



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 28, 2026 – 10:58 AM UTC

PDB ID : 1U3N / pdb_00001u3n
Title : A SOD-like protein from B. subtilis, unstructured in solution, becomes ordered in the crystal: implications for function and for fibrillogenesis
Authors : Banci, L.; Bertini, I.; Calderone, V.; Cramaro, F.; Del Conte, R.; Fantoni, A.; Mangani, S.; Quattrone, A.; Viezzoli, M.S.
Deposited on : 2004-07-22

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

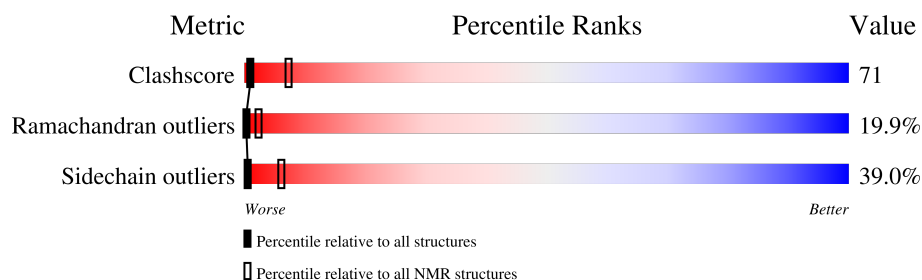
1 Overall quality at a glance

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	162	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 29 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:40-A:105, A:123-A:147, A:152-A:171, A:178-A:190 (124)	2.97	29

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 5 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 7, 8, 10, 11, 23, 26, 27
2	2, 5, 13, 14, 16, 28
3	6, 18, 20, 21, 29, 30
4	1, 17
5	19, 24
Single-model clusters	9; 12; 15; 22; 25

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2377 atoms, of which 1165 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	162	Total	C	H	N	O	S	0
			2377	750	1165	215	243	4	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM

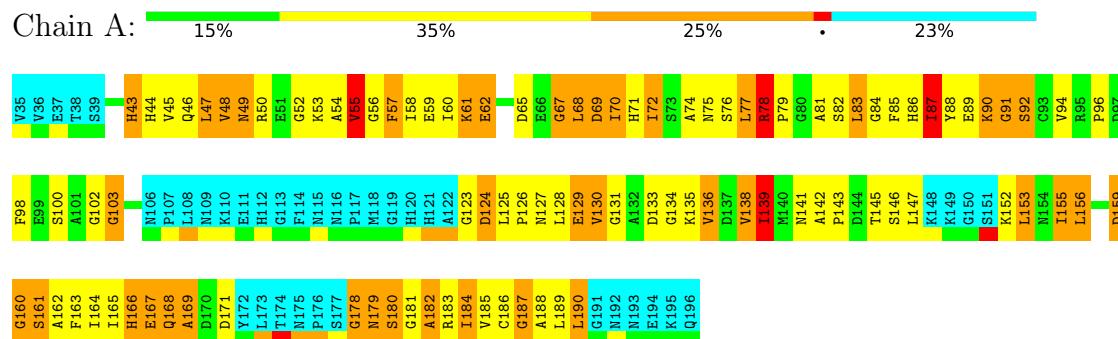


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

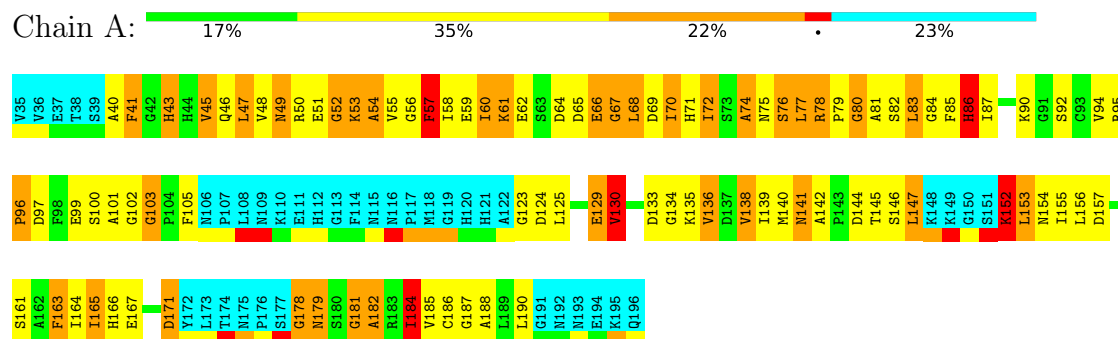
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



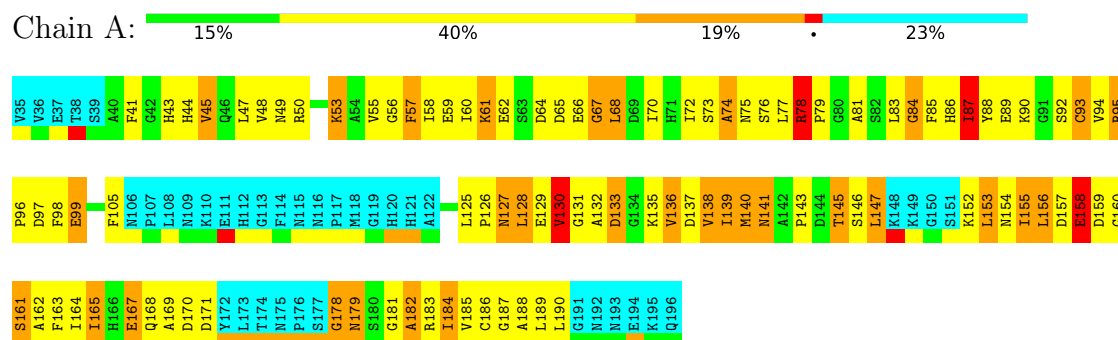
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



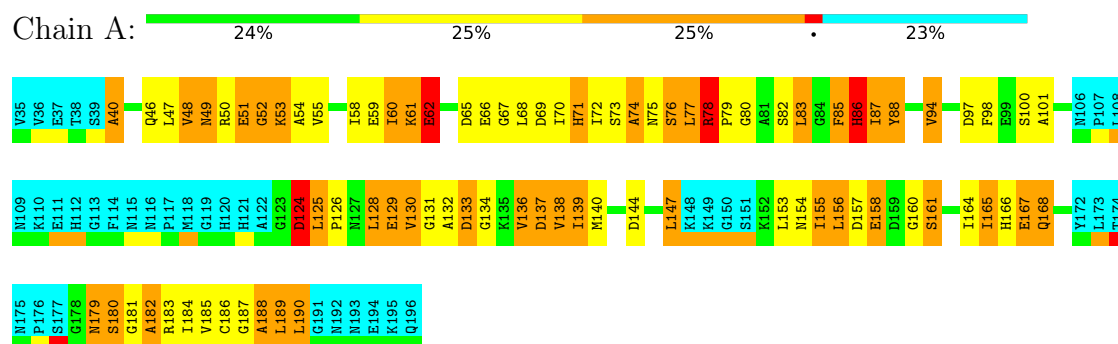
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



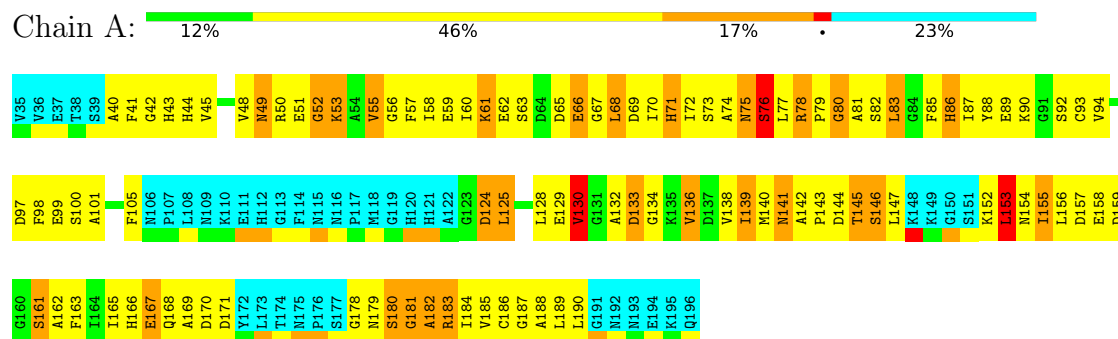
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



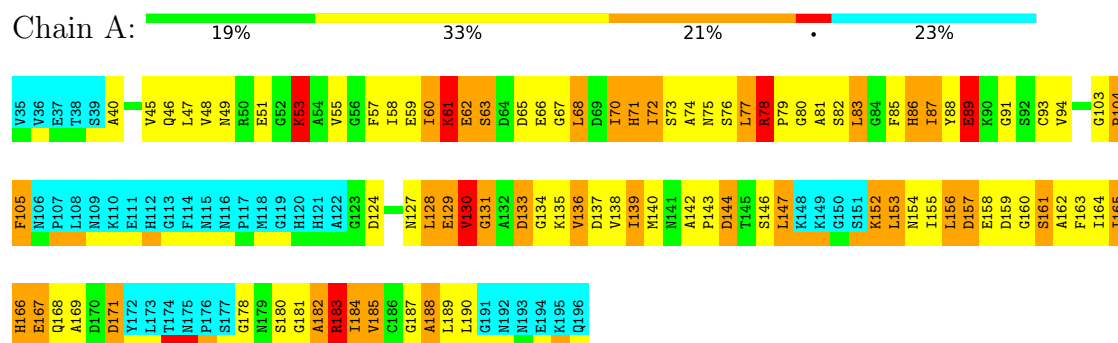
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



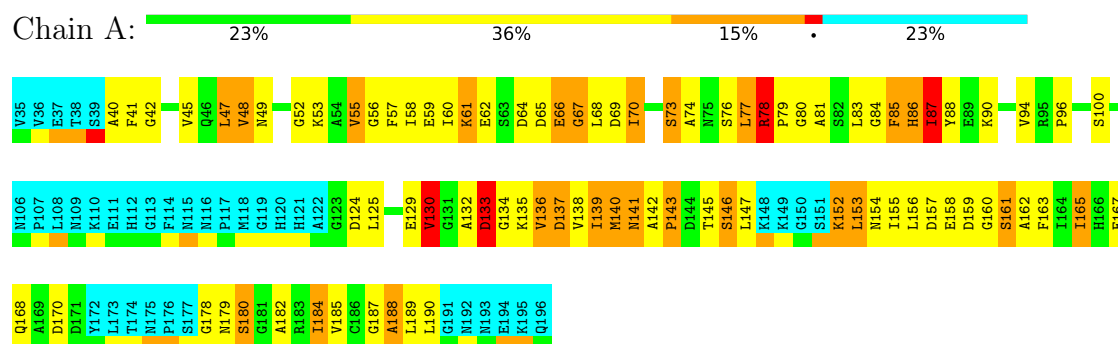
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



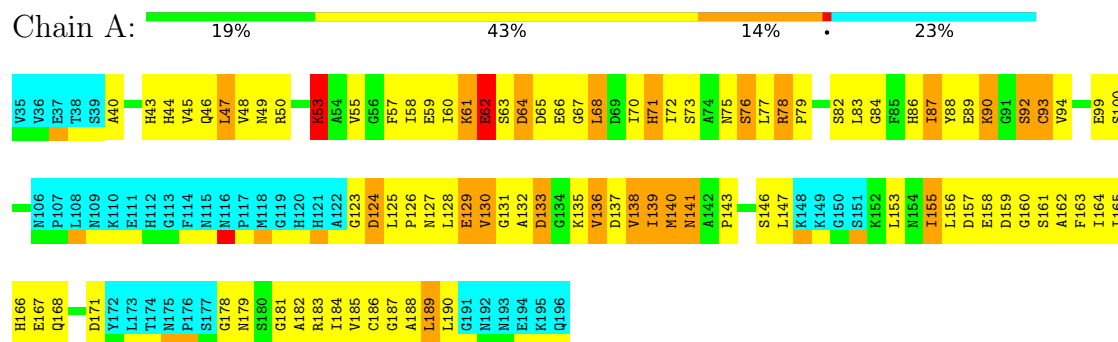
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



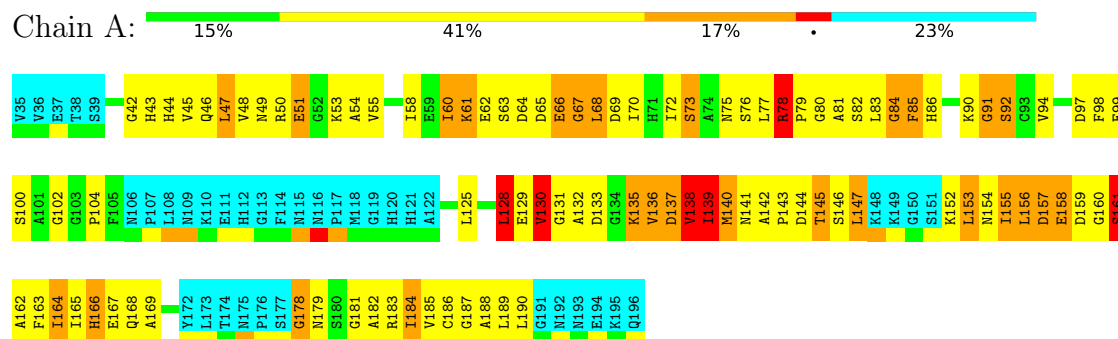
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



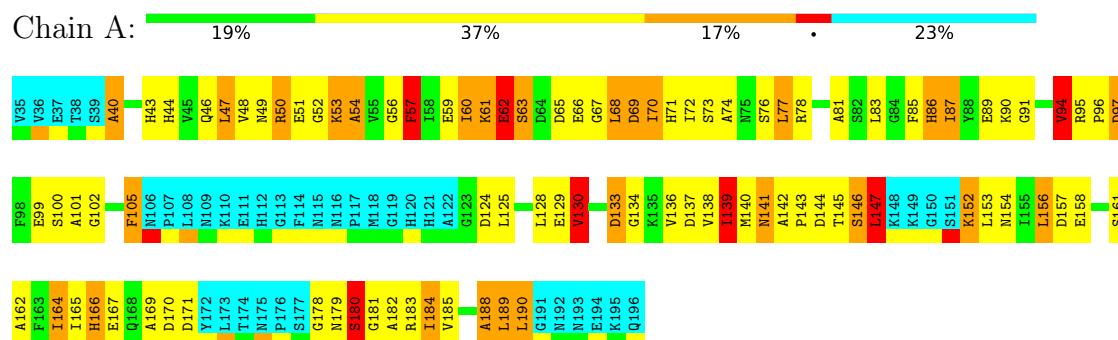
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



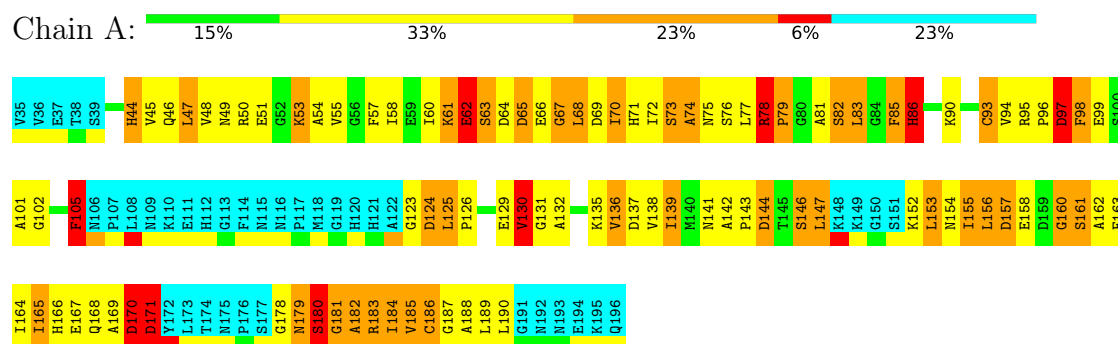
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



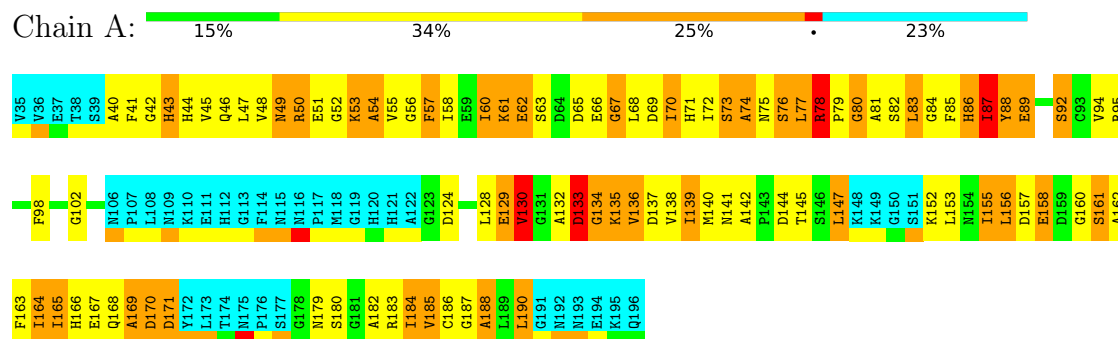
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



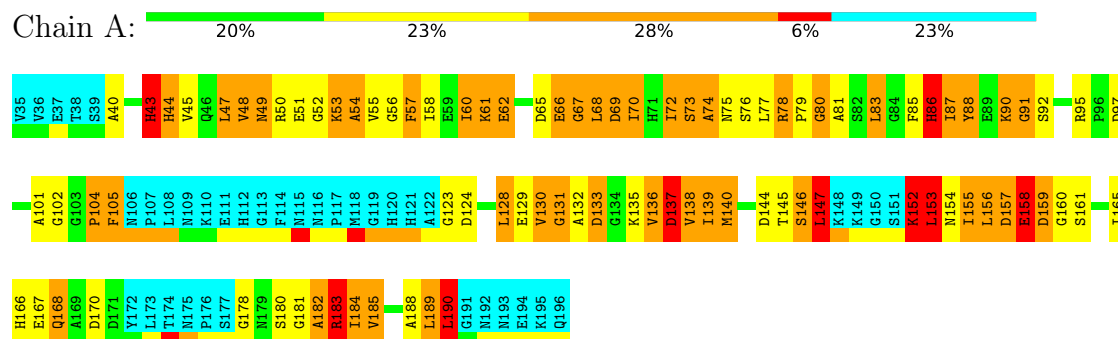
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



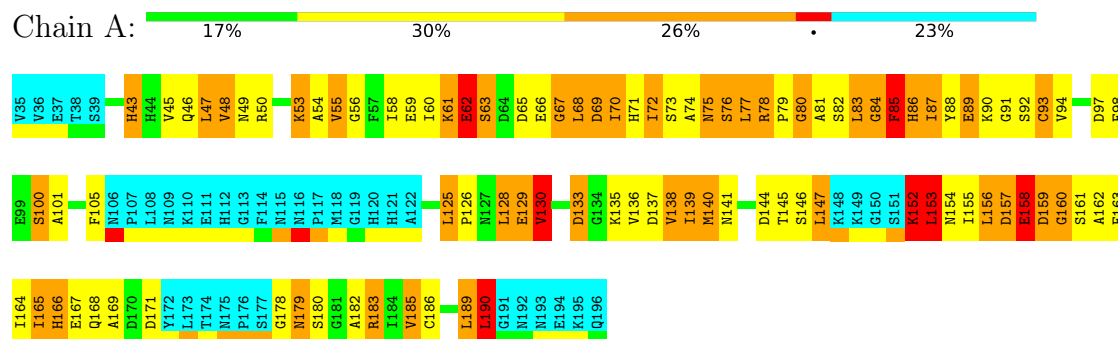
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



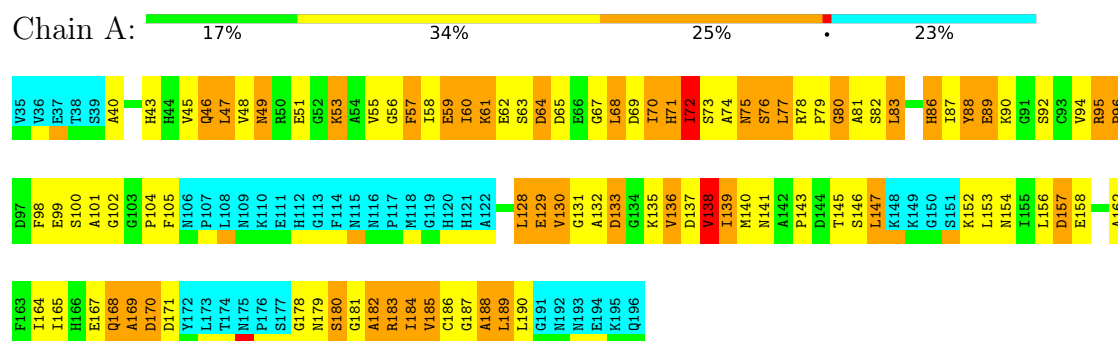
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



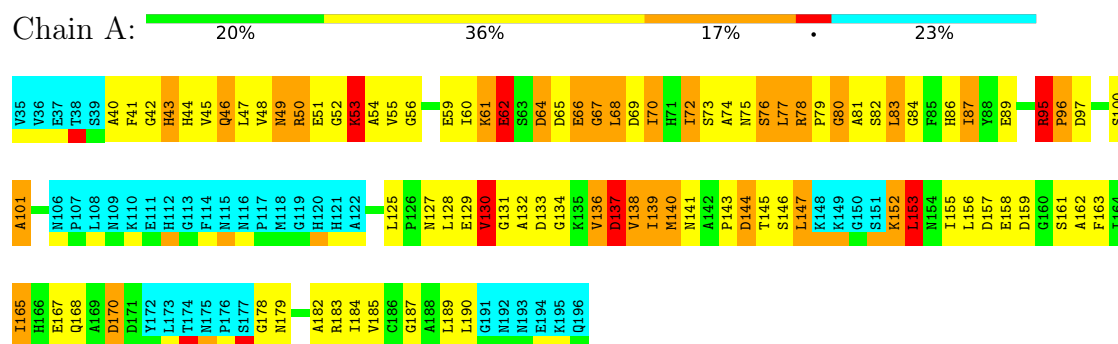
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



