



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 03:44 AM UTC

PDB ID : 1POZ / pdb_00001poz
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE HYALURONAN BINDING DOMAIN
OF HUMAN CD44
Authors : Teriete, P.; Banerji, S.; Blundell, C.D.; Kahmann, J.D.; Pickford, A.R.;
Wright, A.J.; Campbell, I.D.; Jackson, D.G.; Day, A.J.
Deposited on : 2003-06-16

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

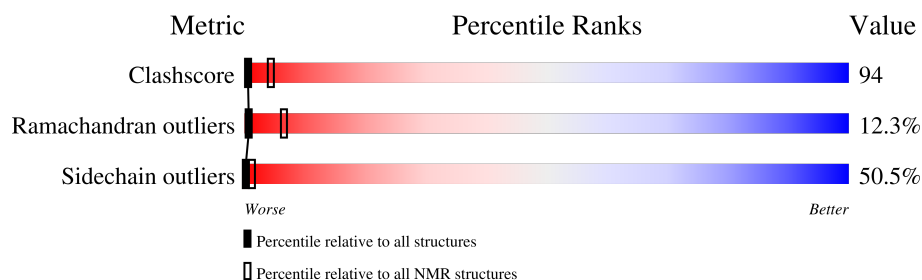
1 Overall quality at a glance

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	159	

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, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:20-A:38, A:42-A:91, A:98-A:107, A:113-A:162 (129)	1.05	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 5 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2403 atoms, of which 1170 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called CD44 antigen.

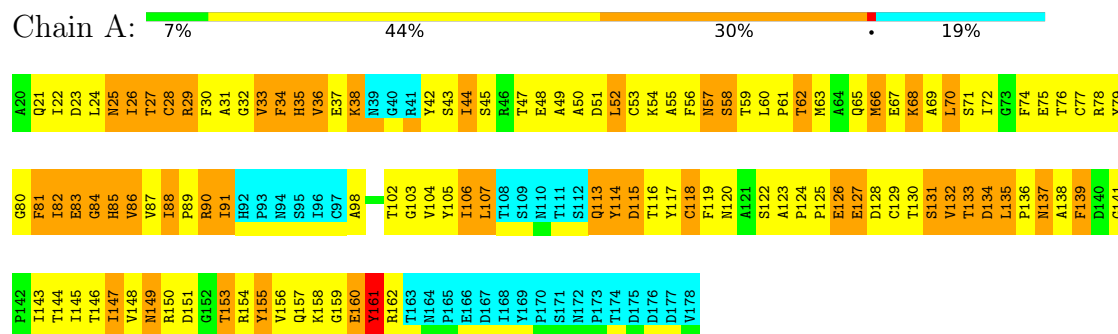
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	159	Total	C	H	N	O	S	0
			2403	767	1170	209	249	8	

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: CD44 antigen

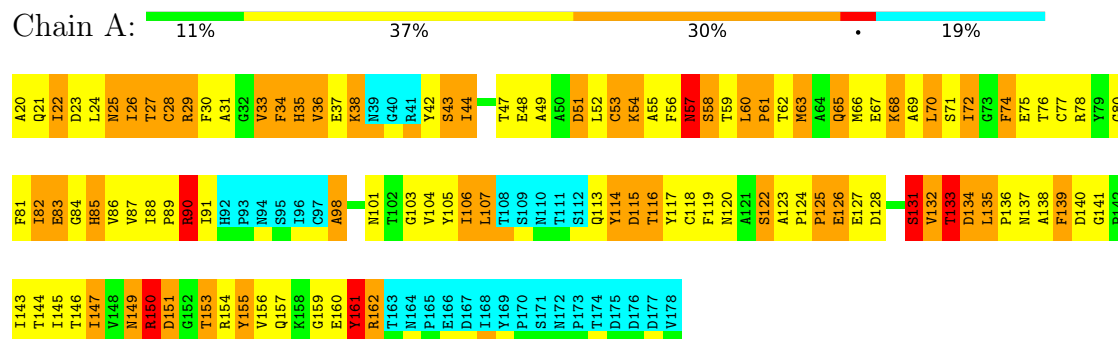


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

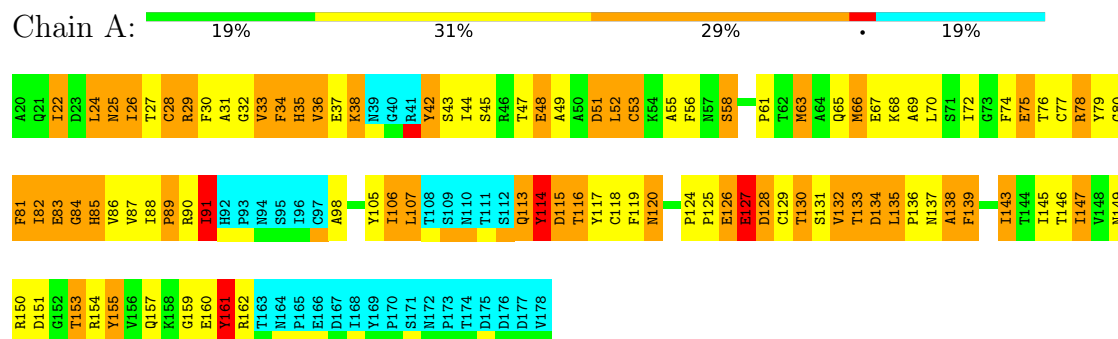
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: CD44 antigen



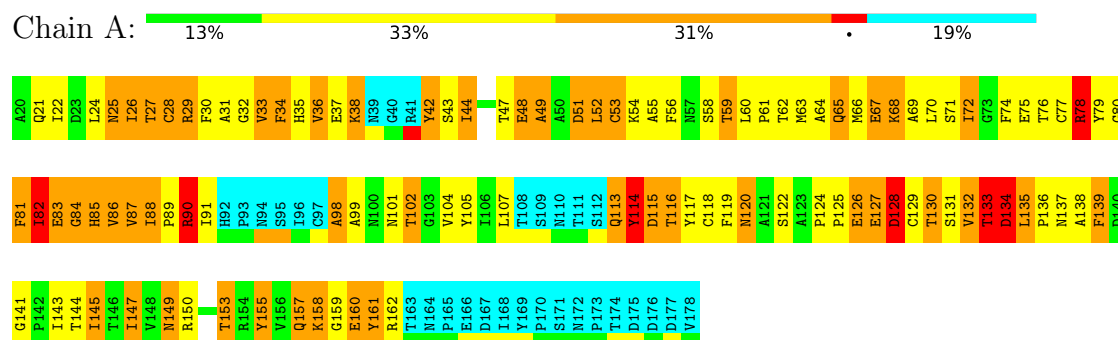
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: CD44 antigen



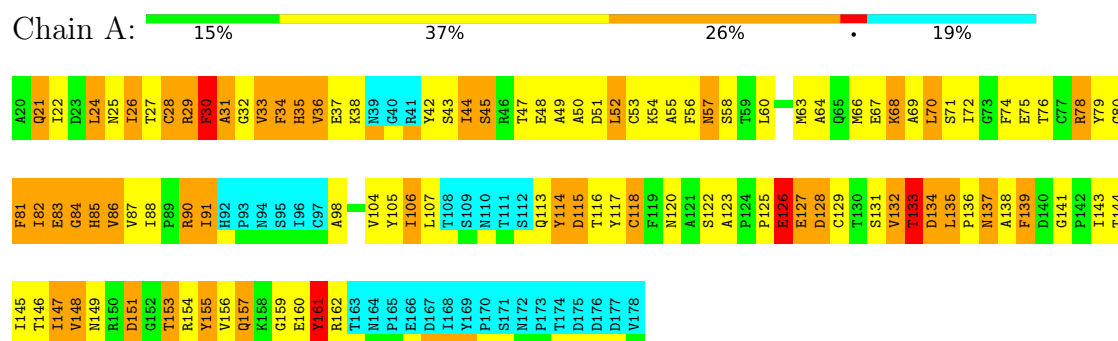
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: CD44 antigen



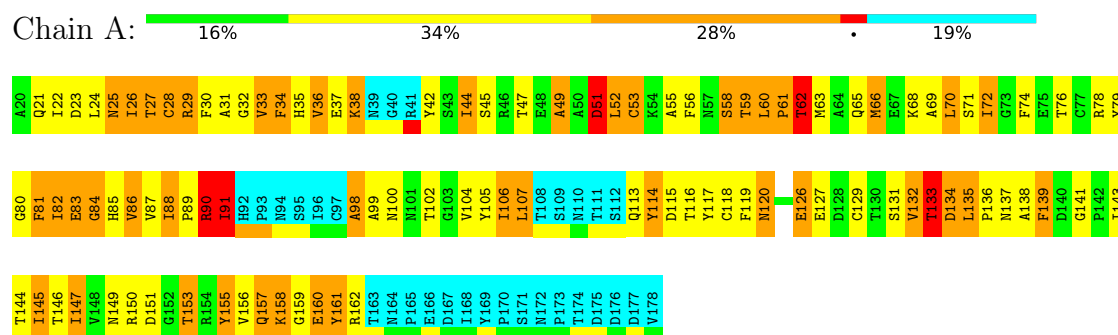
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: CD44 antigen



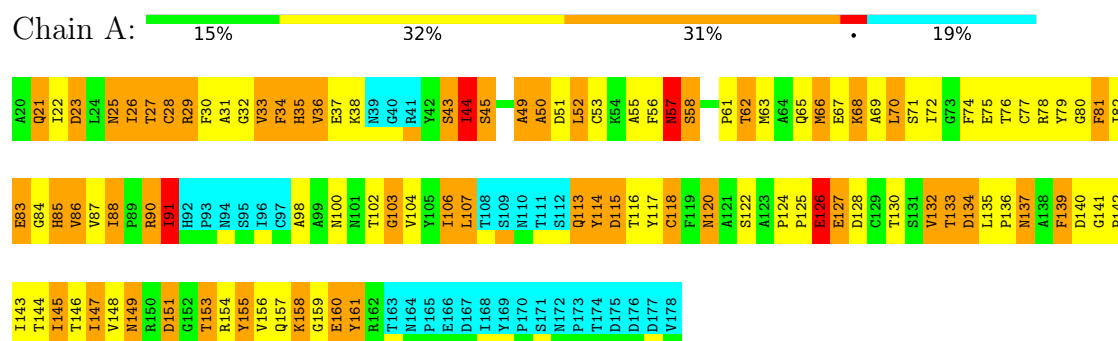
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: CD44 antigen



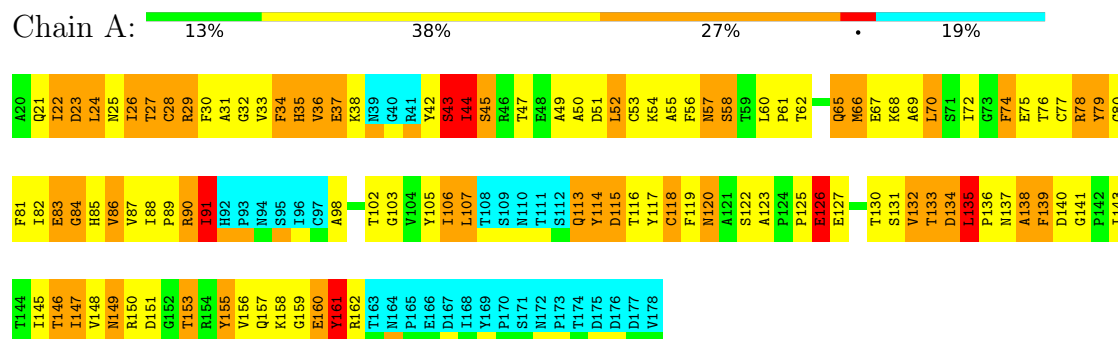
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: CD44 antigen



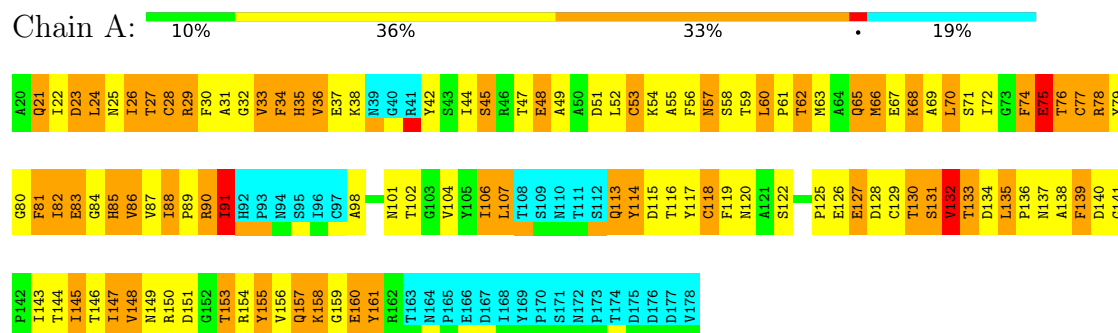
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: CD44 antigen



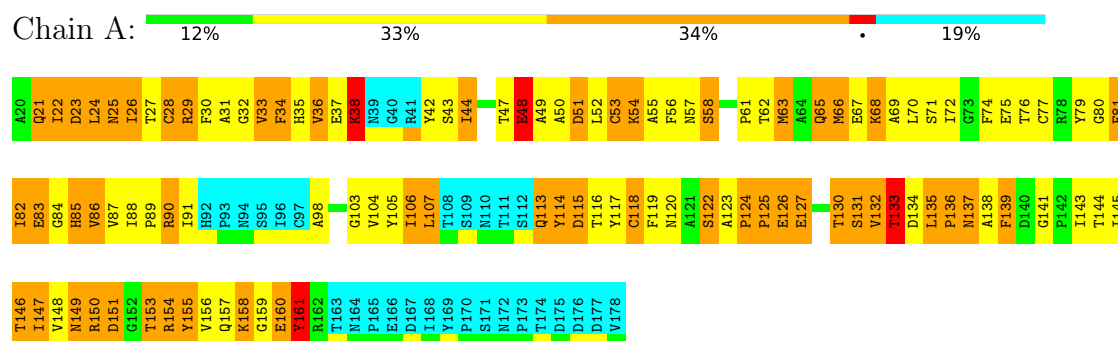
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: CD44 antigen



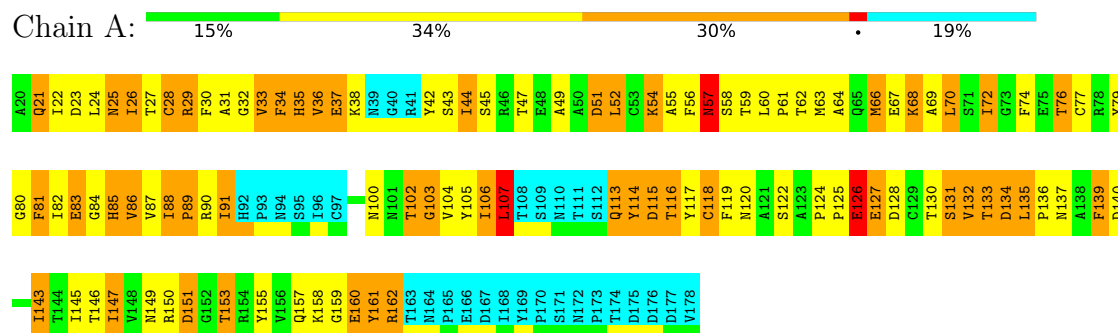
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: CD44 antigen



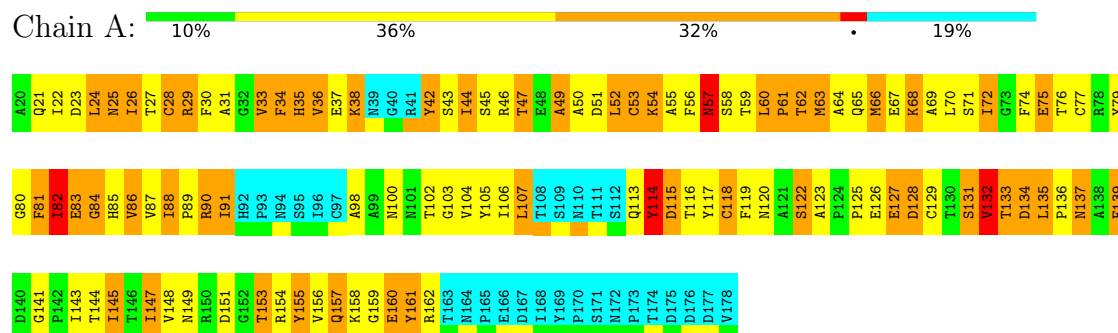
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: CD44 antigen



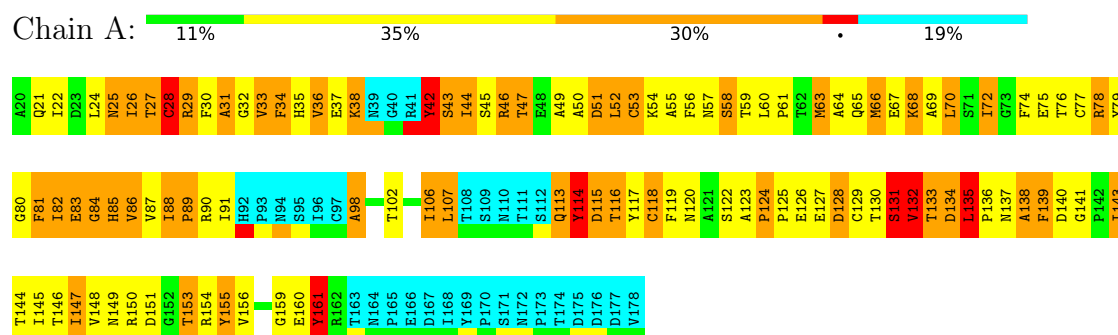
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: CD44 antigen



