0.50	1.57	5	1
1:A:41:GLN:HB3	1:A:43:TYR:CE1	0.50	2.42	8	1
1:A:52:GLU:HG3	1:A:74:PHE:CE1	0.50	2.41	20	1
1:A:65:GLN:N	1:A:66:PRO:HD2	0.50	2.22	14	15
1:A:25:LEU:HD12	1:A:128:MET:HE1	0.50	1.84	18	3
1:A:155:GLN:CG	1:A:196:TYR:CD1	0.50	2.94	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:CD2	1:A:191:MET:HG3	0.50	2.36	19	1
1:A:175:ASP:CA	1:A:191:MET:O	0.50	2.60	13	2
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD13	0.50	2.32	5	1
1:A:152:SER:O	1:A:152:SER:OG	0.50	2.29	12	5
1:A:12:TYR:CE2	1:A:197:VAL:CG2	0.50	2.94	12	1
1:A:109:MET:O	1:A:117:ARG:HD3	0.50	2.07	13	1
1:A:117:ARG:NH1	1:A:157:TRP:CE2	0.50	2.79	14	1
1:A:188:LEU:C	1:A:190:ARG:N	0.50	2.68	5	7
1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:ILE:CD1	0.50	2.28	2	1
1:A:135:LEU:CD2	1:A:195:VAL:HG13	0.50	2.36	7	2
1:A:168:VAL:HB	1:A:196:TYR:CD2	0.50	2.42	4	1
1:A:106:ARG:HG3	1:A:107:ALA:N	0.50	2.21	12	2
1:A:37:TRP:CH2	1:A:41:GLN:HG3	0.50	2.41	8	2
1:A:117:ARG:HH11	1:A:153:VAL:HG11	0.50	1.66	12	1
1:A:117:ARG:HD2	1:A:121:VAL:CG1	0.50	2.37	18	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:CG1	0.50	2.36	15	5
1:A:140:GLU:OE2	1:A:194:HIS:CE1	0.50	2.65	14	2
1:A:97:ILE:CD1	1:A:98:GLY:N	0.50	2.65	5	1
1:A:23:ARG:HG3	1:A:99:HIS:NE2	0.50	2.22	18	2
1:A:117:ARG:HA	1:A:117:ARG:NE	0.50	2.19	9	2
1:A:18:VAL:HG12	1:A:19:VAL:N	0.50	2.22	1	1
1:A:124:LEU:HD13	1:A:128:MET:HG3	0.50	1.84	20	8
1:A:140:GLU:CD	1:A:194:HIS:ND1	0.50	2.70	2	1
1:A:6:ASN:ND2	1:A:8:ASP:OD2	0.50	2.45	12	2
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:N	0.50	2.22	6	2
1:A:138:THR:OG1	1:A:194:HIS:O	0.50	2.27	18	7
1:A:177:LEU:HD12	1:A:178:HIS:N	0.50	2.22	11	2
1:A:101:ALA:N	1:A:132:CYS:SG	0.49	2.85	8	6
1:A:6:ASN:O	1:A:9:LEU:N	0.49	2.45	20	5
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:HD22	0.49	1.84	6	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:38:LEU:HD13	0.49	2.37	9	1
1:A:196:TYR:CE2	1:A:198:LEU:HD23	0.49	2.42	20	1
1:A:169:THR:CB	1:A:197:VAL:HG12	0.49	2.36	17	6
1:A:140:GLU:CD	1:A:192:ASP:OD2	0.49	2.55	2	1
1:A:186:ALA:HB3	1:A:188:LEU:CD2	0.49	2.37	3	1
1:A:137:ILE:CG2	1:A:193:GLU:CD	0.49	2.85	7	2
1:A:106:ARG:O	1:A:108:ALA:N	0.49	2.45	12	1
1:A:30:GLY:O	1:A:31:LYS:O	0.49	2.29	19	3
1:A:110:ILE:HD13	1:A:150:PRO:HB3	0.49	1.84	14	1
1:A:170:LYS:HA	1:A:196:TYR:CD1	0.49	2.42	16	1
1:A:191:MET:SD	1:A:191:MET:C	0.49	2.96	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:ARG:NH1	1:A:201:VAL:C	0.49	2.71	1	3
1:A:139:LEU:CD2	1:A:142:ASP:CG	0.49	2.76	3	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:ND2	0.49	2.43	3	3
1:A:195:VAL:C	1:A:196:TYR:CG	0.49	2.90	6	5
1:A:49:GLU:HG3	1:A:86:CYS:HA	0.49	1.82	7	1
1:A:142:ASP:C	1:A:143:GLN:CG	0.49	2.85	7	1
1:A:177:LEU:HD11	1:A:184:LEU:CD1	0.49	2.38	9	3
1:A:18:VAL:HG13	1:A:43:TYR:CE2	0.49	2.42	19	1
1:A:190:ARG:O	1:A:191:MET:CE	0.49	2.51	20	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:27:PRO:HD3	0.49	2.37	11	6
1:A:35:MET:HG3	1:A:45:VAL:HG11	0.49	1.83	9	2
1:A:19:VAL:CG2	1:A:20:PRO:HD2	0.49	2.37	1	6
1:A:192:ASP:C	1:A:192:ASP:OD1	0.49	2.55	2	2
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:38:LEU:HD11	0.49	2.43	19	3
1:A:125:GLU:OE2	1:A:200:ARG:CZ	0.49	2.60	12	2
1:A:188:LEU:O	1:A:190:ARG:CG	0.49	2.60	11	1
1:A:176:THR:HG1	1:A:178:HIS:CD2	0.49	2.26	13	1
1:A:158:LEU:CA	1:A:162:MET:HB2	0.49	2.38	20	4
1:A:28:LEU:HB3	1:A:50:LEU:HB2	0.49	1.83	11	9
1:A:178:HIS:O	1:A:178:HIS:CG	0.49	2.65	2	1
1:A:132:CYS:O	1:A:200:ARG:HB2	0.49	2.07	15	2
1:A:103:PHE:CZ	1:A:105:ASP:OD2	0.49	2.65	2	1
1:A:38:LEU:HB3	1:A:45:VAL:HG22	0.49	1.85	19	1
1:A:6:ASN:ND2	1:A:137:ILE:CD1	0.49	2.76	1	1
1:A:158:LEU:O	1:A:162:MET:CA	0.49	2.61	2	11
1:A:12:TYR:CE1	1:A:197:VAL:HG11	0.49	2.43	8	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:178:HIS:CD2	0.49	2.65	13	1
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:CG	0.49	2.91	18	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:87:GLY:C	0.49	2.91	20	1
1:A:128:MET:CB	1:A:129:PRO:CD	0.49	2.90	16	17
1:A:189:GLU:O	1:A:189:GLU:CD	0.49	2.56	12	2
1:A:21:GLY:O	1:A:22:ALA:C	0.49	2.55	16	13
1:A:35:MET:CE	1:A:39:SER:OG	0.49	2.61	9	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:92:LEU:CB	0.49	2.89	16	2
1:A:62:ARG:CZ	1:A:77:TYR:OH	0.49	2.61	12	1
1:A:26:VAL:N	1:A:46:VAL:O	0.49	2.46	15	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:188:LEU:HB2	0.49	1.85	20	2
1:A:49:GLU:OE1	1:A:50:LEU:N	0.49	2.46	12	6
1:A:129:PRO:CG	1:A:132:CYS:SG	0.49	3.01	3	4
1:A:129:PRO:CB	1:A:132:CYS:SG	0.49	3.01	3	4
1:A:141:TYR:O	1:A:143:GLN:CG	0.49	2.60	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:ASP:OD2	1:A:146:LEU:CD1	0.49	2.60	6	3
1:A:173:GLY:O	1:A:174:GLN:C	0.49	2.56	4	2
1:A:128:MET:SD	1:A:129:PRO:HD3	0.49	2.48	6	4
1:A:137:ILE:CG2	1:A:193:GLU:OE2	0.49	2.61	6	1
1:A:30:GLY:HA2	1:A:84:ILE:HD12	0.49	1.83	7	1
1:A:153:VAL:HG13	1:A:153:VAL:O	0.49	2.07	14	4
1:A:109:MET:CA	1:A:117:ARG:NE	0.49	2.76	16	1
1:A:70:SER:C	1:A:71:GLN:OE1	0.49	2.56	17	1
1:A:121:VAL:CG2	1:A:162:MET:HE2	0.49	2.25	17	1
1:A:168:VAL:HB	1:A:196:TYR:CZ	0.49	2.43	20	1
1:A:146:LEU:HD13	1:A:186:ALA:HB2	0.48	1.84	12	2
1:A:177:LEU:HD12	1:A:177:LEU:O	0.48	2.07	4	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:146:LEU:N	0.48	2.22	18	4
1:A:102:ALA:HA	1:A:133:SER:N	0.48	2.23	15	3
1:A:117:ARG:NH2	1:A:153:VAL:HG13	0.48	2.23	10	1
1:A:27:PRO:CG	1:A:105:ASP:OD1	0.48	2.61	16	2
1:A:170:LYS:HA	1:A:196:TYR:CE1	0.48	2.43	16	1
1:A:168:VAL:HA	1:A:197:VAL:O	0.48	2.07	18	1
1:A:157:TRP:O	1:A:161:VAL:CG1	0.48	2.61	10	7
1:A:145:LEU:CD1	1:A:188:LEU:HD13	0.48	2.38	4	5
1:A:157:TRP:O	1:A:160:ARG:N	0.48	2.47	20	7
1:A:84:ILE:HG22	1:A:84:ILE:O	0.48	2.08	8	2
1:A:6:ASN:ND2	1:A:104:TYR:OH	0.48	2.46	9	4
1:A:147:GLU:CG	1:A:147:GLU:O	0.48	2.60	9	2
1:A:137:ILE:HD13	1:A:195:VAL:CB	0.48	2.38	12	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:10:GLN:OE1	0.48	2.08	15	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:77:TYR:O	0.48	2.65	8	4
1:A:92:LEU:O	1:A:92:LEU:CD2	0.48	2.49	1	3
1:A:24:VAL:CG2	1:A:45:VAL:HA	0.48	2.35	2	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:191:MET:HE3	0.48	1.83	7	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:85:TRP:CZ2	0.48	2.95	16	2
1:A:183:GLY:O	1:A:188:LEU:HD12	0.48	2.07	11	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:56:GLU:N	0.48	2.76	17	2
1:A:110:ILE:HG22	1:A:153:VAL:CB	0.48	2.39	15	1
1:A:136:LEU:N	1:A:198:LEU:HD11	0.48	2.23	1	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:SER:CB	0.48	2.62	1	1
1:A:131:ALA:C	1:A:132:CYS:SG	0.48	2.96	3	6