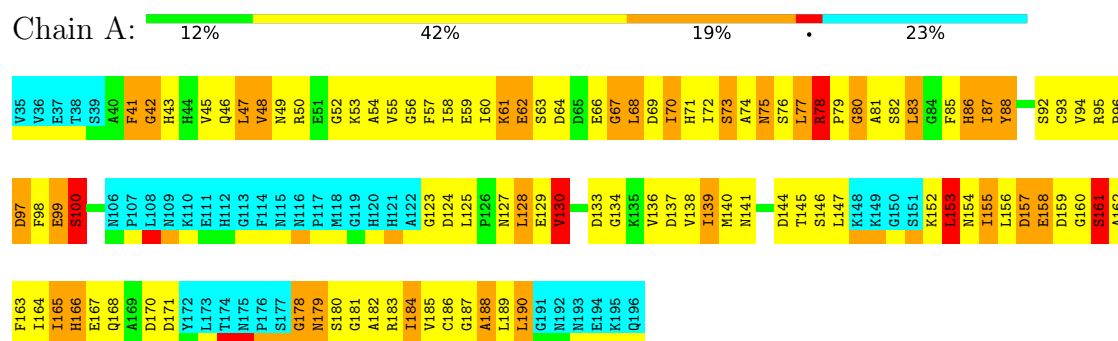
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



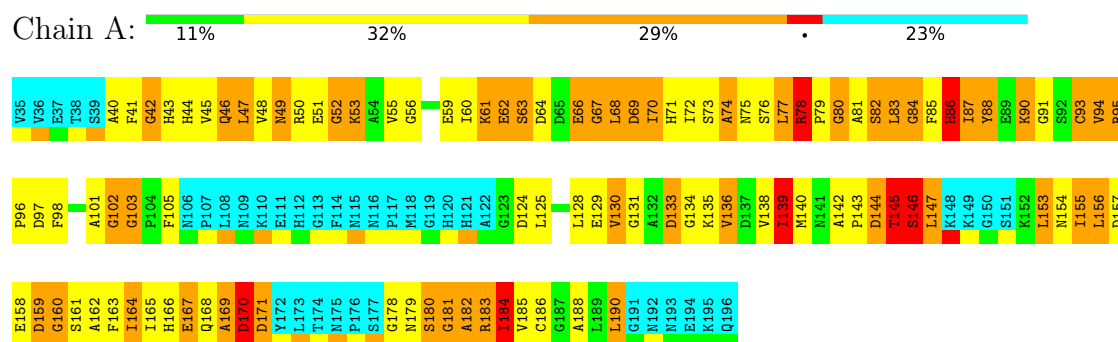
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



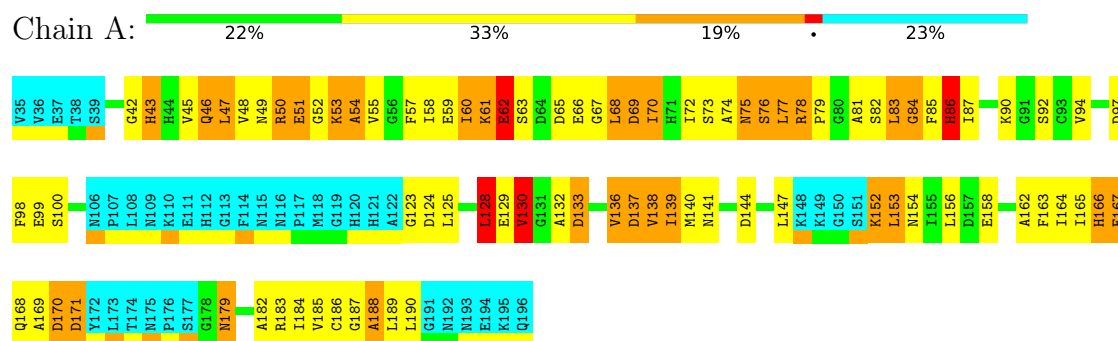
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



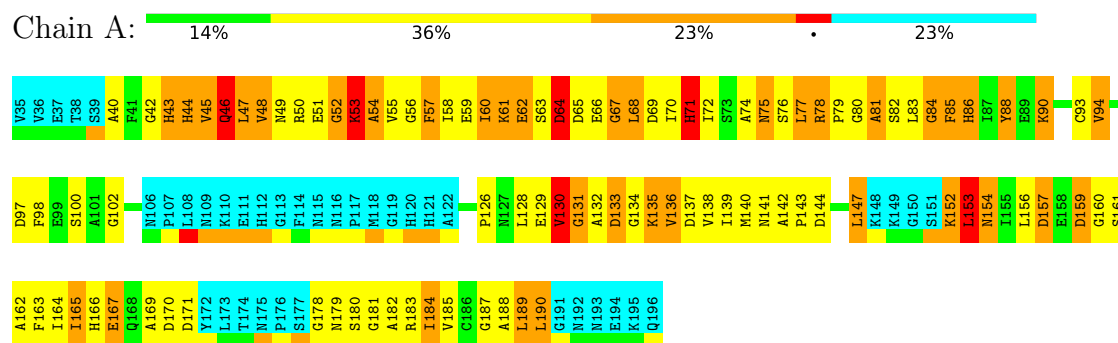
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



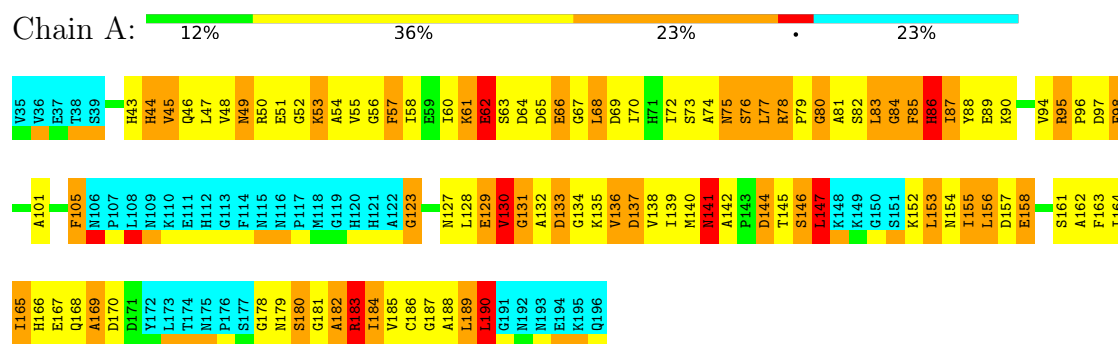
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



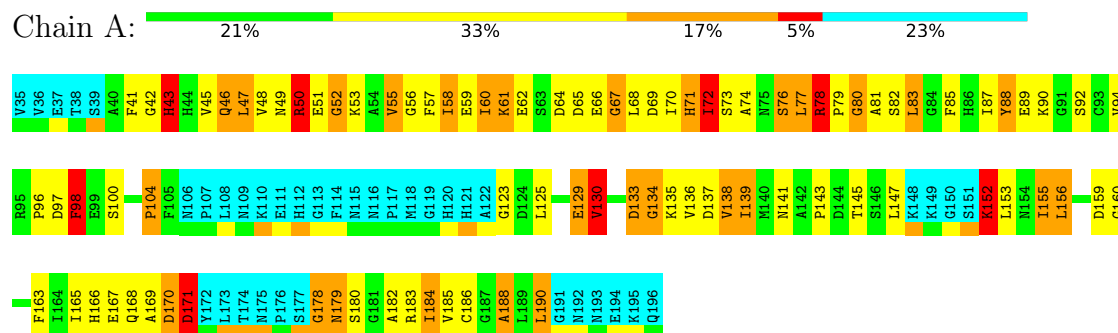
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



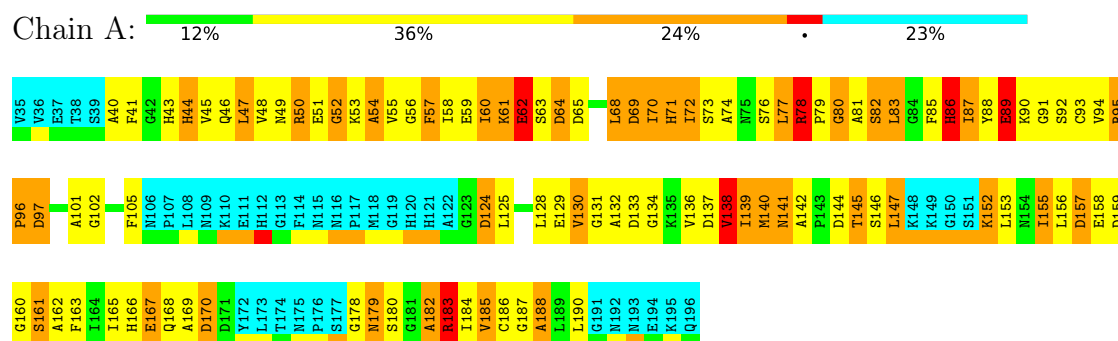
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



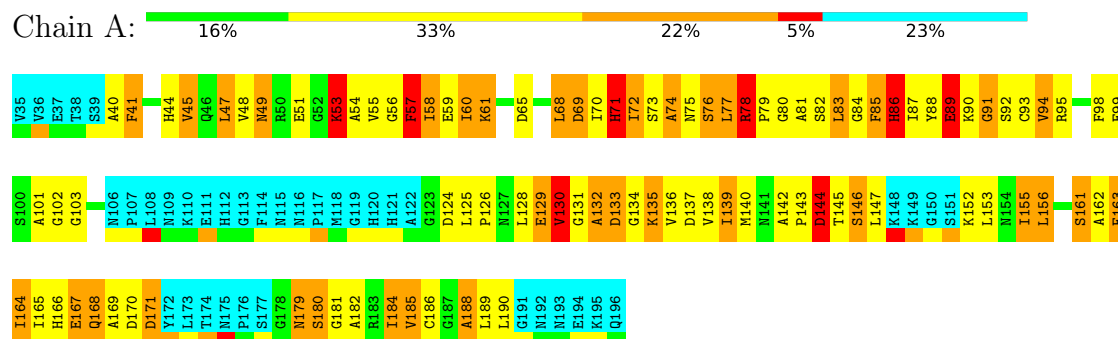
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



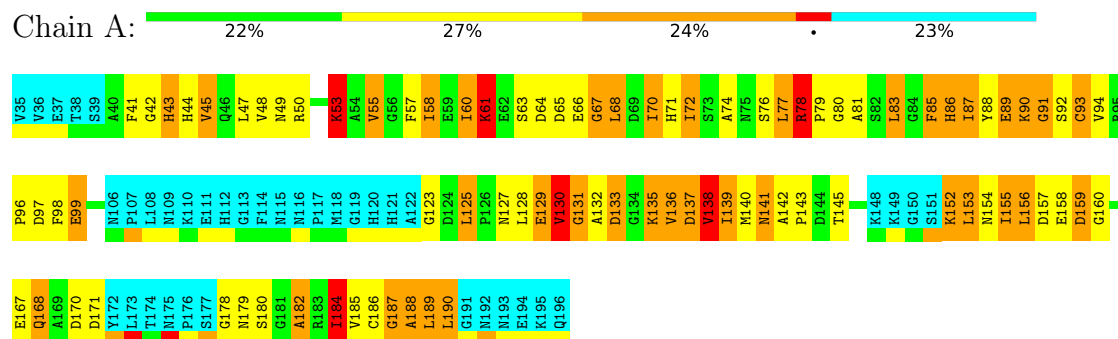
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



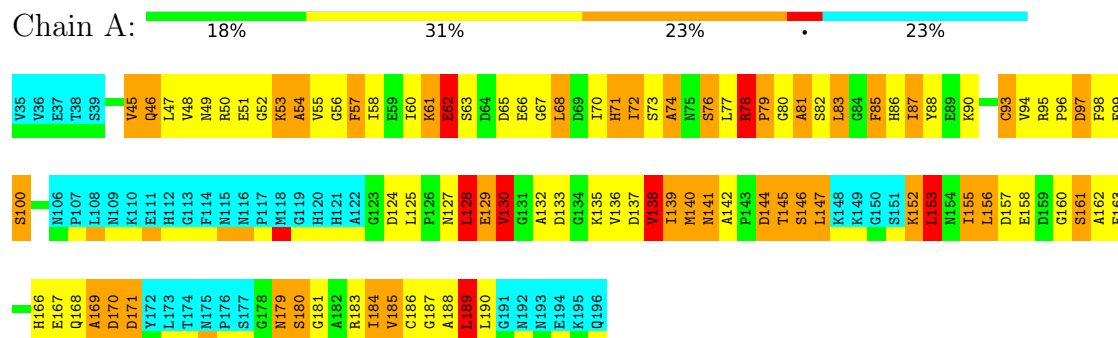
4.2.29 Score per residue for model 29 (medoid)

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Hypothetical superoxide dismutase-like protein yojM



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *the structure of SOD-like from bacillus subtilis was determined using triple resonance three- and bi-dimensional and homonuclear bi-dimensional NMR technique.*

Of the ? calculated structures, 30 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
DYANA	refinement	

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	0.80±0.01	0±0/936 (0.0± 0.0%)	1.01±0.02	0±0/1266 (0.0± 0.0%)
All	All	0.80	0/28080 (0.0%)	1.01	3/37980 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	105	PHE	N-CA-CB	-6.32	106.96	114.17	16	1
1	A	75	ASN	CB-CA-C	-5.15	107.96	114.40	17	1
1	A	179	ASN	CB-CA-C	-5.11	108.01	114.40	19	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	919	891	879	128±17
All	All	27570	26730	26370	3833