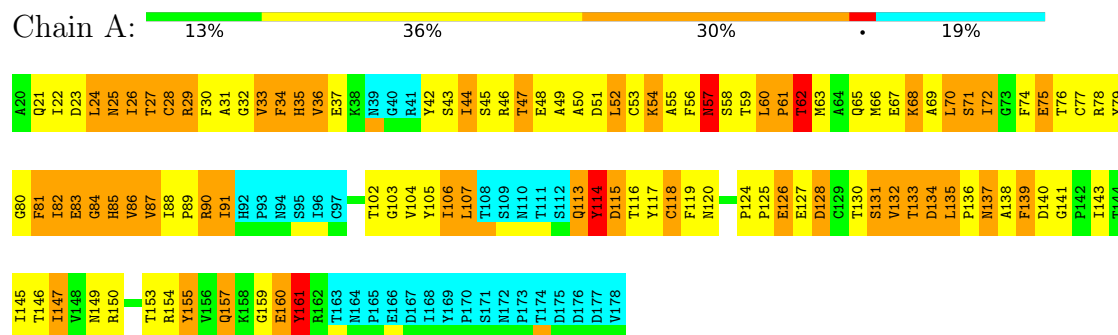
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: CD44 antigen



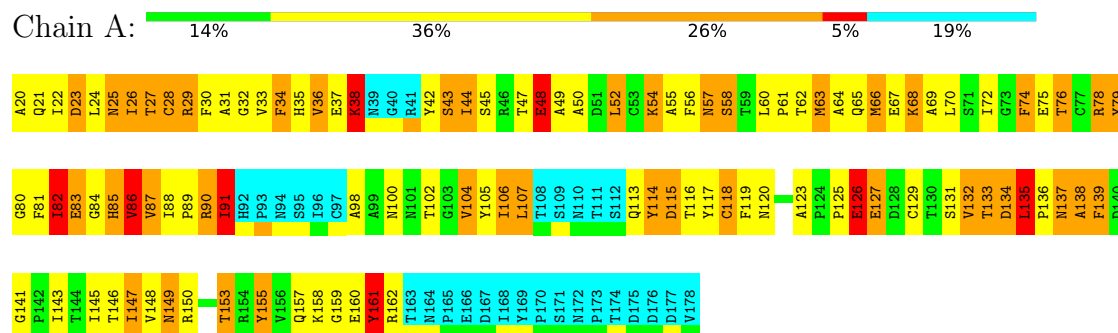
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: CD44 antigen



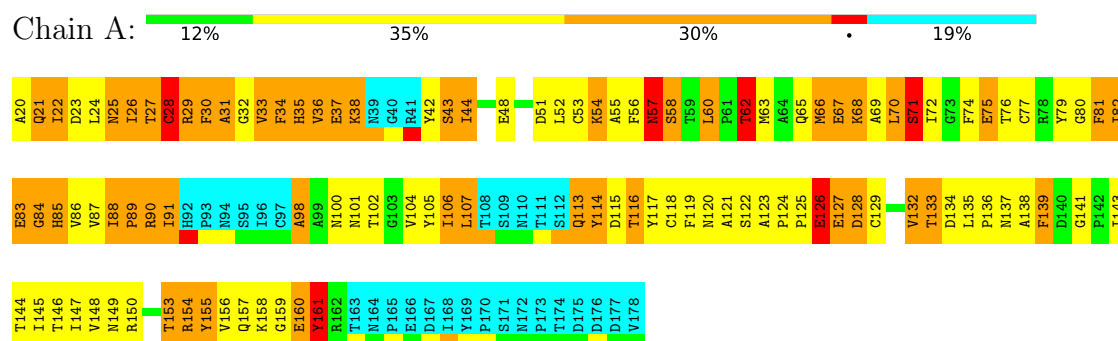
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: CD44 antigen



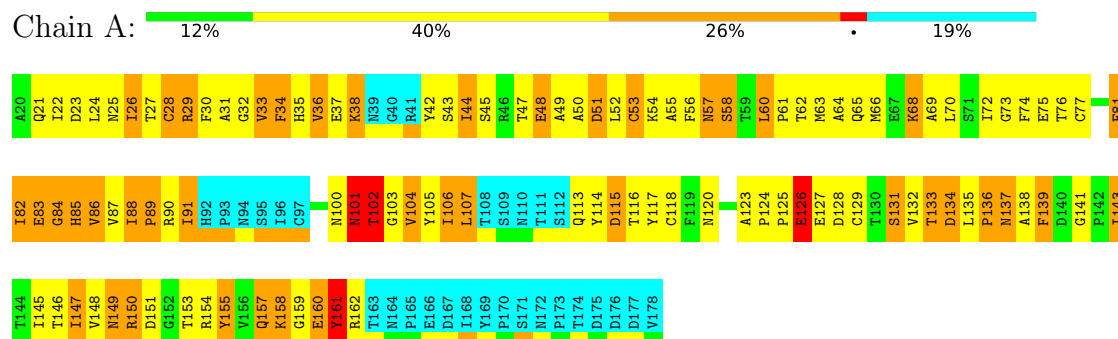
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: CD44 antigen



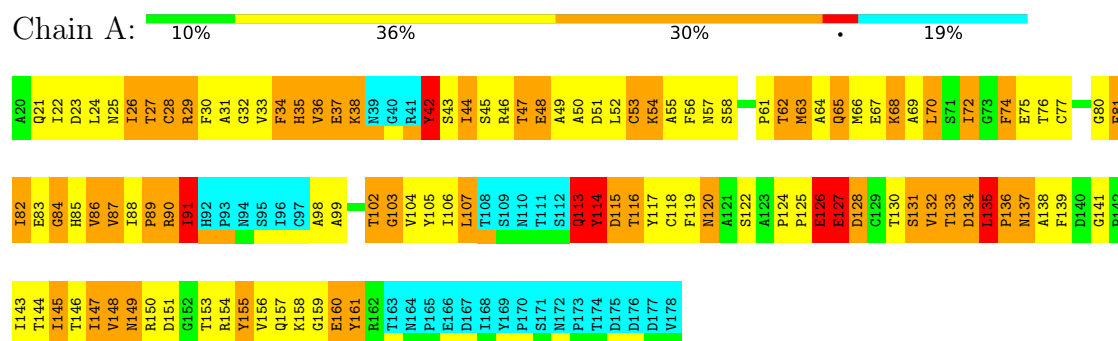
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: CD44 antigen



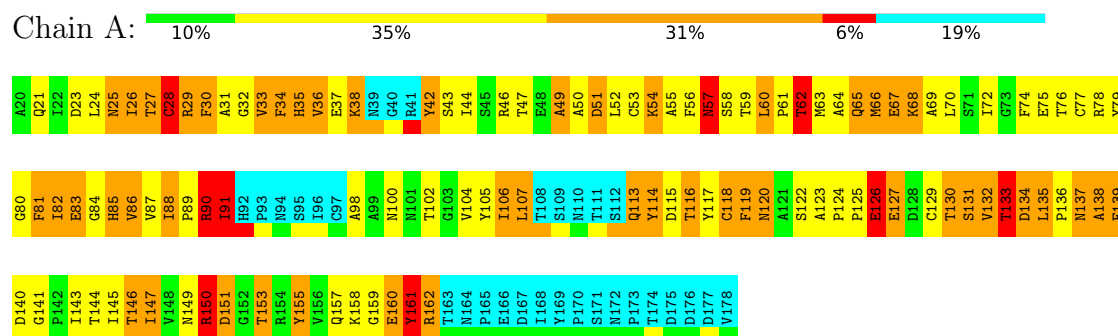
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: CD44 antigen



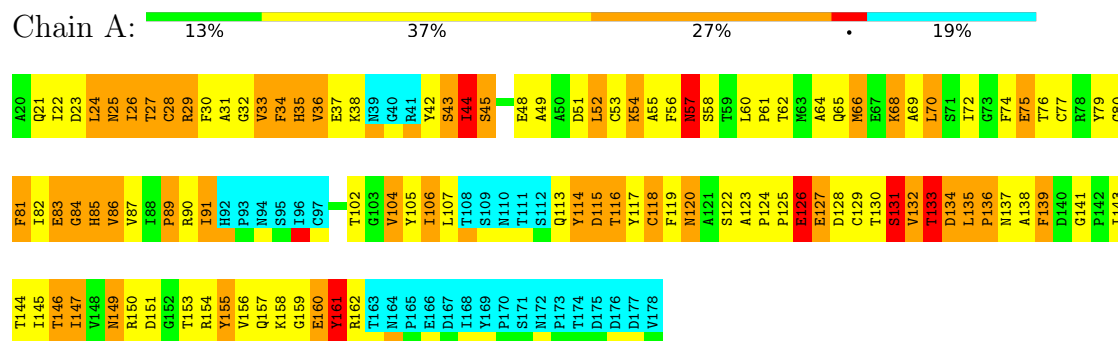
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: CD44 antigen



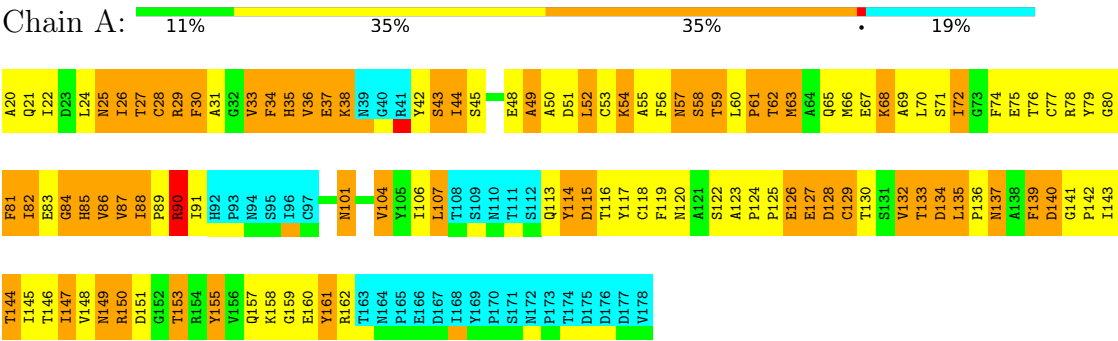
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: CD44 antigen



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: CD44 antigen



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics simulated annealing refinement by molecular dynamics*.

Of the 500 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy, target function*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
SOPHIE	structure solution	1.0
SOPHIE	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1006	974	969	185±10
All	All	20120	19480	19380	3699