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD13	0.48	2.09	5	1
1:A:195:VAL:CG1	1:A:196:TYR:N	0.48	2.76	5	4
1:A:26:VAL:HG13	1:A:29:CYS:HB3	0.48	1.85	7	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:134:GLY:HA2	0.48	2.43	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:HG13	0.48	2.08	10	1
1:A:110:ILE:HB	1:A:153:VAL:HG23	0.48	1.85	12	1
1:A:190:ARG:C	1:A:191:MET:HG2	0.48	2.34	20	1
1:A:35:MET:O	1:A:38:LEU:N	0.48	2.46	10	4
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:92:LEU:CG	0.48	2.96	3	3
1:A:95:ARG:CD	1:A:96:ASP:N	0.48	2.76	3	1
1:A:28:LEU:O	1:A:106:ARG:NH1	0.48	2.46	4	1
1:A:152:SER:OG	1:A:152:SER:O	0.48	2.31	4	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:191:MET:HE2	0.48	1.82	12	2
1:A:183:GLY:O	1:A:187:GLY:N	0.48	2.46	7	4
1:A:35:MET:HE1	1:A:84:ILE:CD1	0.48	2.39	14	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:97:ILE:HD11	0.48	2.36	15	1
1:A:177:LEU:HG	1:A:190:ARG:N	0.48	2.24	14	2
1:A:181:ALA:C	1:A:183:GLY:N	0.48	2.71	19	13
1:A:10:GLN:O	1:A:14:SER:HB2	0.48	2.08	10	8
1:A:129:PRO:HB2	1:A:132:CYS:SG	0.48	2.48	8	3
1:A:46:VAL:CG1	1:A:97:ILE:CD1	0.48	2.89	7	1
1:A:165:ASN:O	1:A:201:VAL:CG2	0.48	2.56	13	2
1:A:168:VAL:CA	1:A:198:LEU:HB3	0.48	2.39	19	1
1:A:142:ASP:OD1	1:A:191:MET:SD	0.48	2.71	19	5
1:A:38:LEU:O	1:A:41:GLN:N	0.48	2.43	12	7
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD2	0.48	2.87	5	2
1:A:73:ASP:C	1:A:74:PHE:CG	0.48	2.92	14	1
1:A:23:ARG:CD	1:A:97:ILE:O	0.48	2.61	20	1
1:A:18:VAL:CG1	1:A:19:VAL:N	0.48	2.76	1	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:87:GLY:HA2	0.48	1.86	3	6
1:A:25:LEU:HA	1:A:46:VAL:O	0.48	2.09	4	6
1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:LEU:CD1	0.48	2.32	5	1
1:A:35:MET:CG	1:A:36:SER:N	0.48	2.76	6	2
1:A:105:ASP:OD2	1:A:136:LEU:CD1	0.48	2.61	6	1
1:A:171:VAL:CG1	1:A:172:GLY:N	0.48	2.77	6	2
1:A:92:LEU:CD2	1:A:92:LEU:C	0.48	2.86	13	4
1:A:117:ARG:HD2	1:A:157:TRP:CZ3	0.48	2.43	7	1
1:A:169:THR:HG22	1:A:197:VAL:CG1	0.48	2.35	17	3
1:A:12:TYR:CD2	1:A:197:VAL:CG2	0.48	2.97	12	1
1:A:168:VAL:CG2	1:A:196:TYR:CE1	0.48	2.94	15	1
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:NE	0.48	2.76	16	1
1:A:34:ASP:CB	1:A:104:TYR:CD2	0.48	2.97	2	2
1:A:107:ALA:CB	1:A:139:LEU:CD2	0.48	2.91	6	3
1:A:109:MET:HE2	1:A:136:LEU:HD11	0.48	1.86	3	2
1:A:153:VAL:O	1:A:196:TYR:OH	0.48	2.31	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:HIS:O	1:A:159:HIS:CD2	0.48	2.66	10	1
1:A:98:GLY:C	1:A:99:HIS:CD2	0.48	2.91	18	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:89:PHE:CE1	0.48	2.97	1	1
1:A:88:ASP:CG	1:A:89:PHE:N	0.48	2.72	1	3
1:A:32:SER:N	1:A:35:MET:SD	0.48	2.87	4	1
1:A:110:ILE:HD13	1:A:111:ALA:N	0.48	2.23	12	2
1:A:84:ILE:O	1:A:84:ILE:CG2	0.48	2.62	14	5
1:A:106:ARG:NH2	1:A:182:ARG:NH2	0.48	2.61	6	1
1:A:92:LEU:O	1:A:93:THR:C	0.48	2.56	19	2
1:A:25:LEU:CD2	1:A:94:ALA:HB1	0.48	2.38	10	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:190:ARG:H	0.48	2.21	19	3
1:A:168:VAL:HG22	1:A:198:LEU:CG	0.48	2.39	14	2
1:A:162:MET:O	1:A:164:GLY:N	0.48	2.47	15	1
1:A:109:MET:HB2	1:A:117:ARG:CZ	0.48	2.38	16	1
1:A:168:VAL:CG2	1:A:196:TYR:CE2	0.48	2.97	16	1
1:A:26:VAL:HB	1:A:29:CYS:HB3	0.48	1.86	18	1
1:A:6:ASN:O	1:A:7:LYS:C	0.47	2.57	6	9
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:GLN:N	0.47	2.23	10	6
1:A:74:PHE:CE2	1:A:88:ASP:CG	0.47	2.92	2	1
1:A:169:THR:O	1:A:196:TYR:CD1	0.47	2.67	4	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:171:VAL:HG13	0.47	2.09	6	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:133:SER:OG	0.47	2.09	6	1
1:A:29:CYS:O	1:A:29:CYS:SG	0.47	2.72	6	1
1:A:46:VAL:CG2	1:A:83:GLU:HB3	0.47	2.34	20	2
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:NE	0.47	2.24	16	1
1:A:136:LEU:HD22	1:A:136:LEU:C	0.47	2.30	20	1
1:A:35:MET:SD	1:A:36:SER:N	0.47	2.86	1	2
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:C	0.47	2.92	3	4
1:A:76:VAL:CG1	1:A:85:TRP:CB	0.47	2.92	4	4
1:A:142:ASP:O	1:A:150:PRO:CG	0.47	2.63	4	1
1:A:10:GLN:O	1:A:14:SER:OG	0.47	2.32	11	8
1:A:128:MET:SD	1:A:200:ARG:CD	0.47	3.02	6	1
1:A:135:LEU:O	1:A:137:ILE:CD1	0.47	2.62	6	1
1:A:151:PHE:O	1:A:152:SER:O	0.47	2.32	12	2
1:A:141:TYR:O	1:A:143:GLN:CD	0.47	2.56	8	3
1:A:103:PHE:CE1	1:A:134:GLY:HA2	0.47	2.42	15	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:97:ILE:HG21	0.47	1.83	19	2
1:A:95:ARG:CG	1:A:96:ASP:N	0.47	2.77	8	4
1:A:142:ASP:O	1:A:143:GLN:HB3	0.47	2.09	5	10
1:A:162:MET:CE	1:A:198:LEU:HD13	0.47	2.39	3	2
1:A:146:LEU:HD13	1:A:186:ALA:HB3	0.47	1.86	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:VAL:CG2	1:A:198:LEU:HD22	0.47	2.40	14	1
1:A:115:ASP:O	1:A:118:GLU:HB2	0.47	2.09	18	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:128:MET:HE3	0.47	1.84	20	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:86:CYS:HB2	0.47	2.43	8	1
1:A:146:LEU:HD21	1:A:191:MET:HE1	0.47	1.87	11	1
1:A:146:LEU:HD12	1:A:147:GLU:H	0.47	1.66	12	1
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:HG22	0.47	1.86	19	1
1:A:168:VAL:HA	1:A:198:LEU:HA	0.47	1.85	19	1
1:A:171:VAL:HG23	1:A:172:GLY:N	0.47	2.23	18	6
1:A:158:LEU:HA	1:A:162:MET:HB2	0.47	1.85	16	5
1:A:129:PRO:O	1:A:200:ARG:NH1	0.47	2.48	8	3
1:A:135:LEU:HD23	1:A:196:TYR:O	0.47	2.09	10	1
1:A:171:VAL:CG1	1:A:195:VAL:HG23	0.47	2.33	14	2
1:A:128:MET:HB3	1:A:200:ARG:NE	0.47	2.24	16	1
1:A:138:THR:HG1	1:A:196:TYR:HE2	0.47	1.47	19	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:CD1	0.47	2.44	17	6
1:A:74:PHE:HB3	1:A:88:ASP:CB	0.47	2.39	1	14
1:A:108:ALA:O	1:A:112:LEU:HD21	0.47	2.09	1	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:76:VAL:CG1	0.47	2.91	8	5
1:A:69:THR:CG2	1:A:76:VAL:HG13	0.47	2.39	18	3
1:A:170:LYS:C	1:A:171:VAL:HG23	0.47	2.35	6	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:84:ILE:CG2	0.47	2.62	7	1
1:A:68:ILE:HG22	1:A:75:LYS:HE3	0.47	1.85	7	1
1:A:41:GLN:HB3	1:A:43:TYR:CD1	0.47	2.44	8	1
1:A:155:GLN:O	1:A:158:LEU:N	0.47	2.48	13	1
1:A:154:PRO:C	1:A:156:THR:N	0.47	2.73	16	3
1:A:103:PHE:CZ	1:A:124:LEU:CD1	0.47	2.98	19	1
1:A:66:PRO:CB	1:A:77:TYR:CE1	0.47	2.97	1	5
1:A:79:ALA:O	1:A:82:ILE:O	0.47	2.32	18	5
1:A:114:ALA:O	1:A:115:ASP:C	0.47	2.58	14	19
1:A:129:PRO:HG2	1:A:132:CYS:SG	0.47	2.50	18	7
1:A:125:GLU:HA	1:A:128:MET:HB2	0.47	1.87	6	6
1:A:109:MET:HG3	1:A:153:VAL:HG11	0.47	1.86	9	2
1:A:6:ASN:ND2	1:A:179:SER:O	0.47	2.48	8	3
1:A:117:ARG:NH2	1:A:158:LEU:HD11	0.47	2.24	7	2
1:A:27:PRO:CG	1:A:105:ASP:OD2	0.47	2.63	10	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HA	0.47	1.87	10	1
1:A:166:TRP:N	1:A:166:TRP:HD1	0.47	2.01	10	1