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD12	1.11	1.12	21	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HD11	1.09	1.21	23	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:165:ILE:HD11	1.06	1.86	15	1
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CE1	1.06	1.86	23	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD13	1.03	1.88	27	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HD11	1.01	1.32	26	3
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HD12	1.01	1.27	13	2
1:A:68:LEU:HD23	1:A:142:ALA:HB2	1.01	1.30	22	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG13	1.00	1.23	8	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:163:PHE:CE2	1.00	1.91	2	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:HD21	0.97	1.74	4	2
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:HD12	0.96	1.61	28	7
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG22	0.96	1.38	14	5
1:A:70:ILE:CD1	1:A:138:VAL:HG13	0.95	1.91	19	1
1:A:69:ASP:O	1:A:70:ILE:HD13	0.94	1.62	26	1
1:A:75:ASN:O	1:A:83:LEU:HD22	0.94	1.63	19	1
1:A:82:SER:O	1:A:83:LEU:HD13	0.94	1.62	15	11
1:A:47:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE2	0.93	1.98	22	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:ILE:HD13	0.93	1.63	2	6
1:A:147:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13	0.93	1.39	22	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:155:ILE:HD13	0.92	1.94	22	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:HD12	0.92	1.39	29	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CD1	0.92	1.93	13	3
1:A:80:GLY:O	1:A:83:LEU:HD21	0.91	1.65	10	1
1:A:188:ALA:C	1:A:189:LEU:HD22	0.91	1.89	11	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:CE1	0.91	2.01	22	1
1:A:55:VAL:O	1:A:74:ALA:HB1	0.91	1.65	22	5
1:A:167:GLU:CG	1:A:182:ALA:HB3	0.91	1.96	17	1
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:HG12	0.91	1.37	14	2
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD21	0.91	1.42	15	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD1	0.91	1.95	21	1
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:HD12	0.90	1.65	27	9
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:O	0.90	1.64	6	3
1:A:138:VAL:C	1:A:139:ILE:HD13	0.90	1.92	28	10
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG12	0.89	1.80	7	2
1:A:67:GLY:C	1:A:68:LEU:HD13	0.89	1.93	29	2
1:A:156:LEU:HD22	1:A:156:LEU:O	0.89	1.66	12	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HG23	0.88	1.43	12	6
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:HG12	0.88	1.69	8	2
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:HD11	0.87	1.43	25	4
1:A:67:GLY:O	1:A:68:LEU:HD23	0.87	1.68	16	1
1:A:71:HIS:CG	1:A:71:HIS:O	0.87	2.27	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG23	1:A:74:ALA:HB1	0.87	1.42	4	3
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:HD23	0.87	1.68	13	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.86	1.84	28	1
1:A:164:ILE:HD13	1:A:164:ILE:O	0.86	1.69	12	3
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:OG1	0.86	1.70	2	4
1:A:45:VAL:HG22	1:A:188:ALA:N	0.86	1.86	2	2
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HD13	0.86	1.45	11	2
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:HG21	0.86	1.44	17	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:CG	0.85	1.95	28	1
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:HD11	0.85	1.70	8	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG23	0.85	2.00	11	3
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:HG22	0.85	1.46	5	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HD13	0.85	1.70	19	2
1:A:190:LEU:HD12	1:A:190:LEU:O	0.85	1.70	5	6
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:CB	0.85	2.00	28	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD22	0.85	1.87	29	1
1:A:68:LEU:HD11	1:A:145:THR:O	0.85	1.70	29	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:HD22	0.84	1.72	5	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:N	0.84	1.88	12	10
1:A:68:LEU:CD2	1:A:142:ALA:HB2	0.84	2.02	22	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:165:ILE:HD12	0.84	2.08	22	1
1:A:83:LEU:C	1:A:165:ILE:HG23	0.83	1.98	24	3
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:O	0.83	1.72	12	13
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD13	0.83	2.07	27	2
1:A:82:SER:OG	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.73	23	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:CD2	0.83	2.02	18	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:53:LYS:O	0.82	1.74	2	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:C	0.82	2.00	15	2
1:A:161:SER:HB3	1:A:188:ALA:HB1	0.82	1.48	21	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:LEU:HD11	0.82	1.49	9	5
1:A:153:LEU:HB2	1:A:156:LEU:HD11	0.82	1.52	10	5
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:ASN:O	0.82	1.75	8	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:HG23	0.82	1.52	15	4
1:A:83:LEU:HD12	1:A:128:LEU:HD13	0.82	1.51	21	1
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:HG23	0.81	1.52	2	4
1:A:48:VAL:HG13	1:A:53:LYS:O	0.81	1.76	14	6
1:A:164:ILE:HG21	1:A:166:HIS:CE1	0.81	2.10	6	1
1:A:52:GLY:O	1:A:77:LEU:HD11	0.81	1.73	24	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HG21	0.81	1.51	19	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:58:ILE:HD11	0.81	2.06	26	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CD1	0.81	2.05	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:VAL:HG13	1:A:54:ALA:HB2	0.81	1.52	20	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:72:ILE:HG23	0.81	2.06	4	2
1:A:59:GLU:N	1:A:72:ILE:HG22	0.81	1.90	3	1
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:HD11	0.81	1.75	24	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:165:ILE:HG23	0.80	1.51	5	9
1:A:70:ILE:HD13	1:A:138:VAL:HG13	0.80	1.51	19	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG22	0.80	1.75	26	5
1:A:45:VAL:HG13	1:A:45:VAL:O	0.80	1.75	19	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:142:ALA:CB	0.80	2.06	22	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:187:GLY:HA2	0.80	1.52	7	3
1:A:60:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HD11	0.80	2.07	13	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG23	0.80	1.77	4	7
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD11	0.80	1.53	28	3
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD13	0.80	1.92	27	2
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:N	0.80	1.90	24	3
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:HD23	0.80	1.76	19	1
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:HD12	0.80	2.01	6	16
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:HG21	0.80	1.76	25	4
1:A:48:VAL:HG22	1:A:53:LYS:O	0.80	1.75	16	9
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:HG23	0.80	1.51	23	1
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:N	0.80	1.92	25	1
1:A:82:SER:C	1:A:83:LEU:HD13	0.80	2.01	2	11
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD12	0.80	1.77	17	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG13	0.79	1.54	21	8
1:A:81:ALA:HB1	1:A:168:GLN:HB3	0.79	1.51	23	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:55:VAL:HG13	0.79	1.77	24	2
1:A:72:ILE:HD11	1:A:85:PHE:CZ	0.79	2.11	10	1
1:A:153:LEU:HB3	1:A:156:LEU:HD11	0.79	1.55	16	1
1:A:153:LEU:CB	1:A:156:LEU:HD11	0.79	2.06	16	3
1:A:50:ARG:N	1:A:169:ALA:HB1	0.79	1.93	9	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:58:ILE:HD11	0.79	2.08	29	2
1:A:189:LEU:HD12	1:A:189:LEU:C	0.79	2.02	17	2
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:HG21	0.79	1.54	12	1
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:HG12	0.79	2.01	30	7
1:A:67:GLY:HA3	1:A:142:ALA:HB3	0.78	1.55	22	9
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:HG23	0.78	1.55	1	2
1:A:50:ARG:HB2	1:A:184:ILE:HG23	0.78	1.52	14	1
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:HG23	0.78	1.55	24	2
1:A:83:LEU:HD22	1:A:83:LEU:N	0.78	1.94	2	13
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:HG21	0.78	1.54	21	5
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:HD12	0.78	1.77	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:HD13	0.77	2.04	9	11
1:A:81:ALA:HB3	1:A:169:ALA:HB2	0.77	1.54	11	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:81:ALA:HB3	0.77	1.56	19	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:164:ILE:HD13	0.77	1.80	1	1
1:A:189:LEU:HD12	1:A:189:LEU:O	0.77	1.80	28	4
1:A:87:ILE:C	1:A:87:ILE:HD13	0.77	2.04	29	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:185:VAL:HG11	0.77	2.04	10	2
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:HD13	0.77	1.79	25	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:HD23	0.77	1.78	9	3
1:A:154:ASN:C	1:A:156:LEU:HD13	0.77	2.05	17	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:147:LEU:HD13	0.77	1.55	19	1
1:A:136:VAL:HG12	1:A:136:VAL:O	0.77	1.79	26	9
1:A:45:VAL:HG21	1:A:189:LEU:HD12	0.77	1.57	9	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:HB3	0.77	1.57	15	1
1:A:156:LEU:N	1:A:156:LEU:HD13	0.77	1.92	1	4
1:A:84:GLY:N	1:A:165:ILE:HG23	0.76	1.95	7	7
1:A:68:LEU:HD23	1:A:145:THR:OG1	0.76	1.80	7	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:HG22	0.76	1.80	7	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD11	0.76	1.58	29	7
1:A:165:ILE:HD12	1:A:165:ILE:N	0.76	1.95	21	7
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:HD3	0.76	1.95	8	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:161:SER:OG	0.76	1.80	28	1
1:A:76:SER:O	1:A:130:VAL:HG13	0.76	1.79	11	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG22	0.76	2.06	22	2
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG22	0.76	1.58	2	3
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:HG12	0.76	1.58	25	2
1:A:82:SER:C	1:A:83:LEU:HD22	0.75	2.06	15	7
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HD22	0.75	1.81	5	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD2	0.75	2.11	29	3
1:A:68:LEU:HD13	1:A:147:LEU:HD21	0.75	1.59	22	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD11	0.75	2.10	23	2
1:A:68:LEU:HD21	1:A:145:THR:OG1	0.75	1.81	16	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:N	0.75	1.96	2	3
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:O	0.75	1.82	9	4
1:A:68:LEU:O	1:A:147:LEU:HD11	0.75	1.82	4	3
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG23	0.75	2.07	30	5
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:HG23	0.74	1.58	20	2
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD13	0.74	1.57	14	1
1:A:92:SER:HB2	1:A:188:ALA:HB3	0.74	1.56	14	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CD1	0.74	2.12	21	6
1:A:78:ARG:O	1:A:130:VAL:HG11	0.74	1.82	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.74	1.83	21	2
1:A:161:SER:C	1:A:189:LEU:HD11	0.74	2.07	28	1
1:A:125:LEU:HD11	1:A:129:GLU:OE1	0.74	1.81	29	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:128:LEU:O	0.74	1.83	3	3
1:A:152:LYS:O	1:A:153:LEU:C	0.74	2.30	18	12
1:A:67:GLY:C	1:A:68:LEU:HD23	0.74	2.08	13	2
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:HB2	0.74	1.82	30	2
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:CB	0.74	2.13	13	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:HA	0.74	1.59	23	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:HD13	0.74	1.60	30	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HA	0.74	1.60	2	1
1:A:139:ILE:HD13	1:A:139:ILE:N	0.74	1.98	27	9
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:CD1	0.74	2.13	25	3
1:A:164:ILE:HD13	1:A:164:ILE:C	0.74	2.07	12	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CD2	0.74	2.13	28	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:128:LEU:HD22	0.74	2.08	28	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG11	0.73	2.13	17	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:143:PRO:HD2	0.73	1.57	9	5
1:A:47:LEU:HD21	1:A:56:GLY:C	0.73	2.08	19	6
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:CD1	0.73	2.13	23	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HD13	0.73	2.17	27	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:GLU:C	0.73	2.31	25	25
1:A:146:SER:HB2	1:A:153:LEU:HD23	0.73	1.58	30	3
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:C	0.73	2.31	23	1
1:A:72:ILE:HG22	1:A:85:PHE:CZ	0.73	2.18	26	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:70:ILE:CG1	0.73	2.13	20	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:128:LEU:HD13	0.73	2.08	4	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:C	0.73	2.31	27	7
1:A:62:GLU:HA	1:A:68:LEU:HD13	0.73	1.58	30	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG13	0.73	1.98	2	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:GLY:N	0.73	1.98	8	2
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:N	0.73	1.97	28	6
1:A:55:VAL:HG12	1:A:76:SER:HB2	0.73	1.60	24	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HG22	0.73	1.59	14	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:147:LEU:HD11	0.73	2.13	20	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:165:ILE:CD1	0.73	2.13	25	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CG	0.73	2.13	25	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:HA3	0.73	1.60	2	4
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG2	0.73	2.14	6	4
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD21	0.72	1.83	20	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:163:PHE:CE2	0.72	2.77	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:ND2	1:A:128:LEU:HD22	0.72	1.99	28	2
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:HB3	0.72	1.84	13	6
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:ALA:CB	0.72	2.15	5	2
1:A:47:LEU:HD13	1:A:74:ALA:HB1	0.72	1.60	25	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:71:HIS:HB2	0.72	1.60	28	1
1:A:159:ASP:O	1:A:160:GLY:C	0.71	2.33	1	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:HB2	0.71	1.84	29	3
1:A:68:LEU:HD12	1:A:70:ILE:CG2	0.71	2.15	30	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HD11	0.71	2.15	5	6
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG12	0.71	1.85	12	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:165:ILE:HD11	0.71	2.20	15	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:H	0.71	1.44	28	2
1:A:137:ASP:HB2	1:A:139:ILE:HD11	0.71	1.60	13	1
1:A:74:ALA:HB1	1:A:128:LEU:HD11	0.71	1.60	21	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:165:ILE:CD1	0.71	2.74	22	1
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CG	0.71	2.44	5	3
1:A:60:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD21	0.71	2.16	18	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CD1	0.71	2.15	25	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:CB	0.71	2.39	30	2
1:A:85:PHE:CG	1:A:163:PHE:CD2	0.71	2.79	26	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:55:VAL:HG22	0.70	1.63	22	3
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:O	0.70	1.85	15	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:187:GLY:HA3	0.70	1.62	29	3
1:A:146:SER:O	1:A:147:LEU:C	0.70	2.34	25	7
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD23	0.70	1.63	28	2
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD23	0.70	1.64	8	3
1:A:62:GLU:HA	1:A:147:LEU:HD13	0.70	1.62	13	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:CD2	0.70	2.16	15	1
1:A:155:ILE:HG23	1:A:156:LEU:HD13	0.70	1.63	11	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:O	0.70	1.86	29	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:CG	0.70	2.11	29	2
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:CG2	0.70	2.17	12	1
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG21	0.70	2.00	2	7
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HD12	0.70	1.87	15	6
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:HG11	0.70	1.86	27	4
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:NE2	0.70	2.00	24	1
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:HG13	0.70	2.10	21	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:158:GLU:O	0.70	1.87	3	1
1:A:68:LEU:HD21	1:A:140:MET:O	0.70	1.87	12	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:CB	0.70	2.17	15	2
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:N	0.69	2.02	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:ILE:CG2	1:A:166:HIS:CE1	0.69	2.74	6	2
1:A:156:LEU:HD12	1:A:156:LEU:O	0.69	1.87	27	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:HD11	0.69	2.02	29	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:70:ILE:HG13	0.69	1.62	20	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD11	0.69	2.17	26	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:H	0.69	1.47	7	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:CG1	0.69	2.16	6	2
1:A:43:HIS:CD2	1:A:153:LEU:CD2	0.69	2.75	24	1
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:HD11	0.69	1.64	29	1
1:A:166:HIS:HA	1:A:184:ILE:HD11	0.69	1.63	13	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:HG12	0.69	1.63	29	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG23	0.69	2.02	23	6
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:N	0.69	2.02	24	8
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:HG21	0.69	1.87	23	4
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:HD23	0.69	1.87	29	2
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG12	0.69	2.13	12	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:130:VAL:HG22	0.69	1.64	22	1
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:CD	0.69	2.56	8	19
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:HB3	0.69	1.85	14	5
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:HD23	0.69	1.87	30	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:179:ASN:HD21	0.69	1.85	3	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:CB	0.69	2.40	12	3
1:A:162:ALA:HB3	1:A:187:GLY:O	0.69	1.88	14	1
1:A:68:LEU:HA	1:A:147:LEU:HD11	0.69	1.64	27	2
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:CA	0.69	2.16	2	2
1:A:86:HIS:O	1:A:163:PHE:CE2	0.69	2.46	14	1
1:A:161:SER:HB3	1:A:190:LEU:HD12	0.69	1.63	14	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG12	0.68	1.63	12	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:189:LEU:O	0.68	1.88	19	1
1:A:85:PHE:C	1:A:85:PHE:CD1	0.68	2.71	28	4
1:A:48:VAL:HG12	1:A:50:ARG:H	0.68	1.49	14	1
1:A:92:SER:HA	1:A:188:ALA:HB1	0.68	1.65	18	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG21	0.68	1.64	6	3
1:A:155:ILE:HD13	1:A:155:ILE:O	0.68	1.89	15	3
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:C	0.68	2.14	18	3
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:HB3	0.68	1.65	11	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HD13	0.68	2.19	28	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD11	0.68	1.88	1	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:88:TYR:N	0.68	2.02	7	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD13	0.68	2.02	20	1
1:A:74:ALA:O	1:A:128:LEU:HD21	0.68	1.89	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:HIS:O	1:A:71:HIS:CD2	0.68	2.46	26	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:HB3	0.68	1.88	4	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:143:PRO:CD	0.68	2.19	9	2
1:A:130:VAL:O	1:A:131:GLY:C	0.68	2.36	15	3
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HB1	0.68	1.65	20	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:HG12	0.68	1.88	26	4
1:A:48:VAL:HA	1:A:54:ALA:HB2	0.68	1.64	23	3
1:A:75:ASN:C	1:A:83:LEU:HD22	0.68	2.14	19	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HB	0.68	1.65	22	3
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:HG23	0.68	1.89	9	1
1:A:139:ILE:HD12	1:A:139:ILE:N	0.68	2.03	23	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:140:MET:HA	0.68	1.66	25	1
1:A:74:ALA:HB1	1:A:77:LEU:HD11	0.67	1.64	12	1
1:A:164:ILE:HD11	1:A:166:HIS:CG	0.67	2.24	12	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HG	0.67	1.65	27	4
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HA	0.67	1.65	3	5
1:A:40:ALA:HB1	1:A:59:GLU:HG3	0.67	1.66	4	1
1:A:51:GLU:OE2	1:A:169:ALA:HB1	0.67	1.89	6	1
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:HG23	0.67	1.89	6	10
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG22	0.67	1.66	16	1
1:A:167:GLU:HG3	1:A:182:ALA:HB3	0.67	1.66	17	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:185:VAL:HG11	0.67	2.04	10	2
1:A:166:HIS:CD2	1:A:185:VAL:O	0.67	2.47	14	1
1:A:76:SER:O	1:A:78:ARG:N	0.67	2.28	7	5
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:HB2	0.67	1.64	6	3
1:A:45:VAL:HG11	1:A:187:GLY:CA	0.67	2.20	10	2
1:A:75:ASN:HB3	1:A:83:LEU:HD23	0.67	1.67	5	2
1:A:153:LEU:HD21	1:A:158:GLU:O	0.67	1.89	3	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:145:THR:OG1	0.67	1.90	28	3
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:HB3	0.67	1.88	23	4
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG21	0.67	1.67	23	2
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD22	0.67	1.66	18	1
1:A:70:ILE:HG23	1:A:145:THR:HG21	0.67	1.67	25	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HB2	0.66	1.67	3	2
1:A:72:ILE:HD12	1:A:85:PHE:CD2	0.66	2.25	14	1
1:A:68:LEU:C	1:A:139:ILE:HG22	0.66	2.15	6	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:CG2	0.66	2.20	30	1
1:A:70:ILE:HG22	1:A:70:ILE:O	0.66	1.90	4	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD12	0.66	2.17	29	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG21	0.66	1.91	1	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:HG12	0.66	1.67	25	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:CD2	1:A:163:PHE:CE2	0.66	2.83	18	3
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD21	0.66	2.21	17	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:O	0.66	1.90	25	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HG12	0.66	1.65	11	2
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HB1	0.66	1.67	16	3
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:HA	0.66	1.65	13	4
1:A:168:GLN:HG2	1:A:184:ILE:HD11	0.66	1.67	29	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:LEU:CD1	0.66	2.20	9	1
1:A:85:PHE:O	1:A:85:PHE:CG	0.66	2.49	14	3
1:A:49:ASN:HB3	1:A:185:VAL:HG11	0.66	1.68	9	2
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG21	0.66	2.16	9	1
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:N	0.66	2.06	26	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD11	0.66	1.67	26	1
1:A:67:GLY:O	1:A:68:LEU:HD13	0.66	1.91	29	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.66	2.43	25	5
1:A:85:PHE:CD2	1:A:163:PHE:CD2	0.66	2.84	6	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:165:ILE:CD1	0.66	2.75	15	1
1:A:47:LEU:CA	1:A:185:VAL:HG13	0.66	2.20	22	2
1:A:70:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD22	0.65	2.21	12	2
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:HG11	0.65	1.92	3	2
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CB	0.65	2.44	5	4
1:A:85:PHE:CB	1:A:163:PHE:CD2	0.65	2.80	26	1
1:A:79:PRO:O	1:A:80:GLY:C	0.65	2.38	17	20
1:A:68:LEU:HD23	1:A:68:LEU:N	0.65	2.06	28	3
1:A:136:VAL:HG22	1:A:136:VAL:O	0.65	1.89	3	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:125:LEU:C	0.65	2.16	5	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:147:LEU:CD1	0.65	2.20	19	1
1:A:47:LEU:C	1:A:185:VAL:HG23	0.65	2.16	23	2
1:A:61:LYS:CG	1:A:61:LYS:O	0.65	2.43	29	1
1:A:49:ASN:CA	1:A:185:VAL:HG22	0.65	2.21	2	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG2	0.65	2.21	27	3
1:A:152:LYS:O	1:A:155:ILE:HG23	0.65	1.92	2	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:N	0.65	2.58	6	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.65	2.84	26	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG23	0.65	1.92	8	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:71:HIS:HB3	0.65	1.67	26	1
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:CD1	0.65	2.69	17	8
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:HA	0.65	1.69	19	2
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:HB3	0.65	1.67	30	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:HB2	0.64	1.92	3	3
1:A:184:ILE:H	1:A:184:ILE:HD13	0.64	1.51	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:PHE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.64	2.65	13	2
1:A:48:VAL:HG12	1:A:54:ALA:HB2	0.64	1.68	9	1
1:A:49:ASN:O	1:A:77:LEU:HD21	0.64	1.92	9	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:H	0.64	1.50	2	2
1:A:77:LEU:HD13	1:A:81:ALA:CB	0.64	2.22	22	1
1:A:155:ILE:CG2	1:A:156:LEU:HD23	0.64	2.22	25	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:71:HIS:ND1	0.64	2.06	26	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HD13	0.64	1.67	28	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG12	0.64	1.92	30	6
1:A:45:VAL:HG12	1:A:188:ALA:O	0.64	1.93	16	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	0.64	1.69	16	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD1	0.64	2.75	27	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD22	0.64	1.70	12	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HB3	0.64	1.68	13	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:85:PHE:O	0.64	2.51	27	2
1:A:130:VAL:CG2	1:A:131:GLY:N	0.64	2.61	24	7
1:A:85:PHE:CZ	1:A:163:PHE:CD2	0.64	2.86	11	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:47:LEU:HD11	0.64	2.23	28	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG11	0.64	2.07	18	3
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:CG1	0.64	2.46	19	5
1:A:45:VAL:HG23	1:A:45:VAL:O	0.64	1.91	16	2
1:A:164:ILE:HG22	1:A:186:CYS:HB2	0.64	1.69	10	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:83:LEU:HD21	0.64	1.69	19	1
1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:LYS:HG3	0.64	1.69	24	2
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HG13	0.64	2.23	2	2
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:HB2	0.64	1.92	28	4
1:A:168:GLN:CG	1:A:184:ILE:HD11	0.64	2.23	29	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:HB2	0.64	1.92	13	4
1:A:83:LEU:O	1:A:84:GLY:C	0.63	2.41	23	6
1:A:125:LEU:HD13	1:A:167:GLU:HB2	0.63	1.68	3	1
1:A:76:SER:HA	1:A:130:VAL:HG13	0.63	1.69	14	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD11	0.63	2.23	9	1
1:A:48:VAL:CB	1:A:54:ALA:HB2	0.63	2.23	12	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:70:ILE:C	0.63	2.70	9	9
1:A:84:GLY:H	1:A:165:ILE:HG23	0.63	1.52	25	5
1:A:67:GLY:HA2	1:A:142:ALA:HB3	0.63	1.69	9	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:CB	0.63	2.45	29	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:74:ALA:HB3	0.63	1.71	9	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:187:GLY:HA3	0.63	1.70	25	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD2	0.63	2.60	29	3
1:A:59:GLU:H	1:A:72:ILE:HG22	0.63	1.51	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:HB	0.63	1.70	6	1
1:A:184:ILE:HD13	1:A:184:ILE:N	0.63	2.09	11	3
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:C	0.63	2.42	7	2
1:A:62:GLU:HB3	1:A:147:LEU:HD22	0.63	1.71	15	1
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:CG1	0.63	2.72	30	8
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:HD11	0.63	2.23	8	3
1:A:76:SER:HB3	1:A:130:VAL:HG23	0.63	1.70	8	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CD2	0.63	2.86	11	1
1:A:93:CYS:SG	1:A:188:ALA:HB2	0.63	2.34	18	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:SER:CB	0.62	2.47	30	11
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:C	0.62	2.41	8	14
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:N	0.62	2.09	27	2
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:O	0.62	2.52	21	1
1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CD1	0.62	2.66	1	2
1:A:162:ALA:O	1:A:163:PHE:CD1	0.62	2.52	10	6
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:N	0.62	2.10	23	3
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:C	0.62	2.41	11	7
1:A:68:LEU:HD22	1:A:146:SER:HB3	0.62	1.71	13	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:185:VAL:HG21	0.62	2.20	22	2
1:A:147:LEU:CG	1:A:155:ILE:HD13	0.62	2.23	25	1
1:A:69:ASP:C	1:A:147:LEU:HD11	0.62	2.19	14	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CD1	0.62	2.43	15	3
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CB	0.62	2.25	23	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CG	0.62	2.52	28	3
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:HB2	0.62	1.94	2	7
1:A:153:LEU:HD11	1:A:158:GLU:C	0.62	2.19	3	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD11	0.62	1.71	3	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:ALA:HB3	0.62	1.72	5	2
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:CB	0.62	2.47	13	5
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:CD2	0.62	2.47	12	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:CD2	0.62	2.78	17	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:HD12	0.62	1.94	24	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:72:ILE:HG21	0.62	1.95	28	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD1	0.62	2.61	12	6
1:A:68:LEU:H	1:A:68:LEU:HD23	0.62	1.54	26	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:156:LEU:N	0.62	2.10	17	2
1:A:47:LEU:HB3	1:A:55:VAL:HG22	0.62	1.72	29	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:78:ARG:NH1	0.62	2.09	15	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:72:ILE:CG2	0.62	2.25	20	1
1:A:161:SER:O	1:A:189:LEU:HD11	0.62	1.95	28	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CD2	0.61	2.52	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HG12	0.61	1.72	4	6
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:HD12	0.61	1.95	30	2
1:A:68:LEU:HD22	1:A:146:SER:CB	0.61	2.24	13	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:C	0.61	2.77	19	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:83:LEU:HG	0.61	1.72	1	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:76:SER:C	0.61	2.19	23	2
1:A:86:HIS:O	1:A:88:TYR:CE2	0.61	2.52	21	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG13	0.61	2.13	8	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:HG13	0.61	1.70	22	3
1:A:55:VAL:HG23	1:A:55:VAL:O	0.61	1.95	29	1
1:A:57:PHE:O	1:A:58:ILE:HD13	0.61	1.95	6	2
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:CB	0.61	2.49	14	4
1:A:77:LEU:HD22	1:A:83:LEU:HD21	0.61	1.73	17	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:OE2	0.61	2.53	28	1
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD22	0.61	1.56	19	7
1:A:62:GLU:CB	1:A:68:LEU:HD23	0.61	2.25	4	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:CG	0.61	2.26	10	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HD12	0.61	2.26	2	1
1:A:155:ILE:HG23	1:A:156:LEU:HD22	0.61	1.71	5	2
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:HB2	0.61	2.24	11	1
1:A:160:GLY:HA3	1:A:190:LEU:HD21	0.61	1.73	16	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CZ	0.61	2.31	22	1
1:A:56:GLY:C	1:A:57:PHE:CG	0.61	2.76	15	16
1:A:55:VAL:HG12	1:A:78:ARG:HB2	0.61	1.73	15	1
1:A:61:LYS:N	1:A:70:ILE:HG22	0.61	2.11	7	3
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:O	0.61	2.18	22	7
1:A:86:HIS:O	1:A:163:PHE:CD1	0.61	2.53	13	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD21	0.61	2.26	26	2
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:HG23	0.61	1.96	27	1
1:A:127:ASN:O	1:A:136:VAL:HG21	0.61	1.96	1	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:190:LEU:C	0.61	2.21	3	3
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:HG12	0.61	1.71	6	2
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CG	0.61	2.79	28	1
1:A:87:ILE:O	1:A:88:TYR:CD1	0.60	2.54	6	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.31	8	1
1:A:49:ASN:HB2	1:A:77:LEU:HD11	0.60	1.72	9	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:GLY:C	0.60	2.21	9	1
1:A:69:ASP:OD2	1:A:147:LEU:HD21	0.60	1.96	15	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HG	0.60	1.72	2	2
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:CB	0.60	2.49	18	11
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:HB1	0.60	2.22	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:CB	1:A:55:VAL:HG22	0.60	2.27	29	3
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:HB3	0.60	1.71	22	1
1:A:147:LEU:HG	1:A:155:ILE:HD13	0.60	1.74	25	1
1:A:145:THR:HA	1:A:155:ILE:HG21	0.60	1.73	28	3
1:A:68:LEU:CD1	1:A:68:LEU:N	0.60	2.64	10	3
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:C	0.60	2.43	22	3
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CD2	0.60	2.55	16	10
1:A:161:SER:CB	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.25	21	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:74:ALA:CB	0.60	2.25	25	1
1:A:189:LEU:HD23	1:A:189:LEU:O	0.60	1.96	1	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD11	0.60	2.26	3	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.74	5	1
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:CG2	0.60	2.25	5	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:188:ALA:HB1	0.60	2.31	8	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:C	0.60	2.43	11	1
1:A:89:GLU:CD	1:A:164:ILE:HD13	0.60	2.22	1	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:CG2	0.60	2.49	17	7
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:CD1	0.60	2.65	3	5
1:A:77:LEU:HD13	1:A:170:ASP:HB2	0.60	1.73	21	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:86:HIS:N	0.60	2.69	5	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:163:PHE:CZ	0.60	2.31	2	1
1:A:72:ILE:HG22	1:A:72:ILE:O	0.60	1.96	15	3
1:A:46:GLN:C	1:A:47:LEU:HD13	0.60	2.21	23	5
1:A:147:LEU:CD2	1:A:155:ILE:HD13	0.60	2.26	25	1
1:A:81:ALA:O	1:A:130:VAL:HG23	0.60	1.96	1	3
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HD12	0.60	1.72	2	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:188:ALA:CB	0.60	2.85	8	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:187:GLY:C	0.60	2.21	27	1