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 94.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ARG:HG3	1:A:34:PHE:HB2	1.01	1.31	16	13
1:A:24:LEU:HD13	1:A:52:LEU:HD13	0.96	1.34	17	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:116:THR:HG21	0.92	1.42	7	15
1:A:29:ARG:HG3	1:A:34:PHE:HB3	0.91	1.39	19	5
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:LEU:HD23	0.91	1.42	15	2
1:A:135:LEU:N	1:A:136:PRO:HD3	0.91	1.81	17	12
1:A:24:LEU:HD12	1:A:38:LYS:HA	0.91	1.39	8	1
1:A:62:THR:HA	1:A:65:GLN:HB2	0.91	1.38	5	3
1:A:28:CYS:O	1:A:34:PHE:HA	0.90	1.67	2	20
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:HD22	0.89	1.43	18	1
1:A:68:LYS:O	1:A:72:ILE:HG23	0.89	1.68	6	19
1:A:55:ALA:HB1	1:A:135:LEU:HB3	0.89	1.41	7	19
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:HG23	0.89	2.03	18	2
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:HB2	0.88	1.69	19	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:PHE:HB3	1:A:72:ILE:HD11	0.87	1.44	1	19
1:A:34:PHE:C	1:A:34:PHE:CD1	0.87	2.53	12	13
1:A:34:PHE:CD1	1:A:34:PHE:C	0.87	2.53	9	7
1:A:31:ALA:HA	1:A:126:GLU:N	0.85	1.87	15	20
1:A:34:PHE:C	1:A:34:PHE:HD1	0.85	1.80	4	19
1:A:60:LEU:N	1:A:61:PRO:HD2	0.84	1.87	5	3
1:A:88:ILE:HB	1:A:105:TYR:HB3	0.84	1.47	16	4
1:A:24:LEU:HD22	1:A:52:LEU:HD23	0.84	1.49	11	1
1:A:65:GLN:NE2	1:A:119:PHE:HB2	0.83	1.87	14	2
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD12	0.83	1.97	6	6
1:A:37:GLU:HB2	1:A:43:SER:O	0.82	1.73	6	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:HB	0.82	1.50	12	6
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:HB3	0.82	1.50	20	5
1:A:22:ILE:HD13	1:A:143:ILE:HG23	0.82	1.51	20	2
1:A:88:ILE:HD13	1:A:89:PRO:HD2	0.81	1.51	12	4
1:A:31:ALA:HA	1:A:126:GLU:C	0.81	2.00	19	14
1:A:31:ALA:O	1:A:125:PRO:HA	0.81	1.75	15	18
1:A:134:ASP:O	1:A:135:LEU:HD23	0.81	1.75	6	2
1:A:35:HIS:ND1	1:A:76:THR:HG21	0.81	1.90	6	16
1:A:82:ILE:HD13	1:A:87:VAL:HG11	0.81	1.49	5	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:52:LEU:HD12	0.80	1.53	18	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:52:LEU:HD11	0.80	1.53	1	2
1:A:29:ARG:CG	1:A:34:PHE:HB2	0.80	2.06	16	13
1:A:133:THR:HA	1:A:147:ILE:HG13	0.80	1.53	12	8
1:A:45:SER:HB2	1:A:113:GLN:HG3	0.80	1.51	4	1
1:A:34:PHE:HD1	1:A:34:PHE:C	0.80	1.85	17	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:116:THR:HG22	0.80	1.52	18	2
1:A:33:VAL:HG21	1:A:65:GLN:HB2	0.80	1.51	18	1
1:A:132:VAL:HG13	1:A:132:VAL:O	0.80	1.76	7	7
1:A:42:TYR:O	1:A:113:GLN:HB2	0.79	1.77	4	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:145:ILE:HD13	0.79	1.54	17	1
1:A:69:ALA:O	1:A:74:PHE:HB3	0.79	1.76	13	18
1:A:82:ILE:HG22	1:A:85:HIS:O	0.79	1.77	10	17
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:HA	0.79	1.78	4	19
1:A:24:LEU:HB3	1:A:147:ILE:HA	0.78	1.53	10	2
1:A:28:CYS:HB3	1:A:30:PHE:CE1	0.78	2.13	9	6
1:A:27:THR:HB	1:A:35:HIS:HB3	0.78	1.55	9	13
1:A:28:CYS:HB3	1:A:30:PHE:HE1	0.78	1.39	9	6
1:A:26:ILE:HB	1:A:35:HIS:O	0.78	1.78	18	19
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:C	0.77	2.04	11	1
1:A:35:HIS:HD1	1:A:76:THR:HG21	0.77	1.37	12	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:ALA:HB1	1:A:160:GLU:O	0.77	1.80	4	12
1:A:29:ARG:HD2	1:A:123:ALA:HB3	0.77	1.57	15	6
1:A:135:LEU:N	1:A:136:PRO:CD	0.76	2.48	17	19
1:A:24:LEU:HG	1:A:52:LEU:HD11	0.76	1.57	7	2
1:A:55:ALA:O	1:A:137:ASN:HB2	0.76	1.78	17	20
1:A:120:ASN:ND2	1:A:122:SER:H	0.76	1.79	15	1
1:A:139:PHE:CD1	1:A:139:PHE:N	0.76	2.54	8	13
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:LEU:CD2	0.75	2.11	15	2
1:A:33:VAL:HG22	1:A:65:GLN:HE21	0.75	1.41	14	1
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:HB3	0.75	1.80	15	2
1:A:61:PRO:HD2	1:A:65:GLN:HE22	0.75	1.40	13	2
1:A:157:GLN:HG3	1:A:158:LYS:N	0.75	1.96	17	2
1:A:141:GLY:N	1:A:142:PRO:CD	0.75	2.49	20	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:126:GLU:CA	0.75	2.12	2	17
1:A:28:CYS:HB2	1:A:30:PHE:HE1	0.75	1.42	10	10
1:A:24:LEU:HD11	1:A:145:ILE:HG23	0.75	1.58	18	1
1:A:44:ILE:HG21	1:A:116:THR:HB	0.75	1.59	19	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:HG	0.74	1.58	11	7
1:A:133:THR:H	1:A:147:ILE:HG13	0.74	1.42	4	3
1:A:35:HIS:CD2	1:A:35:HIS:C	0.74	2.65	10	12
1:A:24:LEU:HB2	1:A:147:ILE:HA	0.74	1.59	15	7
1:A:107:LEU:HD23	1:A:114:TYR:HD2	0.74	1.43	20	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:87:VAL:HG21	0.74	1.59	12	7
1:A:66:MET:HG3	1:A:67:GLU:N	0.74	1.98	18	2
1:A:82:ILE:HG13	1:A:83:GLU:H	0.74	1.43	5	13
1:A:60:LEU:N	1:A:61:PRO:CD	0.73	2.51	5	5
1:A:25:ASN:HB3	1:A:38:LYS:HB2	0.73	1.59	16	2
1:A:36:VAL:CG2	1:A:52:LEU:HD22	0.73	2.13	18	8
1:A:132:VAL:C	1:A:134:ASP:H	0.73	1.89	11	20
1:A:49:ALA:HB1	1:A:116:THR:CG2	0.73	2.12	10	10
1:A:65:GLN:NE2	1:A:119:PHE:HB3	0.73	1.98	13	3
1:A:134:ASP:HB3	1:A:136:PRO:HD3	0.73	1.57	1	13
1:A:87:VAL:HG12	1:A:106:ILE:HG12	0.73	1.59	13	2
1:A:34:PHE:CD2	1:A:56:PHE:CE2	0.73	2.76	11	20
1:A:120:ASN:ND2	1:A:122:SER:HB3	0.73	1.99	11	5
1:A:31:ALA:HB2	1:A:72:ILE:HG12	0.73	1.59	9	11
1:A:88:ILE:HG21	1:A:98:ALA:HB2	0.73	1.61	15	7
1:A:24:LEU:CD1	1:A:52:LEU:HD13	0.73	2.13	17	1
1:A:29:ARG:HD2	1:A:123:ALA:CB	0.73	2.14	15	3
1:A:42:TYR:HA	1:A:114:TYR:HA	0.72	1.60	18	7
1:A:143:ILE:HD13	1:A:160:GLU:HG2	0.72	1.59	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD23	1:A:52:LEU:HD23	0.72	1.59	12	1
1:A:134:ASP:C	1:A:136:PRO:HD3	0.72	2.08	17	18
1:A:36:VAL:HG13	1:A:116:THR:HG22	0.72	1.60	12	5
1:A:69:ALA:O	1:A:72:ILE:HG13	0.72	1.83	13	11
1:A:149:ASN:O	1:A:151:ASP:N	0.72	2.22	1	2
1:A:31:ALA:HB2	1:A:72:ILE:HG21	0.72	1.60	8	4
1:A:141:GLY:HA3	1:A:160:GLU:HG3	0.72	1.60	18	9
1:A:161:TYR:N	1:A:161:TYR:CD1	0.72	2.58	8	18
1:A:133:THR:HA	1:A:147:ILE:HD11	0.72	1.61	16	6
1:A:42:TYR:HB3	1:A:114:TYR:CA	0.72	2.14	13	1
1:A:27:THR:HG21	1:A:76:THR:HG22	0.72	1.60	20	10
1:A:135:LEU:HD23	1:A:135:LEU:N	0.72	1.98	5	1
1:A:27:THR:O	1:A:28:CYS:HB2	0.72	1.84	13	19
1:A:79:TYR:HA	1:A:88:ILE:HG13	0.72	1.62	11	1
1:A:38:LYS:HB2	1:A:44:ILE:HG13	0.72	1.62	4	1
1:A:62:THR:HG23	1:A:82:ILE:HG12	0.71	1.60	14	1
1:A:29:ARG:HA	1:A:33:VAL:O	0.71	1.86	19	19
1:A:143:ILE:HG13	1:A:160:GLU:HA	0.71	1.62	11	5
1:A:43:SER:HB3	1:A:115:ASP:N	0.71	1.99	6	3
1:A:29:ARG:HH11	1:A:29:ARG:HB3	0.71	1.44	9	3
1:A:42:TYR:HB2	1:A:113:GLN:HG3	0.71	1.61	13	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:88:ILE:N	0.71	2.00	20	2
1:A:44:ILE:HG12	1:A:48:GLU:HB2	0.71	1.63	16	1
1:A:78:ARG:HG3	1:A:88:ILE:HD13	0.71	1.61	3	1
1:A:65:GLN:HB3	1:A:119:PHE:HB2	0.71	1.63	12	8
1:A:36:VAL:HG22	1:A:52:LEU:HD11	0.71	1.61	17	1
1:A:134:ASP:O	1:A:135:LEU:HD13	0.71	1.86	11	2
1:A:86:VAL:HG21	1:A:107:LEU:HB2	0.71	1.63	20	3
1:A:43:SER:HB3	1:A:115:ASP:CA	0.70	2.16	19	3
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:HB2	0.70	1.86	18	4
1:A:86:VAL:HG21	1:A:107:LEU:HD12	0.70	1.62	14	1
1:A:132:VAL:O	1:A:132:VAL:HG13	0.70	1.86	17	3
1:A:59:THR:HB	1:A:61:PRO:HD2	0.70	1.61	20	2
1:A:42:TYR:HB3	1:A:114:TYR:N	0.70	2.01	13	1
1:A:31:ALA:C	1:A:124:PRO:O	0.70	2.34	12	1
1:A:51:ASP:HB3	1:A:161:TYR:HB2	0.70	1.62	12	2
1:A:143:ILE:HD12	1:A:160:GLU:HA	0.70	1.61	9	12
1:A:42:TYR:HB3	1:A:114:TYR:HA	0.70	1.63	13	1
1:A:56:PHE:HB3	1:A:135:LEU:HD12	0.69	1.62	20	1
1:A:27:THR:O	1:A:28:CYS:CB	0.69	2.40	11	20
1:A:43:SER:HA	1:A:113:GLN:HB2	0.69	1.64	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLN:CD	1:A:119:PHE:HB3	0.69	2.11	1	7
1:A:36:VAL:O	1:A:116:THR:HG22	0.69	1.87	8	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:161:TYR:OH	0.69	1.87	15	3
1:A:26:ILE:HG21	1:A:34:PHE:CZ	0.69	2.22	17	19
1:A:30:PHE:HA	1:A:127:GLU:HA	0.69	1.62	15	5
1:A:29:ARG:HD2	1:A:132:VAL:HG23	0.69	1.63	6	1
1:A:24:LEU:HB2	1:A:146:THR:O	0.69	1.88	13	9
1:A:50:ALA:O	1:A:54:LYS:HB3	0.69	1.88	14	5
1:A:146:THR:HA	1:A:155:TYR:O	0.69	1.86	10	11
1:A:44:ILE:O	1:A:113:GLN:HB3	0.69	1.88	4	6
1:A:80:GLY:HA3	1:A:117:TYR:CE1	0.69	2.22	7	14
1:A:82:ILE:HG23	1:A:83:GLU:N	0.69	2.02	16	18
1:A:113:GLN:O	1:A:114:TYR:HB3	0.69	1.88	3	4
1:A:30:PHE:CA	1:A:127:GLU:HA	0.69	2.18	15	2
1:A:38:LYS:N	1:A:44:ILE:HG13	0.69	2.03	6	2
1:A:32:GLY:HA2	1:A:123:ALA:HB3	0.69	1.63	12	1
1:A:90:ARG:HB2	1:A:104:VAL:N	0.69	2.03	16	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:52:LEU:CD1	0.69	2.16	17	2
1:A:80:GLY:HA2	1:A:115:ASP:HB2	0.69	1.65	4	2
1:A:55:ALA:HB1	1:A:135:LEU:CB	0.69	2.18	19	5
1:A:61:PRO:HG3	1:A:117:TYR:HB2	0.68	1.65	19	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:132:VAL:HG11	0.68	2.23	15	5
1:A:134:ASP:HB2	1:A:136:PRO:HD3	0.68	1.61	4	1
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:O	0.68	1.87	6	4
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:SER:N	0.68	2.03	15	2
1:A:107:LEU:HD23	1:A:114:TYR:CD2	0.68	2.22	20	1
1:A:52:LEU:HB2	1:A:135:LEU:HD13	0.68	1.65	5	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:72:ILE:HG12	0.68	1.63	1	13
1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CD1	0.68	2.60	11	5
1:A:44:ILE:HG12	1:A:48:GLU:HB3	0.68	1.63	9	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:52:LEU:HD11	0.68	1.65	10	1
1:A:61:PRO:HG2	1:A:65:GLN:HB3	0.68	1.64	14	1
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:HD13	0.68	1.87	17	9
1:A:132:VAL:O	1:A:134:ASP:N	0.68	2.27	11	19
1:A:132:VAL:HG12	1:A:133:THR:N	0.68	2.03	4	7
1:A:28:CYS:HB2	1:A:30:PHE:CE1	0.68	2.24	3	10
1:A:43:SER:C	1:A:113:GLN:HB2	0.68	2.14	11	5
1:A:36:VAL:HG13	1:A:116:THR:HG23	0.68	1.65	14	6
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:HG2	0.68	1.88	6	3
1:A:62:THR:O	1:A:66:MET:HB2	0.68	1.89	5	4
1:A:35:HIS:C	1:A:35:HIS:CD2	0.68	2.72	20	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:PRO:HD2	1:A:65:GLN:NE2	0.68	2.03	18	1
1:A:29:ARG:HG3	1:A:34:PHE:CB	0.67	2.19	19	9
1:A:21:GLN:HB3	1:A:144:THR:HB	0.67	1.65	8	2
1:A:42:TYR:O	1:A:44:ILE:N	0.67	2.27	13	1
1:A:43:SER:O	1:A:44:ILE:HB	0.67	1.89	19	1
1:A:132:VAL:O	1:A:133:THR:HG22	0.67	1.90	20	7
1:A:37:GLU:HB2	1:A:44:ILE:HD13	0.67	1.66	5	2
1:A:84:GLY:O	1:A:85:HIS:HB2	0.67	1.88	14	2
1:A:80:GLY:HA3	1:A:117:TYR:HE1	0.67	1.48	14	11
1:A:64:ALA:O	1:A:68:LYS:HB2	0.67	1.89	3	8
1:A:123:ALA:HB1	1:A:127:GLU:HG3	0.67	1.65	20	1
1:A:141:GLY:N	1:A:142:PRO:HD2	0.67	2.04	20	1
1:A:86:VAL:HG21	1:A:114:TYR:CD2	0.67	2.25	20	3
1:A:61:PRO:HB2	1:A:64:ALA:HB3	0.67	1.66	18	1
1:A:31:ALA:N	1:A:126:GLU:O	0.67	2.28	13	5
1:A:78:ARG:HG2	1:A:98:ALA:H	0.67	1.48	3	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:ILE:HD11	0.67	1.67	19	2
1:A:132:VAL:O	1:A:132:VAL:CG1	0.67	2.42	7	6
1:A:34:PHE:CD2	1:A:56:PHE:CZ	0.67	2.83	17	20
1:A:27:THR:HA	1:A:150:ARG:H	0.67	1.50	18	1
1:A:58:SER:HB2	1:A:118:CYS:SG	0.66	2.29	1	4
1:A:81:PHE:HB2	1:A:115:ASP:O	0.66	1.90	18	7
1:A:133:THR:HB	1:A:155:TYR:HB2	0.66	1.67	18	9
1:A:34:PHE:CE2	1:A:56:PHE:CE1	0.66	2.83	17	15
1:A:143:ILE:HB	1:A:159:GLY:O	0.66	1.90	10	18
1:A:29:ARG:NE	1:A:120:ASN:ND2	0.66	2.43	9	3
1:A:36:VAL:HG12	1:A:116:THR:CG2	0.66	2.18	18	1
1:A:81:PHE:HA	1:A:114:TYR:OH	0.66	1.91	3	4
1:A:54:LYS:O	1:A:137:ASN:HB3	0.66	1.91	20	1
1:A:85:HIS:HB3	1:A:106:ILE:HD11	0.66	1.67	1	9
1:A:56:PHE:CD2	1:A:120:ASN:HB2	0.66	2.26	11	3
1:A:29:ARG:HG3	1:A:29:ARG:HH11	0.66	1.51	11	2
1:A:30:PHE:CG	1:A:74:PHE:HB2	0.66	2.26	1	8
1:A:79:TYR:CG	1:A:107:LEU:HD22	0.66	2.26	20	2
1:A:37:GLU:HG2	1:A:115:ASP:HB3	0.66	1.67	18	5
1:A:155:TYR:CD1	1:A:155:TYR:N	0.66	2.64	15	16
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD23	0.66	2.06	4	1
1:A:33:VAL:HG23	1:A:119:PHE:CD2	0.66	2.25	15	4
1:A:26:ILE:HG13	1:A:27:THR:N	0.66	2.04	16	8
1:A:37:GLU:CG	1:A:43:SER:O	0.66	2.43	19	2
1:A:22:ILE:HG12	1:A:162:ARG:HD3	0.65	1.68	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:SER:H	0.65	1.49	15	2
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:HD23	0.65	2.05	7	9
1:A:61:PRO:O	1:A:63:MET:N	0.65	2.29	20	2
1:A:123:ALA:HB1	1:A:124:PRO:HD2	0.65	1.68	18	2
1:A:52:LEU:O	1:A:55:ALA:N	0.65	2.28	11	17
1:A:139:PHE:CD2	1:A:160:GLU:HB3	0.65	2.26	11	14
1:A:44:ILE:HG22	1:A:114:TYR:O	0.65	1.91	7	6
1:A:24:LEU:HD11	1:A:52:LEU:HD11	0.65	1.65	10	1
1:A:36:VAL:O	1:A:44:ILE:HD12	0.65	1.92	19	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:161:TYR:OH	0.65	1.91	4	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:52:LEU:HD23	0.65	2.21	12	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:145:ILE:HG23	0.65	2.22	18	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:88:ILE:N	0.65	2.59	20	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:145:ILE:HG12	0.65	1.68	5	2
1:A:61:PRO:O	1:A:83:GLU:HA	0.65	1.91	3	1
1:A:38:LYS:HG2	1:A:48:GLU:HB3	0.65	1.69	1	1
1:A:37:GLU:HB3	1:A:115:ASP:HB3	0.65	1.68	11	1
1:A:33:VAL:HG22	1:A:65:GLN:NE2	0.65	2.07	14	1
1:A:88:ILE:HB	1:A:105:TYR:CB	0.64	2.20	16	1
1:A:34:PHE:HE1	1:A:36:VAL:HG23	0.64	1.51	18	1
1:A:120:ASN:HD22	1:A:122:SER:HB3	0.64	1.52	20	1
1:A:31:ALA:O	1:A:124:PRO:O	0.64	2.15	12	1
1:A:135:LEU:HD23	1:A:145:ILE:HG21	0.64	1.67	20	1
1:A:43:SER:CA	1:A:113:GLN:HB2	0.64	2.23	2	3
1:A:53:CYS:O	1:A:58:SER:HB3	0.64	1.93	8	4
1:A:86:VAL:HA	1:A:114:TYR:OH	0.64	1.92	3	4
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:CD1	0.64	2.70	12	7
1:A:55:ALA:C	1:A:137:ASN:HB2	0.64	2.17	8	9
1:A:120:ASN:ND2	1:A:123:ALA:H	0.64	1.90	19	2
1:A:30:PHE:O	1:A:32:GLY:N	0.64	2.31	4	3
1:A:37:GLU:HG3	1:A:115:ASP:CG	0.64	2.17	17	4
1:A:30:PHE:HA	1:A:128:ASP:H	0.64	1.53	2	3
1:A:28:CYS:HB3	1:A:129:CYS:HA	0.64	1.69	3	2
1:A:43:SER:CB	1:A:115:ASP:N	0.64	2.61	6	3
1:A:132:VAL:C	1:A:134:ASP:N	0.63	2.54	11	19
1:A:113:GLN:O	1:A:114:TYR:CB	0.63	2.46	4	6
1:A:30:PHE:C	1:A:32:GLY:H	0.63	2.01	15	10
1:A:34:PHE:CD2	1:A:132:VAL:HG21	0.63	2.29	14	4
1:A:68:LYS:O	1:A:72:ILE:HG12	0.63	1.94	13	3
1:A:107:LEU:HD13	1:A:114:TYR:CE1	0.63	2.29	16	1
1:A:37:GLU:HG3	1:A:43:SER:O	0.63	1.92	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:GLU:O	1:A:127:GLU:C	0.63	2.41	2	3
1:A:29:ARG:HE	1:A:120:ASN:ND2	0.63	1.91	18	3
1:A:75:GLU:HB3	1:A:89:PRO:HB2	0.63	1.71	13	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:89:PRO:HB3	0.63	1.70	2	3
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:CB	0.63	2.24	10	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD12	0.63	2.09	9	1
1:A:30:PHE:O	1:A:31:ALA:C	0.63	2.40	12	1
1:A:61:PRO:HD3	1:A:118:CYS:HA	0.63	1.68	3	3
1:A:32:GLY:HA2	1:A:123:ALA:CB	0.63	2.24	12	1
1:A:56:PHE:O	1:A:57:ASN:C	0.63	2.42	15	12
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:H	0.63	1.54	4	1
1:A:44:ILE:HD13	1:A:49:ALA:HB2	0.63	1.71	6	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:145:ILE:HG23	0.62	1.68	1	2
1:A:25:ASN:CB	1:A:38:LYS:HB2	0.62	2.24	16	3
1:A:120:ASN:HD21	1:A:122:SER:HB3	0.62	1.54	19	3
1:A:79:TYR:CE2	1:A:107:LEU:HD13	0.62	2.30	4	1
1:A:42:TYR:C	1:A:113:GLN:HB2	0.62	2.19	13	1
1:A:59:THR:OG1	1:A:61:PRO:HD3	0.62	1.95	18	1
1:A:34:PHE:CG	1:A:56:PHE:CZ	0.62	2.87	16	20
1:A:143:ILE:HG22	1:A:145:ILE:HG13	0.62	1.70	16	6
1:A:24:LEU:CG	1:A:52:LEU:HD11	0.62	2.23	7	2
1:A:29:ARG:NH2	1:A:122:SER:HB3	0.62	2.10	15	1
1:A:36:VAL:HB	1:A:52:LEU:HD22	0.62	1.71	16	8
1:A:85:HIS:O	1:A:87:VAL:HG13	0.62	1.95	13	8
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:HD13	0.62	1.95	14	7
1:A:124:PRO:CB	1:A:125:PRO:CD	0.62	2.78	12	2
1:A:145:ILE:HG12	1:A:161:TYR:CE1	0.62	2.30	4	13
1:A:135:LEU:HD13	1:A:135:LEU:N	0.62	2.10	4	1
1:A:29:ARG:CD	1:A:123:ALA:HB2	0.62	2.24	12	1
1:A:31:ALA:N	1:A:127:GLU:HA	0.62	2.10	12	1
1:A:61:PRO:CD	1:A:65:GLN:HE22	0.62	2.08	13	2
1:A:124:PRO:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.62	1.71	3	4
1:A:56:PHE:CE2	1:A:120:ASN:HB3	0.62	2.30	20	5
1:A:51:ASP:HB3	1:A:161:TYR:HB3	0.62	1.71	5	1
1:A:62:THR:O	1:A:65:GLN:HG2	0.62	1.94	18	2
1:A:90:ARG:HD3	1:A:103:GLY:HA2	0.62	1.70	16	1
1:A:29:ARG:HA	1:A:33:VAL:C	0.61	2.20	6	11
1:A:24:LEU:CD2	1:A:145:ILE:HD13	0.61	2.25	8	1
1:A:149:ASN:HB2	1:A:153:THR:O	0.61	1.95	16	2
1:A:131:SER:HA	1:A:155:TYR:CZ	0.61	2.30	16	10
1:A:53:CYS:HA	1:A:56:PHE:CE1	0.61	2.30	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:HA	1:A:105:TYR:O	0.61	1.95	13	14
1:A:30:PHE:HB3	1:A:72:ILE:CD1	0.61	2.26	19	10
1:A:35:HIS:NE2	1:A:37:GLU:HG3	0.61	2.11	16	3
1:A:44:ILE:HB	1:A:114:TYR:O	0.61	1.96	10	10
1:A:36:VAL:CG1	1:A:118:CYS:SG	0.61	2.88	4	4
1:A:145:ILE:HD12	1:A:159:GLY:HA3	0.61	1.72	20	1
1:A:61:PRO:HB2	1:A:82:ILE:HD12	0.61	1.72	1	1
1:A:38:LYS:H	1:A:44:ILE:HG13	0.61	1.53	6	1
1:A:70:LEU:O	1:A:91:ILE:HD12	0.61	1.95	16	1
1:A:79:TYR:CD2	1:A:107:LEU:HD22	0.61	2.31	4	2