1:A:6:ASN:C	1:A:8:ASP:N	0.47	2.72	15	1
1:A:102:ALA:N	1:A:132:CYS:SG	0.47	2.87	15	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:188:LEU:CD1	0.47	2.87	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:GLN:O	1:A:14:SER:N	0.47	2.48	2	2
1:A:142:ASP:HB3	1:A:188:LEU:CD1	0.47	2.39	9	8
1:A:37:TRP:CE3	1:A:38:LEU:HD12	0.47	2.44	17	2
1:A:117:ARG:NH2	1:A:151:PHE:CG	0.47	2.83	6	1
1:A:125:GLU:OE2	1:A:166:TRP:CD2	0.47	2.68	6	2
1:A:170:LYS:O	1:A:171:VAL:HG23	0.47	2.09	13	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:SER:N	0.47	2.78	20	1
1:A:47:GLY:O	1:A:84:ILE:HA	0.47	2.10	11	8
1:A:105:ASP:OD1	1:A:135:LEU:C	0.47	2.57	2	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:HB2	0.47	2.10	12	9
1:A:105:ASP:HB3	1:A:136:LEU:CD1	0.47	2.40	18	3
1:A:119:ARG:O	1:A:123:HIS:ND1	0.47	2.48	6	2
1:A:28:LEU:CD2	1:A:89:PHE:CE1	0.47	2.98	7	1
1:A:55:VAL:O	1:A:59:PHE:CG	0.47	2.68	11	4
1:A:174:GLN:C	1:A:176:THR:N	0.47	2.71	14	3
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:CG	0.47	2.39	20	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:87:GLY:CA	0.47	2.40	16	2
1:A:21:GLY:O	1:A:44:HIS:ND1	0.47	2.48	14	1
1:A:125:GLU:OE1	1:A:125:GLU:C	0.47	2.58	15	2
1:A:128:MET:SD	1:A:200:ARG:NH2	0.47	2.87	15	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:188:LEU:CD2	0.47	2.91	15	1
1:A:157:TRP:CE3	1:A:157:TRP:C	0.47	2.93	16	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:139:LEU:H	0.47	1.69	3	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:104:TYR:CZ	0.47	2.68	4	1
1:A:170:LYS:O	1:A:171:VAL:CG2	0.47	2.63	6	1
1:A:4:GLU:HB2	1:A:178:HIS:CD2	0.47	2.45	15	1
1:A:168:VAL:HG23	1:A:196:TYR:OH	0.47	2.08	15	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:86:CYS:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:128:MET:HB3	1:A:200:ARG:CD	0.47	2.39	17	1
1:A:121:VAL:CG2	1:A:122:GLN:N	0.46	2.78	14	6
1:A:63:GLY:O	1:A:64:GLU:CB	0.46	2.62	7	2
1:A:17:ASN:CG	1:A:17:ASN:O	0.46	2.57	9	8
1:A:25:LEU:HD12	1:A:128:MET:CE	0.46	2.40	7	1
1:A:107:ALA:HB2	1:A:139:LEU:HD13	0.46	1.87	7	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:26:VAL:O	0.46	2.10	19	2
1:A:13:TRP:O	1:A:16:LEU:N	0.46	2.48	11	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:37:TRP:C	0.46	2.93	17	2
1:A:90:PHE:CE1	1:A:123:HIS:CE1	0.46	3.02	15	1
1:A:162:MET:SD	1:A:196:TYR:OH	0.46	2.74	18	1
1:A:116:MET:HE3	1:A:119:ARG:HG2	0.46	1.87	19	1
1:A:25:LEU:O	1:A:103:PHE:CA	0.46	2.64	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:O	1:A:76:VAL:HG22	0.46	2.09	16	5
1:A:169:THR:C	1:A:196:TYR:CE1	0.46	2.93	3	1
1:A:198:LEU:HD23	1:A:198:LEU:H	0.46	1.67	5	4
1:A:63:GLY:C	1:A:64:GLU:CG	0.46	2.87	7	2
1:A:155:GLN:HG3	1:A:196:TYR:CD1	0.46	2.45	4	1
1:A:142:ASP:HB3	1:A:188:LEU:CD2	0.46	2.39	14	4
1:A:69:THR:CB	1:A:76:VAL:HG13	0.46	2.39	18	2
1:A:62:ARG:NE	1:A:77:TYR:OH	0.46	2.49	9	2
1:A:69:THR:HG22	1:A:76:VAL:CG2	0.46	2.39	20	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:190:ARG:N	0.46	2.25	9	1
1:A:125:GLU:OE1	1:A:200:ARG:CZ	0.46	2.63	10	1
1:A:159:HIS:O	1:A:163:SER:OG	0.46	2.32	10	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:88:ASP:OD1	0.46	2.68	12	1
1:A:6:ASN:H	1:A:6:ASN:ND2	0.46	2.07	15	1
1:A:146:LEU:HG	1:A:186:ALA:CB	0.46	2.41	4	6
1:A:177:LEU:HD23	1:A:190:ARG:H	0.46	1.70	9	2
1:A:101:ALA:C	1:A:132:CYS:HB3	0.46	2.34	6	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD23	0.46	2.35	7	1
1:A:16:LEU:O	1:A:17:ASN:C	0.46	2.58	15	2
1:A:31:LYS:HA	1:A:35:MET:CB	0.46	2.40	9	2
1:A:59:PHE:CE2	1:A:68:ILE:CG2	0.46	2.98	3	1
1:A:142:ASP:O	1:A:150:PRO:CD	0.46	2.63	4	1
1:A:177:LEU:O	1:A:179:SER:N	0.46	2.49	7	3
1:A:155:GLN:HE21	1:A:170:LYS:N	0.46	2.08	9	1
1:A:109:MET:HE1	1:A:162:MET:CE	0.46	2.41	10	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:GLU:CG	0.46	2.64	20	3
1:A:89:PHE:CD1	1:A:90:PHE:N	0.46	2.84	19	1
1:A:121:VAL:HB	1:A:162:MET:HG2	0.46	1.87	20	1
1:A:107:ALA:CA	1:A:110:ILE:HD12	0.46	2.40	6	5
1:A:125:GLU:O	1:A:200:ARG:NH2	0.46	2.49	2	1
1:A:129:PRO:HD2	1:A:200:ARG:CD	0.46	2.40	2	3
1:A:10:GLN:O	1:A:14:SER:HB3	0.46	2.11	10	2
1:A:125:GLU:CD	1:A:165:ASN:ND2	0.46	2.73	4	2
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:CD1	0.46	2.40	5	1
1:A:140:GLU:C	1:A:140:GLU:OE1	0.46	2.58	12	1
1:A:168:VAL:HA	1:A:198:LEU:HB3	0.46	1.87	19	1
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:CD1	0.46	2.78	20	1
1:A:118:GLU:CG	1:A:161:VAL:HG21	0.46	2.40	14	5
1:A:169:THR:HG22	1:A:197:VAL:HB	0.46	1.87	10	2
1:A:93:THR:O	1:A:97:ILE:CG2	0.46	2.64	4	2
1:A:105:ASP:HB2	1:A:136:LEU:CD1	0.46	2.40	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:VAL:HG12	1:A:22:ALA:HB2	0.46	1.88	9	1
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:HD13	0.46	2.24	12	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:104:TYR:HD2	0.46	1.71	16	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:86:CYS:CB	0.46	2.40	20	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:56:GLU:N	0.46	2.25	20	2
1:A:164:GLY:C	1:A:165:ASN:ND2	0.46	2.74	3	1
1:A:6:ASN:CG	1:A:179:SER:OG	0.46	2.59	4	1
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:CD1	0.46	2.79	4	2
1:A:125:GLU:OE2	1:A:200:ARG:NH1	0.46	2.49	10	1
1:A:109:MET:O	1:A:117:ARG:NE	0.46	2.49	15	1
1:A:108:ALA:O	1:A:111:ALA:HB3	0.46	2.11	19	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:153:VAL:HG11	0.46	2.40	19	1
1:A:168:VAL:CA	1:A:196:TYR:CE1	0.46	2.99	20	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:LEU:CD2	0.46	2.64	1	1
1:A:27:PRO:O	1:A:28:LEU:O	0.46	2.34	3	1
1:A:174:GLN:O	1:A:176:THR:N	0.46	2.43	4	2
1:A:171:VAL:CG1	1:A:196:TYR:HA	0.46	2.41	15	2
1:A:142:ASP:O	1:A:143:GLN:CG	0.46	2.64	7	1
1:A:7:LYS:O	1:A:11:GLN:HB2	0.46	2.11	10	2
1:A:108:ALA:N	1:A:110:ILE:HD12	0.46	2.25	10	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:116:MET:CG	0.46	2.94	13	1
1:A:144:ALA:C	1:A:145:LEU:HD12	0.46	2.36	19	2
1:A:199:GLU:O	1:A:201:VAL:HG13	0.46	2.11	15	1
1:A:51:SER:HB3	1:A:54:ALA:CB	0.46	2.41	16	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:24:VAL:HG22	0.46	2.45	19	1
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:HD22	0.46	2.25	1	6
1:A:157:TRP:O	1:A:160:ARG:CG	0.46	2.64	10	2
1:A:125:GLU:OE1	1:A:126:ALA:N	0.46	2.49	15	2
1:A:121:VAL:HB	1:A:162:MET:HE2	0.46	1.88	10	1
1:A:158:LEU:CD2	1:A:162:MET:CE	0.46	2.84	10	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:175:ASP:N	0.46	2.49	13	1
1:A:140:GLU:N	1:A:142:ASP:OD1	0.46	2.49	14	1
1:A:125:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CE3	0.46	2.46	19	1