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:HG13	0.60	1.97	11	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:124:ASP:O	0.60	2.54	4	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:86:HIS:N	0.60	2.69	5	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:75:ASN:C	0.60	2.22	8	1
1:A:85:PHE:O	1:A:85:PHE:CD1	0.60	2.55	14	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:70:ILE:CG2	0.60	2.80	29	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:HA	0.60	1.74	1	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:N	0.60	2.12	2	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:CG2	0.60	2.78	11	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG13	0.60	2.21	17	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD1	0.60	2.65	27	4
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HB2	0.60	1.72	21	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:160:GLY:HA2	0.60	1.72	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG22	1:A:71:HIS:C	0.59	2.22	15	2
1:A:50:ARG:H	1:A:169:ALA:HB1	0.59	1.57	9	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:O	0.59	1.97	9	1
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:CD1	0.59	2.80	30	1
1:A:142:ALA:HB1	1:A:145:THR:CG2	0.59	2.25	15	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:HG22	0.59	2.24	4	2
1:A:139:ILE:HD13	1:A:139:ILE:H	0.59	1.57	29	2
1:A:68:LEU:CB	1:A:147:LEU:HD11	0.59	2.27	11	2
1:A:59:GLU:O	1:A:70:ILE:HG22	0.59	1.96	26	1
1:A:87:ILE:C	1:A:88:TYR:CG	0.59	2.80	6	1
1:A:156:LEU:H	1:A:156:LEU:HD13	0.59	1.55	14	3
1:A:49:ASN:CG	1:A:77:LEU:HD11	0.59	2.22	21	1
1:A:67:GLY:CA	1:A:142:ALA:HB3	0.59	2.27	30	4
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:HD13	0.59	1.97	28	2
1:A:94:VAL:HG13	1:A:96:PRO:HD2	0.59	1.74	2	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:CB	0.59	2.50	15	2
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:CB	0.59	2.26	20	1
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:CD1	0.59	2.47	27	5
1:A:161:SER:C	1:A:188:ALA:HB1	0.59	2.23	9	1
1:A:153:LEU:HB2	1:A:156:LEU:HD21	0.59	1.75	16	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG12	0.59	2.27	25	1
1:A:74:ALA:HB3	1:A:134:GLY:CA	0.59	2.27	27	1
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:HB2	0.59	1.98	25	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:CG1	0.59	2.66	29	6
1:A:45:VAL:O	1:A:46:GLN:C	0.59	2.46	19	4
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD22	0.59	2.12	13	1
1:A:74:ALA:CB	1:A:128:LEU:HD11	0.59	2.27	21	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HD13	0.59	1.98	28	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:128:LEU:O	0.59	1.98	1	1
1:A:51:GLU:O	1:A:52:GLY:C	0.59	2.45	4	12
1:A:128:LEU:HD11	1:A:136:VAL:HG11	0.59	1.73	8	1
1:A:50:ARG:HH21	1:A:53:LYS:HB2	0.59	1.56	9	1
1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CD	0.59	2.65	9	2
1:A:78:ARG:HB2	1:A:81:ALA:HB2	0.59	1.75	12	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:O	0.59	2.56	30	2
1:A:66:GLU:O	1:A:67:GLY:C	0.59	2.45	29	20
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:CB	0.59	2.28	6	2
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CG1	0.59	2.51	14	1
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CD1	0.59	2.81	28	1
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:CG1	0.58	2.50	26	8
1:A:94:VAL:HG22	1:A:94:VAL:O	0.58	1.97	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CG	0.58	2.27	27	3
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HD21	0.58	2.28	25	1
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:CG	0.58	2.45	7	11
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD21	0.58	1.75	11	3
1:A:88:TYR:CD1	1:A:89:GLU:N	0.58	2.72	14	1
1:A:165:ILE:HD12	1:A:165:ILE:H	0.58	1.57	14	3
1:A:43:HIS:CE1	1:A:44:HIS:CE1	0.58	2.91	8	1
1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:HD2	0.58	2.13	29	2
1:A:143:PRO:O	1:A:145:THR:HG23	0.58	1.98	11	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HG22	0.58	1.74	17	2
1:A:155:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD23	0.58	2.28	8	5
1:A:49:ASN:CB	1:A:185:VAL:HG11	0.58	2.28	9	1
1:A:178:GLY:O	1:A:184:ILE:HG22	0.58	1.98	9	1
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:CD1	0.58	2.74	15	1
1:A:190:LEU:N	1:A:190:LEU:HD13	0.58	2.13	16	1
1:A:47:LEU:O	1:A:55:VAL:HG22	0.58	1.97	18	2
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:CB	0.58	2.52	14	10
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:HG21	0.58	1.97	21	4
1:A:69:ASP:HA	1:A:138:VAL:HG22	0.58	1.75	27	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:HD11	0.58	1.98	29	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:58:ILE:CB	0.58	2.28	6	1
1:A:81:ALA:O	1:A:83:LEU:HD22	0.58	1.98	7	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:C	0.58	2.23	9	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:137:ASP:OD2	0.58	2.56	14	1
1:A:185:VAL:HG22	1:A:185:VAL:O	0.58	1.98	23	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:LYS:HG3	0.58	1.75	10	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:130:VAL:HG21	0.58	2.28	12	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HD11	0.58	1.74	13	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HD11	0.58	1.76	13	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:HD21	0.58	1.99	16	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	0.58	1.76	25	1
1:A:91:GLY:H	1:A:190:LEU:HD21	0.58	1.59	1	1
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:CG2	0.58	2.51	2	6
1:A:48:VAL:HG23	1:A:53:LYS:C	0.58	2.23	3	3
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:O	0.58	1.98	11	1
1:A:82:SER:H	1:A:169:ALA:HB2	0.58	1.58	18	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CG	0.58	2.28	25	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:49:ASN:N	0.58	1.97	5	3
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:CG2	0.58	2.75	30	6
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:HG22	0.58	1.76	16	3
1:A:167:GLU:CD	1:A:182:ALA:HB3	0.58	2.23	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HD11	1:A:74:ALA:HB2	0.58	1.75	21	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:76:SER:O	0.58	1.98	23	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HB	0.57	1.73	30	3
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HG13	0.57	1.75	10	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:CD1	0.57	2.29	17	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.57	2.26	21	2
1:A:48:VAL:HG22	1:A:54:ALA:HA	0.57	1.76	30	1
1:A:94:VAL:HG22	1:A:96:PRO:HD2	0.57	1.75	2	1
1:A:169:ALA:HB2	1:A:180:SER:HA	0.57	1.74	6	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.92	11	1
1:A:76:SER:OG	1:A:81:ALA:CB	0.57	2.52	29	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:77:LEU:HD11	0.57	1.74	17	2
1:A:160:GLY:O	1:A:161:SER:CB	0.57	2.52	13	8
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:HG2	0.57	1.99	29	4
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG22	0.57	1.75	12	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD12	0.57	1.76	23	1
1:A:90:LYS:CB	1:A:164:ILE:HD11	0.57	2.29	24	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:HB3	0.57	1.74	25	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:H	0.57	1.58	29	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.57	1.75	29	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CB	0.57	2.52	15	10
1:A:156:LEU:HD22	1:A:156:LEU:C	0.57	2.25	14	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:188:ALA:C	0.57	2.24	16	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.34	22	1
1:A:159:ASP:CB	1:A:189:LEU:HD21	0.57	2.30	24	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:139:ILE:CG1	0.57	2.30	25	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD23	0.57	1.76	6	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:157:ASP:N	0.57	2.15	10	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG13	0.57	2.00	17	2
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ARG:CB	0.57	2.53	2	17
1:A:49:ASN:HD21	1:A:77:LEU:HD21	0.57	1.59	6	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:HG11	0.57	1.76	10	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:N	0.57	2.37	23	2
1:A:74:ALA:HB3	1:A:134:GLY:HA3	0.57	1.77	27	1
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.57	2.72	27	1
1:A:183:ARG:O	1:A:184:ILE:HD12	0.57	2.00	27	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:70:ILE:HG23	0.57	1.76	30	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:HB3	0.57	2.00	28	6
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HD22	0.57	2.35	27	1
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:C	0.57	2.47	26	5
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:HG23	0.57	1.99	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:PRO:O	1:A:105:PHE:CB	0.57	2.53	16	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.57	2.68	28	4
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:H	0.56	1.60	1	5
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CG1	0.56	2.30	21	4
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG21	0.56	1.75	12	2
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CG	0.56	2.58	10	1
1:A:159:ASP:HA	1:A:190:LEU:HD13	0.56	1.76	1	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:CB	0.56	2.53	4	5
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:HA	0.56	1.77	4	2
1:A:163:PHE:H	1:A:188:ALA:HB2	0.56	1.60	9	1
1:A:40:ALA:HB1	1:A:43:HIS:NE2	0.56	2.15	15	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASP:OD2	0.56	2.00	28	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:72:ILE:CG2	0.56	2.53	28	1
1:A:78:ARG:CB	1:A:79:PRO:HD3	0.56	2.31	28	16
1:A:91:GLY:N	1:A:190:LEU:HD21	0.56	2.15	1	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:125:LEU:CB	0.56	2.88	4	1
1:A:92:SER:HB2	1:A:188:ALA:HB1	0.56	1.78	5	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:CD1	0.56	2.31	7	2
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:N	0.56	2.14	7	2
1:A:57:PHE:CD2	1:A:59:GLU:CG	0.56	2.88	8	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:CG1	0.56	2.16	8	1
1:A:50:ARG:O	1:A:50:ARG:HG3	0.56	2.00	9	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD22	0.56	1.99	17	1
1:A:152:LYS:O	1:A:152:LYS:CG	0.56	2.52	17	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:ND1	0.56	2.68	18	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CD1	0.56	2.83	29	1
1:A:61:LYS:H	1:A:70:ILE:HG22	0.56	1.60	16	6
1:A:55:VAL:CG2	1:A:75:ASN:O	0.56	2.54	16	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:C	0.56	2.23	29	1
1:A:139:ILE:N	1:A:139:ILE:CD1	0.56	2.67	27	7
1:A:83:LEU:HD12	1:A:165:ILE:HG21	0.56	1.78	4	2
1:A:98:PHE:O	1:A:98:PHE:CD2	0.56	2.57	4	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD13	0.56	2.16	5	3
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:HG13	0.56	2.00	7	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG22	0.56	2.00	21	1
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:CB	0.56	2.53	23	7
1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:LYS:HG2	0.56	1.76	25	1
1:A:144:ASP:O	1:A:145:THR:C	0.56	2.48	27	2
1:A:88:TYR:CZ	1:A:104:PRO:CD	0.56	2.89	26	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:77:LEU:HD21	0.56	1.52	4	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:O	0.56	2.00	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:HG12	0.56	1.76	6	3
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG12	0.56	2.01	9	3
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:C	0.56	2.48	11	1
1:A:55:VAL:C	1:A:75:ASN:O	0.56	2.49	18	3
1:A:83:LEU:HD12	1:A:128:LEU:CD1	0.56	2.29	21	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:H	0.56	1.60	24	1
1:A:183:ARG:C	1:A:184:ILE:HD12	0.56	2.26	27	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HG	0.56	1.76	25	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:CD1	0.56	2.84	27	2
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:CG1	0.56	2.31	29	2
1:A:139:ILE:HG21	1:A:142:ALA:HB2	0.56	1.75	9	1
1:A:47:LEU:O	1:A:54:ALA:HB1	0.56	2.01	11	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:147:LEU:HD21	0.56	2.25	15	2
1:A:144:ASP:HA	1:A:147:LEU:HD12	0.56	1.78	15	1
1:A:57:PHE:H	1:A:74:ALA:HB2	0.56	1.60	19	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:CD2	0.56	2.31	20	1
1:A:164:ILE:CG2	1:A:166:HIS:NE2	0.56	2.69	25	2
1:A:71:HIS:CD2	1:A:137:ASP:OD1	0.56	2.59	6	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:168:GLN:C	0.56	2.74	16	1
1:A:161:SER:OG	1:A:163:PHE:CZ	0.55	2.54	5	1
1:A:50:ARG:CD	1:A:50:ARG:C	0.55	2.78	9	1
1:A:92:SER:OG	1:A:94:VAL:HG13	0.55	2.01	19	1
1:A:184:ILE:CG2	1:A:185:VAL:HG12	0.55	2.24	14	1
1:A:155:ILE:O	1:A:160:GLY:CA	0.55	2.54	17	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:157:ASP:OD1	0.55	2.01	22	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD2	0.55	2.68	9	7
1:A:81:ALA:O	1:A:130:VAL:CG2	0.55	2.54	7	6
1:A:60:ILE:HB	1:A:147:LEU:HD13	0.55	1.78	6	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:156:LEU:H	0.55	1.60	17	3
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG22	0.55	2.16	10	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD21	0.55	1.79	11	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:146:SER:HB2	0.55	1.76	13	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:LEU:HD11	0.55	1.77	14	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:162:ALA:HA	0.55	1.79	24	1
1:A:72:ILE:HD11	1:A:138:VAL:O	0.55	2.01	28	1
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:O	0.55	2.24	21	5
1:A:49:ASN:HD21	1:A:55:VAL:HG13	0.55	1.62	16	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:163:PHE:CE2	0.55	2.89	20	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:HD13	0.55	1.78	29	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:72:ILE:CG1	0.55	2.30	6	3
1:A:162:ALA:C	1:A:163:PHE:CG	0.55	2.85	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:VAL:CG2	1:A:138:VAL:O	0.55	2.54	1	3
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD11	0.55	2.02	21	2
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:CD	0.55	2.55	29	5
1:A:60:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD13	0.55	2.32	3	1
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:HG12	0.55	2.01	4	3
1:A:45:VAL:CG1	1:A:47:LEU:CD2	0.55	2.85	10	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:153:LEU:O	0.55	2.54	10	1
1:A:69:ASP:C	1:A:70:ILE:HD13	0.55	2.26	26	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG11	0.55	1.78	5	1
1:A:48:VAL:CA	1:A:54:ALA:HB2	0.55	2.32	12	3
1:A:50:ARG:O	1:A:52:GLY:N	0.55	2.40	9	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:CD2	0.55	2.54	17	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:CD1	0.55	2.60	18	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:130:VAL:HG22	0.55	1.78	1	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.55	2.74	2	3
1:A:78:ARG:N	1:A:130:VAL:HG11	0.55	2.16	5	1
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:C	0.55	2.50	7	5
1:A:44:HIS:CD2	1:A:44:HIS:C	0.55	2.84	10	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	0.55	1.79	20	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG23	0.55	1.77	21	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.55	1.78	25	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:161:SER:OG	0.55	2.02	20	2
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:CB	0.55	2.85	22	3
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:C	0.55	2.50	27	7
1:A:55:VAL:HB	1:A:83:LEU:HD12	0.55	1.77	7	1
1:A:57:PHE:CE1	1:A:59:GLU:OE2	0.55	2.60	12	2
1:A:63:SER:OG	1:A:69:ASP:CB	0.55	2.55	17	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:CB	0.55	2.32	29	2
1:A:66:GLU:O	1:A:67:GLY:O	0.55	2.23	29	3
1:A:159:ASP:HB3	1:A:189:LEU:HD21	0.55	1.77	24	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:61:LYS:C	0.55	2.79	29	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:77:LEU:HD21	0.54	2.27	20	2
1:A:83:LEU:HD21	1:A:130:VAL:HG22	0.54	1.78	11	4
1:A:138:VAL:CG1	1:A:139:ILE:N	0.54	2.69	4	2
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD11	0.54	1.77	11	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:CA	0.54	2.32	18	2
1:A:85:PHE:CZ	1:A:125:LEU:HB3	0.54	2.38	4	1
1:A:74:ALA:HB2	1:A:85:PHE:CE2	0.54	2.37	17	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.54	2.32	22	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CG2	0.54	2.86	27	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:O	0.54	2.25	8	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:CD2	0.54	2.55	1	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:HIS:H	0.54	1.62	15	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:156:LEU:O	0.54	2.55	17	1
1:A:67:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HD23	0.54	1.78	20	1
1:A:94:VAL:HG23	1:A:94:VAL:O	0.54	2.02	26	1
1:A:156:LEU:HD11	1:A:161:SER:HA	0.54	1.79	2	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CD1	0.54	2.54	30	6
1:A:130:VAL:HG23	1:A:131:GLY:H	0.54	1.60	24	2
1:A:48:VAL:HG12	1:A:54:ALA:CB	0.54	2.32	9	1
1:A:164:ILE:C	1:A:164:ILE:CD1	0.54	2.80	12	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:187:GLY:O	0.54	2.55	14	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD21	0.54	2.28	15	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:CB	0.54	2.56	14	10
1:A:55:VAL:O	1:A:55:VAL:HG23	0.54	2.01	7	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:145:THR:OG1	0.54	2.56	21	2
1:A:69:ASP:O	1:A:139:ILE:CD1	0.54	2.56	19	2
1:A:70:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG23	0.54	2.33	21	1
1:A:57:PHE:C	1:A:58:ILE:HD12	0.54	2.28	28	3
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:O	0.54	2.02	27	1
1:A:156:LEU:N	1:A:156:LEU:CD1	0.54	2.64	1	3
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:CB	0.54	2.55	3	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:136:VAL:HG21	0.54	2.33	6	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:HG13	0.54	1.77	8	1
1:A:67:GLY:N	1:A:142:ALA:O	0.54	2.40	13	2
1:A:85:PHE:HB2	1:A:163:PHE:CD2	0.54	2.38	26	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:C	0.54	2.50	20	3
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:CB	0.54	2.91	7	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:153:LEU:HD21	0.54	2.37	24	1
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:CG2	0.54	2.56	1	3
1:A:161:SER:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.54	2.38	27	3
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:HD11	0.54	1.80	3	1
1:A:98:PHE:CD1	1:A:183:ARG:NH2	0.54	2.76	13	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:CG	0.54	2.61	28	2
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CG1	0.54	2.56	30	2
1:A:61:LYS:H	1:A:70:ILE:HG21	0.54	1.62	20	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:138:VAL:N	0.54	2.71	26	1
1:A:189:LEU:HD23	1:A:189:LEU:C	0.54	2.28	1	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG11	0.54	1.78	8	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD11	0.54	1.79	5	1
1:A:90:LYS:O	1:A:164:ILE:CG1	0.54	2.56	17	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:HD12	0.54	2.02	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:C	0.54	2.85	22	1
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:CD1	0.54	2.54	25	1
1:A:63:SER:H	1:A:68:LEU:HD22	0.54	1.63	30	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:145:THR:O	0.53	2.56	17	2
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:ALA:CB	0.53	2.91	8	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:138:VAL:CG2	0.53	2.32	13	1
1:A:78:ARG:O	1:A:131:GLY:CA	0.53	2.56	16	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:165:ILE:HD13	0.53	1.79	28	1
1:A:46:GLN:O	1:A:46:GLN:CG	0.53	2.56	2	3
1:A:184:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG12	0.53	2.33	9	2
1:A:182:ALA:O	1:A:183:ARG:C	0.53	2.51	15	5
1:A:130:VAL:CG1	1:A:131:GLY:N	0.53	2.69	27	3
1:A:88:TYR:OH	1:A:163:PHE:N	0.53	2.42	21	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:71:HIS:C	0.53	2.27	26	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:58:ILE:O	0.53	2.62	1	1
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:CD1	0.53	2.33	14	2
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:HG21	0.53	2.18	7	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:H	0.53	1.64	16	1
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:CG2	0.53	2.28	17	1
1:A:189:LEU:CD1	1:A:190:LEU:HD12	0.53	2.33	17	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:188:ALA:N	0.53	2.18	19	1
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:HG23	0.53	2.04	27	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:167:GLU:CB	0.53	2.33	3	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:O	0.53	2.27	9	9
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:HG13	0.53	2.03	25	2
1:A:163:PHE:O	1:A:163:PHE:CG	0.53	2.61	15	1
1:A:94:VAL:CG1	1:A:188:ALA:HB1	0.53	2.34	19	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:71:HIS:O	0.53	2.57	26	1
1:A:76:SER:OG	1:A:134:GLY:CA	0.53	2.57	2	1
1:A:50:ARG:C	1:A:52:GLY:N	0.53	2.67	9	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:156:LEU:C	0.53	2.82	11	3
1:A:48:VAL:HB	1:A:54:ALA:HB2	0.53	1.81	12	1
1:A:75:ASN:C	1:A:75:ASN:OD1	0.53	2.50	19	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CB	0.53	2.34	24	1
1:A:85:PHE:HD1	1:A:128:LEU:HD11	0.53	1.64	28	1
1:A:130:VAL:HG12	1:A:131:GLY:H	0.53	1.62	11	5
1:A:184:ILE:CG2	1:A:185:VAL:N	0.53	2.71	24	5
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:C	0.53	2.50	17	3
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.53	2.79	29	5
1:A:162:ALA:HB3	1:A:187:GLY:C	0.53	2.27	14	2
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:CD1	0.53	2.56	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:CB	0.53	2.34	17	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:59:GLU:HA	0.53	2.39	20	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:CD1	0.53	2.57	23	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:55:VAL:CG2	0.53	2.86	24	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:71:HIS:O	0.53	2.04	26	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:81:ALA:HB3	0.53	1.79	28	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:HD21	0.53	1.78	2	4
1:A:81:ALA:HA	1:A:129:GLU:C	0.53	2.29	30	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:O	0.53	2.04	3	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:PRO:O	0.53	2.04	13	2
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:HD23	0.53	2.04	13	1
1:A:92:SER:OG	1:A:164:ILE:HG22	0.53	2.04	15	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:147:LEU:HD22	0.53	1.81	16	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG23	0.53	1.80	12	1
1:A:56:GLY:HA2	1:A:77:LEU:HD23	0.53	1.81	15	1
1:A:85:PHE:C	1:A:86:HIS:CG	0.53	2.85	15	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD23	0.53	1.81	24	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:N	0.53	2.56	25	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CG2	0.53	2.57	1	2
1:A:50:ARG:NE	1:A:51:GLU:CB	0.53	2.72	9	1
1:A:44:HIS:O	1:A:45:VAL:HG23	0.53	2.04	25	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:HG	0.53	1.81	25	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:C	0.52	2.87	26	5
1:A:161:SER:O	1:A:188:ALA:HB1	0.52	2.03	9	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.82	9	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:H	0.52	1.64	24	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:O	0.52	2.57	23	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:74:ALA:CB	0.52	2.87	25	1
1:A:158:GLU:O	1:A:189:LEU:HD22	0.52	2.04	25	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CG2	0.52	2.58	5	8
1:A:166:HIS:HB2	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.80	15	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:185:VAL:CG1	0.52	2.34	25	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:HB2	0.52	1.80	15	3
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:CD2	0.52	2.57	24	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:70:ILE:O	0.52	2.05	26	1
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:CG2	0.52	2.57	3	1
1:A:76:SER:HG	1:A:83:LEU:HD11	0.52	1.60	8	1
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:CG2	0.52	2.57	9	1
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:CG	0.52	2.57	25	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:56:GLY:O	0.52	2.04	22	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:GLU:CG	0.52	2.58	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ALA:HB3	1:A:130:VAL:O	0.52	2.04	21	1
1:A:48:VAL:H	1:A:185:VAL:HG23	0.52	1.62	30	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CB	0.52	2.58	13	3
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:N	0.52	2.43	24	2
1:A:139:ILE:H	1:A:139:ILE:HD12	0.52	1.62	9	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:83:LEU:CD1	0.52	2.35	15	1
1:A:146:SER:CB	1:A:153:LEU:HD23	0.52	2.34	20	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:CA	0.52	2.34	26	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:184:ILE:HD11	0.52	2.03	30	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:153:LEU:N	0.52	2.20	29	2
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:CD1	0.52	2.58	15	4
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:CG2	0.52	2.83	9	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CG2	0.52	2.86	18	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:162:ALA:HA	0.52	2.40	21	1
1:A:147:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	0.52	1.81	22	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:45:VAL:O	0.52	2.04	2	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:CB	0.52	2.57	15	3
1:A:47:LEU:O	1:A:54:ALA:CB	0.52	2.58	11	1
1:A:68:LEU:HD11	1:A:142:ALA:CB	0.52	2.35	12	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:55:VAL:HG21	0.52	1.63	17	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:N	0.52	2.20	17	2
1:A:85:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD11	0.52	2.40	30	2
1:A:57:PHE:C	1:A:58:ILE:HD13	0.52	2.30	9	3
1:A:76:SER:CB	1:A:81:ALA:HB3	0.52	2.32	19	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.52	2.86	22	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:SER:C	0.52	2.53	22	2
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD2	0.52	2.65	25	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:162:ALA:O	0.52	2.58	27	1
1:A:130:VAL:HG22	1:A:133:ASP:OD1	0.52	2.05	29	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:O	0.52	2.57	1	1
1:A:95:ARG:N	1:A:96:PRO:CD	0.52	2.73	27	6
1:A:161:SER:CB	1:A:163:PHE:CE2	0.52	2.93	9	3
1:A:69:ASP:CG	1:A:139:ILE:HG23	0.52	2.29	7	1
1:A:57:PHE:CD2	1:A:59:GLU:HG2	0.52	2.39	8	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:CG	0.52	2.63	15	6
1:A:141:ASN:O	1:A:141:ASN:ND2	0.52	2.43	20	1
1:A:85:PHE:CB	1:A:128:LEU:HD12	0.52	2.35	22	1
1:A:181:GLY:O	1:A:182:ALA:CB	0.52	2.58	3	3
1:A:44:HIS:CB	1:A:58:ILE:O	0.52	2.58	10	2
1:A:75:ASN:O	1:A:134:GLY:O	0.52	2.27	5	1
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:HD11	0.52	2.05	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:CG1	1:A:47:LEU:HD21	0.52	2.34	10	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:145:THR:OG1	0.52	2.05	10	1
1:A:68:LEU:H	1:A:68:LEU:HD22	0.52	1.65	12	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HG21	0.52	1.81	17	1
1:A:154:ASN:C	1:A:156:LEU:CD1	0.52	2.81	17	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:189:LEU:C	0.52	2.30	24	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG13	0.51	2.21	16	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:138:VAL:O	0.51	2.57	7	1
1:A:132:ALA:C	1:A:133:ASP:CG	0.51	2.78	14	4
1:A:50:ARG:CG	1:A:77:LEU:HD22	0.51	2.35	9	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:HD21	0.51	1.82	11	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:68:LEU:N	0.51	2.20	12	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD22	0.51	2.36	16	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD11	0.51	1.82	17	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:185:VAL:CG1	0.51	2.88	22	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:47:LEU:N	0.51	2.70	23	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD2	0.51	2.35	25	1
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	0.51	1.60	25	1
1:A:76:SER:CB	1:A:133:ASP:HA	0.51	2.34	26	1
1:A:79:PRO:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.58	3	2
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:CB	0.51	2.57	6	1
1:A:57:PHE:CE1	1:A:73:SER:O	0.51	2.63	7	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:CD1	0.51	2.58	27	7
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:GLY:H	0.51	1.61	8	2
1:A:52:GLY:CA	1:A:77:LEU:HD11	0.51	2.36	16	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:168:GLN:CB	0.51	2.31	23	1
1:A:171:ASP:CG	1:A:179:ASN:C	0.51	2.79	26	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:CB	0.51	2.58	3	1
1:A:76:SER:CB	1:A:134:GLY:N	0.51	2.73	7	2
1:A:164:ILE:HD11	1:A:166:HIS:CD2	0.51	2.39	12	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:57:PHE:CA	0.51	2.34	23	2
1:A:169:ALA:C	1:A:170:ASP:CG	0.51	2.78	30	1
1:A:55:VAL:O	1:A:74:ALA:C	0.51	2.54	10	3
1:A:76:SER:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.58	11	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:165:ILE:HG21	0.51	2.34	12	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:170:ASP:HB2	0.51	1.82	13	1
1:A:86:HIS:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.40	13	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:56:GLY:C	0.51	2.83	15	2
1:A:137:ASP:O	1:A:138:VAL:CG1	0.51	2.59	25	2
1:A:56:GLY:CA	1:A:74:ALA:HB1	0.51	2.34	16	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.51	2.74	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CD2	0.51	2.64	1	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.51	1.83	2	1
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:CD2	0.51	2.57	3	1
1:A:161:SER:HB3	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.41	10	2
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:HB3	0.51	2.06	5	3
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:C	0.51	2.53	20	7
1:A:50:ARG:CZ	1:A:51:GLU:CB	0.51	2.88	9	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:CB	0.51	2.58	15	5
1:A:166:HIS:HB2	1:A:182:ALA:HB1	0.51	1.82	16	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:47:LEU:HD21	0.51	1.82	25	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CB	0.51	2.94	27	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:145:THR:HB	0.51	1.83	3	1
1:A:78:ARG:C	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.84	4	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:CB	0.51	2.58	5	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:CA	0.51	2.58	16	3
1:A:79:PRO:HG2	1:A:83:LEU:HD11	0.51	1.83	24	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:HB3	0.51	2.06	22	8
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CG1	0.51	2.36	17	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CG1	0.51	2.35	19	1
1:A:51:GLU:O	1:A:53:LYS:N	0.51	2.44	24	6
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG22	0.51	2.30	9	5
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:MET:N	0.51	2.21	16	3
1:A:68:LEU:CD1	1:A:147:LEU:HD11	0.51	2.36	9	1
1:A:166:HIS:CG	1:A:184:ILE:HB	0.51	2.40	15	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:N	0.51	2.44	25	2
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:CG1	0.51	2.59	4	2
1:A:68:LEU:CD2	1:A:139:ILE:HD13	0.51	2.36	9	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:55:VAL:HG11	0.51	2.30	10	1
1:A:76:SER:CB	1:A:83:LEU:HD23	0.51	2.36	15	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:CD2	0.51	2.59	18	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:CD1	0.51	2.59	18	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:CG1	0.51	2.59	30	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:128:LEU:CD2	0.51	2.74	4	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:139:ILE:O	0.51	2.59	7	1
1:A:92:SER:O	1:A:93:CYS:CB	0.51	2.59	8	2
1:A:49:ASN:HD22	1:A:185:VAL:HG21	0.51	1.66	15	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.51	1.83	21	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:CD1	0.51	2.55	28	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:161:SER:OG	0.50	2.06	1	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HG12	0.50	1.83	17	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:CB	0.50	2.59	30	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:CD2	0.50	2.36	25	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:58:ILE:CD1	0.50	2.36	29	1
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:N	0.50	2.45	7	2
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:CG	0.50	2.53	18	8
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:ND2	0.50	2.45	25	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:CB	0.50	2.89	27	2
1:A:83:LEU:HB2	1:A:128:LEU:HD13	0.50	1.81	11	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:166:HIS:ND1	0.50	2.21	14	1
1:A:142:ALA:CB	1:A:145:THR:HG23	0.50	2.33	15	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:HG23	0.50	2.06	22	1
1:A:168:GLN:O	1:A:169:ALA:C	0.50	2.54	22	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:HIS:CB	0.50	2.59	24	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:130:VAL:O	0.50	2.59	30	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:CB	0.50	2.58	29	9
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASN:CG	0.50	2.78	17	2
1:A:75:ASN:O	1:A:77:LEU:N	0.50	2.43	3	1
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:CG	0.50	2.60	17	3
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:HB3	0.50	2.42	7	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:HD12	0.50	2.33	9	1
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:CG1	0.50	2.59	11	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:HG13	0.50	2.06	13	1