1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:ILE:HD12	0.61	1.73	6	1
1:A:61:PRO:HG2	1:A:82:ILE:HA	0.61	1.72	19	3
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:SER:N	0.61	2.64	15	2
1:A:145:ILE:HG23	1:A:161:TYR:CZ	0.60	2.31	7	2
1:A:143:ILE:HG12	1:A:162:ARG:HG2	0.60	1.72	10	1
1:A:65:GLN:HB2	1:A:119:PHE:CD2	0.60	2.31	13	2
1:A:148:VAL:HG13	1:A:154:ARG:HB3	0.60	1.73	9	1
1:A:129:CYS:SG	1:A:151:ASP:HB2	0.60	2.37	2	1
1:A:36:VAL:HG12	1:A:118:CYS:SG	0.60	2.36	4	7
1:A:60:LEU:C	1:A:62:THR:H	0.60	2.03	20	2
1:A:60:LEU:HG	1:A:60:LEU:O	0.60	1.96	10	1
1:A:119:PHE:CD1	1:A:119:PHE:C	0.60	2.79	18	5
1:A:145:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CE1	0.60	2.32	6	5
1:A:24:LEU:HD11	1:A:145:ILE:CG2	0.60	2.27	4	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:145:ILE:CD1	0.60	2.26	17	1
1:A:134:ASP:CB	1:A:136:PRO:HD3	0.60	2.27	9	11
1:A:86:VAL:HG11	1:A:107:LEU:HD23	0.60	1.73	2	3
1:A:27:THR:O	1:A:28:CYS:SG	0.60	2.59	10	9
1:A:29:ARG:NE	1:A:120:ASN:HD21	0.60	1.94	9	1
1:A:58:SER:HB3	1:A:118:CYS:HB3	0.60	1.74	2	4
1:A:31:ALA:H	1:A:127:GLU:HA	0.60	1.55	11	7
1:A:34:PHE:CD1	1:A:34:PHE:O	0.60	2.55	19	20
1:A:133:THR:HA	1:A:147:ILE:CG1	0.60	2.27	17	12
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:N	0.60	2.12	1	1
1:A:29:ARG:CZ	1:A:123:ALA:HB2	0.60	2.26	18	3
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:HB2	0.60	1.71	10	1
1:A:42:TYR:C	1:A:44:ILE:H	0.60	2.03	13	1
1:A:42:TYR:C	1:A:44:ILE:N	0.60	2.60	13	1
1:A:65:GLN:NE2	1:A:119:PHE:CB	0.60	2.65	13	1
1:A:82:ILE:HG23	1:A:84:GLY:H	0.60	1.57	10	4
1:A:42:TYR:O	1:A:113:GLN:HG2	0.60	1.97	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ARG:NH1	1:A:120:ASN:HD22	0.60	1.95	11	1
1:A:69:ALA:O	1:A:74:PHE:HB2	0.60	1.97	12	1
1:A:44:ILE:HA	1:A:48:GLU:HG3	0.60	1.73	13	1
1:A:21:GLN:HA	1:A:144:THR:HB	0.59	1.73	15	4
1:A:44:ILE:HG23	1:A:45:SER:N	0.59	2.12	6	3
1:A:58:SER:CB	1:A:118:CYS:HB3	0.59	2.26	20	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:52:LEU:HD11	0.59	1.74	14	2
1:A:21:GLN:C	1:A:22:ILE:HD12	0.59	2.22	10	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:52:LEU:HD11	0.59	2.27	7	5
1:A:25:ASN:CA	1:A:148:VAL:HG23	0.59	2.26	4	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:ILE:CD1	0.59	2.26	7	2
1:A:131:SER:HA	1:A:155:TYR:CE2	0.59	2.33	10	5
1:A:71:SER:N	1:A:91:ILE:HD13	0.59	2.13	20	3
1:A:135:LEU:HD11	1:A:147:ILE:HG12	0.59	1.74	2	2
1:A:70:LEU:HD11	1:A:89:PRO:HB2	0.59	1.72	7	2
1:A:62:THR:HA	1:A:83:GLU:HG3	0.59	1.74	8	2
1:A:30:PHE:CB	1:A:74:PHE:HB2	0.59	2.27	17	10
1:A:53:CYS:O	1:A:58:SER:HB2	0.59	1.98	5	3
1:A:80:GLY:HA3	1:A:117:TYR:CE2	0.59	2.33	19	5
1:A:24:LEU:O	1:A:148:VAL:HG23	0.59	1.96	8	4
1:A:27:THR:HA	1:A:150:ARG:N	0.59	2.13	18	1
1:A:87:VAL:HG21	1:A:104:VAL:HG12	0.59	1.74	20	1
1:A:132:VAL:HG12	1:A:155:TYR:HE2	0.59	1.57	3	1
1:A:25:ASN:HA	1:A:148:VAL:HG23	0.59	1.72	4	2
1:A:37:GLU:HB2	1:A:115:ASP:HB3	0.59	1.73	10	1
1:A:70:LEU:O	1:A:91:ILE:HD13	0.59	1.97	14	1
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:HB3	0.59	1.98	4	8
1:A:52:LEU:O	1:A:55:ALA:HB3	0.59	1.96	2	4
1:A:81:PHE:HB2	1:A:116:THR:OG1	0.59	1.97	12	4
1:A:89:PRO:HG3	1:A:117:TYR:OH	0.59	1.97	3	3
1:A:120:ASN:HD21	1:A:123:ALA:HB2	0.59	1.58	14	1
1:A:63:MET:O	1:A:67:GLU:HB2	0.59	1.97	3	1
1:A:59:THR:HB	1:A:61:PRO:HD3	0.59	1.74	13	2
1:A:51:ASP:O	1:A:54:LYS:HG2	0.59	1.97	18	6
1:A:113:GLN:O	1:A:114:TYR:CG	0.59	2.56	4	3
1:A:60:LEU:N	1:A:61:PRO:HD3	0.58	2.13	10	3
1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CD1	0.58	2.71	17	2
1:A:86:VAL:HA	1:A:114:TYR:CE2	0.58	2.33	5	3
1:A:24:LEU:O	1:A:147:ILE:HA	0.58	1.99	9	3
1:A:78:ARG:O	1:A:88:ILE:HG22	0.58	1.98	14	1
1:A:132:VAL:N	1:A:155:TYR:CE2	0.58	2.72	4	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ALA:O	1:A:53:CYS:HB3	0.58	1.97	3	4
1:A:114:TYR:CD1	1:A:114:TYR:N	0.58	2.71	5	6
1:A:35:HIS:HB2	1:A:117:TYR:CD1	0.58	2.33	13	5
1:A:72:ILE:HD13	1:A:126:GLU:O	0.58	1.98	4	6
1:A:70:LEU:O	1:A:91:ILE:HG21	0.58	1.98	19	4
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:HG23	0.58	1.98	11	3
1:A:134:ASP:C	1:A:135:LEU:HD13	0.58	2.23	11	2
1:A:33:VAL:O	1:A:33:VAL:HG12	0.58	1.97	11	13
1:A:48:GLU:O	1:A:51:ASP:HB2	0.58	1.98	17	7
1:A:69:ALA:C	1:A:74:PHE:HB3	0.58	2.23	3	3
1:A:120:ASN:H	1:A:120:ASN:HD22	0.58	1.42	3	4
1:A:133:THR:N	1:A:147:ILE:HG13	0.58	2.10	4	2
1:A:61:PRO:C	1:A:63:MET:H	0.58	2.07	5	2
1:A:24:LEU:HD11	1:A:161:TYR:OH	0.58	1.98	9	3
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:GLU:N	0.58	2.66	8	8
1:A:135:LEU:HD12	1:A:145:ILE:HG21	0.58	1.73	18	9
1:A:65:GLN:N	1:A:65:GLN:CD	0.58	2.62	3	3
1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:CYS:HA	0.58	1.74	14	3
1:A:61:PRO:HG3	1:A:117:TYR:O	0.58	1.98	12	1
1:A:27:THR:O	1:A:28:CYS:HB3	0.58	1.98	11	4
1:A:24:LEU:HD11	1:A:52:LEU:CD1	0.58	2.29	10	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:122:SER:HB3	0.58	2.24	11	3
1:A:34:PHE:CZ	1:A:36:VAL:HG23	0.58	2.34	18	2
1:A:79:TYR:N	1:A:88:ILE:HG12	0.57	2.13	3	1
1:A:145:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CZ	0.57	2.34	5	4
1:A:58:SER:HB2	1:A:118:CYS:HB3	0.57	1.76	6	1
1:A:42:TYR:O	1:A:114:TYR:N	0.57	2.33	13	1
1:A:38:LYS:H	1:A:44:ILE:HG12	0.57	1.59	10	1
1:A:67:GLU:CA	1:A:70:LEU:HD23	0.57	2.25	15	1
1:A:119:PHE:C	1:A:119:PHE:HD1	0.57	2.07	18	1
1:A:79:TYR:CD1	1:A:107:LEU:HB2	0.57	2.34	4	1
1:A:60:LEU:O	1:A:62:THR:N	0.57	2.38	20	2
1:A:134:ASP:O	1:A:157:GLN:NE2	0.57	2.38	7	2
1:A:30:PHE:C	1:A:32:GLY:N	0.57	2.61	4	12
1:A:87:VAL:CG2	1:A:104:VAL:HG23	0.57	2.29	16	1
1:A:29:ARG:HD3	1:A:120:ASN:HB3	0.57	1.75	11	1
1:A:70:LEU:O	1:A:91:ILE:HD11	0.57	1.99	7	1
1:A:86:VAL:CG2	1:A:107:LEU:HB2	0.57	2.29	15	4
1:A:113:GLN:C	1:A:114:TYR:CG	0.57	2.81	2	9
1:A:62:THR:N	1:A:65:GLN:OE1	0.57	2.38	5	2
1:A:37:GLU:HG3	1:A:115:ASP:HB3	0.57	1.77	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:SER:HB2	1:A:120:ASN:HB3	0.57	1.76	8	1
1:A:160:GLU:C	1:A:161:TYR:CD1	0.57	2.83	17	5
1:A:82:ILE:HG23	1:A:83:GLU:HG3	0.56	1.77	16	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:147:ILE:HG23	0.56	1.77	4	1
1:A:34:PHE:HB3	1:A:120:ASN:ND2	0.56	2.14	16	1
1:A:124:PRO:HD2	1:A:128:ASP:HB2	0.56	1.77	16	2
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:HD12	0.56	1.77	1	2
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:HG12	0.56	2.00	10	7
1:A:28:CYS:HB3	1:A:128:ASP:O	0.56	2.01	3	1
1:A:49:ALA:O	1:A:50:ALA:C	0.56	2.48	13	7
1:A:82:ILE:HB	1:A:87:VAL:HB	0.56	1.77	20	3
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:ILE:N	0.56	2.15	16	3
1:A:66:MET:HG3	1:A:82:ILE:HD11	0.56	1.76	1	4
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:HD13	0.56	2.14	4	2
1:A:153:THR:HB	1:A:155:TYR:CE1	0.56	2.36	4	6
1:A:56:PHE:CD2	1:A:120:ASN:HB3	0.56	2.35	13	5
1:A:28:CYS:SG	1:A:29:ARG:N	0.56	2.77	19	5
1:A:38:LYS:CB	1:A:44:ILE:HG13	0.56	2.31	4	1
1:A:36:VAL:CG2	1:A:52:LEU:HG	0.56	2.31	12	2
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:HD13	0.56	2.15	19	2
1:A:34:PHE:CE1	1:A:36:VAL:HB	0.56	2.35	19	8
1:A:65:GLN:HB3	1:A:119:PHE:CB	0.56	2.31	8	6
1:A:153:THR:HB	1:A:155:TYR:HE1	0.56	1.60	4	8
1:A:133:THR:OG1	1:A:157:GLN:HB3	0.56	2.00	3	1
1:A:82:ILE:HG13	1:A:83:GLU:N	0.56	2.14	5	7
1:A:52:LEU:HG	1:A:53:CYS:N	0.56	2.15	17	1
1:A:90:ARG:HH22	1:A:105:TYR:HB2	0.56	1.61	11	1
1:A:59:THR:CB	1:A:61:PRO:HD2	0.56	2.31	5	2
1:A:65:GLN:HG2	1:A:119:PHE:CG	0.56	2.36	11	1
1:A:34:PHE:HE1	1:A:36:VAL:HB	0.56	1.60	19	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:114:TYR:CD2	0.56	2.36	8	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:74:PHE:HB3	0.56	1.78	12	1
1:A:25:ASN:N	1:A:38:LYS:HB2	0.56	2.16	14	2
1:A:22:ILE:CD1	1:A:143:ILE:HG23	0.56	2.30	20	1
1:A:132:VAL:HB	1:A:155:TYR:HE2	0.56	1.60	9	4
1:A:133:THR:HA	1:A:147:ILE:CD1	0.56	2.31	16	14
1:A:37:GLU:CG	1:A:115:ASP:HB3	0.56	2.30	9	4
1:A:65:GLN:HG3	1:A:119:PHE:CD1	0.56	2.35	3	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:ILE:H	0.56	1.61	3	4
1:A:29:ARG:O	1:A:128:ASP:O	0.56	2.23	15	5
1:A:86:VAL:HG13	1:A:114:TYR:CE2	0.56	2.36	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:HIS:ND1	1:A:117:TYR:CZ	0.55	2.74	17	9
1:A:55:ALA:CB	1:A:135:LEU:HB3	0.55	2.31	3	4
1:A:87:VAL:HG21	1:A:104:VAL:HG23	0.55	1.77	14	1
1:A:65:GLN:HB3	1:A:119:PHE:HD2	0.55	1.61	18	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:CYS:N	0.55	2.39	13	2
1:A:149:ASN:CB	1:A:153:THR:HG23	0.55	2.31	1	1
1:A:113:GLN:O	1:A:114:TYR:CD2	0.55	2.60	2	1
1:A:145:ILE:HG12	1:A:161:TYR:HH	0.55	1.60	20	1
1:A:29:ARG:CG	1:A:34:PHE:HB3	0.55	2.23	19	5
1:A:26:ILE:O	1:A:150:ARG:N	0.55	2.40	18	2
1:A:24:LEU:CB	1:A:147:ILE:HA	0.55	2.32	2	1
1:A:55:ALA:HA	1:A:137:ASN:CB	0.55	2.32	17	4
1:A:82:ILE:CG1	1:A:83:GLU:H	0.55	2.15	10	8
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:CG	0.55	2.31	13	3
1:A:43:SER:HB3	1:A:115:ASP:CB	0.55	2.31	19	3
1:A:149:ASN:HB2	1:A:153:THR:HG23	0.55	1.78	17	1
1:A:26:ILE:HB	1:A:34:PHE:CE1	0.55	2.36	1	11
1:A:149:ASN:HB2	1:A:153:THR:OG1	0.55	2.01	3	9
1:A:49:ALA:HB2	1:A:116:THR:HG21	0.55	1.77	13	1
1:A:153:THR:OG1	1:A:154:ARG:N	0.55	2.40	1	1
1:A:31:ALA:H	1:A:126:GLU:C	0.55	2.09	8	5
1:A:61:PRO:O	1:A:82:ILE:HG13	0.55	2.02	9	4
1:A:90:ARG:NH1	1:A:98:ALA:HB3	0.55	2.17	11	1
1:A:29:ARG:NE	1:A:120:ASN:HD22	0.55	1.99	19	1
1:A:79:TYR:CB	1:A:107:LEU:HD22	0.55	2.32	20	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:87:VAL:HG11	0.55	2.29	5	1
1:A:43:SER:HA	1:A:113:GLN:HB3	0.55	1.77	14	2
1:A:29:ARG:NH1	1:A:123:ALA:HB2	0.55	2.16	19	2
1:A:120:ASN:H	1:A:120:ASN:ND2	0.54	1.99	3	1
1:A:85:HIS:HB2	1:A:106:ILE:HD11	0.54	1.80	18	2
1:A:61:PRO:HG2	1:A:82:ILE:C	0.54	2.27	1	3
1:A:61:PRO:HD3	1:A:117:TYR:O	0.54	2.02	2	5
1:A:75:GLU:HB2	1:A:90:ARG:HG2	0.54	1.78	2	1
1:A:28:CYS:SG	1:A:149:ASN:ND2	0.54	2.81	3	2
1:A:113:GLN:O	1:A:114:TYR:HB2	0.54	2.02	4	2
1:A:25:ASN:H	1:A:38:LYS:CB	0.54	2.15	9	1
1:A:140:ASP:HB3	1:A:142:PRO:HD2	0.54	1.78	20	1
1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:HD1	0.54	2.00	5	5
1:A:61:PRO:C	1:A:63:MET:N	0.54	2.65	5	3
1:A:84:GLY:O	1:A:85:HIS:CB	0.54	2.55	14	2
1:A:25:ASN:HB2	1:A:148:VAL:HB	0.54	1.77	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:VAL:HG23	1:A:119:PHE:HD1	0.54	1.61	3	1
1:A:42:TYR:N	1:A:114:TYR:HA	0.54	2.17	16	3
1:A:26:ILE:O	1:A:149:ASN:HA	0.54	2.02	19	1
1:A:56:PHE:HB3	1:A:135:LEU:CD1	0.54	2.32	20	2
1:A:42:TYR:O	1:A:113:GLN:O	0.54	2.26	8	1
1:A:66:MET:HE3	1:A:67:GLU:HG3	0.54	1.79	7	1
1:A:44:ILE:CG1	1:A:48:GLU:HB3	0.54	2.32	9	2
1:A:132:VAL:CG2	1:A:147:ILE:HG21	0.54	2.33	11	1
1:A:148:VAL:HG13	1:A:154:ARG:HG3	0.54	1.80	15	1
1:A:60:LEU:HB3	1:A:83:GLU:HA	0.54	1.79	19	1
1:A:33:VAL:CG2	1:A:119:PHE:HB2	0.54	2.31	5	5
1:A:133:THR:HA	1:A:147:ILE:HD13	0.54	1.79	10	4
1:A:24:LEU:HD21	1:A:52:LEU:HD21	0.54	1.80	10	1
1:A:123:ALA:HB1	1:A:128:ASP:HB3	0.54	1.80	16	1
1:A:58:SER:OG	1:A:120:ASN:HB3	0.54	2.02	9	4
1:A:70:LEU:C	1:A:91:ILE:HD13	0.54	2.28	4	3
1:A:25:ASN:H	1:A:38:LYS:HB2	0.54	1.62	9	1
1:A:65:GLN:HB2	1:A:119:PHE:HD2	0.54	1.62	15	1
1:A:49:ALA:CB	1:A:116:THR:HG21	0.54	2.32	13	6
1:A:120:ASN:OD1	1:A:122:SER:HB3	0.54	2.03	19	2
1:A:38:LYS:N	1:A:44:ILE:HG12	0.54	2.17	10	1
1:A:36:VAL:HG22	1:A:52:LEU:CD1	0.54	2.33	17	1
1:A:46:ARG:O	1:A:50:ALA:HB3	0.54	2.03	17	1
1:A:148:VAL:HA	1:A:153:THR:O	0.53	2.03	7	5
1:A:124:PRO:HB3	1:A:125:PRO:HD2	0.53	1.80	9	1
1:A:22:ILE:HD13	1:A:143:ILE:CG2	0.53	2.31	20	2
1:A:106:ILE:HG23	1:A:107:LEU:N	0.53	2.18	15	6
1:A:79:TYR:O	1:A:114:TYR:HB2	0.53	2.03	7	4
1:A:68:LYS:O	1:A:72:ILE:CG2	0.53	2.57	18	5
1:A:107:LEU:HD13	1:A:114:TYR:CE2	0.53	2.37	8	2
1:A:48:GLU:O	1:A:49:ALA:C	0.53	2.51	9	3
1:A:133:THR:OG1	1:A:155:TYR:HB3	0.53	2.03	10	1
1:A:56:PHE:O	1:A:120:ASN:CG	0.53	2.51	11	2
1:A:86:VAL:HB	1:A:114:TYR:CE2	0.53	2.38	2	3
1:A:80:GLY:O	1:A:87:VAL:HG12	0.53	2.04	5	2
1:A:42:TYR:HB3	1:A:113:GLN:HB3	0.53	1.78	7	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:72:ILE:HG21	0.53	2.32	8	1
1:A:79:TYR:HB3	1:A:86:VAL:HG23	0.53	1.80	10	3
1:A:28:CYS:O	1:A:34:PHE:CA	0.53	2.51	18	3
1:A:44:ILE:HD13	1:A:116:THR:HB	0.53	1.79	19	1
1:A:33:VAL:HG23	1:A:119:PHE:HB2	0.53	1.78	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ASN:HB2	1:A:38:LYS:HB2	0.53	1.79	14	1
1:A:36:VAL:HG23	1:A:52:LEU:HD21	0.53	1.81	2	3
1:A:135:LEU:N	1:A:136:PRO:HD2	0.53	2.19	7	2
1:A:56:PHE:HD2	1:A:120:ASN:ND2	0.53	2.01	9	1
1:A:34:PHE:HZ	1:A:52:LEU:HD21	0.53	1.64	15	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:116:THR:CG2	0.53	2.97	19	1
1:A:29:ARG:NH1	1:A:120:ASN:HD21	0.53	2.00	1	1
1:A:82:ILE:C	1:A:84:GLY:H	0.53	2.11	12	6
1:A:117:TYR:O	1:A:118:CYS:SG	0.53	2.66	17	4
1:A:56:PHE:CZ	1:A:118:CYS:HB2	0.53	2.39	18	1
1:A:143:ILE:HG13	1:A:160:GLU:HG2	0.53	1.79	19	1
1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:OD1	0.53	2.42	19	4
1:A:144:THR:HA	1:A:157:GLN:O	0.53	2.03	11	3
1:A:145:ILE:HG12	1:A:161:TYR:CZ	0.53	2.39	20	4
1:A:27:THR:OG1	1:A:150:ARG:HG3	0.53	2.04	13	7
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:CD2	0.53	2.70	5	3
1:A:141:GLY:O	1:A:158:LYS:HG3	0.53	2.04	16	4
1:A:31:ALA:CA	1:A:126:GLU:C	0.53	2.80	19	6
1:A:58:SER:CB	1:A:118:CYS:HB2	0.53	2.33	11	2
1:A:126:GLU:O	1:A:127:GLU:O	0.53	2.27	10	2
1:A:145:ILE:HG23	1:A:161:TYR:OH	0.53	2.03	13	7
1:A:26:ILE:HG23	1:A:147:ILE:HG22	0.52	1.81	11	4
1:A:62:THR:OG1	1:A:83:GLU:HB2	0.52	2.05	14	1
1:A:35:HIS:C	1:A:35:HIS:HD2	0.52	2.12	7	13
1:A:27:THR:CG2	1:A:76:THR:HG22	0.52	2.35	9	4
1:A:61:PRO:HA	1:A:65:GLN:OE1	0.52	2.04	6	2
1:A:42:TYR:O	1:A:114:TYR:O	0.52	2.27	13	1
1:A:35:HIS:NE2	1:A:115:ASP:HB3	0.52	2.19	8	4
1:A:29:ARG:CG	1:A:34:PHE:CB	0.52	2.87	15	6
1:A:43:SER:HA	1:A:113:GLN:HG3	0.52	1.81	18	1
1:A:38:LYS:HB2	1:A:48:GLU:HG2	0.52	1.80	19	1
1:A:43:SER:HB2	1:A:114:TYR:HA	0.52	1.80	6	1
1:A:86:VAL:HG13	1:A:107:LEU:H	0.52	1.64	15	2
1:A:34:PHE:CG	1:A:56:PHE:CE2	0.52	2.97	16	9
1:A:120:ASN:ND2	1:A:123:ALA:N	0.52	2.57	7	3
1:A:130:THR:O	1:A:131:SER:C	0.52	2.52	19	3
1:A:65:GLN:HE21	1:A:119:PHE:HB2	0.52	1.60	15	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:52:LEU:HD12	0.52	2.33	18	1
1:A:90:ARG:HG3	1:A:102:THR:C	0.52	2.29	18	1
1:A:59:THR:CB	1:A:61:PRO:HD3	0.52	2.34	13	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:70:LEU:HD21	0.52	1.82	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:ASP:O	1:A:159:GLY:C	0.52	2.53	20	1
1:A:52:LEU:C	1:A:54:LYS:N	0.52	2.67	7	9
1:A:90:ARG:O	1:A:91:ILE:C	0.52	2.52	7	4
1:A:30:PHE:CD1	1:A:74:PHE:CD1	0.52	2.97	9	2
1:A:124:PRO:CB	1:A:125:PRO:HD2	0.52	2.35	3	4
1:A:29:ARG:HG3	1:A:29:ARG:NH1	0.52	2.19	11	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:53:CYS:SG	0.52	2.45	13	1
1:A:26:ILE:HG23	1:A:147:ILE:CG2	0.52	2.34	20	1
1:A:86:VAL:CG2	1:A:114:TYR:CD2	0.52	2.93	20	1
1:A:29:ARG:HD3	1:A:120:ASN:OD1	0.52	2.05	1	2
1:A:65:GLN:HG3	1:A:119:PHE:CG	0.52	2.40	3	2
1:A:42:TYR:O	1:A:113:GLN:CB	0.52	2.56	4	2
1:A:62:THR:HG22	1:A:83:GLU:HG3	0.52	1.80	7	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:145:ILE:HG23	0.52	1.82	8	1
1:A:38:LYS:HG3	1:A:48:GLU:HB3	0.52	1.80	8	1
1:A:75:GLU:C	1:A:77:CYS:H	0.52	2.14	8	1
1:A:59:THR:O	1:A:119:PHE:HB3	0.52	2.05	10	1
1:A:62:THR:H	1:A:65:GLN:NE2	0.52	2.02	18	1
1:A:37:GLU:HG3	1:A:115:ASP:CB	0.51	2.35	3	2
1:A:30:PHE:HB2	1:A:74:PHE:HB2	0.51	1.83	10	4
1:A:27:THR:HA	1:A:150:ARG:HG2	0.51	1.81	9	1
1:A:79:TYR:HA	1:A:88:ILE:CG2	0.51	2.35	14	1
1:A:78:ARG:HG2	1:A:98:ALA:N	0.51	2.20	3	1
1:A:145:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CD1	0.51	2.40	6	3
1:A:37:GLU:HA	1:A:44:ILE:HD12	0.51	1.82	4	2
1:A:132:VAL:HG13	1:A:134:ASP:OD1	0.51	2.05	4	1
1:A:59:THR:C	1:A:61:PRO:HD2	0.51	2.30	5	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:N	0.51	2.20	5	5
1:A:58:SER:OG	1:A:118:CYS:HB3	0.51	2.04	17	3
1:A:42:TYR:H	1:A:114:TYR:HA	0.51	1.65	16	2
1:A:55:ALA:C	1:A:135:LEU:HA	0.51	2.30	17	6
1:A:86:VAL:HA	1:A:114:TYR:CZ	0.51	2.40	17	4
1:A:133:THR:HB	1:A:155:TYR:CB	0.51	2.35	4	6
1:A:24:LEU:HD23	1:A:145:ILE:HD13	0.51	1.81	8	1
1:A:132:VAL:CG1	1:A:133:THR:N	0.51	2.73	5	4
1:A:74:PHE:C	1:A:74:PHE:CD1	0.51	2.88	8	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:52:LEU:CD1	0.51	2.31	9	2
1:A:82:ILE:C	1:A:84:GLY:N	0.51	2.68	19	13
1:A:37:GLU:HG2	1:A:37:GLU:O	0.51	2.04	10	1
1:A:75:GLU:HG3	1:A:76:THR:N	0.51	2.20	19	2
1:A:29:ARG:HD3	1:A:128:ASP:O	0.51	2.05	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ARG:CD	1:A:123:ALA:HB3	0.51	2.36	19	4
1:A:134:ASP:C	1:A:136:PRO:CD	0.51	2.84	10	6
1:A:145:ILE:N	1:A:157:GLN:O	0.51	2.43	3	5