1:A:196:TYR:CE2	1:A:198:LEU:CD2	0.46	2.99	20	1
1:A:122:GLN:O	1:A:125:GLU:HG3	0.46	2.11	5	8
1:A:37:TRP:C	1:A:37:TRP:CE3	0.46	2.94	15	5
1:A:93:THR:O	1:A:95:ARG:N	0.46	2.49	14	3
1:A:93:THR:C	1:A:95:ARG:H	0.46	2.18	4	5
1:A:177:LEU:CD2	1:A:183:GLY:HA3	0.46	2.41	17	2
1:A:191:MET:C	1:A:191:MET:SD	0.46	2.98	13	1
1:A:32:SER:OG	1:A:181:ALA:CB	0.46	2.64	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:ARG:HH21	1:A:153:VAL:HG11	0.46	1.70	17	1
1:A:97:ILE:O	1:A:99:HIS:NE2	0.46	2.49	18	1
1:A:196:TYR:CD1	1:A:198:LEU:HD22	0.46	2.39	18	1
1:A:28:LEU:HB3	1:A:50:LEU:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:165:ASN:O	1:A:200:ARG:NH1	0.45	2.49	1	2
1:A:181:ALA:O	1:A:182:ARG:C	0.45	2.59	5	6
1:A:46:VAL:CB	1:A:83:GLU:HB3	0.45	2.41	13	7
1:A:177:LEU:O	1:A:180:SER:N	0.45	2.49	11	2
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:GLN:N	0.45	2.79	17	1
1:A:6:ASN:ND2	1:A:179:SER:OG	0.45	2.48	13	2
1:A:134:GLY:N	1:A:200:ARG:HH21	0.45	2.10	6	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HD11	0.45	1.89	7	1
1:A:188:LEU:O	1:A:189:GLU:HG2	0.45	2.11	11	2
1:A:177:LEU:CG	1:A:188:LEU:HB2	0.45	2.41	15	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:38:LEU:HD23	0.45	2.42	17	1
1:A:107:ALA:C	1:A:110:ILE:HD11	0.45	2.36	18	1
1:A:171:VAL:HG13	1:A:195:VAL:HG12	0.45	1.88	20	1
1:A:173:GLY:C	1:A:193:GLU:O	0.45	2.59	4	1
1:A:194:HIS:N	1:A:194:HIS:CD2	0.45	2.84	4	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD11	0.45	2.41	9	1
1:A:71:GLN:OE1	1:A:71:GLN:CA	0.45	2.64	10	2
1:A:7:LYS:HG2	1:A:8:ASP:N	0.45	2.25	11	2
1:A:59:PHE:CZ	1:A:68:ILE:CD1	0.45	2.99	13	2
1:A:112:LEU:HD13	1:A:116:MET:HG3	0.45	1.89	14	1
1:A:180:SER:N	1:A:193:GLU:OE2	0.45	2.49	15	1
1:A:190:ARG:O	1:A:191:MET:HG2	0.45	2.11	15	1
1:A:33:GLN:NE2	1:A:181:ALA:HB2	0.45	2.26	16	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:ARG:O	0.45	2.33	17	2
1:A:49:GLU:CB	1:A:86:CYS:SG	0.45	3.04	20	1
1:A:30:GLY:O	1:A:106:ARG:NH2	0.45	2.49	1	1
1:A:71:GLN:O	1:A:71:GLN:CD	0.45	2.59	12	2
1:A:142:ASP:OD2	1:A:191:MET:SD	0.45	2.75	4	5
1:A:89:PHE:O	1:A:89:PHE:CD1	0.45	2.70	5	3
1:A:59:PHE:HE1	1:A:77:TYR:CD2	0.45	2.26	17	4
1:A:95:ARG:NH1	1:A:126:ALA:O	0.45	2.50	10	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:139:LEU:N	0.45	2.73	10	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:ARG:NH2	0.45	2.49	11	1
1:A:101:ALA:C	1:A:132:CYS:HA	0.45	2.36	15	1
1:A:122:GLN:HA	1:A:125:GLU:CG	0.45	2.42	3	7
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:CD1	0.45	2.80	3	5
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:CD	0.45	2.95	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:LEU:C	1:A:128:MET:HG3	0.45	2.37	5	1
1:A:6:ASN:CB	1:A:104:TYR:OH	0.45	2.64	6	2
1:A:46:VAL:HB	1:A:83:GLU:CB	0.45	2.41	8	4
1:A:125:GLU:OE1	1:A:165:ASN:ND2	0.45	2.49	7	1
1:A:71:GLN:HG3	1:A:91:ALA:CB	0.45	2.42	9	1
1:A:71:GLN:OE1	1:A:71:GLN:HA	0.45	2.11	10	2
1:A:112:LEU:HD12	1:A:117:ARG:N	0.45	2.27	15	1
1:A:171:VAL:HG13	1:A:196:TYR:N	0.45	2.25	15	1
1:A:141:TYR:O	1:A:143:GLN:NE2	0.45	2.49	16	1
1:A:30:GLY:C	1:A:49:GLU:OE2	0.45	2.59	1	1
1:A:107:ALA:CB	1:A:110:ILE:CD1	0.45	2.94	1	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:104:TYR:HB3	0.45	1.89	3	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:147:GLU:N	0.45	2.77	3	1
1:A:35:MET:CE	1:A:39:SER:HB3	0.45	2.42	9	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:192:ASP:C	0.45	2.59	14	2
1:A:160:ARG:HG2	1:A:161:VAL:N	0.45	2.27	16	1
1:A:7:LYS:O	1:A:10:GLN:NE2	0.45	2.50	1	1
1:A:103:PHE:CD2	1:A:134:GLY:HA2	0.45	2.47	5	3
1:A:189:GLU:C	1:A:190:ARG:HG2	0.45	2.37	3	1
1:A:71:GLN:O	1:A:71:GLN:HG3	0.45	2.12	12	2
1:A:161:VAL:O	1:A:162:MET:C	0.45	2.60	13	4
1:A:27:PRO:HD3	1:A:103:PHE:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:88:ASP:OD1	0.45	2.70	10	1
1:A:140:GLU:HG3	1:A:141:TYR:N	0.45	2.26	12	1
1:A:5:VAL:O	1:A:7:LYS:N	0.45	2.50	15	1
1:A:27:PRO:CD	1:A:105:ASP:OD1	0.45	2.65	16	1
1:A:125:GLU:CD	1:A:166:TRP:NE1	0.45	2.74	19	1
1:A:6:ASN:OD1	1:A:9:LEU:CB	0.45	2.65	20	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:92:LEU:HD12	0.45	2.47	3	1
1:A:23:ARG:HD2	1:A:46:VAL:HG11	0.45	1.88	7	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:29:CYS:CB	0.45	2.32	15	2
1:A:30:GLY:HA2	1:A:49:GLU:CD	0.45	2.36	13	2
1:A:95:ARG:HB3	1:A:128:MET:O	0.45	2.12	8	1
1:A:140:GLU:O	1:A:142:ASP:O	0.45	2.34	11	5
1:A:116:MET:O	1:A:120:TYR:HB2	0.45	2.12	12	2
1:A:48:ALA:O	1:A:49:GLU:OE1	0.45	2.35	13	2
1:A:180:SER:CB	1:A:193:GLU:OE2	0.45	2.65	14	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:38:LEU:CD2	0.45	2.93	17	1
1:A:30:GLY:N	1:A:49:GLU:OE1	0.45	2.44	19	1
1:A:125:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CZ2	0.45	2.47	19	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:129:PRO:O	0.45	2.49	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:GLU:OE1	1:A:192:ASP:CG	0.45	2.60	2	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:ASN:OD1	0.45	2.35	4	3
1:A:26:VAL:O	1:A:47:GLY:HA2	0.45	2.12	5	2
1:A:139:LEU:CG	1:A:142:ASP:OD2	0.45	2.65	3	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:50:LEU:CG	0.45	2.41	8	2
1:A:97:ILE:HD12	1:A:97:ILE:O	0.45	2.12	9	1
1:A:46:VAL:CG1	1:A:97:ILE:HG12	0.45	2.42	13	1
1:A:191:MET:SD	1:A:191:MET:O	0.45	2.75	13	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:38:LEU:HD22	0.45	2.46	14	1
1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:CZ	0.45	2.42	20	1
1:A:13:TRP:HZ3	1:A:43:TYR:CE2	0.45	2.30	1	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:116:MET:HB3	0.45	1.88	2	2
1:A:168:VAL:C	1:A:196:TYR:CE1	0.45	2.95	15	2
1:A:104:TYR:CZ	1:A:135:LEU:CD1	0.45	2.95	10	1
1:A:125:GLU:HG2	1:A:166:TRP:CZ3	0.45	2.47	12	1
1:A:188:LEU:O	1:A:191:MET:CG	0.45	2.65	15	1
1:A:38:LEU:O	1:A:42:GLY:N	0.45	2.47	16	1
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:NH2	0.45	2.26	16	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:ARG:N	0.45	2.50	17	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:197:VAL:CG2	0.45	3.00	18	1
1:A:97:ILE:O	1:A:99:HIS:CD2	0.45	2.70	18	1
1:A:177:LEU:O	1:A:177:LEU:CD2	0.45	2.51	18	1
1:A:49:GLU:HB3	1:A:86:CYS:SG	0.45	2.52	20	1
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CD1	0.45	2.69	20	1
1:A:181:ALA:O	1:A:184:LEU:N	0.44	2.50	7	2
1:A:117:ARG:O	1:A:120:TYR:N	0.44	2.50	5	1
1:A:9:LEU:HA	1:A:135:LEU:CD2	0.44	2.41	11	2
1:A:112:LEU:HB2	1:A:113:PRO:HD2	0.44	1.89	12	2
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:NH2	0.44	2.80	17	2
1:A:105:ASP:CG	1:A:136:LEU:HD21	0.44	2.37	19	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:49:GLU:C	0.44	2.61	3	1