1:A:169:ALA:HB3	1:A:180:SER:HA	0.50	1.83	13	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:O	0.50	2.60	16	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:170:ASP:HB3	0.50	1.83	20	1
1:A:146:SER:HA	1:A:153:LEU:CB	0.50	2.37	27	1
1:A:182:ALA:O	1:A:184:ILE:HG23	0.50	2.07	3	1
1:A:76:SER:OG	1:A:81:ALA:HB3	0.50	2.07	6	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:VAL:HG21	0.50	1.82	6	1
1:A:50:ARG:O	1:A:51:GLU:C	0.50	2.54	9	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:134:GLY:CA	0.50	2.88	9	1
1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:VAL:HG21	0.50	1.84	10	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:187:GLY:HA3	0.50	1.84	19	2
1:A:165:ILE:O	1:A:184:ILE:CG1	0.50	2.60	13	1
1:A:87:ILE:HA	1:A:162:ALA:HB2	0.50	1.83	21	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:LYS:HB3	0.50	2.06	29	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:128:LEU:O	0.50	2.58	3	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:CB	0.50	2.60	10	4
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:CB	0.50	2.59	17	1
1:A:163:PHE:C	1:A:164:ILE:HD12	0.50	2.32	22	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:CG	0.50	2.60	29	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD12	0.50	2.37	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:C	1:A:87:ILE:CD1	0.50	2.78	29	1
1:A:49:ASN:O	1:A:51:GLU:N	0.50	2.43	14	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:CG1	0.50	2.35	7	1
1:A:133:ASP:C	1:A:135:LYS:N	0.50	2.68	26	4
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:C	0.50	2.55	8	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:C	0.50	2.55	20	2
1:A:58:ILE:C	1:A:59:GLU:CG	0.50	2.85	28	3
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD21	0.50	1.83	11	1
1:A:75:ASN:HD22	1:A:75:ASN:N	0.50	2.04	21	1
1:A:67:GLY:O	1:A:145:THR:HG23	0.50	2.06	22	1
1:A:171:ASP:CB	1:A:179:ASN:O	0.50	2.60	26	1
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:CG2	0.50	2.37	1	2
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:CD1	0.50	2.59	1	2
1:A:79:PRO:O	1:A:81:ALA:N	0.50	2.44	9	10
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CA	0.50	2.60	5	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:147:LEU:CD2	0.50	2.37	12	1
1:A:72:ILE:HD12	1:A:72:ILE:C	0.50	2.31	12	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:74:ALA:O	0.50	2.07	13	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:CD1	0.50	2.59	18	1
1:A:63:SER:C	1:A:68:LEU:HD22	0.50	2.32	18	1
1:A:166:HIS:C	1:A:167:GLU:CG	0.50	2.84	28	2
1:A:155:ILE:CD1	1:A:156:LEU:CD2	0.50	2.90	3	2
1:A:166:HIS:ND1	1:A:182:ALA:C	0.50	2.69	4	1
1:A:51:GLU:CD	1:A:52:GLY:N	0.50	2.69	10	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:75:ASN:C	0.50	2.32	11	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:136:VAL:CG2	0.50	2.59	15	2
1:A:145:THR:N	1:A:147:LEU:HD22	0.50	2.21	20	1
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HG22	0.50	2.37	22	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:184:ILE:HG21	0.50	2.06	24	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG11	0.50	2.07	1	2
1:A:78:ARG:N	1:A:79:PRO:HD2	0.50	2.22	2	6
1:A:189:LEU:O	1:A:190:LEU:C	0.50	2.55	17	8
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:H	0.50	1.66	12	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CD1	0.50	2.59	13	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:CD2	0.50	2.59	16	2
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HB	0.50	2.06	14	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:128:LEU:HD13	0.50	2.31	21	1
1:A:49:ASN:N	1:A:185:VAL:CG2	0.50	2.74	22	1
1:A:155:ILE:HG22	1:A:156:LEU:N	0.50	2.21	22	2
1:A:167:GLU:CG	1:A:184:ILE:CG1	0.50	2.89	23	1
1:A:129:GLU:N	1:A:133:ASP:OD1	0.50	2.45	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:CB	0.49	2.60	30	7
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HB2	0.49	1.83	9	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:133:ASP:O	0.49	2.60	10	1
1:A:147:LEU:O	1:A:147:LEU:CD1	0.49	2.57	21	2
1:A:96:PRO:O	1:A:97:ASP:CB	0.49	2.59	29	4
1:A:163:PHE:CE1	1:A:165:ILE:HD12	0.49	2.42	22	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:57:PHE:N	0.49	2.22	26	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:104:PRO:CD	0.49	2.95	26	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:ILE:HG23	0.49	2.06	22	3
1:A:83:LEU:HA	1:A:165:ILE:CG2	0.49	2.37	2	6
1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:VAL:HB	0.49	1.84	3	1
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:HD21	0.49	1.84	6	1
1:A:76:SER:HG	1:A:130:VAL:HG22	0.49	1.67	7	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:188:ALA:HA	0.49	2.42	8	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD11	0.49	1.84	11	1
1:A:45:VAL:O	1:A:57:PHE:CD2	0.49	2.65	13	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ALA:C	0.49	2.54	21	2
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG21	0.49	1.84	21	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:SER:CB	0.49	2.60	21	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:154:ASN:H	0.49	1.66	22	2
1:A:47:LEU:CD1	1:A:56:GLY:C	0.49	2.86	26	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:N	0.49	2.45	26	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:157:ASP:O	0.49	2.08	16	2
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:ASP:N	0.49	2.75	13	2
1:A:92:SER:C	1:A:93:CYS:SG	0.49	2.95	27	2
1:A:166:HIS:CD2	1:A:166:HIS:C	0.49	2.90	12	1
1:A:68:LEU:C	1:A:69:ASP:OD1	0.49	2.55	15	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:56:GLY:C	0.49	2.32	18	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:CB	0.49	2.91	30	1
1:A:68:LEU:CB	1:A:147:LEU:HD21	0.49	2.38	1	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:87:ILE:O	0.49	2.60	1	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD1	0.49	2.66	2	2
1:A:88:TYR:CG	1:A:89:GLU:N	0.49	2.80	3	1
1:A:133:ASP:O	1:A:135:LYS:N	0.49	2.45	26	3
1:A:161:SER:O	1:A:190:LEU:CD1	0.49	2.60	11	2
1:A:136:VAL:C	1:A:137:ASP:CG	0.49	2.80	20	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:134:GLY:O	0.49	2.45	25	1
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:C	0.49	2.53	30	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:H	0.49	1.68	12	2
1:A:141:ASN:O	1:A:141:ASN:CG	0.49	2.53	8	2
1:A:60:ILE:HG13	1:A:147:LEU:HD21	0.49	1.81	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:PHE:CE1	1:A:60:ILE:O	0.49	2.66	22	1
1:A:144:ASP:C	1:A:145:THR:OG1	0.49	2.56	22	2
1:A:76:SER:O	1:A:79:PRO:HD3	0.49	2.06	24	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:133:ASP:C	0.49	2.32	26	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:187:GLY:CA	0.49	2.91	3	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:HB2	0.49	2.08	14	4
1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD12	0.49	1.82	7	1
1:A:44:HIS:O	1:A:44:HIS:CG	0.49	2.66	8	2
1:A:62:GLU:CD	1:A:69:ASP:O	0.49	2.55	9	2
1:A:161:SER:HB2	1:A:163:PHE:CZ	0.49	2.42	30	2
1:A:94:VAL:HG12	1:A:95:ARG:H	0.49	1.68	12	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:HIS:C	0.49	2.55	14	3
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CD1	0.49	2.38	23	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HB3	0.49	2.42	27	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD23	0.49	1.83	27	1
1:A:184:ILE:HG12	1:A:185:VAL:N	0.49	2.23	1	4
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:O	0.49	2.30	19	5
1:A:88:TYR:CD1	1:A:161:SER:HB3	0.49	2.42	7	1
1:A:76:SER:O	1:A:133:ASP:C	0.49	2.55	8	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:HD13	0.49	2.08	8	1
1:A:49:ASN:O	1:A:77:LEU:CD2	0.49	2.60	9	1
1:A:137:ASP:CG	1:A:137:ASP:O	0.49	2.55	12	2
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CB	0.49	2.60	14	2
1:A:70:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CD1	0.49	2.38	18	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:131:GLY:C	0.49	2.33	24	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:61:LYS:CE	0.49	2.96	29	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:CB	0.49	2.38	16	2
1:A:84:GLY:HA3	1:A:125:LEU:HD23	0.49	1.84	3	1
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:CG2	0.49	2.61	12	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:147:LEU:HD23	0.49	2.07	16	1
1:A:155:ILE:CG2	1:A:156:LEU:N	0.49	2.76	22	2
1:A:157:ASP:OD1	1:A:190:LEU:CB	0.49	2.61	22	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:77:LEU:CD1	0.49	2.37	27	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:157:ASP:O	0.49	2.61	9	1
1:A:65:ASP:CG	1:A:66:GLU:N	0.49	2.70	24	2
1:A:70:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:98:PHE:O	1:A:98:PHE:CG	0.49	2.64	4	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:C	0.49	2.56	6	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:N	0.49	2.46	7	4
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HD13	0.49	1.85	17	1
1:A:167:GLU:O	1:A:180:SER:CB	0.49	2.61	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:GLU:C	1:A:53:LYS:N	0.48	2.71	27	5
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:CG	0.48	2.61	30	5
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD21	0.48	1.85	20	2
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:CB	0.48	2.61	29	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD23	0.48	2.07	14	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:161:SER:OG	0.48	2.59	28	2
1:A:59:GLU:C	1:A:71:HIS:CB	0.48	2.86	26	1
1:A:83:LEU:HB2	1:A:128:LEU:CB	0.48	2.38	30	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:164:ILE:CD1	0.48	2.59	1	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:C	0.48	2.54	12	3
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:LEU:HD21	0.48	1.83	10	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:C	0.48	2.85	23	1
1:A:164:ILE:HG13	1:A:166:HIS:CD2	0.48	2.43	1	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD13	0.48	1.83	3	1
1:A:77:LEU:C	1:A:133:ASP:OD2	0.48	2.56	8	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:72:ILE:CG2	0.48	2.38	12	3
1:A:94:VAL:HG13	1:A:188:ALA:HB1	0.48	1.85	19	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD23	0.48	1.85	25	1
1:A:74:ALA:N	1:A:134:GLY:O	0.48	2.47	27	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:185:VAL:HG11	0.48	1.84	29	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:42:GLY:N	0.48	2.82	5	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:HG21	0.48	1.85	11	1
1:A:178:GLY:O	1:A:184:ILE:HG21	0.48	2.08	11	1
1:A:130:VAL:O	1:A:131:GLY:O	0.48	2.32	16	3
1:A:75:ASN:C	1:A:76:SER:OG	0.48	2.56	17	1
1:A:189:LEU:O	1:A:190:LEU:O	0.48	2.31	18	5
1:A:82:SER:HA	1:A:129:GLU:CB	0.48	2.38	25	2
1:A:167:GLU:HB3	1:A:181:GLY:O	0.48	2.07	22	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:CD1	0.48	2.66	27	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:47:LEU:HD11	0.48	1.85	28	1
1:A:92:SER:CB	1:A:164:ILE:HG21	0.48	2.39	28	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:HB2	0.48	1.85	2	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:N	0.48	2.23	12	1
1:A:74:ALA:HB1	1:A:77:LEU:CD1	0.48	2.37	12	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD21	0.48	1.86	25	1
1:A:70:ILE:O	1:A:71:HIS:CD2	0.48	2.66	5	1
1:A:182:ALA:O	1:A:183:ARG:CB	0.48	2.61	16	2
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HG22	0.48	1.85	10	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:HD23	0.48	1.86	15	1
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:HG12	0.48	2.08	17	1
1:A:62:GLU:O	1:A:64:ASP:N	0.48	2.46	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:HD12	1:A:157:ASP:H	0.48	1.68	18	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:ALA:C	0.48	2.57	21	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:CB	0.48	2.38	25	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD12	0.48	2.43	25	1
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:LEU:HD11	0.48	1.85	10	1
1:A:93:CYS:HB2	1:A:188:ALA:HB2	0.48	1.86	15	2
1:A:163:PHE:O	1:A:163:PHE:CD1	0.48	2.66	15	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:CG1	0.48	2.62	26	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:83:LEU:CD1	0.48	2.38	30	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:83:LEU:O	0.48	2.57	13	1
1:A:138:VAL:C	1:A:139:ILE:CD1	0.48	2.83	13	3
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:C	0.48	2.92	17	2
1:A:72:ILE:HG21	1:A:163:PHE:CZ	0.48	2.39	23	1
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:HA	0.48	2.09	25	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:70:ILE:HG22	0.48	2.38	29	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:130:VAL:CG2	0.48	2.39	3	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:CA	0.48	2.92	11	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:43:HIS:NE2	0.48	2.76	15	1
1:A:54:ALA:C	1:A:55:VAL:HG13	0.48	2.34	17	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:CG	0.48	2.57	21	1
1:A:49:ASN:CA	1:A:185:VAL:CG2	0.48	2.91	22	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:CB	0.48	2.91	25	1
1:A:161:SER:OG	1:A:190:LEU:N	0.48	2.47	25	1
1:A:170:ASP:C	1:A:171:ASP:CG	0.48	2.82	26	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:136:VAL:HG11	0.48	2.24	4	1
1:A:82:SER:HB2	1:A:168:GLN:CB	0.48	2.39	27	6
1:A:87:ILE:HG21	1:A:155:ILE:O	0.48	2.09	5	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:55:VAL:CG2	0.48	2.39	24	3
1:A:152:LYS:O	1:A:154:ASN:N	0.48	2.47	9	2
1:A:156:LEU:CD2	1:A:157:ASP:N	0.48	2.77	10	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:140:MET:O	0.48	2.61	12	1
1:A:54:ALA:O	1:A:77:LEU:HD23	0.48	2.09	13	1
1:A:190:LEU:HD13	1:A:190:LEU:H	0.48	1.69	16	1
1:A:76:SER:C	1:A:78:ARG:N	0.48	2.71	19	2
1:A:89:GLU:OE2	1:A:162:ALA:HB3	0.48	2.08	20	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:164:ILE:N	0.48	2.47	21	1
1:A:178:GLY:O	1:A:181:GLY:N	0.48	2.47	24	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:163:PHE:HB2	0.48	1.85	26	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:NE2	0.48	2.47	26	1
1:A:47:LEU:CG	1:A:58:ILE:HD11	0.48	2.39	29	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB3	0.47	2.43	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD11	0.47	2.37	12	1
1:A:156:LEU:C	1:A:156:LEU:CD2	0.47	2.87	14	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:69:ASP:HA	0.47	2.39	15	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:135:LYS:CG	0.47	2.62	18	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:147:LEU:HD13	0.47	2.32	19	1
1:A:183:ARG:C	1:A:184:ILE:HG23	0.47	2.34	22	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:55:VAL:CG1	0.47	2.59	24	1
1:A:49:ASN:N	1:A:49:ASN:ND2	0.47	2.62	5	2
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:CD	0.47	2.87	1	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:158:GLU:O	0.47	2.61	3	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:134:GLY:C	0.47	2.57	5	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:HG23	0.47	2.34	8	1
1:A:63:SER:O	1:A:65:ASP:N	0.47	2.47	13	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:CG2	0.47	2.39	16	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:55:VAL:HG21	0.47	2.23	18	2
1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:VAL:HG11	0.47	1.83	17	1
1:A:139:ILE:HG13	1:A:142:ALA:HB2	0.47	1.85	30	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:126:PRO:HD3	0.47	2.44	4	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:161:SER:O	0.47	2.61	4	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:57:PHE:HA	0.47	1.86	7	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:CD1	0.47	2.61	29	2
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:HG13	0.47	2.34	15	2
1:A:54:ALA:C	1:A:55:VAL:CG1	0.47	2.87	17	1
1:A:63:SER:O	1:A:64:ASP:CB	0.47	2.62	24	3
1:A:78:ARG:HH21	1:A:171:ASP:HB3	0.47	1.69	19	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:188:ALA:H	0.47	1.69	19	2
1:A:87:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD22	0.47	2.38	21	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HD12	0.47	2.07	21	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:157:ASP:CB	0.47	2.39	25	1
1:A:88:TYR:CZ	1:A:104:PRO:HD2	0.47	2.44	26	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:69:ASP:CB	0.47	2.85	28	1
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASP:N	0.47	2.47	16	9
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HG21	0.47	2.35	7	1
1:A:54:ALA:O	1:A:76:SER:O	0.47	2.32	17	2
1:A:68:LEU:HD13	1:A:139:ILE:CD1	0.47	2.35	23	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:HB3	0.47	2.40	12	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:162:ALA:HB1	0.47	2.39	17	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:CD2	0.47	2.68	18	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:HA	0.47	2.09	19	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:49:ASN:O	1:A:50:ARG:O	0.47	2.33	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:CD2	1:A:130:VAL:HG22	0.47	2.39	11	1
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HG13	0.47	1.86	11	1
1:A:179:ASN:HB3	1:A:184:ILE:HG21	0.47	1.84	12	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:155:ILE:O	0.47	2.10	22	1
1:A:183:ARG:O	1:A:184:ILE:CG2	0.47	2.63	22	1
1:A:130:VAL:HG13	1:A:133:ASP:OD2	0.47	2.09	24	1
1:A:77:LEU:CG	1:A:83:LEU:HD11	0.47	2.39	28	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD13	0.47	1.86	29	1
1:A:144:ASP:OD2	1:A:144:ASP:C	0.47	2.56	30	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:CB	0.47	2.63	8	3
1:A:92:SER:N	1:A:188:ALA:O	0.47	2.48	1	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:C	0.47	2.57	2	1
1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD13	0.47	1.70	5	1
1:A:87:ILE:O	1:A:88:TYR:CG	0.47	2.68	6	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:88:TYR:N	0.47	2.77	14	2
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:GLY:CA	0.47	2.38	9	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:87:ILE:O	0.47	2.67	17	1
1:A:88:TYR:O	1:A:157:ASP:CB	0.47	2.63	21	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:CG	0.47	2.58	21	1
1:A:156:LEU:H	1:A:156:LEU:HD22	0.47	1.70	1	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:179:ASN:N	0.47	2.48	26	2
1:A:153:LEU:CD2	1:A:158:GLU:O	0.47	2.62	3	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:N	0.47	2.24	3	2
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:C	0.47	2.58	9	6
1:A:61:LYS:O	1:A:70:ILE:HG22	0.47	2.10	11	1
1:A:76:SER:CB	1:A:79:PRO:O	0.47	2.62	11	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:56:GLY:O	0.47	2.62	15	1
1:A:92:SER:O	1:A:93:CYS:C	0.47	2.58	18	2
1:A:68:LEU:CA	1:A:147:LEU:HD21	0.47	2.40	19	1
1:A:165:ILE:N	1:A:185:VAL:O	0.47	2.47	21	2
1:A:76:SER:OG	1:A:76:SER:O	0.47	2.32	20	1
1:A:146:SER:C	1:A:147:LEU:HD13	0.47	2.34	20	1
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:CG	0.47	2.62	22	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:126:PRO:HB3	0.47	2.44	24	1
1:A:63:SER:OG	1:A:66:GLU:CB	0.47	2.62	25	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD11	0.47	1.87	25	1
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:CD	0.47	2.63	25	1
1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:CD2	0.47	2.93	2	1
1:A:166:HIS:O	1:A:167:GLU:HB2	0.47	2.10	9	5
1:A:184:ILE:HD13	1:A:184:ILE:H	0.47	1.69	6	1
1:A:74:ALA:O	1:A:133:ASP:O	0.47	2.32	22	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ASP:O	1:A:160:GLY:N	0.47	2.46	24	5
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:HD12	0.47	2.34	20	2
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HG	0.47	1.87	25	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:142:ALA:CB	0.47	2.39	27	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:CG1	0.47	2.39	27	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:145:THR:HB	0.47	1.86	17	2
1:A:184:ILE:N	1:A:184:ILE:CD1	0.47	2.78	11	1
1:A:58:ILE:HG12	1:A:163:PHE:CZ	0.47	2.44	24	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:128:LEU:CD1	0.47	2.98	25	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:158:GLU:N	0.47	2.72	4	2
1:A:165:ILE:H	1:A:185:VAL:HG13	0.47	1.70	4	1
1:A:156:LEU:CB	1:A:161:SER:OG	0.47	2.63	6	1
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:HD22	0.47	2.07	11	1
1:A:184:ILE:CD1	1:A:185:VAL:HG22	0.47	2.40	12	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:C	0.47	2.87	13	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:HD11	0.47	1.86	16	1
1:A:87:ILE:HG23	1:A:159:ASP:O	0.47	2.10	17	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:N	0.47	2.25	21	1
1:A:88:TYR:C	1:A:157:ASP:OD2	0.47	2.58	21	1
1:A:47:LEU:C	1:A:185:VAL:CG1	0.46	2.88	2	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:ND2	0.46	2.48	3	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:CG2	0.46	2.59	7	1
1:A:147:LEU:C	1:A:152:LYS:O	0.46	2.58	7	1
1:A:51:GLU:OE1	1:A:179:ASN:CG	0.46	2.58	15	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:74:ALA:HA	0.46	1.87	17	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:155:ILE:C	0.46	2.35	8	3
1:A:170:ASP:OD1	1:A:171:ASP:N	0.46	2.48	9	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:HB3	0.46	2.09	12	1
1:A:164:ILE:O	1:A:164:ILE:CD1	0.46	2.61	15	3
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:C	0.46	2.93	21	1
1:A:44:HIS:O	1:A:44:HIS:CD2	0.46	2.68	28	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:71:HIS:HB2	0.46	2.35	28	1
1:A:72:ILE:HG12	1:A:72:ILE:O	0.46	2.09	28	1
1:A:48:VAL:HG12	1:A:185:VAL:HG21	0.46	1.85	29	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:O	0.46	2.33	2	2
1:A:167:GLU:C	1:A:168:GLN:CG	0.46	2.88	4	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:138:VAL:HG22	0.46	2.33	5	1
1:A:167:GLU:C	1:A:168:GLN:OE1	0.46	2.58	8	1
1:A:88:TYR:O	1:A:90:LYS:N	0.46	2.48	9	3
1:A:140:MET:O	1:A:142:ALA:N	0.46	2.49	12	1
1:A:40:ALA:HB1	1:A:43:HIS:CD2	0.46	2.46	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:TYR:CZ	1:A:162:ALA:HA	0.46	2.46	21	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:HB3	0.46	2.10	21	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:C	0.46	2.58	24	1
1:A:78:ARG:CB	1:A:79:PRO:CD	0.46	2.93	28	6
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:C	0.46	2.58	3	3
1:A:72:ILE:CD1	1:A:72:ILE:O	0.46	2.64	4	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:126:PRO:HD2	0.46	2.45	4	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:187:GLY:HA2	0.46	1.86	5	1
1:A:85:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD13	0.46	2.46	6	2
1:A:72:ILE:O	1:A:136:VAL:O	0.46	2.34	10	5
1:A:179:ASN:C	1:A:179:ASN:OD1	0.46	2.58	11	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:83:LEU:O	0.46	2.49	13	1
1:A:178:GLY:C	1:A:180:SER:N	0.46	2.69	24	1
1:A:72:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CD1	0.46	2.94	28	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:ND2	0.46	2.48	29	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:CG	0.46	2.59	21	2
1:A:84:GLY:N	1:A:168:GLN:NE2	0.46	2.63	8	1
1:A:50:ARG:CZ	1:A:51:GLU:HB3	0.46	2.40	9	1
1:A:42:GLY:HA2	1:A:44:HIS:CE1	0.46	2.45	14	1
1:A:76:SER:OG	1:A:134:GLY:N	0.46	2.48	22	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:165:ILE:HD13	0.46	1.85	25	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD1	0.46	2.96	27	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:CG1	0.46	2.41	26	2
1:A:50:ARG:O	1:A:179:ASN:CG	0.46	2.58	8	1
1:A:77:LEU:N	1:A:79:PRO:HD3	0.46	2.25	8	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:170:ASP:C	0.46	2.58	9	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HG	0.46	2.41	25	2
1:A:164:ILE:HG13	1:A:166:HIS:CE1	0.46	2.46	14	1
1:A:43:HIS:C	1:A:44:HIS:CG	0.46	2.93	16	1
1:A:169:ALA:C	1:A:170:ASP:OD2	0.46	2.59	22	1
1:A:76:SER:O	1:A:77:LEU:O	0.46	2.33	27	1
1:A:146:SER:HB3	1:A:155:ILE:HD11	0.46	1.87	27	1
1:A:55:VAL:O	1:A:55:VAL:CG2	0.46	2.63	29	1
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:N	0.46	2.49	30	1
1:A:166:HIS:ND1	1:A:166:HIS:C	0.46	2.74	1	1
1:A:137:ASP:C	1:A:138:VAL:O	0.46	2.59	27	5
1:A:171:ASP:CG	1:A:171:ASP:O	0.46	2.59	3	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:HB3	0.46	2.41	22	4
1:A:74:ALA:C	1:A:75:ASN:ND2	0.46	2.73	5	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:72:ILE:HG22	0.46	1.87	6	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:55:VAL:HG12	0.46	2.34	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:LEU:CA	1:A:152:LYS:O	0.46	2.63	7	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:75:ASN:C	0.46	2.89	11	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:77:LEU:HA	0.46	1.88	9	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:CG1	0.46	2.94	9	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:187:GLY:C	0.46	2.88	11	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:CG	0.46	2.59	13	2
1:A:56:GLY:CA	1:A:77:LEU:HD23	0.46	2.41	15	1
1:A:132:ALA:C	1:A:133:ASP:OD1	0.46	2.58	18	1
1:A:50:ARG:CG	1:A:51:GLU:N	0.46	2.75	20	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HB	0.46	2.41	20	1
1:A:55:VAL:O	1:A:77:LEU:HD23	0.46	2.11	30	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:54:ALA:N	0.46	2.63	2	1
1:A:75:ASN:HB2	1:A:134:GLY:CA	0.46	2.40	9	3
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:N	0.46	2.79	11	1
1:A:128:LEU:HD13	1:A:136:VAL:HB	0.46	1.86	12	1
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HD13	0.46	2.10	12	1
1:A:144:ASP:O	1:A:146:SER:N	0.46	2.48	15	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HG	0.46	2.41	17	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:89:GLU:HG3	0.46	2.46	3	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:GLY:C	0.46	2.59	7	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:74:ALA:CB	0.46	2.38	9	2
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:N	0.46	2.26	11	2
1:A:51:GLU:OE1	1:A:179:ASN:CB	0.46	2.63	15	1
1:A:80:GLY:O	1:A:170:ASP:CG	0.46	2.59	22	1
1:A:83:LEU:CB	1:A:128:LEU:HB3	0.46	2.40	30	1
1:A:73:SER:O	1:A:75:ASN:CG	0.46	2.59	10	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:CG	0.46	2.64	26	2
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASN:OD1	0.46	2.59	12	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:HD12	0.46	1.87	15	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:CD2	0.46	2.64	15	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:LEU:HD22	0.46	2.11	15	1
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HD11	0.46	2.11	18	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:130:VAL:O	0.46	2.64	21	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:HB2	0.46	2.41	25	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD13	0.45	1.85	1	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:83:LEU:HD12	0.45	2.26	1	1
1:A:57:PHE:CG	1:A:59:GLU:OE2	0.45	2.69	9	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASP:N	0.45	2.74	16	3
1:A:69:ASP:CA	1:A:139:ILE:HG22	0.45	2.42	22	2
1:A:87:ILE:O	1:A:162:ALA:C	0.45	2.60	14	1
1:A:55:VAL:O	1:A:77:LEU:N	0.45	2.46	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LYS:O	1:A:62:GLU:O	0.45	2.34	22	5
1:A:56:GLY:N	1:A:75:ASN:O	0.45	2.49	17	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG23	0.45	1.86	18	1
1:A:55:VAL:CB	1:A:83:LEU:HD21	0.45	2.40	19	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:139:ILE:CG1	0.45	2.94	25	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CG2	0.45	2.63	2	1
1:A:164:ILE:C	1:A:165:ILE:HD12	0.45	2.36	4	3
1:A:129:GLU:O	1:A:129:GLU:CG	0.45	2.63	24	3
1:A:63:SER:OG	1:A:69:ASP:CG	0.45	2.59	10	1
1:A:67:GLY:CA	1:A:142:ALA:O	0.45	2.65	13	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:N	0.45	2.42	28	3
1:A:71:HIS:NE2	1:A:137:ASP:OD2	0.45	2.49	14	1
1:A:183:ARG:CG	1:A:183:ARG:O	0.45	2.63	17	1
1:A:165:ILE:C	1:A:166:HIS:CG	0.45	2.94	21	1
1:A:55:VAL:CB	1:A:77:LEU:HG	0.45	2.41	25	1
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:OD1	0.45	2.34	27	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:ASP:OD1	0.45	2.34	28	1
1:A:88:TYR:N	1:A:162:ALA:HB3	0.45	2.26	1	1
1:A:171:ASP:O	1:A:171:ASP:CG	0.45	2.60	1	3
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CG2	0.45	2.62	4	1
1:A:76:SER:OG	1:A:130:VAL:O	0.45	2.34	16	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:189:LEU:H	0.45	1.71	8	1
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:CB	0.45	2.94	12	2
1:A:156:LEU:C	1:A:156:LEU:HD22	0.45	2.37	13	1
1:A:42:GLY:O	1:A:60:ILE:HD13	0.45	2.11	14	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:HIS:N	0.45	2.24	15	1
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:CD2	0.45	2.65	18	1
1:A:131:GLY:O	1:A:133:ASP:N	0.45	2.46	20	1
1:A:87:ILE:HA	1:A:162:ALA:HB3	0.45	1.88	1	1
1:A:190:LEU:C	1:A:190:LEU:CD1	0.45	2.90	22	2
1:A:61:LYS:C	1:A:70:ILE:HG22	0.45	2.36	7	1
1:A:63:SER:CB	1:A:68:LEU:HB2	0.45	2.41	9	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:CG	0.45	2.64	9	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:GLY:C	0.45	2.59	22	2
1:A:82:SER:OG	1:A:129:GLU:CB	0.45	2.64	24	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:CG2	0.45	2.42	17	3
1:A:76:SER:O	1:A:134:GLY:N	0.45	2.50	4	1
1:A:56:GLY:C	1:A:57:PHE:CD2	0.45	2.95	27	5
1:A:76:SER:HB3	1:A:79:PRO:O	0.45	2.11	11	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:C	0.45	2.59	11	1
1:A:166:HIS:CE1	1:A:168:GLN:HG3	0.45	2.46	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:THR:O	1:A:147:LEU:HD12	0.45	2.12	18	1
1:A:190:LEU:O	1:A:190:LEU:CD1	0.45	2.57	30	2
1:A:88:TYR:O	1:A:190:LEU:CD2	0.45	2.64	22	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	0.45	2.37	23	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:86:HIS:HB2	0.45	2.46	24	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CB	0.45	2.99	27	1
1:A:89:GLU:HG3	1:A:90:LYS:N	0.45	2.27	1	1
1:A:154:ASN:CB	1:A:157:ASP:O	0.45	2.65	2	1
1:A:166:HIS:C	1:A:168:GLN:H	0.45	2.20	15	4
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:HG	0.45	2.12	7	1
1:A:48:VAL:HA	1:A:54:ALA:CB	0.45	2.40	12	3
1:A:68:LEU:HD21	1:A:139:ILE:HD13	0.45	1.89	9	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:70:ILE:HG13	0.45	1.89	10	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:161:SER:O	0.45	2.69	21	1
1:A:43:HIS:CG	1:A:153:LEU:HD21	0.45	2.46	24	1
1:A:94:VAL:HG13	1:A:95:ARG:N	0.45	2.27	28	1
1:A:131:GLY:C	1:A:133:ASP:N	0.45	2.73	29	1
1:A:131:GLY:O	1:A:132:ALA:C	0.45	2.60	29	1
1:A:133:ASP:O	1:A:134:GLY:C	0.45	2.59	14	3
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:C	0.45	2.60	9	1
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:ARG:H	0.45	1.71	21	1
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:CB	0.45	2.64	30	2
1:A:171:ASP:OD1	1:A:179:ASN:C	0.45	2.60	26	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:153:LEU:H	0.45	1.71	29	1
1:A:166:HIS:CG	1:A:183:ARG:HA	0.45	2.47	26	4
1:A:52:GLY:HA3	1:A:77:LEU:CD2	0.45	2.42	7	2
1:A:90:LYS:HB3	1:A:162:ALA:HB1	0.45	1.88	8	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:160:GLY:O	0.45	2.59	11	1
1:A:81:ALA:H	1:A:130:VAL:HG21	0.45	1.71	12	1
1:A:57:PHE:N	1:A:73:SER:O	0.45	2.49	15	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:VAL:CG1	0.45	2.65	17	1
1:A:76:SER:O	1:A:76:SER:OG	0.45	2.32	26	3
1:A:153:LEU:HD13	1:A:157:ASP:O	0.45	2.12	30	1
1:A:57:PHE:CE1	1:A:59:GLU:CD	0.45	2.95	23	3
1:A:102:GLY:O	1:A:103:GLY:C	0.45	2.59	2	3
1:A:70:ILE:O	1:A:138:VAL:CG1	0.45	2.58	3	1
1:A:158:GLU:C	1:A:159:ASP:OD1	0.45	2.60	3	1
1:A:76:SER:OG	1:A:128:LEU:C	0.45	2.59	15	1
1:A:166:HIS:C	1:A:168:GLN:N	0.45	2.73	15	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CB	0.45	2.65	20	1
1:A:164:ILE:HB	1:A:166:HIS:CE1	0.45	2.47	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:ARG:C	1:A:184:ILE:CG2	0.45	2.90	22	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:58:ILE:CG1	0.45	2.41	23	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ARG:HB2	0.45	2.12	25	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:71:HIS:CD2	0.45	2.47	26	1
1:A:138:VAL:CA	1:A:139:ILE:HD13	0.45	2.42	27	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:130:VAL:C	0.45	2.90	30	1
1:A:46:GLN:CD	1:A:46:GLN:O	0.45	2.60	1	1
1:A:68:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.45	1.87	1	1
1:A:95:ARG:CB	1:A:96:PRO:HD3	0.45	2.42	2	3
1:A:179:ASN:O	1:A:179:ASN:CG	0.45	2.60	3	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:HB2	0.45	2.41	22	2
1:A:180:SER:O	1:A:182:ALA:N	0.45	2.50	5	1
1:A:91:GLY:HA2	1:A:188:ALA:HB1	0.45	1.87	6	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:139:ILE:O	0.45	2.12	7	1
1:A:170:ASP:O	1:A:171:ASP:CB	0.45	2.65	10	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD13	0.45	1.89	16	1
1:A:48:VAL:C	1:A:185:VAL:CG1	0.45	2.90	17	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:HB3	0.45	2.12	25	3
1:A:156:LEU:CB	1:A:160:GLY:O	0.45	2.64	26	1
1:A:76:SER:OG	1:A:135:LYS:N	0.45	2.50	28	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:163:PHE:O	0.45	2.11	30	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:145:THR:O	0.44	2.12	2	1
1:A:83:LEU:O	1:A:84:GLY:O	0.44	2.35	9	3
1:A:80:GLY:CA	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.42	10	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:83:LEU:HD12	0.44	1.88	11	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:H	0.44	1.72	13	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:HB3	0.44	2.36	14	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:HD23	0.44	2.12	24	1
1:A:53:LYS:CG	1:A:54:ALA:N	0.44	2.79	25	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:180:SER:CB	0.44	2.66	26	1
1:A:70:ILE:N	1:A:139:ILE:HG23	0.44	2.28	6	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:163:PHE:CD1	0.44	2.47	7	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:54:ALA:HB2	0.44	2.39	9	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:N	0.44	2.64	10	1
1:A:132:ALA:CB	1:A:135:LYS:HG3	0.44	2.42	10	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CG1	0.44	2.64	11	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HD13	0.44	1.88	11	1
1:A:48:VAL:HG12	1:A:50:ARG:N	0.44	2.23	14	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:85:PHE:CD2	0.44	2.85	15	1
1:A:57:PHE:C	1:A:57:PHE:CD1	0.44	2.95	18	1