1:A:44:ILE:N	1:A:114:TYR:O	0.51	2.43	19	1
1:A:63:MET:O	1:A:67:GLU:HG2	0.51	2.06	1	2
1:A:70:LEU:HD12	1:A:74:PHE:O	0.51	2.06	4	1
1:A:131:SER:C	1:A:133:THR:H	0.51	2.12	11	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:89:PRO:CB	0.51	2.35	14	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:106:ILE:HG12	0.51	1.81	14	1
1:A:27:THR:HA	1:A:150:ARG:HB2	0.51	1.82	15	2
1:A:62:THR:CG2	1:A:82:ILE:HG12	0.51	2.33	14	1
1:A:29:ARG:HD2	1:A:132:VAL:CG2	0.51	2.36	16	1
1:A:145:ILE:HG12	1:A:161:TYR:OH	0.51	2.05	20	1
1:A:29:ARG:HE	1:A:123:ALA:CB	0.50	2.19	11	2
1:A:37:GLU:HG2	1:A:43:SER:HA	0.50	1.82	7	1
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ASP:CB	0.50	2.60	16	3
1:A:29:ARG:HE	1:A:123:ALA:HB2	0.50	1.65	11	1
1:A:46:ARG:O	1:A:47:THR:C	0.50	2.52	12	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CE2	0.50	2.41	12	1
1:A:44:ILE:HG12	1:A:48:GLU:CB	0.50	2.35	16	2
1:A:29:ARG:HD3	1:A:120:ASN:ND2	0.50	2.21	1	1
1:A:117:TYR:C	1:A:118:CYS:SG	0.50	2.94	7	8
1:A:131:SER:HA	1:A:155:TYR:CE1	0.50	2.41	9	1
1:A:88:ILE:HG12	1:A:105:TYR:HB3	0.50	1.82	14	1
1:A:30:PHE:C	1:A:127:GLU:HA	0.50	2.31	15	1
1:A:52:LEU:O	1:A:53:CYS:C	0.50	2.54	16	13
1:A:35:HIS:NE2	1:A:115:ASP:HB2	0.50	2.21	13	3
1:A:65:GLN:HB3	1:A:119:PHE:CD2	0.50	2.42	18	4
1:A:37:GLU:HG2	1:A:44:ILE:CD1	0.50	2.36	12	1
1:A:87:VAL:HG12	1:A:106:ILE:CD1	0.50	2.36	17	1
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:CD1	0.50	2.74	17	1
1:A:135:LEU:C	1:A:137:ASN:H	0.50	2.15	17	9
1:A:78:ARG:O	1:A:88:ILE:HG12	0.50	2.07	4	3
1:A:55:ALA:HA	1:A:137:ASN:HB2	0.50	1.84	3	4
1:A:125:PRO:C	1:A:126:GLU:CG	0.50	2.85	2	1
1:A:77:CYS:O	1:A:78:ARG:CB	0.50	2.60	3	1
1:A:48:GLU:O	1:A:51:ASP:N	0.50	2.45	16	2
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:HG3	0.50	2.07	11	1
1:A:61:PRO:HB2	1:A:82:ILE:HA	0.50	1.83	12	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:146:THR:N	0.50	2.22	20	1
1:A:71:SER:CA	1:A:91:ILE:HD13	0.50	2.37	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:VAL:CG1	1:A:114:TYR:CE2	0.50	2.94	12	3
1:A:55:ALA:CA	1:A:137:ASN:HB2	0.50	2.36	8	4
1:A:139:PHE:CD1	1:A:160:GLU:HB3	0.50	2.42	6	3
1:A:34:PHE:CZ	1:A:56:PHE:CE1	0.50	2.99	13	5
1:A:51:ASP:O	1:A:55:ALA:HB2	0.50	2.06	9	1
1:A:79:TYR:CE1	1:A:107:LEU:HB2	0.50	2.42	9	1
1:A:58:SER:HB3	1:A:120:ASN:HA	0.50	1.82	10	1
1:A:29:ARG:HG2	1:A:33:VAL:C	0.50	2.32	19	2
1:A:84:GLY:O	1:A:106:ILE:HD11	0.50	2.05	18	2
1:A:56:PHE:O	1:A:120:ASN:HB2	0.50	2.07	19	2
1:A:86:VAL:HB	1:A:114:TYR:CD2	0.50	2.42	16	4
1:A:132:VAL:H	1:A:155:TYR:HE2	0.50	1.49	14	2
1:A:146:THR:OG1	1:A:156:VAL:HG23	0.49	2.06	1	1
1:A:44:ILE:O	1:A:113:GLN:HG2	0.49	2.07	6	1
1:A:75:GLU:C	1:A:76:THR:HG23	0.49	2.33	8	1
1:A:75:GLU:HG2	1:A:76:THR:N	0.49	2.22	15	1
1:A:139:PHE:CE1	1:A:161:TYR:HA	0.49	2.42	4	1
1:A:139:PHE:HD1	1:A:160:GLU:HB3	0.49	1.67	6	2
1:A:142:PRO:HA	1:A:158:LYS:HG3	0.49	1.84	6	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:145:ILE:HG23	0.49	2.37	9	1
1:A:149:ASN:O	1:A:150:ARG:C	0.49	2.56	1	1
1:A:161:TYR:N	1:A:161:TYR:HD1	0.49	2.05	4	7
1:A:37:GLU:HG2	1:A:43:SER:O	0.49	2.07	7	1
1:A:29:ARG:HB3	1:A:29:ARG:NH1	0.49	2.20	9	1
1:A:55:ALA:CB	1:A:135:LEU:HD13	0.49	2.37	16	1
1:A:90:ARG:HB3	1:A:103:GLY:H	0.49	1.67	1	1
1:A:66:MET:HE1	1:A:89:PRO:HB3	0.49	1.83	8	1
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:CB	0.49	2.59	16	9
1:A:29:ARG:NH1	1:A:120:ASN:ND2	0.49	2.61	1	1
1:A:29:ARG:NH1	1:A:132:VAL:HG23	0.49	2.23	10	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:53:CYS:HB2	0.49	1.85	3	2
1:A:77:CYS:O	1:A:78:ARG:HB2	0.49	2.06	3	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:123:ALA:HB2	0.49	2.21	14	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:154:ARG:HG2	0.49	1.83	15	2
1:A:62:THR:O	1:A:65:GLN:N	0.49	2.46	14	1
1:A:29:ARG:NH1	1:A:132:VAL:HG22	0.49	2.23	16	3
1:A:29:ARG:HD3	1:A:120:ASN:HD21	0.49	1.68	1	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:117:TYR:CE2	0.49	3.01	1	8
1:A:26:ILE:HG12	1:A:149:ASN:ND2	0.49	2.22	11	7
1:A:37:GLU:HG2	1:A:43:SER:CA	0.49	2.38	7	1
1:A:82:ILE:HB	1:A:87:VAL:HG22	0.49	1.85	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:MET:HG3	1:A:82:ILE:CD1	0.49	2.38	19	1
1:A:133:THR:O	1:A:133:THR:HG23	0.49	2.07	18	10
1:A:79:TYR:CZ	1:A:107:LEU:HB2	0.49	2.43	2	2
1:A:36:VAL:HG13	1:A:116:THR:CG2	0.49	2.38	4	5
1:A:61:PRO:O	1:A:82:ILE:HD12	0.48	2.08	2	1
1:A:60:LEU:C	1:A:62:THR:N	0.48	2.69	20	2
1:A:86:VAL:HG13	1:A:114:TYR:CZ	0.48	2.42	17	4
1:A:124:PRO:O	1:A:126:GLU:N	0.48	2.46	1	2
1:A:22:ILE:CD1	1:A:143:ILE:HG13	0.48	2.38	10	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:103:GLY:N	0.48	2.23	11	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:107:LEU:HB2	0.48	2.38	13	1
1:A:143:ILE:HD11	1:A:162:ARG:HG2	0.48	1.84	18	1
1:A:124:PRO:HD2	1:A:127:GLU:HG2	0.48	1.83	20	1
1:A:36:VAL:CB	1:A:52:LEU:HD22	0.48	2.38	16	6
1:A:74:PHE:CZ	1:A:117:TYR:HE2	0.48	2.26	9	5
1:A:81:PHE:CB	1:A:116:THR:OG1	0.48	2.61	12	3
1:A:90:ARG:NH2	1:A:105:TYR:HB2	0.48	2.24	15	2
1:A:44:ILE:O	1:A:113:GLN:CB	0.48	2.60	10	2
1:A:55:ALA:O	1:A:137:ASN:CB	0.48	2.61	5	4
1:A:113:GLN:C	1:A:114:TYR:CD1	0.48	2.92	12	2
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:N	0.48	2.46	7	4
1:A:70:LEU:HD12	1:A:91:ILE:H	0.48	1.67	9	1
1:A:62:THR:OG1	1:A:83:GLU:HG3	0.48	2.08	18	1
1:A:50:ALA:O	1:A:54:LYS:HG2	0.48	2.08	20	1
1:A:149:ASN:ND2	1:A:155:TYR:OH	0.48	2.46	1	6
1:A:63:MET:O	1:A:67:GLU:HG3	0.48	2.09	9	7
1:A:34:PHE:HB3	1:A:56:PHE:CE2	0.48	2.44	16	2
1:A:130:THR:O	1:A:132:VAL:N	0.48	2.45	13	3
1:A:25:ASN:CB	1:A:148:VAL:HB	0.48	2.38	11	3
1:A:81:PHE:HA	1:A:114:TYR:CZ	0.48	2.44	11	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:LEU:CG	0.48	2.38	13	2
1:A:29:ARG:CZ	1:A:122:SER:HB3	0.48	2.38	15	1
1:A:36:VAL:C	1:A:37:GLU:HG3	0.48	2.33	18	1
1:A:124:PRO:HG2	1:A:128:ASP:CG	0.48	2.33	2	1
1:A:132:VAL:HG12	1:A:155:TYR:CE2	0.48	2.41	3	1
1:A:146:THR:OG1	1:A:156:VAL:HG22	0.48	2.09	4	1
1:A:44:ILE:N	1:A:113:GLN:HB2	0.48	2.23	17	1
1:A:25:ASN:HB3	1:A:37:GLU:HB2	0.48	1.85	1	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:54:LYS:N	0.48	2.86	3	2
1:A:66:MET:CG	1:A:67:GLU:N	0.48	2.77	6	1
1:A:54:LYS:O	1:A:55:ALA:C	0.48	2.57	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:PHE:CD2	1:A:120:ASN:ND2	0.48	2.82	9	1
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:O	0.48	2.31	11	2
1:A:29:ARG:HD3	1:A:123:ALA:HB2	0.48	1.84	12	1
1:A:29:ARG:HD2	1:A:123:ALA:HB2	0.48	1.86	12	1
1:A:133:THR:O	1:A:157:GLN:HG3	0.48	2.08	13	1
1:A:33:VAL:CG2	1:A:65:GLN:HB2	0.48	2.33	18	2
1:A:119:PHE:C	1:A:119:PHE:CD1	0.48	2.92	1	2
1:A:79:TYR:HA	1:A:88:ILE:HG12	0.48	1.84	12	2
1:A:62:THR:O	1:A:66:MET:HB3	0.48	2.09	6	1
1:A:29:ARG:NH1	1:A:128:ASP:HB3	0.48	2.23	17	2
1:A:62:THR:H	1:A:65:GLN:CD	0.48	2.17	18	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:72:ILE:CG1	0.48	2.39	4	4
1:A:35:HIS:NE2	1:A:115:ASP:CG	0.48	2.72	6	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:LEU:HD22	0.48	1.84	10	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:83:GLU:N	0.48	2.76	19	3
1:A:49:ALA:O	1:A:52:LEU:N	0.48	2.46	12	1
1:A:62:THR:O	1:A:63:MET:C	0.48	2.56	14	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:146:THR:N	0.47	2.24	1	1
1:A:135:LEU:HD13	1:A:135:LEU:H	0.47	1.67	4	1
1:A:82:ILE:HB	1:A:87:VAL:CG1	0.47	2.39	11	4
1:A:44:ILE:HD13	1:A:49:ALA:CB	0.47	2.38	6	1
1:A:149:ASN:C	1:A:151:ASP:N	0.47	2.72	18	5
1:A:27:THR:HA	1:A:150:ARG:CG	0.47	2.40	17	6
1:A:134:ASP:HB2	1:A:136:PRO:CD	0.47	2.34	4	1
1:A:58:SER:OG	1:A:118:CYS:HB2	0.47	2.08	7	3
1:A:86:VAL:HG13	1:A:106:ILE:HD13	0.47	1.85	19	2
1:A:24:LEU:HD13	1:A:161:TYR:OH	0.47	2.09	10	2
1:A:32:GLY:O	1:A:120:ASN:N	0.47	2.47	10	1
1:A:35:HIS:HB2	1:A:117:TYR:CD2	0.47	2.45	8	2
1:A:29:ARG:CZ	1:A:123:ALA:CB	0.47	2.92	9	1
1:A:62:THR:O	1:A:66:MET:CB	0.47	2.62	20	2
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:CD1	0.47	2.62	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:117:TYR:CE1	0.47	3.02	13	2
1:A:26:ILE:N	1:A:148:VAL:O	0.47	2.47	16	3
1:A:86:VAL:HB	1:A:114:TYR:CD1	0.47	2.44	18	2
1:A:25:ASN:O	1:A:37:GLU:CG	0.47	2.62	11	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:161:TYR:CE2	0.47	2.44	18	3
1:A:86:VAL:O	1:A:106:ILE:CA	0.47	2.59	20	1
1:A:139:PHE:CE2	1:A:160:GLU:HB3	0.47	2.44	4	5
1:A:143:ILE:O	1:A:158:LYS:HA	0.47	2.10	5	2
1:A:60:LEU:HD13	1:A:117:TYR:O	0.47	2.10	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:HG12	1:A:162:ARG:NE	0.47	2.24	1	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:106:ILE:HD11	0.47	2.39	13	4
1:A:30:PHE:CD1	1:A:74:PHE:HD1	0.47	2.28	3	4
1:A:134:ASP:HB3	1:A:136:PRO:CD	0.47	2.39	10	7
1:A:146:THR:OG1	1:A:156:VAL:HG13	0.47	2.10	15	2
1:A:27:THR:HG22	1:A:28:CYS:N	0.47	2.25	13	2
1:A:70:LEU:CB	1:A:91:ILE:HD12	0.47	2.40	1	1
1:A:133:THR:CB	1:A:155:TYR:HB2	0.47	2.39	17	6
1:A:35:HIS:NE2	1:A:115:ASP:CB	0.47	2.77	6	4
1:A:37:GLU:CB	1:A:43:SER:O	0.47	2.57	6	1
1:A:36:VAL:HG23	1:A:37:GLU:N	0.47	2.24	8	2
1:A:82:ILE:CG1	1:A:83:GLU:N	0.47	2.78	10	1
1:A:35:HIS:CE1	1:A:76:THR:HG21	0.47	2.43	13	1
1:A:78:ARG:C	1:A:88:ILE:HG21	0.47	2.35	13	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:52:LEU:HD21	0.47	2.45	15	1
1:A:70:LEU:C	1:A:72:ILE:H	0.47	2.16	15	2
1:A:157:GLN:CG	1:A:158:LYS:N	0.47	2.75	17	1
1:A:32:GLY:O	1:A:120:ASN:O	0.47	2.32	18	1
1:A:74:PHE:C	1:A:91:ILE:HD11	0.47	2.35	18	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD1	0.47	2.78	1	2
1:A:62:THR:HG21	1:A:117:TYR:HB3	0.47	1.86	5	1
1:A:49:ALA:HB1	1:A:116:THR:CB	0.47	2.39	12	2
1:A:36:VAL:CG2	1:A:52:LEU:CD1	0.47	2.93	17	1
1:A:90:ARG:CZ	1:A:101:ASN:HA	0.47	2.40	3	1
1:A:145:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CE2	0.47	2.45	5	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:117:TYR:CE2	0.47	3.02	12	1
1:A:120:ASN:HD21	1:A:122:SER:CB	0.47	2.20	19	1
1:A:90:ARG:HH21	1:A:105:TYR:HB2	0.47	1.70	3	1
1:A:147:ILE:HB	1:A:155:TYR:CE2	0.47	2.45	15	3
1:A:55:ALA:O	1:A:135:LEU:HA	0.47	2.10	14	2
1:A:26:ILE:CG2	1:A:147:ILE:HG22	0.47	2.39	11	3
1:A:143:ILE:CG1	1:A:162:ARG:HG2	0.47	2.39	10	1
1:A:38:LYS:HB2	1:A:44:ILE:HD11	0.47	1.85	11	1
1:A:23:ASP:HA	1:A:146:THR:HG22	0.47	1.87	18	2
1:A:55:ALA:O	1:A:137:ASN:N	0.46	2.48	16	5
1:A:65:GLN:CB	1:A:119:PHE:HB2	0.46	2.38	12	3
1:A:79:TYR:CD1	1:A:107:LEU:HD12	0.46	2.45	8	1
1:A:143:ILE:O	1:A:143:ILE:HG22	0.46	2.10	10	1
1:A:70:LEU:C	1:A:72:ILE:N	0.46	2.72	18	2
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD23	0.46	2.35	18	1
1:A:133:THR:N	1:A:155:TYR:CD2	0.46	2.83	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:OG1	1:A:76:THR:HG22	0.46	2.10	6	4
1:A:43:SER:HB3	1:A:115:ASP:CG	0.46	2.34	6	1
1:A:42:TYR:HB3	1:A:114:TYR:CD1	0.46	2.45	10	1
1:A:120:ASN:HD22	1:A:121:ALA:N	0.46	2.08	15	1
1:A:147:ILE:HB	1:A:155:TYR:CD2	0.46	2.46	12	1
1:A:72:ILE:HD11	1:A:74:PHE:HB3	0.46	1.86	14	1
1:A:79:TYR:CE1	1:A:107:LEU:HG	0.46	2.45	15	2
1:A:149:ASN:C	1:A:151:ASP:H	0.46	2.19	6	5
1:A:56:PHE:HB3	1:A:134:ASP:O	0.46	2.11	6	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:74:PHE:CD1	0.46	2.45	6	3
1:A:120:ASN:OD1	1:A:122:SER:HB2	0.46	2.10	10	2
1:A:132:VAL:O	1:A:135:LEU:HD13	0.46	2.10	8	1
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:HD23	0.46	2.09	9	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:154:ARG:HB3	0.46	1.87	16	1
1:A:145:ILE:HB	1:A:157:GLN:HG3	0.46	1.87	4	1
1:A:106:ILE:CG2	1:A:107:LEU:N	0.46	2.79	5	5
1:A:33:VAL:HG23	1:A:119:PHE:CD1	0.46	2.46	3	1
1:A:76:THR:OG1	1:A:117:TYR:OH	0.46	2.33	14	4
1:A:31:ALA:CA	1:A:126:GLU:O	0.46	2.64	4	2
1:A:134:ASP:C	1:A:135:LEU:HD22	0.46	2.36	4	2
1:A:135:LEU:HD12	1:A:145:ILE:CG2	0.46	2.39	7	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CE1	0.46	2.45	15	2
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:C	0.46	2.74	15	2
1:A:147:ILE:HG13	1:A:155:TYR:CD2	0.46	2.46	11	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:HA	0.46	1.86	16	1
1:A:26:ILE:HA	1:A:35:HIS:O	0.46	2.10	8	2
1:A:124:PRO:HB2	1:A:125:PRO:CD	0.46	2.40	1	1
1:A:79:TYR:HB3	1:A:114:TYR:HD2	0.46	1.71	3	2
1:A:90:ARG:NE	1:A:101:ASN:HA	0.46	2.25	3	1
1:A:37:GLU:CA	1:A:44:ILE:HD12	0.46	2.39	4	1
1:A:44:ILE:C	1:A:113:GLN:HB3	0.46	2.36	4	1
1:A:45:SER:CB	1:A:113:GLN:HG3	0.46	2.34	4	1
1:A:69:ALA:C	1:A:72:ILE:HG13	0.46	2.35	15	3
1:A:25:ASN:N	1:A:37:GLU:O	0.46	2.49	17	2
1:A:76:THR:H	1:A:89:PRO:HG3	0.46	1.70	16	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:146:THR:N	0.46	2.25	4	1
1:A:29:ARG:NH1	1:A:29:ARG:HG2	0.46	2.26	10	1
1:A:80:GLY:O	1:A:87:VAL:O	0.46	2.34	13	1
1:A:134:ASP:O	1:A:135:LEU:HB2	0.46	2.11	17	1
1:A:59:THR:O	1:A:60:LEU:C	0.46	2.59	1	3
1:A:26:ILE:HG21	1:A:34:PHE:CE1	0.46	2.46	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLN:CD	1:A:65:GLN:H	0.46	2.19	7	2
1:A:28:CYS:CB	1:A:129:CYS:HA	0.46	2.40	20	1
1:A:30:PHE:N	1:A:33:VAL:O	0.45	2.48	1	1
1:A:78:ARG:O	1:A:89:PRO:HD2	0.45	2.11	3	1
1:A:26:ILE:HD11	1:A:149:ASN:HD21	0.45	1.70	9	1
1:A:124:PRO:HD2	1:A:127:GLU:CG	0.45	2.41	10	2
1:A:36:VAL:HG21	1:A:52:LEU:CD2	0.45	2.30	18	2
1:A:89:PRO:HA	1:A:103:GLY:O	0.45	2.11	13	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:122:SER:N	0.45	2.48	17	1
1:A:88:ILE:HG21	1:A:98:ALA:CB	0.45	2.42	18	1
1:A:103:GLY:O	1:A:104:VAL:C	0.45	2.60	17	5
1:A:33:VAL:O	1:A:33:VAL:CG1	0.45	2.63	11	1
1:A:131:SER:C	1:A:133:THR:N	0.45	2.75	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:117:TYR:HE1	0.45	2.29	16	2
1:A:52:LEU:O	1:A:52:LEU:HD23	0.45	2.12	18	1
1:A:65:GLN:O	1:A:69:ALA:HB3	0.45	2.11	18	1
1:A:70:LEU:C	1:A:91:ILE:HD11	0.45	2.37	2	1
1:A:55:ALA:CB	1:A:135:LEU:HG	0.45	2.41	8	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:72:ILE:CG1	0.45	2.41	10	1
1:A:124:PRO:HD2	1:A:128:ASP:CB	0.45	2.41	16	2
1:A:120:ASN:HD22	1:A:120:ASN:C	0.45	2.19	15	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:56:PHE:HE1	0.45	1.70	17	1
1:A:61:PRO:CB	1:A:64:ALA:HB3	0.45	2.39	18	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:122:SER:N	0.45	2.64	18	1
1:A:82:ILE:O	1:A:84:GLY:N	0.45	2.50	19	5
1:A:24:LEU:HD21	1:A:145:ILE:CD1	0.45	2.41	8	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:114:TYR:CZ	0.45	2.47	8	1
1:A:132:VAL:HB	1:A:155:TYR:CE2	0.45	2.46	9	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:104:VAL:C	0.45	2.36	20	1
1:A:70:LEU:HD21	1:A:89:PRO:HB3	0.45	1.89	9	2
1:A:139:PHE:O	1:A:160:GLU:HB2	0.45	2.12	15	5
1:A:30:PHE:CD1	1:A:30:PHE:N	0.45	2.84	4	2
1:A:33:VAL:CG2	1:A:65:GLN:HE21	0.45	2.24	15	1
1:A:135:LEU:O	1:A:137:ASN:N	0.45	2.50	16	1
1:A:42:TYR:HD1	1:A:114:TYR:HA	0.45	1.71	19	1
1:A:21:GLN:HA	1:A:144:THR:H	0.45	1.72	1	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:TYR:C	0.45	2.59	3	1
1:A:143:ILE:HG22	1:A:145:ILE:CG1	0.45	2.41	14	1
1:A:88:ILE:O	1:A:89:PRO:C	0.45	2.60	16	1
1:A:62:THR:HA	1:A:83:GLU:CG	0.45	2.41	17	1
1:A:25:ASN:CG	1:A:148:VAL:HB	0.45	2.36	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:VAL:HG13	1:A:104:VAL:O	0.45	2.11	6	3
1:A:26:ILE:CG2	1:A:34:PHE:CE1	0.45	3.00	17	3
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:C	0.45	2.37	2	2
1:A:79:TYR:HB3	1:A:86:VAL:HG12	0.45	1.87	4	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:119:PHE:HB2	0.45	2.42	7	1
1:A:24:LEU:O	1:A:148:VAL:CG2	0.45	2.64	8	1
1:A:80:GLY:C	1:A:114:TYR:CE2	0.45	2.94	17	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:147:ILE:CD1	0.45	2.41	1	1
1:A:44:ILE:O	1:A:113:GLN:C	0.45	2.60	4	1
1:A:62:THR:N	1:A:65:GLN:HG2	0.45	2.27	15	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:91:ILE:H	0.45	1.72	6	1
1:A:46:ARG:O	1:A:50:ALA:N	0.45	2.49	12	2
1:A:61:PRO:HB3	1:A:117:TYR:HB2	0.44	1.89	1	1
1:A:104:VAL:O	1:A:104:VAL:HG13	0.44	2.11	9	5
1:A:141:GLY:O	1:A:159:GLY:O	0.44	2.36	16	9
1:A:52:LEU:HA	1:A:55:ALA:HB2	0.44	1.89	11	2
1:A:120:ASN:HD22	1:A:123:ALA:HB2	0.44	1.71	7	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:52:LEU:HD11	0.44	2.42	10	1
1:A:28:CYS:SG	1:A:128:ASP:O	0.44	2.75	13	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:107:LEU:HB2	0.44	1.89	13	1
1:A:25:ASN:HB2	1:A:38:LYS:CG	0.44	2.42	14	1
1:A:120:ASN:HD21	1:A:123:ALA:N	0.44	2.10	19	1
1:A:30:PHE:O	1:A:31:ALA:HB3	0.44	2.12	2	1
1:A:104:VAL:HG22	1:A:104:VAL:O	0.44	2.12	5	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD2	0.44	2.77	4	1
1:A:44:ILE:CG2	1:A:115:ASP:HA	0.44	2.41	6	1
1:A:78:ARG:O	1:A:80:GLY:N	0.44	2.51	14	2
1:A:82:ILE:HD13	1:A:87:VAL:CG2	0.44	2.42	13	1
1:A:25:ASN:HA	1:A:148:VAL:O	0.44	2.12	14	1