1:A:153:VAL:CG1	1:A:157:TRP:CE3	0.44	3.00	4	1
1:A:84:ILE:O	1:A:84:ILE:HG22	0.44	2.12	14	3
1:A:71:GLN:O	1:A:73:ASP:N	0.44	2.51	10	1
1:A:171:VAL:HG13	1:A:195:VAL:HG22	0.44	1.86	14	2
1:A:112:LEU:HB2	1:A:117:ARG:NE	0.44	2.27	13	1
1:A:110:ILE:CD1	1:A:139:LEU:HD12	0.44	2.42	17	1
1:A:110:ILE:HD12	1:A:150:PRO:CB	0.44	2.42	17	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:SER:N	0.44	2.27	20	1
1:A:181:ALA:O	1:A:183:GLY:N	0.44	2.51	12	4
1:A:117:ARG:CZ	1:A:158:LEU:HD11	0.44	2.42	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:LEU:CD1	1:A:50:LEU:HG	0.44	2.42	8	1
1:A:113:PRO:O	1:A:117:ARG:CG	0.44	2.66	8	2
1:A:162:MET:O	1:A:163:SER:C	0.44	2.59	10	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:38:LEU:CD2	0.44	3.00	14	1
1:A:179:SER:CB	1:A:193:GLU:OE2	0.44	2.65	20	2
1:A:168:VAL:HG23	1:A:196:TYR:CE2	0.44	2.48	16	1
1:A:31:LYS:HE3	1:A:58:TYR:CZ	0.44	2.47	17	1
1:A:168:VAL:CG1	1:A:196:TYR:HB3	0.44	2.41	19	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:89:PHE:CD2	0.44	3.00	20	1
1:A:121:VAL:O	1:A:125:GLU:HG3	0.44	2.13	18	5
1:A:156:THR:CG2	1:A:157:TRP:N	0.44	2.80	4	1
1:A:34:ASP:O	1:A:38:LEU:CD2	0.44	2.56	6	2
1:A:37:TRP:O	1:A:41:GLN:N	0.44	2.50	6	1
1:A:113:PRO:HD2	1:A:116:MET:HB3	0.44	1.88	9	4
1:A:129:PRO:O	1:A:130:GLN:CD	0.44	2.59	6	1
1:A:47:GLY:C	1:A:85:TRP:NE1	0.44	2.76	9	1
1:A:113:PRO:O	1:A:117:ARG:N	0.44	2.47	16	1
1:A:6:ASN:HA	1:A:179:SER:CB	0.44	2.43	19	1
1:A:146:LEU:O	1:A:147:GLU:C	0.44	2.61	3	3
1:A:47:GLY:O	1:A:85:TRP:NE1	0.44	2.51	4	1
1:A:50:LEU:HD13	1:A:88:ASP:HA	0.44	1.88	7	1
1:A:147:GLU:O	1:A:147:GLU:CD	0.44	2.61	9	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:184:LEU:CD1	0.44	2.96	12	1
1:A:74:PHE:HB3	1:A:88:ASP:CG	0.44	2.38	13	1
1:A:51:SER:CB	1:A:54:ALA:HB3	0.44	2.40	15	2
1:A:154:PRO:O	1:A:156:THR:N	0.44	2.50	19	2
1:A:168:VAL:HA	1:A:198:LEU:CA	0.44	2.42	19	1
1:A:103:PHE:CE2	1:A:105:ASP:HB2	0.44	2.47	7	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:197:VAL:CG2	0.44	2.37	18	2
1:A:69:THR:CG2	1:A:76:VAL:HB	0.44	2.42	20	4
1:A:177:LEU:O	1:A:178:HIS:C	0.44	2.60	7	2
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:99:HIS:CA	1:A:129:PRO:CB	0.44	2.96	15	1
1:A:132:CYS:CB	1:A:200:ARG:NH1	0.44	2.81	15	1
1:A:110:ILE:HD12	1:A:150:PRO:HB3	0.44	1.88	17	1
1:A:129:PRO:CD	1:A:200:ARG:HD3	0.44	2.43	20	1
1:A:18:VAL:O	1:A:43:TYR:OH	0.44	2.35	1	2
1:A:46:VAL:HA	1:A:83:GLU:O	0.44	2.13	2	1
1:A:29:CYS:HB3	1:A:35:MET:HE3	0.44	1.87	4	1
1:A:110:ILE:N	1:A:110:ILE:HD13	0.44	2.27	18	5
1:A:166:TRP:HD1	1:A:166:TRP:H	0.44	1.55	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:LEU:HD22	1:A:188:LEU:CG	0.44	2.42	14	3
1:A:168:VAL:HG22	1:A:198:LEU:CD2	0.44	2.43	14	1
1:A:99:HIS:HA	1:A:129:PRO:HB3	0.44	1.90	15	1
1:A:136:LEU:HD21	1:A:138:THR:HG23	0.44	1.89	15	1
1:A:129:PRO:HD2	1:A:200:ARG:HD3	0.44	1.90	16	2
1:A:125:GLU:OE2	1:A:165:ASN:HB3	0.44	2.12	19	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:50:LEU:CB	0.44	2.42	20	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:105:ASP:C	0.44	3.01	20	1
1:A:24:VAL:HB	1:A:38:LEU:HD13	0.44	1.89	2	1
1:A:39:SER:O	1:A:42:GLY:N	0.44	2.49	20	2
1:A:35:MET:CE	1:A:39:SER:CB	0.44	2.96	9	1
1:A:46:VAL:CG1	1:A:83:GLU:HB3	0.44	2.32	9	2
1:A:186:ALA:HB3	1:A:188:LEU:CD1	0.44	2.40	14	4
1:A:104:TYR:CD1	1:A:105:ASP:N	0.44	2.86	16	1
1:A:125:GLU:HA	1:A:128:MET:HG3	0.44	1.90	16	1
1:A:71:GLN:O	1:A:71:GLN:OE1	0.44	2.36	4	3
1:A:142:ASP:C	1:A:143:GLN:HG3	0.44	2.37	7	1
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:CG1	0.44	2.66	10	1
1:A:92:LEU:O	1:A:93:THR:CB	0.44	2.66	11	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:195:VAL:HB	0.44	2.41	14	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:153:VAL:HG11	0.44	1.89	14	2
1:A:33:GLN:NE2	1:A:179:SER:O	0.44	2.51	19	1
1:A:106:ARG:O	1:A:107:ALA:C	0.43	2.61	10	3
1:A:125:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CE2	0.43	2.48	4	1
1:A:6:ASN:HB3	1:A:9:LEU:CB	0.43	2.43	10	6
1:A:74:PHE:CB	1:A:88:ASP:OD1	0.43	2.66	6	1
1:A:99:HIS:N	1:A:129:PRO:CB	0.43	2.81	15	2
1:A:30:GLY:HA3	1:A:49:GLU:CD	0.43	2.37	8	2
1:A:66:PRO:HB2	1:A:78:ALA:O	0.43	2.13	10	2
1:A:104:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HB3	0.43	2.48	10	1
1:A:125:GLU:OE1	1:A:200:ARG:CG	0.43	2.65	12	1
1:A:23:ARG:HG3	1:A:97:ILE:O	0.43	2.14	19	5
1:A:148:GLY:O	1:A:150:PRO:HD3	0.43	2.13	18	3
1:A:59:PHE:N	1:A:59:PHE:HD1	0.43	2.11	12	4
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLY:CA	0.43	2.65	16	2
1:A:140:GLU:CG	1:A:192:ASP:HB2	0.43	2.43	5	1
1:A:89:PHE:O	1:A:90:PHE:HB2	0.43	2.12	8	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:50:LEU:HD23	0.43	2.40	12	1
1:A:142:ASP:O	1:A:150:PRO:HG2	0.43	2.14	13	1
1:A:146:LEU:HG	1:A:188:LEU:HD11	0.43	1.90	18	1
1:A:168:VAL:CG1	1:A:196:TYR:OH	0.43	2.60	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ASN:O	1:A:18:VAL:C	0.43	2.61	14	3
1:A:49:GLU:OE1	1:A:51:SER:N	0.43	2.51	2	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:189:GLU:CA	0.43	2.43	4	2
1:A:109:MET:HB2	1:A:117:ARG:CD	0.43	2.43	16	2
1:A:74:PHE:HB2	1:A:88:ASP:CG	0.43	2.38	13	1
1:A:27:PRO:C	1:A:28:LEU:CD2	0.43	2.88	16	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:84:ILE:N	0.43	2.28	17	1
1:A:142:ASP:OD2	1:A:150:PRO:HG3	0.43	2.12	18	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD12	0.43	2.38	19	2
1:A:79:ALA:HB1	1:A:80:PRO:HD2	0.43	1.90	6	1
1:A:119:ARG:HD3	1:A:123:HIS:CE1	0.43	2.48	7	1
1:A:6:ASN:HD21	1:A:137:ILE:HD12	0.43	1.74	9	1
1:A:13:TRP:HZ3	1:A:104:TYR:CE1	0.43	2.31	10	1
1:A:34:ASP:OD2	1:A:38:LEU:HD11	0.43	2.14	14	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:146:LEU:CD2	0.43	2.43	16	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:105:ASP:CA	0.43	3.06	20	1
1:A:102:ALA:N	1:A:132:CYS:HB3	0.43	2.27	4	3
1:A:26:VAL:CG2	1:A:29:CYS:HB3	0.43	2.42	17	4
1:A:121:VAL:O	1:A:166:TRP:CH2	0.43	2.71	8	1
1:A:28:LEU:O	1:A:106:ARG:CZ	0.43	2.67	10	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:PHE:CG	0.43	2.71	14	1
1:A:140:GLU:CG	1:A:194:HIS:HB2	0.43	2.44	14	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:LEU:CD2	0.43	2.91	16	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:146:LEU:HD23	0.43	1.89	16	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:139:LEU:N	0.43	2.28	3	1
1:A:94:ALA:N	1:A:127:LEU:HD13	0.43	2.27	4	1
1:A:28:LEU:CG	1:A:50:LEU:HG	0.43	2.44	8	2
1:A:90:PHE:O	1:A:91:ALA:HB2	0.43	2.12	8	2
1:A:9:LEU:HD22	1:A:104:TYR:CE2	0.43	2.47	10	1
1:A:161:VAL:CG2	1:A:162:MET:N	0.43	2.80	12	2