1:A:128:LEU:H	1:A:136:VAL:HG11	0.44	1.72	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:CD1	0.44	2.65	23	1
1:A:44:HIS:O	1:A:188:ALA:O	0.44	2.36	25	1
1:A:47:LEU:C	1:A:185:VAL:CG2	0.44	2.91	28	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:70:ILE:HB	0.44	2.43	29	1
1:A:94:VAL:HG13	1:A:96:PRO:CD	0.44	2.42	2	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG13	0.44	2.42	27	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:72:ILE:HG12	0.44	2.42	9	4
1:A:92:SER:O	1:A:94:VAL:N	0.44	2.48	11	1
1:A:52:GLY:O	1:A:54:ALA:N	0.44	2.48	21	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG23	0.44	1.88	22	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:CG2	0.44	2.66	22	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:77:LEU:CD1	0.44	2.77	29	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:139:ILE:CD1	0.44	2.42	30	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:O	0.44	2.66	3	1
1:A:93:CYS:SG	1:A:186:CYS:C	0.44	3.00	3	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:OD1	0.44	2.35	4	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:187:GLY:HA3	0.44	1.88	9	1
1:A:73:SER:O	1:A:75:ASN:ND2	0.44	2.50	10	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:75:ASN:O	0.44	2.12	16	1
1:A:146:SER:O	1:A:146:SER:OG	0.44	2.35	22	1
1:A:167:GLU:HG2	1:A:184:ILE:CG1	0.44	2.42	23	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CG	0.44	2.43	24	1
1:A:71:HIS:C	1:A:72:ILE:HG13	0.44	2.38	26	1
1:A:52:GLY:HA2	1:A:77:LEU:HD21	0.44	1.89	27	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:71:HIS:H	0.44	1.73	29	1
1:A:130:VAL:HG12	1:A:131:GLY:N	0.44	2.27	22	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:186:CYS:C	0.44	2.91	1	1
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:CD2	0.44	2.89	5	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD13	0.44	1.88	5	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:CB	0.44	2.95	11	1
1:A:97:ASP:OD1	1:A:97:ASP:C	0.44	2.60	30	2
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:CG	0.44	2.66	18	1
1:A:90:LYS:NZ	1:A:93:CYS:SG	0.44	2.90	24	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:HG	0.44	1.87	28	1
1:A:63:SER:CB	1:A:68:LEU:CB	0.44	2.96	6	1
1:A:160:GLY:C	1:A:161:SER:OG	0.44	2.60	11	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:CG2	0.44	2.62	16	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:165:ILE:CD1	0.44	3.01	22	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:71:HIS:CB	0.44	2.41	26	1
1:A:180:SER:O	1:A:180:SER:OG	0.44	2.35	28	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:61:LYS:HE2	0.44	2.48	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:CA	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.43	4	1
1:A:76:SER:OG	1:A:83:LEU:HD23	0.44	2.12	7	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:134:GLY:N	0.44	2.28	7	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:CG	0.44	2.61	9	1
1:A:183:ARG:O	1:A:183:ARG:CG	0.44	2.66	10	2
1:A:73:SER:HA	1:A:136:VAL:HG23	0.44	1.89	11	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:CG2	0.44	2.43	17	2
1:A:60:ILE:HG13	1:A:147:LEU:CD2	0.44	2.43	18	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:164:ILE:CD1	0.44	3.00	21	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:SER:O	0.44	2.36	21	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.44	2.43	25	1
1:A:71:HIS:CB	1:A:137:ASP:OD1	0.44	2.65	30	1
1:A:170:ASP:OD2	1:A:181:GLY:N	0.44	2.51	30	1
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:CD1	0.44	2.79	1	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:128:LEU:O	0.44	2.36	3	1
1:A:82:SER:HB3	1:A:168:GLN:CB	0.44	2.43	4	3
1:A:130:VAL:HG22	1:A:131:GLY:H	0.44	1.72	8	2
1:A:43:HIS:CD2	1:A:43:HIS:C	0.44	2.95	21	1
1:A:51:GLU:OE2	1:A:171:ASP:CG	0.44	2.61	30	1
1:A:87:ILE:C	1:A:156:LEU:HD22	0.44	2.38	2	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:HB1	0.44	2.41	5	1
1:A:127:ASN:C	1:A:128:LEU:HD12	0.44	2.37	9	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:69:ASP:O	0.44	2.58	10	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:159:ASP:O	0.44	2.65	17	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD13	0.44	2.12	18	1
1:A:74:ALA:C	1:A:128:LEU:HD21	0.44	2.38	21	1
1:A:144:ASP:O	1:A:145:THR:O	0.44	2.36	22	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:HD11	0.44	2.13	23	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:83:LEU:CG	0.43	2.42	1	1
1:A:87:ILE:CG1	1:A:162:ALA:O	0.43	2.66	3	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:133:ASP:O	0.43	2.12	10	2
1:A:70:ILE:HD12	1:A:71:HIS:N	0.43	2.28	12	1
1:A:70:ILE:N	1:A:147:LEU:HD11	0.43	2.28	14	1
1:A:170:ASP:OD2	1:A:170:ASP:N	0.43	2.51	14	1
1:A:57:PHE:O	1:A:73:SER:O	0.43	2.36	25	2
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:HB3	0.43	2.43	17	2
1:A:188:ALA:O	1:A:189:LEU:O	0.43	2.36	19	2
1:A:73:SER:C	1:A:134:GLY:O	0.43	2.61	22	1
1:A:154:ASN:O	1:A:155:ILE:HD12	0.43	2.12	22	1
1:A:167:GLU:CG	1:A:184:ILE:HG12	0.43	2.42	23	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD21	0.43	1.89	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:CG2	1:A:76:SER:CB	0.43	2.96	1	1
1:A:179:ASN:O	1:A:179:ASN:ND2	0.43	2.52	9	2
1:A:181:GLY:C	1:A:182:ALA:O	0.43	2.61	22	3
1:A:70:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HG21	0.43	1.90	5	1
1:A:50:ARG:NE	1:A:51:GLU:HB2	0.43	2.28	9	1
1:A:63:SER:O	1:A:64:ASP:CG	0.43	2.62	11	1
1:A:146:SER:O	1:A:153:LEU:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:166:HIS:C	1:A:167:GLU:HG3	0.43	2.39	13	1
1:A:184:ILE:HG22	1:A:185:VAL:H	0.43	1.72	14	1
1:A:166:HIS:CE1	1:A:184:ILE:HD13	0.43	2.48	15	1
1:A:69:ASP:HA	1:A:139:ILE:HG22	0.43	1.90	22	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HB3	0.43	1.89	25	1
1:A:87:ILE:O	1:A:163:PHE:CE1	0.43	2.71	27	1
1:A:167:GLU:O	1:A:168:GLN:CG	0.43	2.65	30	1
1:A:79:PRO:C	1:A:81:ALA:N	0.43	2.76	9	3
1:A:170:ASP:HA	1:A:178:GLY:O	0.43	2.12	3	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HD12	0.43	2.13	4	1
1:A:147:LEU:O	1:A:153:LEU:CG	0.43	2.67	11	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:72:ILE:CG2	0.43	2.43	19	1
1:A:132:ALA:C	1:A:134:GLY:N	0.43	2.74	28	2
1:A:147:LEU:CD1	1:A:155:ILE:CD1	0.43	2.84	22	1
1:A:152:LYS:CG	1:A:153:LEU:N	0.43	2.77	26	1
1:A:70:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD22	0.43	1.88	27	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:LEU:CD1	0.43	2.43	28	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:133:ASP:OD1	0.43	2.66	29	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:169:ALA:HA	0.43	2.43	1	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:CD2	0.43	3.01	12	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:145:THR:OG1	0.43	2.37	15	1
1:A:92:SER:CB	1:A:189:LEU:HD23	0.43	2.44	16	1
1:A:68:LEU:HD11	1:A:147:LEU:HD21	0.43	1.88	17	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:189:LEU:HD21	0.43	1.89	17	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:185:VAL:CB	0.43	2.66	19	1
1:A:127:ASN:O	1:A:128:LEU:O	0.43	2.37	21	1
1:A:63:SER:CB	1:A:67:GLY:O	0.43	2.66	22	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HB3	0.43	2.44	25	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:HG13	0.43	1.87	27	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:71:HIS:CB	0.43	2.38	28	1
1:A:76:SER:HB2	1:A:130:VAL:HG13	0.43	1.89	2	1
1:A:75:ASN:C	1:A:77:LEU:HD12	0.43	2.38	3	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:C	0.43	2.61	4	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:ALA:HB3	0.43	1.90	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:GLN:O	1:A:179:ASN:ND2	0.43	2.51	10	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:O	0.43	2.36	13	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:LEU:CG	0.43	2.97	17	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:134:GLY:CA	0.43	2.44	22	1
1:A:178:GLY:O	1:A:180:SER:N	0.43	2.51	24	2
1:A:60:ILE:HG12	1:A:71:HIS:C	0.43	2.38	28	1
1:A:170:ASP:OD2	1:A:181:GLY:CA	0.43	2.66	30	1
1:A:163:PHE:O	1:A:165:ILE:CD1	0.43	2.67	3	1
1:A:88:TYR:HA	1:A:162:ALA:HB2	0.43	1.91	5	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:76:SER:HA	1:A:83:LEU:CD2	0.43	2.43	6	1
1:A:100:SER:O	1:A:101:ALA:C	0.43	2.61	20	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:54:ALA:HB2	0.43	2.43	21	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:156:LEU:CB	0.43	2.96	25	1
1:A:89:GLU:H	1:A:162:ALA:HB3	0.43	1.73	27	1
1:A:94:VAL:HG21	1:A:190:LEU:HD22	0.43	1.91	4	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:HB3	0.43	2.14	5	2
1:A:181:GLY:O	1:A:184:ILE:HG23	0.43	2.14	6	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:O	0.43	2.36	23	2
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:CG2	0.43	2.44	11	1
1:A:136:VAL:CG2	1:A:137:ASP:N	0.43	2.81	16	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:OG	0.43	2.32	16	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:126:PRO:HD3	0.43	2.44	17	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:HB3	0.43	2.14	18	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:69:ASP:OD2	0.43	2.14	19	1
1:A:159:ASP:OD1	1:A:160:GLY:N	0.43	2.52	21	1
1:A:145:THR:HG22	1:A:155:ILE:HG21	0.43	1.91	22	1
1:A:85:PHE:HB2	1:A:128:LEU:HD21	0.43	1.90	23	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:123:GLY:HA3	0.43	2.49	25	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HG23	0.43	1.88	27	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:187:GLY:CA	0.43	2.43	1	1
1:A:53:LYS:C	1:A:76:SER:O	0.43	2.61	1	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:CYS:N	0.43	2.29	1	1
1:A:76:SER:CB	1:A:130:VAL:HA	0.43	2.43	2	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:HG3	0.43	2.49	3	1
1:A:159:ASP:HB3	1:A:189:LEU:HD23	0.43	1.89	7	1
1:A:50:ARG:C	1:A:50:ARG:HD2	0.43	2.37	9	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:72:ILE:HG12	0.43	1.90	13	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:GLY:O	0.43	2.36	29	4
1:A:154:ASN:HA	1:A:156:LEU:CD1	0.43	2.44	17	1
1:A:189:LEU:C	1:A:189:LEU:CD1	0.43	2.75	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PRO:O	1:A:98:PHE:N	0.43	2.48	19	2
1:A:98:PHE:O	1:A:99:GLU:C	0.43	2.61	29	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:77:LEU:HG	0.43	1.90	20	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:VAL:HG13	0.43	2.13	21	1
1:A:74:ALA:C	1:A:75:ASN:CG	0.43	2.87	25	2
1:A:47:LEU:HB3	1:A:55:VAL:CG2	0.43	2.44	24	1
1:A:157:ASP:CB	1:A:160:GLY:O	0.43	2.67	30	1
1:A:50:ARG:O	1:A:50:ARG:CG	0.43	2.65	9	1
1:A:61:LYS:HD3	1:A:61:LYS:C	0.43	2.38	9	1
1:A:162:ALA:O	1:A:163:PHE:CG	0.43	2.72	21	1
1:A:52:GLY:CA	1:A:77:LEU:CD2	0.43	2.97	22	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:71:HIS:HB3	0.43	2.42	26	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HG21	0.43	1.88	27	1
1:A:138:VAL:HG13	1:A:139:ILE:N	0.43	2.28	27	1
1:A:129:GLU:HG3	1:A:133:ASP:CB	0.43	2.44	28	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:138:VAL:HG23	0.43	1.91	2	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:69:ASP:CA	0.43	2.43	4	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:68:LEU:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:182:ALA:C	1:A:183:ARG:HG3	0.43	2.38	6	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:157:ASP:N	0.43	2.51	11	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:156:LEU:H	0.43	2.25	12	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PHE:HB3	0.43	2.13	15	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:58:ILE:HG21	0.43	2.49	18	1
1:A:55:VAL:C	1:A:75:ASN:HB2	0.43	2.39	21	1
1:A:167:GLU:HB3	1:A:182:ALA:CA	0.43	2.43	22	1
1:A:76:SER:C	1:A:77:LEU:CG	0.43	2.92	24	1
1:A:154:ASN:C	1:A:156:LEU:N	0.43	2.76	24	1
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:HD3	0.43	2.12	29	2
1:A:87:ILE:HD11	1:A:163:PHE:CD1	0.43	2.49	28	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:45:VAL:N	0.43	2.86	29	1
1:A:45:VAL:O	1:A:58:ILE:CD1	0.43	2.66	29	1
1:A:165:ILE:O	1:A:185:VAL:O	0.42	2.37	14	6
1:A:60:ILE:CG2	1:A:69:ASP:HA	0.42	2.43	4	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HG12	0.42	2.44	6	1
1:A:127:ASN:C	1:A:133:ASP:OD2	0.42	2.62	6	1
1:A:187:GLY:O	1:A:189:LEU:N	0.42	2.48	11	2
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD2	0.42	2.81	13	1
1:A:90:LYS:NZ	1:A:102:GLY:H	0.42	2.12	13	1
1:A:93:CYS:C	1:A:94:VAL:CG2	0.42	2.91	13	1
1:A:146:SER:HA	1:A:155:ILE:HG21	0.42	1.90	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ASP:CG	1:A:145:THR:OG1	0.42	2.62	15	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD22	0.42	2.13	18	1
1:A:96:PRO:O	1:A:97:ASP:CG	0.42	2.62	21	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:CB	0.42	2.67	26	2
1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:OD1	0.42	2.52	27	1
1:A:160:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD21	0.42	2.43	27	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:156:LEU:N	0.42	2.29	30	1
1:A:84:GLY:O	1:A:168:GLN:NE2	0.42	2.52	1	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:H	0.42	1.73	3	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:169:ALA:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:140:MET:O	1:A:141:ASN:O	0.42	2.37	15	3
1:A:62:GLU:H	1:A:147:LEU:HD11	0.42	1.74	6	1
1:A:81:ALA:C	1:A:83:LEU:HD22	0.42	2.39	7	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:189:LEU:HB2	0.42	1.91	9	1
1:A:48:VAL:O	1:A:184:ILE:O	0.42	2.38	12	2
1:A:49:ASN:HA	1:A:185:VAL:HG12	0.42	1.90	12	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:CG2	0.42	2.67	15	2
1:A:69:ASP:CA	1:A:147:LEU:HD11	0.42	2.45	14	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.67	16	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:H	0.42	2.13	25	2
1:A:166:HIS:HA	1:A:182:ALA:O	0.42	2.14	23	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ASN:HB2	0.42	2.14	24	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:70:ILE:HB	0.42	1.90	29	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:74:ALA:CB	0.42	2.36	30	1
1:A:127:ASN:C	1:A:128:LEU:CG	0.42	2.92	30	1
1:A:129:GLU:C	1:A:130:VAL:O	0.42	2.63	1	3
1:A:61:LYS:N	1:A:70:ILE:CG2	0.42	2.82	7	1
1:A:76:SER:C	1:A:78:ARG:H	0.42	2.22	8	1
1:A:63:SER:O	1:A:68:LEU:HD12	0.42	2.14	9	1
1:A:89:GLU:CG	1:A:89:GLU:O	0.42	2.67	12	1
1:A:146:SER:HB2	1:A:153:LEU:CD2	0.42	2.44	20	1
1:A:163:PHE:O	1:A:164:ILE:HD12	0.42	2.15	22	1
1:A:132:ALA:O	1:A:135:LYS:HG3	0.42	2.14	25	1
1:A:86:HIS:CE1	1:A:126:PRO:HB3	0.42	2.50	28	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:CD	0.42	2.62	8	1
1:A:128:LEU:CB	1:A:136:VAL:HG11	0.42	2.42	10	1
1:A:66:GLU:CD	1:A:141:ASN:ND2	0.42	2.77	12	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:72:ILE:CD1	0.42	2.84	13	1
1:A:98:PHE:CE1	1:A:183:ARG:NH2	0.42	2.88	13	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:HIS:O	0.42	2.37	24	4
1:A:60:ILE:CG1	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.96	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HG	0.42	2.14	22	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:163:PHE:H	0.42	1.75	30	1
1:A:161:SER:CB	1:A:163:PHE:CZ	0.42	3.02	30	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:189:LEU:CD2	0.42	2.44	30	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:HG	0.42	2.44	3	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:N	0.42	2.86	15	2
1:A:126:PRO:HB2	1:A:128:LEU:HD21	0.42	1.90	4	1
1:A:155:ILE:O	1:A:161:SER:OG	0.42	2.35	7	1
1:A:63:SER:C	1:A:64:ASP:CG	0.42	2.87	11	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.98	13	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:147:LEU:HD21	0.42	2.14	15	1
1:A:75:ASN:O	1:A:83:LEU:HB2	0.42	2.13	15	1
1:A:43:HIS:HD2	1:A:58:ILE:HG21	0.42	1.74	18	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:OD1	0.42	2.36	21	1
1:A:67:GLY:O	1:A:142:ALA:HB3	0.42	2.14	25	1
1:A:97:ASP:O	1:A:98:PHE:HB2	0.42	2.14	26	1
1:A:166:HIS:ND1	1:A:167:GLU:N	0.42	2.68	1	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.44	2	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.44	3	2
1:A:51:GLU:OE2	1:A:169:ALA:CB	0.42	2.66	6	1
1:A:93:CYS:C	1:A:94:VAL:HG12	0.42	2.39	6	1
1:A:67:GLY:O	1:A:145:THR:O	0.42	2.37	7	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:CG2	0.42	2.82	8	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:GLY:O	0.42	2.38	15	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:78:ARG:CB	0.42	2.43	15	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HD13	0.42	2.14	16	1
1:A:190:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	0.42	1.75	16	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:GLU:CG	0.42	2.68	17	2
1:A:59:GLU:C	1:A:71:HIS:O	0.42	2.63	19	1
1:A:56:GLY:HA2	1:A:74:ALA:HB1	0.42	1.90	20	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG21	0.42	2.44	21	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:O	0.42	2.37	23	2
1:A:75:ASN:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.44	23	1
1:A:167:GLU:OE1	1:A:179:ASN:OD1	0.42	2.38	23	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:139:ILE:CG1	0.42	2.97	25	1
1:A:157:ASP:C	1:A:190:LEU:CD2	0.42	2.93	25	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.44	29	1
1:A:48:VAL:N	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.78	2	1
1:A:62:GLU:HB2	1:A:68:LEU:HD23	0.42	1.92	4	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:134:GLY:O	0.42	2.36	24	2
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ALA:O	0.42	2.38	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:O	0.42	2.37	13	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:188:ALA:CA	0.42	2.41	13	1
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HG12	0.42	2.14	16	1
1:A:189:LEU:O	1:A:189:LEU:HG	0.42	2.14	17	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:166:HIS:CG	0.42	3.03	18	1
1:A:75:ASN:CA	1:A:133:ASP:O	0.42	2.68	10	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:N	0.42	2.52	11	1
1:A:93:CYS:C	1:A:94:VAL:HG22	0.42	2.40	13	1
1:A:56:GLY:CA	1:A:73:SER:O	0.42	2.67	15	1
1:A:82:SER:OG	1:A:169:ALA:CB	0.42	2.58	23	1
1:A:59:GLU:O	1:A:71:HIS:ND1	0.42	2.50	24	1
1:A:163:PHE:N	1:A:187:GLY:O	0.42	2.53	25	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:71:HIS:H	0.42	2.33	30	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:VAL:HG13	0.42	2.15	1	1
1:A:159:ASP:O	1:A:160:GLY:O	0.42	2.36	1	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:ASN:CG	0.42	2.62	3	1
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:CG2	0.42	2.67	6	1
1:A:40:ALA:O	1:A:42:GLY:N	0.42	2.49	7	1
1:A:50:ARG:HG2	1:A:77:LEU:HD22	0.42	1.90	9	1
1:A:155:ILE:O	1:A:155:ILE:CD1	0.42	2.63	15	1
1:A:187:GLY:C	1:A:188:ALA:O	0.42	2.63	21	1
1:A:82:SER:HG	1:A:169:ALA:HB2	0.42	1.72	23	1
1:A:92:SER:CB	1:A:188:ALA:CB	0.42	2.98	26	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:PHE:CE1	0.42	2.72	27	1
1:A:146:SER:O	1:A:152:LYS:O	0.42	2.38	6	1
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:CD1	0.42	2.87	9	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:72:ILE:HG12	0.42	2.45	13	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:CG2	0.42	2.45	14	1
1:A:166:HIS:NE2	1:A:185:VAL:O	0.42	2.53	14	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:163:PHE:CE1	0.42	2.50	17	1
1:A:154:ASN:O	1:A:156:LEU:HD13	0.42	2.14	17	1
1:A:71:HIS:O	1:A:72:ILE:HG23	0.42	2.15	19	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CG1	0.42	2.45	22	1
1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:OD1	0.42	2.63	27	1
1:A:41:PHE:O	1:A:60:ILE:O	0.42	2.37	28	1
1:A:77:LEU:H	1:A:130:VAL:HG13	0.42	1.74	28	1
1:A:41:PHE:CD1	1:A:41:PHE:N	0.42	2.87	29	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:70:ILE:CG2	0.42	2.45	29	1
1:A:156:LEU:HD12	1:A:160:GLY:HA2	0.42	1.91	29	1
1:A:186:CYS:O	1:A:187:GLY:O	0.42	2.37	29	1
1:A:46:GLN:N	1:A:187:GLY:CA	0.42	2.83	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:CG2	1:A:157:ASP:OD1	0.42	2.68	30	1
1:A:159:ASP:C	1:A:190:LEU:HB3	0.41	2.40	1	1
1:A:73:SER:HB3	1:A:137:ASP:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:80:GLY:HA3	1:A:130:VAL:HA	0.41	1.91	10	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:147:LEU:CD1	0.41	2.44	11	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:136:VAL:HG21	0.41	2.15	11	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:SER:HB2	0.41	2.15	12	1
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:HD13	0.41	2.40	21	1
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:ARG:N	0.41	2.30	21	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:139:ILE:HG13	0.41	2.44	25	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:71:HIS:ND1	0.41	2.82	26	1
1:A:81:ALA:N	1:A:130:VAL:HG11	0.41	2.29	27	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:160:GLY:HA2	0.41	2.45	29	1
1:A:57:PHE:N	1:A:74:ALA:HB2	0.41	2.27	30	1
1:A:82:SER:HB3	1:A:169:ALA:N	0.41	2.30	30	1
1:A:68:LEU:O	1:A:138:VAL:O	0.41	2.38	13	2
1:A:78:ARG:N	1:A:130:VAL:HG13	0.41	2.30	4	1
1:A:166:HIS:O	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.38	8	1
1:A:184:ILE:HD12	1:A:185:VAL:HG13	0.41	1.91	12	1
1:A:55:VAL:O	1:A:75:ASN:HB2	0.41	2.15	14	1
1:A:68:LEU:O	1:A:145:THR:O	0.41	2.38	14	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:58:ILE:HG13	0.41	2.45	16	1
1:A:75:ASN:HA	1:A:128:LEU:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:82:SER:O	1:A:165:ILE:HG23	0.41	2.15	22	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:HG11	0.41	1.91	27	1
1:A:51:GLU:OE2	1:A:179:ASN:OD1	0.41	2.38	28	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ASN:ND2	0.41	2.52	28	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:O	0.41	2.38	29	1
1:A:182:ALA:C	1:A:184:ILE:HD13	0.41	2.41	2	1
1:A:155:ILE:HD12	1:A:156:LEU:HD23	0.41	1.91	4	1
1:A:87:ILE:N	1:A:162:ALA:O	0.41	2.50	9	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:O	0.41	2.37	13	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CG1	0.41	2.67	15	1
1:A:92:SER:OG	1:A:186:CYS:SG	0.41	2.78	15	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:189:LEU:HB3	0.41	2.45	17	1
1:A:130:VAL:HG22	1:A:131:GLY:N	0.41	2.31	19	1
1:A:162:ALA:C	1:A:163:PHE:CD2	0.41	2.98	21	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:83:LEU:HD12	0.41	2.15	23	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:59:GLU:OE1	0.41	2.72	24	1
1:A:51:GLU:CD	1:A:179:ASN:OD1	0.41	2.63	28	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:55:VAL:HG12	0.41	1.74	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:CD2	1:A:145:THR:O	0.41	2.68	2	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:73:SER:OG	1:A:137:ASP:CG	0.41	2.63	6	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:57:PHE:CA	0.41	2.97	7	1
1:A:51:GLU:OE1	1:A:51:GLU:C	0.41	2.64	11	1
1:A:70:ILE:O	1:A:139:ILE:HD11	0.41	2.16	13	1
1:A:76:SER:HA	1:A:130:VAL:CG1	0.41	2.43	14	1
1:A:137:ASP:C	1:A:139:ILE:HD13	0.41	2.41	14	1
1:A:161:SER:CB	1:A:190:LEU:O	0.41	2.69	14	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:72:ILE:CD1	0.41	2.45	15	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:184:ILE:CD1	0.41	2.68	16	1
1:A:161:SER:C	1:A:189:LEU:HG	0.41	2.41	17	1
1:A:63:SER:HA	1:A:66:GLU:O	0.41	2.15	18	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:168:GLN:OE1	0.41	2.39	19	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:86:HIS:HB2	0.41	2.51	23	1
1:A:152:LYS:CD	1:A:152:LYS:N	0.41	2.84	24	1
1:A:60:ILE:HA	1:A:70:ILE:HB	0.41	1.90	27	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	0.41	1.92	27	1
1:A:129:GLU:C	1:A:133:ASP:OD1	0.41	2.63	27	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:69:ASP:HB3	0.41	1.90	28	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HG	0.41	1.92	3	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:59:GLU:HB3	0.41	2.50	7	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CG2	0.41	2.45	11	1
1:A:154:ASN:OD1	1:A:154:ASN:N	0.41	2.52	12	1
1:A:74:ALA:HB2	1:A:85:PHE:CZ	0.41	2.51	17	1
1:A:75:ASN:HB2	1:A:136:VAL:CG2	0.41	2.45	19	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:86:HIS:HB2	0.41	2.51	23	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:165:ILE:HG21	0.41	1.93	24	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:71:HIS:CB	0.41	2.45	26	1
1:A:95:ARG:N	1:A:96:PRO:HD2	0.41	2.31	27	1
1:A:162:ALA:HA	1:A:189:LEU:HD21	0.41	1.92	28	1
1:A:130:VAL:CG1	1:A:133:ASP:CG	0.41	2.90	29	1
1:A:164:ILE:CD1	1:A:186:CYS:HB2	0.41	2.45	1	1
1:A:97:ASP:O	1:A:99:GLU:N	0.41	2.51	3	1
1:A:77:LEU:C	1:A:79:PRO:HD3	0.41	2.41	8	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HD13	0.41	2.45	11	1
1:A:80:GLY:HA2	1:A:130:VAL:CB	0.41	2.45	11	1
1:A:169:ALA:O	1:A:171:ASP:N	0.41	2.53	12	1
1:A:164:ILE:HG23	1:A:186:CYS:HB2	0.41	1.87	13	1
1:A:169:ALA:HB3	1:A:180:SER:CA	0.41	2.46	13	1
1:A:43:HIS:O	1:A:58:ILE:HG21	0.41	2.16	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:CG1	1:A:187:GLY:HA3	0.41	2.45	20	1
1:A:167:GLU:HB3	1:A:181:GLY:C	0.41	2.40	22	1
1:A:164:ILE:HD12	1:A:164:ILE:N	0.41	2.30	23	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:161:SER:HA	0.41	1.93	1	1
1:A:87:ILE:CD1	1:A:155:ILE:HD11	0.41	2.45	2	1
1:A:88:TYR:O	1:A:160:GLY:O	0.41	2.39	4	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:134:GLY:N	0.41	2.31	22	2
1:A:168:GLN:O	1:A:180:SER:O	0.41	2.38	19	2
1:A:75:ASN:HB2	1:A:134:GLY:C	0.41	2.41	25	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:SER:OG	0.41	2.37	28	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:CG	0.41	2.64	30	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:126:PRO:HD3	0.41	2.51	1	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:187:GLY:HA2	0.41	2.46	5	1
1:A:93:CYS:C	1:A:94:VAL:CG1	0.41	2.94	6	1
1:A:51:GLU:N	1:A:170:ASP:O	0.41	2.53	9	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:69:ASP:CB	0.41	2.45	12	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:133:ASP:C	0.41	2.94	17	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ARG:HD3	0.41	2.16	19	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:157:ASP:CA	0.41	2.45	25	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:71:HIS:CG	0.41	2.51	26	1
1:A:179:ASN:HD22	1:A:180:SER:N	0.41	2.14	28	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:184:ILE:CD1	0.41	2.98	29	1
1:A:76:SER:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.41	2.45	30	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:189:LEU:HB2	0.41	2.45	1	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:54:ALA:O	0.41	2.15	1	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:HG12	0.41	1.92	2	1
1:A:47:LEU:CA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.99	2	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:LYS:HB3	0.41	2.16	16	2
1:A:49:ASN:N	1:A:53:LYS:O	0.41	2.53	3	2
1:A:73:SER:OG	1:A:137:ASP:OD1	0.41	2.39	6	1
1:A:83:LEU:O	1:A:128:LEU:O	0.41	2.39	6	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:165:ILE:CG2	0.41	2.45	6	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:58:ILE:N	0.41	2.31	9	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:70:ILE:N	0.41	2.30	14	2
1:A:88:TYR:O	1:A:90:LYS:O	0.41	2.38	9	1
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:OD1	0.41	2.38	10	1
1:A:84:GLY:O	1:A:164:ILE:O	0.41	2.39	11	1
1:A:68:LEU:O	1:A:139:ILE:HG23	0.41	2.16	13	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:77:LEU:CD2	0.41	2.68	14	1
1:A:140:MET:C	1:A:142:ALA:N	0.41	2.76	14	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:171:ASP:N	0.41	2.53	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:OG	0.41	2.37	17	2
1:A:56:GLY:CA	1:A:74:ALA:HA	0.41	2.46	18	1
1:A:75:ASN:HB2	1:A:136:VAL:CG1	0.41	2.45	19	1
1:A:74:ALA:O	1:A:134:GLY:HA3	0.41	2.16	21	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:157:ASP:OD1	0.41	2.69	22	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:69:ASP:HA	0.41	2.46	24	1
1:A:48:VAL:O	1:A:185:VAL:HG22	0.41	2.16	25	1
1:A:55:VAL:O	1:A:76:SER:O	0.41	2.39	28	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HD11	0.41	1.92	28	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HD13	0.41	2.16	29	1
1:A:127:ASN:C	1:A:128:LEU:HG	0.41	2.40	30	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:189:LEU:O	0.41	2.14	3	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:179:ASN:ND2	0.41	2.61	3	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.46	7	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:CG1	0.41	2.69	8	1
1:A:159:ASP:O	1:A:190:LEU:O	0.41	2.39	8	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:134:GLY:HA3	0.41	2.46	9	1
1:A:56:GLY:HA3	1:A:75:ASN:N	0.41	2.31	10	1
1:A:127:ASN:O	1:A:136:VAL:CG1	0.41	2.69	10	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:185:VAL:CG2	0.41	2.46	11	1
1:A:164:ILE:CG1	1:A:186:CYS:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:187:GLY:N	0.41	2.84	14	1
1:A:42:GLY:O	1:A:44:HIS:ND1	0.41	2.48	20	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:147:LEU:CG	0.41	2.46	20	1
1:A:167:GLU:O	1:A:167:GLU:HG3	0.41	2.16	22	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:188:ALA:CA	0.41	2.45	26	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:O	0.41	2.38	26	1
1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:OD2	0.40	2.64	3	1
1:A:170:ASP:OD1	1:A:179:ASN:ND2	0.40	2.54	5	1
1:A:161:SER:CA	1:A:188:ALA:HA	0.40	2.47	7	1
1:A:68:LEU:O	1:A:69:ASP:OD1	0.40	2.39	11	1
1:A:49:ASN:C	1:A:51:GLU:N	0.40	2.77	12	1
1:A:50:ARG:CB	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.69	12	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:75:ASN:N	0.40	2.31	13	1
1:A:165:ILE:H	1:A:165:ILE:HD12	0.40	1.76	13	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:LEU:CD1	0.40	2.98	14	1
1:A:50:ARG:O	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.38	15	1
1:A:56:GLY:N	1:A:77:LEU:HD23	0.40	2.31	15	1
1:A:68:LEU:CG	1:A:147:LEU:HD11	0.40	2.45	20	1
1:A:159:ASP:O	1:A:189:LEU:CD2	0.40	2.69	24	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:77:LEU:HG	0.40	2.45	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HG23	1:A:72:ILE:HA	0.40	1.92	25	1
1:A:168:GLN:O	1:A:180:SER:OG	0.40	2.39	26	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD23	0.40	2.16	27	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:130:VAL:O	0.40	2.16	30	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:HIS:ND1	0.40	2.54	5	2
1:A:86:HIS:O	1:A:87:ILE:HD12	0.40	2.17	6	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:145:THR:OG1	0.40	2.69	10	1
1:A:128:LEU:HB3	1:A:136:VAL:CG1	0.40	2.44	10	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASP:C	0.40	2.64	10	1
1:A:42:GLY:C	1:A:43:HIS:CG	0.40	2.99	11	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:190:LEU:CD2	0.40	2.45	11	1
1:A:66:GLU:CD	1:A:141:ASN:CG	0.40	2.88	12	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:74:ALA:O	0.40	2.69	13	1
1:A:165:ILE:C	1:A:185:VAL:O	0.40	2.64	14	1
1:A:81:ALA:O	1:A:129:GLU:HA	0.40	2.16	16	1
1:A:83:LEU:CG	1:A:128:LEU:O	0.40	2.69	16	1
1:A:166:HIS:HB2	1:A:182:ALA:CB	0.40	2.46	16	1
1:A:61:LYS:CG	1:A:62:GLU:N	0.40	2.85	19	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:162:ALA:CB	0.40	2.47	21	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:HIS:CG	0.40	2.74	21	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:C	0.40	2.64	22	1
1:A:169:ALA:C	1:A:170:ASP:O	0.40	2.64	26	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:142:ALA:HB1	0.40	2.46	27	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:69:ASP:N	0.40	2.54	27	1
1:A:158:GLU:O	1:A:159:ASP:OD1	0.40	2.39	3	1
1:A:132:ALA:O	1:A:133:ASP:HB2	0.40	2.15	4	1
1:A:63:SER:CB	1:A:69:ASP:OD1	0.40	2.69	10	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:139:ILE:HB	0.40	2.46	11	1
1:A:82:SER:CB	1:A:168:GLN:OE1	0.40	2.69	11	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:139:ILE:HA	0.40	1.92	12	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:75:ASN:CA	0.40	2.46	13	1
1:A:164:ILE:CG2	1:A:186:CYS:HB3	0.40	2.44	13	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:58:ILE:CG1	0.40	3.00	16	1
1:A:88:TYR:C	1:A:90:LYS:N	0.40	2.79	17	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASN:OD1	0.40	2.39	17	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:190:LEU:CD2	0.40	2.91	18	1
1:A:51:GLU:HB3	1:A:78:ARG:HH21	0.40	1.76	19	1
1:A:76:SER:C	1:A:77:LEU:HG	0.40	2.41	24	1
1:A:87:ILE:HG21	1:A:154:ASN:ND2	0.40	2.31	25	1
1:A:86:HIS:O	1:A:162:ALA:O	0.40	2.38	5	1
1:A:98:PHE:O	1:A:100:SER:N	0.40	2.54	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:HB	1:A:162:ALA:O	0.40	2.16	6	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLU:CB	0.40	2.68	6	1
1:A:104:PRO:O	1:A:105:PHE:C	0.40	2.65	6	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:152:LYS:O	0.40	2.16	7	1
1:A:76:SER:C	1:A:79:PRO:HD3	0.40	2.41	8	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:179:ASN:ND2	0.40	2.54	8	1
1:A:44:HIS:O	1:A:189:LEU:O	0.40	2.40	12	1
1:A:93:CYS:O	1:A:94:VAL:O	0.40	2.39	15	1
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HD23	0.40	2.16	22	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:LEU:HG	0.40	2.16	24	1
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG13	0.40	2.16	24	1
1:A:49:ASN:HA	1:A:184:ILE:CG2	0.40	2.47	25	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:61:LYS:HB3	0.40	2.46	28	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:165:ILE:CD1	0.40	2.46	28	1
1:A:137:ASP:OD1	1:A:137:ASP:N	0.40	2.53	29	1
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ASP:HB2	0.40	2.17	30	1
1:A:82:SER:HB2	1:A:168:GLN:CG	0.40	2.47	1	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:61:LYS:HB2	0.40	2.51	3	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HD11	0.40	1.93	11	1
1:A:154:ASN:CA	1:A:156:LEU:CD1	0.40	3.00	17	1
1:A:72:ILE:C	1:A:136:VAL:O	0.40	2.64	24	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:139:ILE:CG1	0.40	2.46	25	1
1:A:76:SER:CB	1:A:133:ASP:C	0.40	2.95	26	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:HD21	0.40	2.16	28	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	124/162 (77%)	58±5 (47±4%)	41±5 (33±4%)	25±5 (20±4%)		
All	All	3720/4860 (77%)	1735 (47%)	1243 (33%)	742 (20%)		