1:A:124:PRO:HG2	1:A:128:ASP:CB	0.44	2.42	17	1
1:A:143:ILE:HB	1:A:160:GLU:HA	0.44	1.89	20	1
1:A:79:TYR:CE2	1:A:107:LEU:HB2	0.44	2.47	2	2
1:A:149:ASN:HD22	1:A:149:ASN:N	0.44	2.11	6	1
1:A:145:ILE:HB	1:A:157:GLN:HB3	0.44	1.88	10	1
1:A:58:SER:HB3	1:A:119:PHE:C	0.44	2.37	12	1
1:A:58:SER:HB3	1:A:118:CYS:CB	0.44	2.42	15	1
1:A:90:ARG:HE	1:A:102:THR:HA	0.44	1.72	15	1
1:A:146:THR:HG23	1:A:155:TYR:O	0.44	2.13	16	1
1:A:62:THR:CG2	1:A:83:GLU:HB2	0.44	2.41	18	1
1:A:120:ASN:HD21	1:A:123:ALA:H	0.44	1.55	18	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:145:ILE:CG2	0.44	2.41	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:ILE:HB	1:A:159:GLY:C	0.44	2.38	16	3
1:A:65:GLN:HG3	1:A:119:PHE:CB	0.44	2.43	7	1
1:A:35:HIS:ND1	1:A:117:TYR:CE1	0.44	2.86	16	1
1:A:27:THR:CB	1:A:76:THR:HG22	0.44	2.43	1	1
1:A:34:PHE:HD1	1:A:35:HIS:N	0.44	2.10	11	4
1:A:62:THR:HG23	1:A:83:GLU:OE2	0.44	2.13	8	1
1:A:35:HIS:CD2	1:A:37:GLU:HG3	0.44	2.47	9	1
1:A:70:LEU:C	1:A:70:LEU:HD12	0.44	2.37	13	2
1:A:81:PHE:CB	1:A:116:THR:HA	0.44	2.43	13	1
1:A:42:TYR:HB3	1:A:114:TYR:HD1	0.44	1.72	10	2
1:A:82:ILE:HB	1:A:87:VAL:CG2	0.44	2.43	10	6
1:A:42:TYR:HB2	1:A:113:GLN:CG	0.44	2.40	13	1
1:A:34:PHE:CD2	1:A:56:PHE:CE1	0.44	3.06	17	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:52:LEU:CD1	0.44	2.35	18	1
1:A:38:LYS:HB2	1:A:44:ILE:CD1	0.44	2.43	11	2
1:A:29:ARG:HB3	1:A:123:ALA:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:42:TYR:CA	1:A:114:TYR:HA	0.44	2.42	14	4
1:A:24:LEU:CD1	1:A:161:TYR:OH	0.44	2.66	7	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:161:TYR:CE2	0.44	2.48	18	2
1:A:29:ARG:HG2	1:A:29:ARG:HH11	0.44	1.72	10	1
1:A:85:HIS:HB3	1:A:106:ILE:CD1	0.44	2.42	12	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:114:TYR:CD2	0.44	2.48	13	1
1:A:25:ASN:HB2	1:A:38:LYS:CB	0.44	2.43	14	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:83:GLU:HA	0.44	1.88	15	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:52:LEU:CD1	0.44	2.38	19	1
1:A:33:VAL:HA	1:A:119:PHE:HA	0.44	1.90	19	1
1:A:61:PRO:HG2	1:A:82:ILE:CA	0.44	2.43	19	1
1:A:140:ASP:C	1:A:142:PRO:HD2	0.44	2.38	20	1
1:A:143:ILE:HG22	1:A:143:ILE:O	0.44	2.12	20	1
1:A:33:VAL:HG23	1:A:119:PHE:HD2	0.44	1.72	2	6
1:A:44:ILE:HD12	1:A:115:ASP:HA	0.44	1.89	8	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:52:LEU:HD12	0.44	1.89	18	1
1:A:29:ARG:HD3	1:A:32:GLY:O	0.44	2.13	19	1
1:A:30:PHE:CD2	1:A:74:PHE:HB2	0.44	2.48	19	1
1:A:143:ILE:HG12	1:A:160:GLU:HG3	0.44	1.89	20	1
1:A:125:PRO:C	1:A:126:GLU:HG3	0.44	2.36	2	1
1:A:125:PRO:O	1:A:126:GLU:HB3	0.44	2.13	3	1
1:A:65:GLN:HG3	1:A:119:PHE:HB2	0.44	1.87	7	1
1:A:59:THR:C	1:A:61:PRO:HD3	0.44	2.38	10	1
1:A:24:LEU:N	1:A:146:THR:O	0.44	2.50	14	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:122:SER:HB2	0.44	2.27	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ASN:HB3	1:A:37:GLU:CD	0.43	2.38	5	1
1:A:34:PHE:CD2	1:A:132:VAL:HG11	0.43	2.48	8	1
1:A:44:ILE:HD12	1:A:114:TYR:O	0.43	2.13	8	2
1:A:44:ILE:C	1:A:113:GLN:HG2	0.43	2.37	10	1
1:A:28:CYS:SG	1:A:149:ASN:OD1	0.43	2.76	15	2
1:A:132:VAL:O	1:A:133:THR:C	0.43	2.60	16	1
1:A:33:VAL:HG21	1:A:65:GLN:CB	0.43	2.36	18	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:122:SER:HB2	0.43	2.28	19	1
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:O	0.43	2.13	3	2
1:A:88:ILE:CG1	1:A:105:TYR:HB3	0.43	2.43	14	1
1:A:133:THR:CA	1:A:147:ILE:HD11	0.43	2.39	16	1
1:A:66:MET:SD	1:A:82:ILE:HD12	0.43	2.53	20	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:87:VAL:CG1	0.43	2.43	20	1
1:A:133:THR:CA	1:A:147:ILE:HG13	0.43	2.35	12	3
1:A:76:THR:CB	1:A:117:TYR:OH	0.43	2.66	14	1
1:A:25:ASN:HD22	1:A:148:VAL:HB	0.43	1.73	17	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:145:ILE:CD1	0.43	2.96	8	1
1:A:26:ILE:CA	1:A:35:HIS:O	0.43	2.66	8	1
1:A:53:CYS:HB2	1:A:118:CYS:HB2	0.43	1.60	12	2
1:A:44:ILE:CB	1:A:114:TYR:O	0.43	2.65	10	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:70:LEU:CD2	0.43	2.43	13	1
1:A:77:CYS:H	1:A:89:PRO:CG	0.43	2.26	16	1
1:A:82:ILE:O	1:A:83:GLU:C	0.43	2.62	1	3
1:A:86:VAL:HB	1:A:114:TYR:CE1	0.43	2.49	1	1
1:A:59:THR:HB	1:A:61:PRO:CD	0.43	2.39	5	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:105:TYR:HB3	0.43	1.90	5	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:132:VAL:HG21	0.43	2.48	10	1
1:A:35:HIS:HB2	1:A:117:TYR:CE2	0.43	2.49	12	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:52:LEU:HD11	0.43	1.90	14	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:127:GLU:HG2	0.43	2.44	1	1
1:A:104:VAL:O	1:A:104:VAL:HG22	0.43	2.14	1	3
1:A:77:CYS:O	1:A:78:ARG:HD3	0.43	2.13	3	1
1:A:78:ARG:C	1:A:88:ILE:HG22	0.43	2.38	14	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:154:ARG:CG	0.43	2.44	15	1
1:A:149:ASN:HB3	1:A:153:THR:HG23	0.43	1.88	20	2
1:A:88:ILE:CB	1:A:105:TYR:HB3	0.43	2.33	16	1
1:A:27:THR:CA	1:A:150:ARG:H	0.43	2.26	18	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:88:ILE:H	0.43	1.71	20	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:CG1	0.43	2.44	2	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:38:LYS:HA	0.43	2.28	8	1
1:A:25:ASN:OD1	1:A:25:ASN:N	0.43	2.52	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:TYR:CE2	1:A:107:LEU:HG	0.43	2.49	13	1
1:A:62:THR:O	1:A:64:ALA:N	0.43	2.51	14	1
1:A:69:ALA:O	1:A:74:PHE:CD1	0.43	2.72	14	1
1:A:25:ASN:N	1:A:38:LYS:CB	0.43	2.82	16	1
1:A:53:CYS:O	1:A:56:PHE:CE1	0.43	2.71	17	1
1:A:43:SER:O	1:A:44:ILE:CB	0.43	2.60	19	1
1:A:33:VAL:HG22	1:A:119:PHE:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:52:LEU:O	1:A:54:LYS:N	0.43	2.51	9	3
1:A:23:ASP:C	1:A:24:LEU:HD13	0.43	2.39	8	1
1:A:29:ARG:HG3	1:A:120:ASN:HD21	0.43	1.74	9	1
1:A:60:LEU:HD12	1:A:82:ILE:HD12	0.43	1.89	10	1
1:A:69:ALA:C	1:A:74:PHE:HB2	0.43	2.38	12	1
1:A:78:ARG:O	1:A:88:ILE:HG21	0.43	2.14	13	1
1:A:48:GLU:HG2	1:A:162:ARG:HE	0.43	1.72	2	1
1:A:52:LEU:HA	1:A:55:ALA:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:57:ASN:HB3	1:A:137:ASN:ND2	0.43	2.28	14	2
1:A:43:SER:CA	1:A:113:GLN:HB3	0.43	2.44	16	1
1:A:75:GLU:CD	1:A:89:PRO:HB2	0.43	2.38	19	1
1:A:123:ALA:HB1	1:A:128:ASP:CB	0.43	2.44	19	1
1:A:21:GLN:CG	1:A:144:THR:HB	0.43	2.43	20	1
1:A:81:PHE:CD1	1:A:114:TYR:OH	0.43	2.71	11	3
1:A:89:PRO:O	1:A:90:ARG:HB2	0.43	2.14	17	4
1:A:62:THR:O	1:A:66:MET:HG2	0.43	2.14	13	1
1:A:57:ASN:HD22	1:A:137:ASN:ND2	0.42	2.12	20	2
1:A:87:VAL:HG11	1:A:104:VAL:HG23	0.42	1.91	1	1
1:A:81:PHE:HB2	1:A:116:THR:HA	0.42	1.90	4	4
1:A:76:THR:OG1	1:A:89:PRO:HG3	0.42	2.14	14	1
1:A:65:GLN:CB	1:A:119:PHE:CD2	0.42	3.02	15	1
1:A:77:CYS:H	1:A:89:PRO:HG2	0.42	1.74	16	1
1:A:56:PHE:O	1:A:120:ASN:OD1	0.42	2.36	18	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:161:TYR:HE2	0.42	1.74	19	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:107:LEU:HB3	0.42	2.45	6	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:38:LYS:HE3	0.42	1.90	7	1
1:A:161:TYR:CD1	1:A:161:TYR:C	0.42	2.97	10	1
1:A:70:LEU:HD22	1:A:91:ILE:N	0.42	2.30	11	1
1:A:25:ASN:N	1:A:25:ASN:OD1	0.42	2.52	12	1
1:A:63:MET:O	1:A:67:GLU:N	0.42	2.52	13	1
1:A:56:PHE:HD2	1:A:120:ASN:OD1	0.42	1.97	15	1
1:A:78:ARG:HB3	1:A:115:ASP:OD2	0.42	2.14	2	1
1:A:86:VAL:HB	1:A:114:TYR:CZ	0.42	2.48	3	1
1:A:141:GLY:HA3	1:A:160:GLU:CG	0.42	2.44	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:LYS:O	1:A:158:LYS:HG2	0.42	2.14	16	2
1:A:28:CYS:HA	1:A:149:ASN:OD1	0.42	2.15	12	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:120:ASN:CB	0.42	3.02	13	2
1:A:141:GLY:HA3	1:A:160:GLU:HG2	0.42	1.92	3	1
1:A:141:GLY:C	1:A:143:ILE:H	0.42	2.23	5	4
1:A:85:HIS:CG	1:A:106:ILE:HD11	0.42	2.50	4	1
1:A:61:PRO:HA	1:A:65:GLN:HG2	0.42	1.90	7	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:56:PHE:CD1	0.42	3.08	17	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:142:PRO:HD2	0.42	2.43	20	1
1:A:65:GLN:HG3	1:A:119:PHE:CD2	0.42	2.49	7	1
1:A:61:PRO:HG3	1:A:117:TYR:C	0.42	2.39	9	1
1:A:161:TYR:CD1	1:A:161:TYR:N	0.42	2.88	10	2
1:A:29:ARG:HG2	1:A:34:PHE:N	0.42	2.29	11	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:114:TYR:HD2	0.42	1.74	15	1
1:A:61:PRO:CG	1:A:117:TYR:HB2	0.42	2.43	19	1
1:A:28:CYS:SG	1:A:149:ASN:CG	0.42	3.03	3	1
1:A:23:ASP:O	1:A:38:LYS:HG2	0.42	2.15	5	1
1:A:44:ILE:CG2	1:A:45:SER:N	0.42	2.81	6	1
1:A:49:ALA:O	1:A:51:ASP:N	0.42	2.52	6	1
1:A:34:PHE:HE2	1:A:132:VAL:HG11	0.42	1.71	8	1
1:A:79:TYR:CG	1:A:107:LEU:HD12	0.42	2.50	8	1
1:A:81:PHE:N	1:A:116:THR:HA	0.42	2.29	10	1
1:A:90:ARG:CZ	1:A:98:ALA:HB3	0.42	2.44	12	1
1:A:58:SER:HB3	1:A:120:ASN:N	0.42	2.30	14	1
1:A:23:ASP:O	1:A:38:LYS:HG3	0.42	2.15	17	1
1:A:104:VAL:HG12	1:A:104:VAL:O	0.42	2.14	18	1
1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CD1	0.42	2.88	20	1
1:A:145:ILE:HG22	1:A:145:ILE:O	0.42	2.14	20	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:136:PRO:HD2	0.42	1.92	2	1
1:A:59:THR:CB	1:A:65:GLN:HE22	0.42	2.27	5	1
1:A:44:ILE:HG22	1:A:115:ASP:HA	0.42	1.91	6	1
1:A:26:ILE:CB	1:A:35:HIS:O	0.42	2.64	20	3
1:A:62:THR:O	1:A:66:MET:N	0.42	2.50	20	3
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:CD1	0.42	2.44	17	1
1:A:141:GLY:O	1:A:142:PRO:C	0.42	2.63	20	1
1:A:133:THR:CB	1:A:155:TYR:HB3	0.42	2.43	10	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:122:SER:CB	0.42	2.67	18	1
1:A:31:ALA:H	1:A:127:GLU:N	0.42	2.13	2	1
1:A:66:MET:HE3	1:A:82:ILE:HD13	0.42	1.91	2	1
1:A:143:ILE:HD12	1:A:160:GLU:HG2	0.42	1.92	4	1
1:A:78:ARG:HB3	1:A:115:ASP:CG	0.42	2.39	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:THR:HB	1:A:155:TYR:CD2	0.42	2.50	7	1
1:A:129:CYS:O	1:A:130:THR:C	0.42	2.61	8	1
1:A:38:LYS:H	1:A:44:ILE:CG1	0.42	2.27	10	1
1:A:65:GLN:HE21	1:A:119:PHE:CB	0.42	2.26	13	1
1:A:90:ARG:O	1:A:90:ARG:HG3	0.42	2.13	16	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:126:GLU:H	0.42	1.73	19	1
1:A:78:ARG:C	1:A:88:ILE:HD11	0.42	2.39	12	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:52:LEU:HD21	0.42	2.44	10	1
1:A:143:ILE:HD11	1:A:162:ARG:NE	0.42	2.30	10	1
1:A:132:VAL:HG23	1:A:147:ILE:HG21	0.42	1.91	11	1
1:A:28:CYS:O	1:A:34:PHE:HB2	0.42	2.15	12	1
1:A:66:MET:O	1:A:70:LEU:HD12	0.41	2.15	1	1
1:A:44:ILE:O	1:A:114:TYR:O	0.41	2.38	10	2
1:A:76:THR:C	1:A:78:ARG:N	0.41	2.77	8	2
1:A:50:ALA:O	1:A:54:LYS:CB	0.41	2.66	9	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:71:SER:N	0.41	2.30	13	1
1:A:139:PHE:CZ	1:A:161:TYR:HA	0.41	2.50	2	1
1:A:29:ARG:HH11	1:A:132:VAL:HG22	0.41	1.75	5	1
1:A:139:PHE:CD1	1:A:160:GLU:O	0.41	2.73	6	1
1:A:35:HIS:NE2	1:A:37:GLU:CG	0.41	2.82	9	1
1:A:79:TYR:CZ	1:A:107:LEU:HG	0.41	2.50	13	1
1:A:44:ILE:CG2	1:A:114:TYR:O	0.41	2.68	14	2
1:A:33:VAL:CG2	1:A:65:GLN:NE2	0.41	2.83	15	1
1:A:148:VAL:HG22	1:A:154:ARG:CB	0.41	2.44	16	1
1:A:87:VAL:HG11	1:A:104:VAL:HG12	0.41	1.91	19	1
1:A:149:ASN:HD22	1:A:149:ASN:HA	0.41	1.53	20	1
1:A:29:ARG:HD3	1:A:120:ASN:CG	0.41	2.39	1	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:120:ASN:CB	0.41	3.03	4	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:146:THR:O	0.41	2.15	9	1
1:A:64:ALA:HA	1:A:67:GLU:CG	0.41	2.46	11	1
1:A:28:CYS:O	1:A:34:PHE:CB	0.41	2.68	12	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:88:ILE:N	0.41	2.83	16	1
1:A:62:THR:CG2	1:A:118:CYS:HA	0.41	2.46	20	1
1:A:125:PRO:O	1:A:126:GLU:HB2	0.41	2.13	20	1
1:A:75:GLU:C	1:A:77:CYS:N	0.41	2.78	8	1
1:A:90:ARG:HE	1:A:90:ARG:HA	0.41	1.76	9	1
1:A:120:ASN:C	1:A:122:SER:N	0.41	2.78	9	2
1:A:26:ILE:HD12	1:A:34:PHE:CD1	0.41	2.50	11	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:145:ILE:CG2	0.41	2.96	18	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:38:LYS:NZ	0.41	2.30	1	1
1:A:149:ASN:CG	1:A:155:TYR:OH	0.41	2.63	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:SER:HB2	1:A:118:CYS:HB2	0.41	1.92	11	1
1:A:47:THR:HG22	1:A:48:GLU:N	0.41	2.30	13	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:161:TYR:HE1	0.41	1.76	15	1
1:A:134:ASP:O	1:A:157:GLN:CD	0.41	2.64	17	1
1:A:43:SER:HA	1:A:113:GLN:HG2	0.41	1.92	9	1
1:A:37:GLU:CB	1:A:115:ASP:HB3	0.41	2.44	10	1
1:A:66:MET:HE3	1:A:66:MET:HB3	0.41	1.80	10	1
1:A:26:ILE:HD13	1:A:132:VAL:HG21	0.41	1.92	11	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:120:ASN:HB2	0.41	2.50	11	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:LEU:HD12	0.41	1.93	11	1
1:A:60:LEU:O	1:A:61:PRO:C	0.41	2.64	13	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:52:LEU:CD2	0.41	3.03	15	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HD12	0.41	2.15	17	1
1:A:80:GLY:N	1:A:87:VAL:O	0.41	2.53	18	1
1:A:57:ASN:HB3	1:A:137:ASN:OD1	0.41	2.16	20	1
1:A:58:SER:HA	1:A:120:ASN:HA	0.41	1.92	1	1
1:A:143:ILE:CD1	1:A:160:GLU:HG2	0.41	2.46	4	1
1:A:106:ILE:HG22	1:A:107:LEU:N	0.41	2.30	17	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:146:THR:O	0.41	2.15	15	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:122:SER:H	0.41	2.24	18	1
1:A:42:TYR:CD1	1:A:114:TYR:HA	0.41	2.50	19	1
1:A:43:SER:HB2	1:A:114:TYR:CA	0.41	2.46	6	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:LEU:HD23	0.41	2.41	16	2
1:A:42:TYR:O	1:A:113:GLN:C	0.41	2.64	15	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:104:VAL:HG23	0.41	1.92	16	1
1:A:143:ILE:HG21	1:A:161:TYR:CE1	0.41	2.50	20	1
1:A:145:ILE:CD1	1:A:159:GLY:HA3	0.41	2.45	20	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:52:LEU:HD22	0.41	2.46	2	1
1:A:52:LEU:O	1:A:55:ALA:CB	0.41	2.68	2	1
1:A:81:PHE:CA	1:A:114:TYR:OH	0.41	2.67	3	1
1:A:88:ILE:HD13	1:A:98:ALA:HB2	0.41	1.92	3	1
1:A:145:ILE:O	1:A:145:ILE:HG22	0.41	2.15	3	1
1:A:26:ILE:HD13	1:A:34:PHE:CE1	0.41	2.51	6	1
1:A:132:VAL:HG12	1:A:147:ILE:HG21	0.41	1.93	7	1
1:A:31:ALA:N	1:A:126:GLU:C	0.41	2.79	9	1
1:A:45:SER:HB3	1:A:113:GLN:CG	0.41	2.46	10	1
1:A:30:PHE:CD1	1:A:74:PHE:HD2	0.41	2.34	15	1
1:A:30:PHE:CD2	1:A:73:GLY:O	0.41	2.74	16	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:61:PRO:HD2	0.41	1.93	16	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:90:ARG:H	0.41	2.28	16	1
1:A:72:ILE:C	1:A:72:ILE:HD12	0.41	2.41	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:ILE:HG13	1:A:155:TYR:HD2	0.41	1.76	11	1
1:A:29:ARG:HA	1:A:34:PHE:HB2	0.41	1.92	12	1
1:A:133:THR:OG1	1:A:157:GLN:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:43:SER:CB	1:A:114:TYR:C	0.41	2.94	19	1
1:A:50:ALA:O	1:A:53:CYS:HB2	0.41	2.16	20	1
1:A:36:VAL:CG2	1:A:52:LEU:HD21	0.40	2.47	2	2
1:A:86:VAL:HG23	1:A:114:TYR:CE2	0.40	2.51	3	1
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:CD1	0.40	2.78	4	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:52:LEU:HD11	0.40	2.50	6	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:107:LEU:CD2	0.40	2.46	7	1
1:A:58:SER:HB2	1:A:120:ASN:CA	0.40	2.45	13	2
1:A:61:PRO:CG	1:A:65:GLN:HE22	0.40	2.28	13	1
1:A:36:VAL:CG2	1:A:52:LEU:HD11	0.40	2.38	17	1
1:A:46:ARG:O	1:A:50:ALA:CB	0.40	2.69	17	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:74:PHE:CD2	0.40	2.52	18	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:146:THR:C	0.40	2.42	1	1
1:A:35:HIS:HB2	1:A:117:TYR:CE1	0.40	2.51	4	1
1:A:61:PRO:HG3	1:A:81:PHE:O	0.40	2.16	8	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:LYS:CB	0.40	2.69	9	1
1:A:69:ALA:O	1:A:74:PHE:CB	0.40	2.69	12	2
1:A:90:ARG:HD3	1:A:104:VAL:H	0.40	1.76	16	1
1:A:86:VAL:O	1:A:86:VAL:HG22	0.40	2.17	3	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:145:ILE:CG1	0.40	2.44	5	1
1:A:135:LEU:HD11	1:A:147:ILE:HD12	0.40	1.91	7	1
1:A:67:GLU:O	1:A:70:LEU:HB2	0.40	2.17	10	1
1:A:53:CYS:O	1:A:58:SER:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:36:VAL:HG11	1:A:53:CYS:CB	0.40	2.47	3	1
1:A:145:ILE:HG22	1:A:147:ILE:CD1	0.40	2.46	4	1
1:A:58:SER:HB2	1:A:120:ASN:CB	0.40	2.44	8	1
1:A:59:THR:C	1:A:61:PRO:CD	0.40	2.94	10	1
1:A:26:ILE:CG2	1:A:34:PHE:CZ	0.40	3.02	17	1
1:A:62:THR:HG23	1:A:65:GLN:CD	0.40	2.42	17	1
1:A:145:ILE:HD12	1:A:161:TYR:CG	0.40	2.51	17	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:91:ILE:HD11	0.40	1.93	2	1
1:A:25:ASN:N	1:A:148:VAL:HG23	0.40	2.31	4	1
1:A:88:ILE:O	1:A:88:ILE:HG22	0.40	2.15	8	1
1:A:32:GLY:HA2	1:A:123:ALA:O	0.40	2.17	9	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:117:TYR:HE2	0.40	2.35	10	1
1:A:26:ILE:HD13	1:A:132:VAL:HG11	0.40	1.94	12	1
1:A:90:ARG:CD	1:A:103:GLY:HA2	0.40	2.43	16	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	128/159 (81%)	82±4 (64±3%)	30±4 (23±3%)	16±3 (12±2%)	1	6
All	All	2560/3180 (81%)	1644 (64%)	601 (23%)	315 (12%)	1	6