1:A:112:LEU:HB2	1:A:117:ARG:CZ	0.43	2.42	13	1
1:A:32:SER:HB3	1:A:181:ALA:CB	0.43	2.44	15	1
1:A:46:VAL:HG11	1:A:97:ILE:HD11	0.43	1.89	16	1
1:A:113:PRO:O	1:A:114:ALA:C	0.43	2.61	16	1
1:A:97:ILE:C	1:A:99:HIS:CD2	0.43	2.96	18	1
1:A:18:VAL:HG13	1:A:43:TYR:HE2	0.43	1.73	19	1
1:A:117:ARG:HH22	1:A:158:LEU:HD11	0.43	1.72	19	1
1:A:138:THR:C	1:A:139:LEU:CD2	0.43	2.81	19	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:68:ILE:HD12	0.43	2.49	1	1
1:A:42:GLY:C	1:A:43:TYR:CD1	0.43	2.97	17	3
1:A:124:LEU:C	1:A:126:ALA:N	0.43	2.76	11	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:LEU:HD12	1:A:198:LEU:HD21	0.43	1.90	17	2
1:A:34:ASP:OD1	1:A:104:TYR:CD2	0.43	2.71	14	1
1:A:125:GLU:CD	1:A:165:ASN:HB2	0.43	2.39	19	1
1:A:189:GLU:O	1:A:189:GLU:CG	0.43	2.66	2	1
1:A:189:GLU:O	1:A:190:ARG:HB2	0.43	2.12	6	3
1:A:160:ARG:CG	1:A:161:VAL:N	0.43	2.82	3	6
1:A:6:ASN:CB	1:A:9:LEU:HB3	0.43	2.43	10	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:97:ILE:CD1	0.43	2.44	5	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:N	0.43	2.52	6	1
1:A:71:GLN:CD	1:A:91:ALA:CB	0.43	2.92	9	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:84:ILE:CB	0.43	2.34	9	1
1:A:177:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:104:TYR:CD1	1:A:135:LEU:HB3	0.43	2.48	10	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:59:PHE:CZ	0.43	3.00	13	1
1:A:109:MET:HA	1:A:112:LEU:CG	0.43	2.44	14	1
1:A:99:HIS:N	1:A:129:PRO:CG	0.43	2.82	15	1
1:A:109:MET:HB2	1:A:117:ARG:NE	0.43	2.28	16	1
1:A:116:MET:HA	1:A:116:MET:CE	0.43	2.40	18	1
1:A:142:ASP:HB3	1:A:188:LEU:HD21	0.43	1.90	18	1
1:A:151:PHE:O	1:A:153:VAL:N	0.43	2.51	18	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:97:ILE:CD1	0.43	2.44	20	1
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:HG13	0.43	1.91	6	1
1:A:137:ILE:HG23	1:A:193:GLU:OE2	0.43	2.13	6	1
1:A:28:LEU:O	1:A:106:ARG:NE	0.43	2.51	8	1
1:A:17:ASN:O	1:A:17:ASN:CG	0.43	2.61	19	2
1:A:169:THR:O	1:A:170:LYS:C	0.43	2.62	15	1
1:A:88:ASP:OD1	1:A:89:PHE:N	0.43	2.51	18	1
1:A:102:ALA:C	1:A:200:ARG:HH22	0.43	2.21	6	1
1:A:18:VAL:CG1	1:A:22:ALA:HB3	0.43	2.44	18	2
1:A:172:GLY:CA	1:A:195:VAL:HG13	0.43	2.44	12	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:86:CYS:HA	0.43	2.44	14	1
1:A:6:ASN:OD1	1:A:179:SER:O	0.43	2.37	15	1
1:A:33:GLN:HE22	1:A:181:ALA:HB2	0.43	1.74	16	1
1:A:34:ASP:OD2	1:A:35:MET:SD	0.43	2.77	19	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:50:LEU:HB2	0.43	2.44	20	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:SER:CB	0.42	2.66	1	1
1:A:121:VAL:HB	1:A:162:MET:CG	0.42	2.44	20	5
1:A:155:GLN:CB	1:A:196:TYR:CE2	0.42	3.02	3	1
1:A:125:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CH2	0.42	2.49	4	1
1:A:146:LEU:CG	1:A:188:LEU:HD21	0.42	2.38	6	4
1:A:97:ILE:CD1	1:A:97:ILE:C	0.42	2.92	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:PHE:HB3	1:A:200:ARG:NH2	0.42	2.29	6	1
1:A:25:LEU:O	1:A:103:PHE:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:109:MET:CB	1:A:117:ARG:HD3	0.42	2.44	13	1
1:A:28:LEU:O	1:A:28:LEU:CD2	0.42	2.67	14	1
1:A:68:ILE:CG2	1:A:75:LYS:HE2	0.42	2.44	16	1
1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	0.42	1.74	19	1
1:A:188:LEU:C	1:A:189:GLU:CG	0.42	2.92	20	1
1:A:124:LEU:O	1:A:128:MET:SD	0.42	2.76	4	1
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:ILE:CG1	0.42	2.44	6	1
1:A:109:MET:HA	1:A:117:ARG:NH1	0.42	2.28	13	1
1:A:191:MET:HE1	1:A:193:GLU:HB2	0.42	1.91	13	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:157:TRP:CH2	0.42	3.02	15	1
1:A:113:PRO:HD2	1:A:116:MET:HB2	0.42	1.91	19	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:142:ASP:OD2	0.42	2.64	19	1
1:A:124:LEU:HD13	1:A:128:MET:HG2	0.42	1.91	13	2
1:A:34:ASP:OD1	1:A:35:MET:N	0.42	2.48	3	1
1:A:109:MET:HE2	1:A:158:LEU:CD1	0.42	2.19	5	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:CA	0.42	2.81	13	1
1:A:68:ILE:HD13	1:A:77:TYR:HA	0.42	1.89	17	1
1:A:107:ALA:HB2	1:A:137:ILE:O	0.42	2.14	1	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:34:ASP:HA	0.42	1.90	4	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:97:ILE:HG12	0.42	2.44	7	1
1:A:110:ILE:CG1	1:A:150:PRO:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:97:ILE:HG13	1:A:98:GLY:N	0.42	2.29	15	2
1:A:141:TYR:CG	1:A:191:MET:HA	0.42	2.49	9	2
1:A:8:ASP:OD1	1:A:171:VAL:CG2	0.42	2.67	10	1
1:A:75:LYS:O	1:A:88:ASP:OD1	0.42	2.38	13	1
1:A:21:GLY:O	1:A:22:ALA:O	0.42	2.35	16	2
1:A:139:LEU:CD2	1:A:191:MET:SD	0.42	3.08	18	1
1:A:189:GLU:C	1:A:190:ARG:HG3	0.42	2.39	19	1
1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:HD23	0.42	2.30	1	1
1:A:160:ARG:HG3	1:A:161:VAL:HG12	0.42	1.92	1	2
1:A:109:MET:HB3	1:A:117:ARG:CD	0.42	2.44	5	1
1:A:58:TYR:CE2	1:A:77:TYR:CE1	0.42	3.08	7	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:86:CYS:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:28:LEU:CA	1:A:48:ALA:O	0.42	2.68	19	1
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:CD2	0.42	2.82	2	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:O	0.42	2.13	3	3
1:A:106:ARG:CZ	1:A:182:ARG:HG3	0.42	2.45	3	1
1:A:155:GLN:HG3	1:A:196:TYR:CD2	0.42	2.50	3	1
1:A:142:ASP:O	1:A:150:PRO:HD2	0.42	2.15	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:TYR:O	1:A:143:GLN:HG2	0.42	2.15	7	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:89:PHE:CD2	0.42	2.50	6	1
1:A:23:ARG:HB3	1:A:97:ILE:O	0.42	2.12	7	3
1:A:47:GLY:C	1:A:84:ILE:HD13	0.42	2.40	13	1
1:A:144:ALA:C	1:A:145:LEU:CG	0.42	2.92	14	1
1:A:166:TRP:HA	1:A:199:GLU:O	0.42	2.15	16	3
1:A:125:GLU:OE2	1:A:165:ASN:C	0.42	2.63	19	1
1:A:158:LEU:HD21	1:A:162:MET:SD	0.42	2.54	1	1
1:A:189:GLU:O	1:A:189:GLU:OE2	0.42	2.38	4	1
1:A:162:MET:HG2	1:A:166:TRP:CE2	0.42	2.50	12	1
1:A:104:TYR:HH	1:A:137:ILE:HG13	0.42	1.75	15	1
1:A:24:VAL:HA	1:A:102:ALA:O	0.42	2.14	8	4
1:A:142:ASP:CB	1:A:146:LEU:CD1	0.42	2.98	1	1
1:A:95:ARG:CA	1:A:127:LEU:O	0.42	2.68	3	1
1:A:102:ALA:CA	1:A:132:CYS:HB3	0.42	2.44	8	2
1:A:155:GLN:CB	1:A:196:TYR:CZ	0.42	3.02	4	1
1:A:195:VAL:HG12	1:A:196:TYR:N	0.42	2.30	5	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:117:ARG:CD	0.42	2.44	9	1
1:A:6:ASN:CB	1:A:9:LEU:CB	0.42	2.98	10	1
1:A:6:ASN:OD1	1:A:104:TYR:OH	0.42	2.38	14	1
1:A:158:LEU:HB3	1:A:196:TYR:CE2	0.42	2.49	16	1
1:A:29:CYS:HB3	1:A:35:MET:HE1	0.42	1.90	19	1
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:H	0.42	1.75	20	1
1:A:30:GLY:HA2	1:A:84:ILE:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:125:GLU:CD	1:A:200:ARG:CZ	0.42	2.93	10	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:191:MET:HE2	0.42	1.90	10	1