All 89 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	130	VAL	26
1	A	78	ARG	25
1	A	67	GLY	19
1	A	53	LYS	19
1	A	141	ASN	18
1	A	144	ASP	17
1	A	188	ALA	17
1	A	98	PHE	16
1	A	86	HIS	16
1	A	62	GLU	15
1	A	87	ILE	15
1	A	182	ALA	15
1	A	43	HIS	14
1	A	80	GLY	14
1	A	101	ALA	14
1	A	138	VAL	13
1	A	180	SER	13
1	A	94	VAL	12
1	A	178	GLY	12
1	A	64	ASP	12
1	A	102	GLY	12
1	A	57	PHE	11
1	A	74	ALA	11
1	A	97	ASP	11
1	A	95	ARG	11
1	A	133	ASP	11
1	A	170	ASP	11
1	A	100	SER	10
1	A	143	PRO	10
1	A	152	LYS	10
1	A	190	LEU	10
1	A	84	GLY	10
1	A	161	SER	10
1	A	91	GLY	9
1	A	96	PRO	9
1	A	124	ASP	9
1	A	169	ALA	9
1	A	179	ASN	9
1	A	52	GLY	9
1	A	54	ALA	9
1	A	171	ASP	9
1	A	40	ALA	9
1	A	77	LEU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	153	LEU	9
1	A	183	ARG	9
1	A	158	GLU	8
1	A	89	GLU	8
1	A	123	GLY	7
1	A	139	ILE	7
1	A	85	PHE	7
1	A	131	GLY	7
1	A	76	SER	7
1	A	104	PRO	7
1	A	93	CYS	7
1	A	189	LEU	7
1	A	71	HIS	6
1	A	103	GLY	5
1	A	44	HIS	5
1	A	147	LEU	5
1	A	50	ARG	5
1	A	146	SER	5
1	A	160	GLY	4
1	A	181	GLY	4
1	A	184	ILE	4
1	A	61	LYS	4
1	A	128	LEU	4
1	A	105	PHE	4
1	A	42	GLY	4
1	A	63	SER	4
1	A	55	VAL	3
1	A	187	GLY	3
1	A	145	THR	3
1	A	137	ASP	3
1	A	41	PHE	2
1	A	99	GLU	2
1	A	51	GLU	2
1	A	79	PRO	2
1	A	134	GLY	2
1	A	166	HIS	2
1	A	46	GLN	2
1	A	72	ILE	2
1	A	154	ASN	2
1	A	167	GLU	2
1	A	81	ALA	2
1	A	127	ASN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	136	VAL	1
1	A	45	VAL	1
1	A	132	ALA	1
1	A	156	LEU	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	97/130 (75%)	59±5 (61±5%)	38±5 (39±5%)	0 6
All	All	2910/3900 (75%)	1775 (61%)	1135 (39%)	0 6