All 57 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	28	CYS	20
1	A	133	THR	19
1	A	57	ASN	16
1	A	90	ARG	15
1	A	84	GLY	14
1	A	126	GLU	13
1	A	131	SER	12
1	A	161	TYR	12
1	A	91	ILE	11
1	A	132	VAL	10
1	A	134	ASP	10
1	A	82	ILE	10
1	A	98	ALA	9
1	A	138	ALA	9
1	A	89	PRO	8
1	A	114	TYR	8
1	A	49	ALA	7
1	A	113	GLN	6
1	A	61	PRO	5
1	A	42	TYR	5
1	A	127	GLU	5
1	A	130	THR	5
1	A	62	THR	5
1	A	83	GLU	4
1	A	102	THR	4
1	A	100	ASN	4
1	A	43	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	103	GLY	4
1	A	135	LEU	4
1	A	136	PRO	4
1	A	99	ALA	3
1	A	128	ASP	3
1	A	31	ALA	3
1	A	44	ILE	3
1	A	38	LYS	3
1	A	48	GLU	3
1	A	144	THR	3
1	A	122	SER	2
1	A	125	PRO	2
1	A	150	ARG	2
1	A	30	PHE	2
1	A	79	TYR	2
1	A	124	PRO	2
1	A	143	ILE	2
1	A	47	THR	2
1	A	85	HIS	2
1	A	86	VAL	2
1	A	104	VAL	2
1	A	101	ASN	2
1	A	78	ARG	1
1	A	51	ASP	1
1	A	50	ALA	1
1	A	75	GLU	1
1	A	107	LEU	1
1	A	45	SER	1
1	A	63	MET	1
1	A	71	SER	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	109/138 (79%)	54±5 (49±5%)	55±5 (51±5%)	01
All	All	2180/2760 (79%)	1079 (49%)	1101 (51%)	01