1:A:119:ARG:C	1:A:119:ARG:HD2	0.42	2.38	12	1
1:A:7:LYS:CE	1:A:173:GLY:HA3	0.42	2.45	14	1
1:A:169:THR:N	1:A:196:TYR:CE1	0.42	2.88	15	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:71:GLN:OE1	0.42	2.13	17	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:91:ALA:N	0.42	2.88	17	1
1:A:95:ARG:HB2	1:A:127:LEU:O	0.42	2.15	3	2
1:A:200:ARG:O	1:A:200:ARG:HG3	0.42	2.14	8	1
1:A:26:VAL:O	1:A:47:GLY:HA3	0.42	2.15	14	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:194:HIS:CG	0.42	2.73	14	1
1:A:6:ASN:HB2	1:A:9:LEU:CB	0.42	2.44	20	2
1:A:64:GLU:O	1:A:66:PRO:CD	0.42	2.68	17	1
1:A:124:LEU:CD2	1:A:128:MET:HG2	0.42	2.44	19	1
1:A:16:LEU:O	1:A:17:ASN:HB3	0.41	2.15	13	3
1:A:94:ALA:CA	1:A:97:ILE:HG23	0.41	2.43	4	1
1:A:128:MET:HG3	1:A:129:PRO:HD2	0.41	1.90	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:HB1	1:A:101:ALA:HB1	0.41	1.86	5	1
1:A:27:PRO:HD3	1:A:103:PHE:CD1	0.41	2.50	9	1
1:A:155:GLN:HB2	1:A:196:TYR:CD1	0.41	2.50	12	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:141:TYR:N	0.41	2.78	13	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:197:VAL:HB	0.41	2.49	14	1
1:A:66:PRO:HB2	1:A:77:TYR:CD1	0.41	2.50	14	1
1:A:99:HIS:HA	1:A:129:PRO:CB	0.41	2.45	15	1
1:A:177:LEU:HD21	1:A:190:ARG:N	0.41	2.28	19	1
1:A:131:ALA:O	1:A:132:CYS:SG	0.41	2.78	8	4
1:A:50:LEU:CD2	1:A:89:PHE:N	0.41	2.83	7	1
1:A:26:VAL:HG21	1:A:29:CYS:SG	0.41	2.55	11	1
1:A:109:MET:HB3	1:A:117:ARG:NH1	0.41	2.30	16	1
1:A:155:GLN:O	1:A:196:TYR:OH	0.41	2.37	16	1
1:A:57:ARG:O	1:A:57:ARG:HG2	0.41	2.15	17	1
1:A:125:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CZ3	0.41	2.50	19	1
1:A:46:VAL:HA	1:A:83:GLU:CB	0.41	2.46	8	1
1:A:138:THR:O	1:A:194:HIS:O	0.41	2.38	19	2
1:A:103:PHE:CE1	1:A:200:ARG:HB2	0.41	2.50	12	1
1:A:35:MET:CE	1:A:84:ILE:HG13	0.41	2.40	14	1
1:A:135:LEU:HG	1:A:137:ILE:HD11	0.41	1.91	14	1
1:A:110:ILE:CD1	1:A:150:PRO:HB3	0.41	2.46	17	1
1:A:51:SER:HB2	1:A:54:ALA:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:138:THR:HG22	0.41	2.45	19	1
1:A:189:GLU:O	1:A:189:GLU:HG2	0.41	2.14	19	1
1:A:158:LEU:HG	1:A:162:MET:SD	0.41	2.55	1	3
1:A:110:ILE:CD1	1:A:110:ILE:N	0.41	2.84	5	1
1:A:48:ALA:HB2	1:A:85:TRP:CH2	0.41	2.50	9	1
1:A:113:PRO:C	1:A:117:ARG:HD3	0.41	2.40	10	1
1:A:188:LEU:O	1:A:189:GLU:CB	0.41	2.67	13	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:16:LEU:HD12	0.41	1.92	14	1
1:A:109:MET:O	1:A:112:LEU:O	0.41	2.38	18	1
1:A:169:THR:HB	1:A:197:VAL:HG12	0.41	1.92	1	1
1:A:117:ARG:NH2	1:A:151:PHE:CD2	0.41	2.88	2	1
1:A:169:THR:N	1:A:196:TYR:CD1	0.41	2.89	3	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:106:ARG:HG2	0.41	2.30	4	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:89:PHE:CD2	0.41	3.03	6	1
1:A:25:LEU:C	1:A:26:VAL:HG13	0.41	2.40	10	1
1:A:103:PHE:O	1:A:134:GLY:CA	0.41	2.66	10	1
1:A:125:GLU:OE1	1:A:200:ARG:NH1	0.41	2.53	12	2
1:A:23:ARG:NH1	1:A:44:HIS:CD2	0.41	2.89	12	1
1:A:157:TRP:CD2	1:A:161:VAL:CG1	0.41	3.03	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:GLU:O	1:A:56:GLU:OE2	0.41	2.38	14	1
1:A:27:PRO:O	1:A:29:CYS:SG	0.41	2.78	20	2
1:A:121:VAL:CB	1:A:162:MET:HG2	0.41	2.45	20	1
1:A:13:TRP:CH2	1:A:38:LEU:HD11	0.41	2.51	1	1
1:A:23:ARG:HB2	1:A:98:GLY:O	0.41	2.16	2	1
1:A:103:PHE:CZ	1:A:105:ASP:CG	0.41	2.98	2	1
1:A:129:PRO:C	1:A:200:ARG:HD2	0.41	2.40	7	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:191:MET:CE	0.41	2.96	11	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:89:PHE:HB3	0.41	1.91	12	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:191:MET:SD	0.41	2.55	14	1
1:A:6:ASN:CG	1:A:179:SER:O	0.41	2.64	15	1
1:A:99:HIS:CA	1:A:129:PRO:HB3	0.41	2.46	15	1
1:A:155:GLN:CD	1:A:155:GLN:O	0.41	2.64	17	1
1:A:12:TYR:O	1:A:15:SER:N	0.41	2.54	20	1
1:A:71:GLN:O	1:A:74:PHE:HB2	0.41	2.16	20	1
1:A:139:LEU:HB2	1:A:142:ASP:OD2	0.41	2.15	2	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:89:PHE:HB3	0.41	1.93	6	2
1:A:147:GLU:O	1:A:147:GLU:CG	0.41	2.68	7	1
1:A:167:GLU:O	1:A:197:VAL:O	0.41	2.39	11	1
1:A:68:ILE:CG2	1:A:75:LYS:HD3	0.41	2.46	14	1
1:A:93:THR:HG22	1:A:95:ARG:CD	0.41	2.45	1	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:97:ILE:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:32:SER:O	1:A:36:SER:OG	0.41	2.38	5	1
1:A:135:LEU:O	1:A:137:ILE:HD12	0.41	2.14	6	1
1:A:71:GLN:O	1:A:71:GLN:NE2	0.41	2.54	7	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:94:ALA:HA	0.41	1.93	9	1
1:A:157:TRP:CE3	1:A:158:LEU:HG	0.41	2.51	10	1
1:A:174:GLN:HA	1:A:192:ASP:HA	0.41	1.93	16	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:142:ASP:OD2	0.41	2.15	20	1
1:A:183:GLY:HA3	1:A:191:MET:HE2	0.41	1.92	1	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:51:SER:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:109:MET:HE3	1:A:109:MET:HB3	0.41	1.81	3	1
1:A:124:LEU:HD22	1:A:127:LEU:CD1	0.41	2.45	3	1
1:A:139:LEU:HD21	1:A:150:PRO:HG2	0.41	1.86	3	1
1:A:121:VAL:CG2	1:A:162:MET:HG2	0.41	2.45	20	2
1:A:25:LEU:C	1:A:26:VAL:HG12	0.41	2.41	5	1
1:A:92:LEU:O	1:A:92:LEU:CD1	0.41	2.59	5	1
1:A:103:PHE:O	1:A:103:PHE:CD2	0.41	2.74	5	1
1:A:125:GLU:HB3	1:A:200:ARG:NH2	0.41	2.31	5	1
1:A:10:GLN:HG3	1:A:37:TRP:NE1	0.41	2.30	6	1
1:A:103:PHE:N	1:A:200:ARG:NH2	0.41	2.69	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:GLU:CG	1:A:141:TYR:N	0.41	2.84	7	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:189:GLU:N	0.41	2.31	7	1
1:A:27:PRO:HG2	1:A:105:ASP:OD2	0.41	2.16	10	1
1:A:171:VAL:HG13	1:A:196:TYR:HA	0.41	1.93	10	1
1:A:117:ARG:NH1	1:A:158:LEU:HD21	0.41	2.31	12	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:184:LEU:CD1	0.41	2.46	12	1
1:A:23:ARG:HG2	1:A:97:ILE:O	0.41	2.15	14	1
1:A:171:VAL:C	1:A:195:VAL:HG22	0.41	2.41	14	1
1:A:113:PRO:O	1:A:117:ARG:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD13	0.41	2.41	17	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:188:LEU:HG	0.41	1.93	19	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:N	0.41	2.30	19	1
1:A:85:TRP:CE3	1:A:88:ASP:O	0.41	2.74	20	1
1:A:105:ASP:HB3	1:A:136:LEU:HD23	0.41	1.93	20	1
1:A:162:MET:HE1	1:A:198:LEU:HD11	0.41	1.93	3	1
1:A:125:GLU:C	1:A:128:MET:HB2	0.41	2.40	4	1
1:A:109:MET:HE3	1:A:117:ARG:HD2	0.41	1.93	5	1
1:A:171:VAL:HG13	1:A:196:TYR:CA	0.41	2.46	5	1
1:A:154:PRO:HB2	1:A:156:THR:CG2	0.41	2.45	7	1
1:A:183:GLY:HA2	1:A:188:LEU:CD1	0.41	2.46	7	1
1:A:95:ARG:HG3	1:A:96:ASP:N	0.41	2.30	9	2
1:A:110:ILE:O	1:A:150:PRO:HA	0.41	2.16	9	1
1:A:175:ASP:HB2	1:A:191:MET:C	0.41	2.41	13	1
1:A:7:LYS:HD3	1:A:8:ASP:N	0.41	2.31	16	1
1:A:177:LEU:C	1:A:179:SER:H	0.41	2.23	18	1
1:A:158:LEU:CD2	1:A:168:VAL:HG11	0.41	2.43	19	1
1:A:109:MET:C	1:A:111:ALA:N	0.40	2.79	2	1
1:A:183:GLY:C	1:A:185:LYS:N	0.40	2.79	3	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:188:LEU:N	0.40	2.31	6	2
1:A:26:VAL:HB	1:A:47:GLY:HA3	0.40	1.93	9	1
1:A:162:MET:CB	1:A:168:VAL:HG11	0.40	2.46	10	1
1:A:119:ARG:HA	1:A:122:GLN:CD	0.40	2.41	12	1
1:A:175:ASP:HA	1:A:192:ASP:HA	0.40	1.93	13	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:86:CYS:SG	0.40	3.08	14	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:139:LEU:C	0.40	2.41	14	1
1:A:153:VAL:O	1:A:153:VAL:CG1	0.40	2.68	14	1
1:A:104:TYR:CD1	1:A:104:TYR:C	0.40	2.99	16	1
1:A:66:PRO:O	1:A:68:ILE:N	0.40	2.54	17	1
1:A:103:PHE:CD1	1:A:103:PHE:O	0.40	2.74	18	1
1:A:144:ALA:O	1:A:145:LEU:CB	0.40	2.69	19	1
1:A:175:ASP:N	1:A:191:MET:O	0.40	2.55	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:TRP:CZ3	1:A:158:LEU:HD12	0.40	2.51	1	1
1:A:78:ALA:HA	1:A:84:ILE:O	0.40	2.15	3	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:83:GLU:N	0.40	2.82	8	1
1:A:141:TYR:O	1:A:143:GLN:OE1	0.40	2.39	11	1
1:A:188:LEU:O	1:A:190:ARG:HG3	0.40	2.16	11	1
1:A:109:MET:HA	1:A:112:LEU:HD21	0.40	1.92	12	1
1:A:109:MET:HA	1:A:112:LEU:HG	0.40	1.93	14	1
1:A:31:LYS:C	1:A:35:MET:HB3	0.40	2.41	15	1
1:A:188:LEU:C	1:A:189:GLU:HG2	0.40	2.42	15	2
1:A:196:TYR:O	1:A:196:TYR:CD2	0.40	2.73	18	1
1:A:119:ARG:HG3	1:A:120:TYR:N	0.40	2.31	19	1
1:A:128:MET:HG3	1:A:129:PRO:CD	0.40	2.46	4	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:192:ASP:HB3	0.40	2.42	5	1
1:A:35:MET:HG3	1:A:36:SER:N	0.40	2.31	6	2
1:A:27:PRO:HG3	1:A:103:PHE:CE1	0.40	2.51	9	1
1:A:45:VAL:O	1:A:83:GLU:HB2	0.40	2.16	10	1
1:A:66:PRO:CB	1:A:78:ALA:O	0.40	2.69	10	1
1:A:64:GLU:O	1:A:65:GLN:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:109:MET:HE2	1:A:117:ARG:CZ	0.40	2.42	12	1
1:A:98:GLY:HA3	1:A:129:PRO:HG3	0.40	1.92	15	1
1:A:5:VAL:HG11	1:A:37:TRP:CD1	0.40	2.51	19	2
1:A:112:LEU:CB	1:A:113:PRO:CD	0.40	3.00	1	1
1:A:27:PRO:O	1:A:48:ALA:HB3	0.40	2.15	5	1
1:A:130:GLN:HG3	1:A:131:ALA:N	0.40	2.30	5	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:133:SER:CB	0.40	3.00	6	1
1:A:7:LYS:CE	1:A:8:ASP:OD1	0.40	2.69	10	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:117:ARG:NH2	0.40	2.31	13	1
1:A:110:ILE:O	1:A:151:PHE:HB2	0.40	2.16	14	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:LEU:HD23	0.40	2.16	15	1
1:A:171:VAL:CG1	1:A:196:TYR:CA	0.40	2.98	15	1
1:A:4:GLU:O	1:A:33:GLN:CG	0.40	2.69	19	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:133:SER:OG	0.40	2.16	20	1
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:CD2	0.40	2.90	1	1
1:A:95:ARG:HB3	1:A:127:LEU:O	0.40	2.17	1	1
1:A:39:SER:C	1:A:41:GLN:N	0.40	2.77	3	1
1:A:74:PHE:HB3	1:A:88:ASP:HB3	0.40	1.92	13	1
1:A:169:THR:O	1:A:169:THR:HG22	0.40	2.16	15	1
1:A:188:LEU:O	1:A:191:MET:HG2	0.40	2.16	15	1
1:A:157:TRP:O	1:A:161:VAL:HG13	0.40	2.16	16	1
1:A:182:ARG:NH2	1:A:185:LYS:NZ	0.40	2.70	17	1
1:A:110:ILE:HG12	1:A:150:PRO:HA	0.40	1.93	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:VAL:CA	1:A:198:LEU:HD23	0.40	2.47	18	1
1:A:198:LEU:CD2	1:A:198:LEU:N	0.40	2.81	18	1
1:A:171:VAL:HG23	1:A:172:GLY:H	0.40	1.76	20	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	198/203 (98%)	140±4 (70±2%)	39±4 (19±2%)	20±2 (10±1%)	1	9
All	All	3960/4060 (98%)	2791 (70%)	771 (19%)	398 (10%)	1	9

All 48 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	90	PHE	20
1	A	101	ALA	20
1	A	143	GLN	20
1	A	145	LEU	20
1	A	99	HIS	19
1	A	142	ASP	19
1	A	190	ARG	19
1	A	6	ASN	18
1	A	65	GLN	18
1	A	162	MET	18
1	A	141	TYR	17
1	A	164	GLY	17
1	A	165	ASN	17
1	A	28	LEU	16
1	A	22	ALA	14
1	A	91	ALA	10
1	A	107	ALA	10
1	A	129	PRO	10
1	A	3	SER	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	GLN	8
1	A	32	SER	6
1	A	152	SER	6
1	A	72	GLY	6
1	A	147	GLU	6
1	A	30	GLY	5
1	A	113	PRO	5
1	A	93	THR	4
1	A	31	LYS	4
1	A	189	GLU	4
1	A	50	LEU	3
1	A	130	GLN	3
1	A	163	SER	3
1	A	66	PRO	3
1	A	18	VAL	2
1	A	179	SER	2
1	A	148	GLY	2
1	A	171	VAL	2
1	A	182	ARG	2
1	A	200	ARG	2
1	A	128	MET	1
1	A	27	PRO	1
1	A	174	GLN	1
1	A	94	ALA	1
1	A	98	GLY	1
1	A	21	GLY	1
1	A	155	GLN	1
1	A	67	HIS	1
1	A	73	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	163/166 (98%)	95±5 (58±3%)	68±5 (42±3%)	0	4
All	All	3260/3320 (98%)	1891 (58%)	1369 (42%)	0	4

All 134 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	28	LEU	20
1	A	60	THR	20
1	A	69	THR	20
1	A	82	ILE	20
1	A	84	ILE	20
1	A	92	LEU	20
1	A	124	LEU	20
1	A	127	LEU	20
1	A	139	LEU	20
1	A	142	ASP	20
1	A	145	LEU	20
1	A	161	VAL	20
1	A	166	TRP	20
1	A	169	THR	20
1	A	198	LEU	20
1	A	7	LYS	19
1	A	49	GLU	19
1	A	83	GLU	19
1	A	97	ILE	19
1	A	146	LEU	19
1	A	162	MET	19
1	A	185	LYS	19
1	A	5	VAL	18
1	A	55	VAL	18
1	A	110	ILE	18
1	A	121	VAL	18
1	A	46	VAL	17
1	A	85	TRP	17
1	A	136	LEU	17
1	A	4	GLU	16
1	A	65	GLN	16
1	A	133	SER	16
1	A	171	VAL	16
1	A	16	LEU	15
1	A	25	LEU	15
1	A	32	SER	15
1	A	125	GLU	15
1	A	184	LEU	15
1	A	199	GLU	15
1	A	50	LEU	14
1	A	71	GLN	14
1	A	177	LEU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	200	ARG	14
1	A	67	HIS	13
1	A	77	TYR	13
1	A	112	LEU	13
1	A	135	LEU	13
1	A	90	PHE	13
1	A	106	ARG	13
1	A	99	HIS	12
1	A	170	LYS	12
1	A	44	HIS	12
1	A	109	MET	12
1	A	15	SER	11
1	A	158	LEU	11
1	A	34	ASP	11
1	A	76	VAL	11
1	A	31	LYS	10
1	A	132	CYS	10
1	A	160	ARG	10
1	A	19	VAL	10
1	A	39	SER	10
1	A	103	PHE	10
1	A	117	ARG	10
1	A	3	SER	9
1	A	26	VAL	9
1	A	38	LEU	9
1	A	93	THR	9
1	A	156	THR	9
1	A	95	ARG	9
1	A	191	MET	9
1	A	6	ASN	9
1	A	190	ARG	9
1	A	119	ARG	9
1	A	8	ASP	8
1	A	9	LEU	8
1	A	88	ASP	8
1	A	168	VAL	8
1	A	189	GLU	8
1	A	29	CYS	8
1	A	51	SER	8
1	A	35	MET	8
1	A	52	GLU	7
1	A	57	ARG	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	151	PHE	7
1	A	75	LYS	7
1	A	159	HIS	7
1	A	194	HIS	7
1	A	182	ARG	7
1	A	192	ASP	7
1	A	73	ASP	6
1	A	10	GLN	6
1	A	128	MET	6
1	A	140	GLU	6
1	A	58	TYR	6
1	A	89	PHE	5
1	A	167	GLU	5
1	A	105	ASP	5
1	A	130	GLN	5
1	A	196	TYR	5
1	A	41	GLN	5
1	A	193	GLU	5
1	A	188	LEU	5
1	A	175	ASP	5
1	A	155	GLN	5
1	A	178	HIS	5
1	A	86	CYS	4
1	A	180	SER	4
1	A	197	VAL	4
1	A	143	GLN	4
1	A	56	GLU	4
1	A	96	ASP	4
1	A	152	SER	4
1	A	174	GLN	4
1	A	36	SER	3
1	A	115	ASP	3
1	A	153	VAL	3
1	A	179	SER	3
1	A	141	TYR	3
1	A	64	GLU	2
1	A	163	SER	2
1	A	118	GLU	2
1	A	195	VAL	2
1	A	59	PHE	2
1	A	33	GLN	2
1	A	100	CYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	23	ARG	1
1	A	138	THR	1
1	A	120	TYR	1
1	A	147	GLU	1
1	A	18	VAL	1
1	A	116	MET	1
1	A	74	PHE	1
1	A	165	ASN	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