All 91 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	61	LYS	30
1	A	65	ASP	26
1	A	68	LEU	25
1	A	136	VAL	24
1	A	130	VAL	24
1	A	83	LEU	23
1	A	139	ILE	23
1	A	167	GLU	23
1	A	184	ILE	23
1	A	155	ILE	22
1	A	47	LEU	21
1	A	153	LEU	21
1	A	78	ARG	20
1	A	90	LYS	20
1	A	125	LEU	20
1	A	156	LEU	20
1	A	70	ILE	19
1	A	86	HIS	19
1	A	147	LEU	19
1	A	186	CYS	19
1	A	60	ILE	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	140	MET	18
1	A	46	GLN	18
1	A	73	SER	18
1	A	50	ARG	17
1	A	49	ASN	16
1	A	77	LEU	16
1	A	135	LYS	16
1	A	158	GLU	16
1	A	183	ARG	16
1	A	129	GLU	15
1	A	133	ASP	15
1	A	152	LYS	14
1	A	62	GLU	14
1	A	72	ILE	13
1	A	146	SER	13
1	A	190	LEU	13
1	A	71	HIS	13
1	A	76	SER	13
1	A	165	ILE	13
1	A	69	ASP	12
1	A	87	ILE	12
1	A	138	VAL	12
1	A	161	SER	12
1	A	99	GLU	12
1	A	128	LEU	12
1	A	88	TYR	12
1	A	53	LYS	12
1	A	124	ASP	11
1	A	168	GLN	10
1	A	75	ASN	10
1	A	100	SER	10
1	A	97	ASP	10
1	A	185	VAL	10
1	A	170	ASP	10
1	A	92	SER	9
1	A	159	ASP	9
1	A	66	GLU	9
1	A	63	SER	9
1	A	89	GLU	9
1	A	157	ASP	9
1	A	64	ASP	9
1	A	164	ILE	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	44	HIS	9
1	A	57	PHE	8
1	A	43	HIS	8
1	A	45	VAL	8
1	A	171	ASP	8
1	A	137	ASP	8
1	A	189	LEU	8
1	A	48	VAL	7
1	A	166	HIS	7
1	A	93	CYS	7
1	A	85	PHE	7
1	A	180	SER	6
1	A	51	GLU	6
1	A	105	PHE	6
1	A	141	ASN	5
1	A	145	THR	5
1	A	58	ILE	5
1	A	55	VAL	4
1	A	144	ASP	4
1	A	94	VAL	4
1	A	41	PHE	4
1	A	179	ASN	4
1	A	82	SER	3
1	A	59	GLU	2
1	A	163	PHE	2
1	A	98	PHE	2
1	A	95	ARG	2
1	A	154	ASN	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