All 99 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	26	ILE	20
1	A	29	ARG	20
1	A	34	PHE	20
1	A	36	VAL	20
1	A	81	PHE	20
1	A	139	PHE	20
1	A	161	TYR	20
1	A	147	ILE	19
1	A	155	TYR	19
1	A	75	GLU	18
1	A	107	LEU	18
1	A	153	THR	18
1	A	22	ILE	17
1	A	33	VAL	17
1	A	44	ILE	17
1	A	68	LYS	17
1	A	114	TYR	17
1	A	115	ASP	17
1	A	135	LEU	17
1	A	21	GLN	17
1	A	85	HIS	16
1	A	106	ILE	16
1	A	66	MET	16
1	A	86	VAL	16
1	A	25	ASN	15
1	A	77	CYS	15
1	A	91	ILE	15
1	A	27	THR	14
1	A	35	HIS	14
1	A	47	THR	14
1	A	58	SER	14
1	A	83	GLU	14
1	A	126	GLU	14
1	A	157	GLN	14
1	A	127	GLU	14
1	A	160	GLU	14
1	A	51	ASP	13
1	A	62	THR	13
1	A	45	SER	13
1	A	52	LEU	13
1	A	88	ILE	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	158	LYS	13
1	A	38	LYS	12
1	A	54	LYS	12
1	A	60	LEU	12
1	A	63	MET	12
1	A	70	LEU	12
1	A	151	ASP	12
1	A	132	VAL	12
1	A	118	CYS	12
1	A	128	ASP	11
1	A	149	ASN	11
1	A	53	CYS	10
1	A	57	ASN	10
1	A	90	ARG	10
1	A	154	ARG	10
1	A	129	CYS	10
1	A	137	ASN	10
1	A	72	ILE	9
1	A	82	ILE	9
1	A	116	THR	9
1	A	140	ASP	9
1	A	78	ARG	9
1	A	65	GLN	8
1	A	133	THR	8
1	A	134	ASP	8
1	A	162	ARG	8
1	A	24	LEU	8
1	A	120	ASN	8
1	A	71	SER	8
1	A	102	THR	8
1	A	113	GLN	8
1	A	156	VAL	8
1	A	23	ASP	8
1	A	130	THR	7
1	A	104	VAL	7
1	A	43	SER	6
1	A	150	ARG	6
1	A	48	GLU	6
1	A	145	ILE	6
1	A	74	PHE	5
1	A	101	ASN	5
1	A	59	THR	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	67	GLU	5
1	A	87	VAL	5
1	A	122	SER	5
1	A	37	GLU	5
1	A	146	THR	5
1	A	131	SER	4
1	A	42	TYR	4
1	A	30	PHE	3
1	A	148	VAL	3
1	A	76	THR	3
1	A	28	CYS	3
1	A	46	ARG	3
1	A	100	ASN	3
1	A	143	ILE	2
1	A	144	THR	2
1	A	119	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided