



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:54 PM UTC

PDB ID : 1VHP / pdb_00001vhp
Title : VH-P8, NMR
Authors : Riechmann, L.
Deposited on : 1996-04-16

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

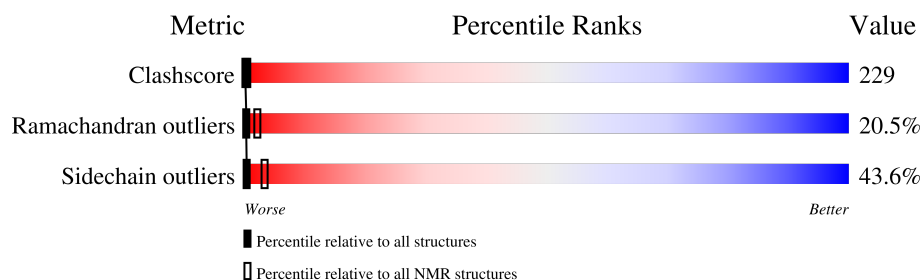
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	117	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 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:2-A:115 (114)	0.73	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 890 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called VH-P8.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
1	A	117	Total	C	N	O	S	0
			890	557	153	176	4	

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

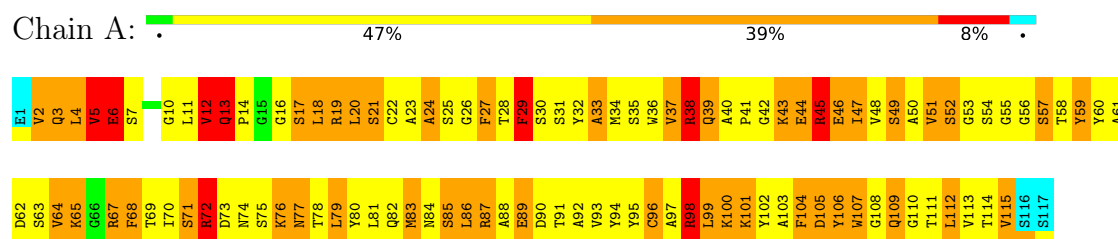
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	5	VAL	LEU	conflict	GB 8489277
A	44	GLU	GLY	conflict	GB 8489277
A	45	ARG	LEU	conflict	GB 8489277
A	47	ILE	TRP	conflict	GB 8489277
A	51	VAL	ILE	conflict	GB 8489277
A	98	ARG	GLU	conflict	GB 8489277
A	99	LEU	ASP	conflict	GB 8489277
A	100	LYS	PRO	conflict	GB 8489277
A	102	TYR	ILE	conflict	GB 8489277
A	103	ALA	ARG	conflict	GB 8489277
A	?	-	GLY	deletion	GB 8489277
A	?	-	TYR	deletion	GB 8489277

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: VH-P8

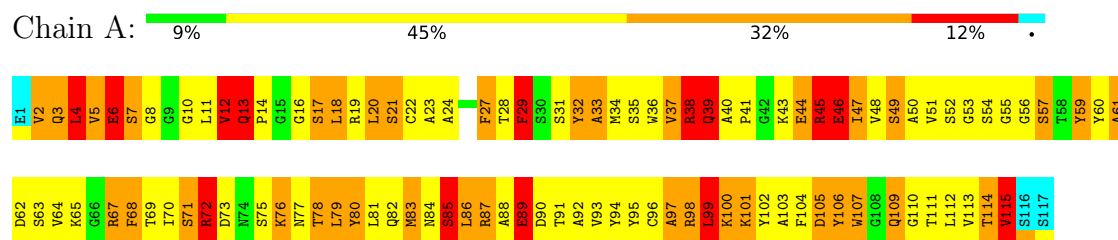


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

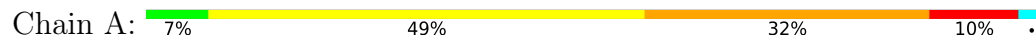
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

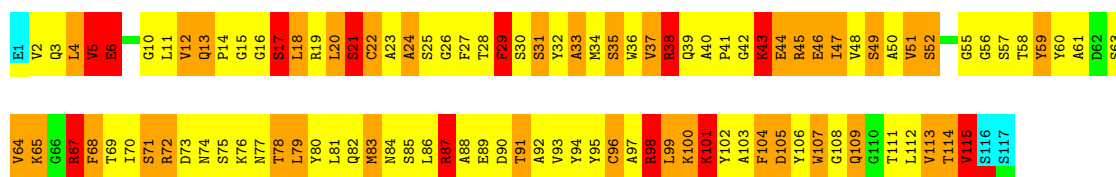
- Molecule 1: VH-P8



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: VH-P8

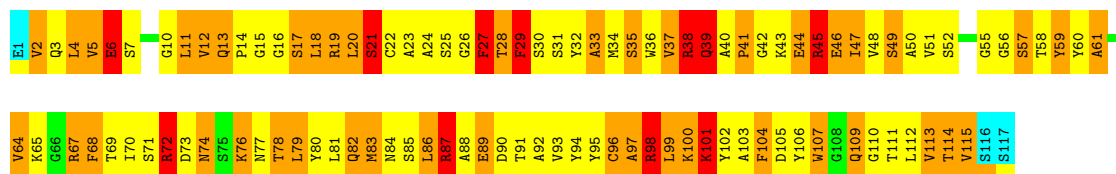




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: VH-P8

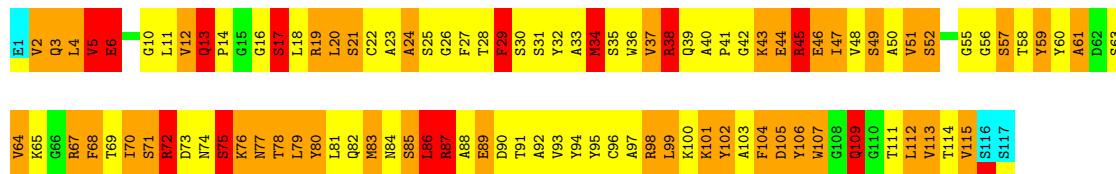
Chain A: 8% 44% 37% 9% .



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: VH-P8

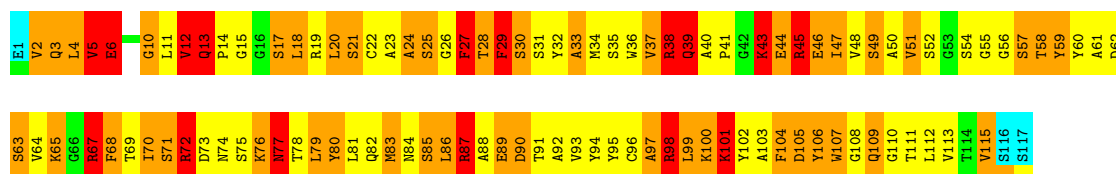
Chain A: 9% 41% 37% 11% .



4.2.5 Score per residue for model 5

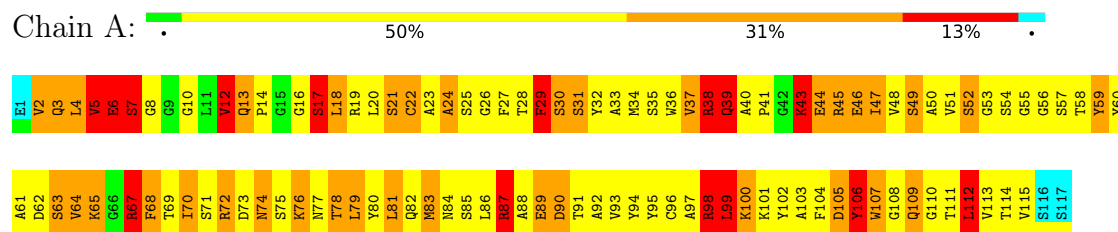
- Molecule 1: VH-P8

Chain A: 7% 39% 38% 14% .



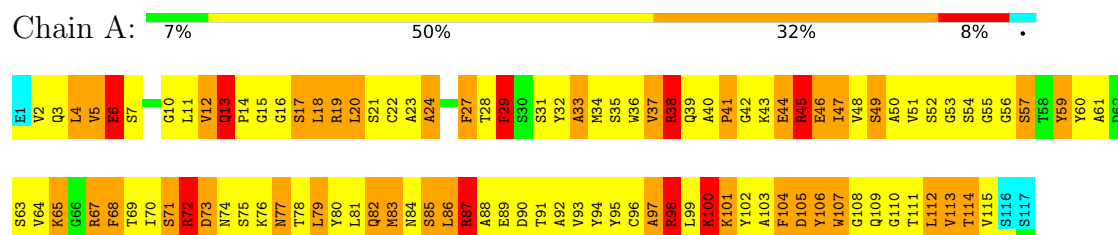
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: VH-P8



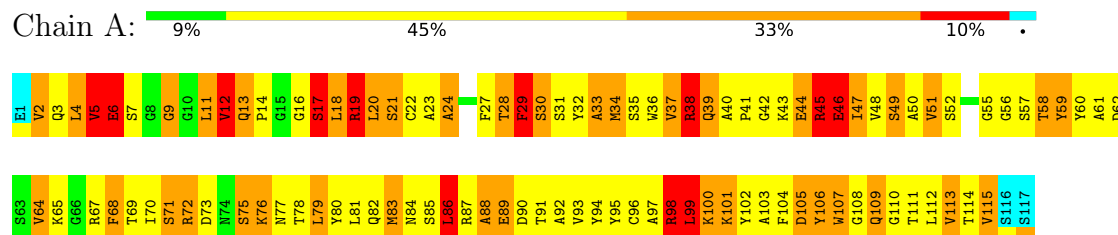
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: VH-P8



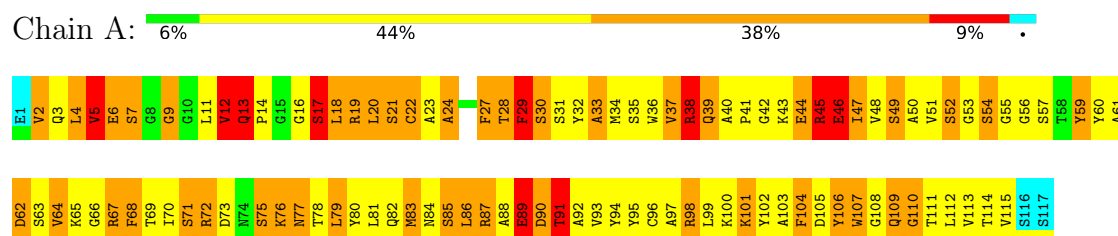
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: VH-P8



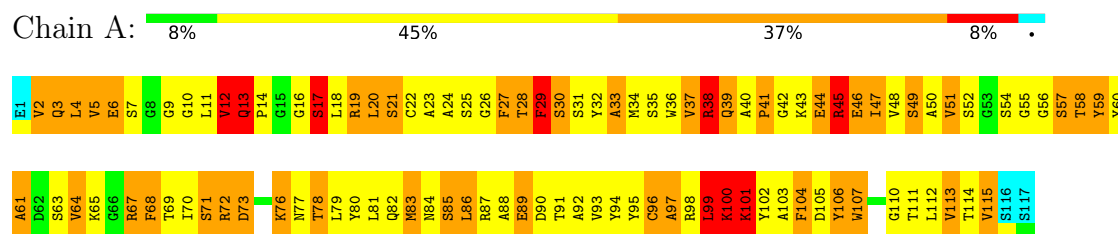
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: VH-P8



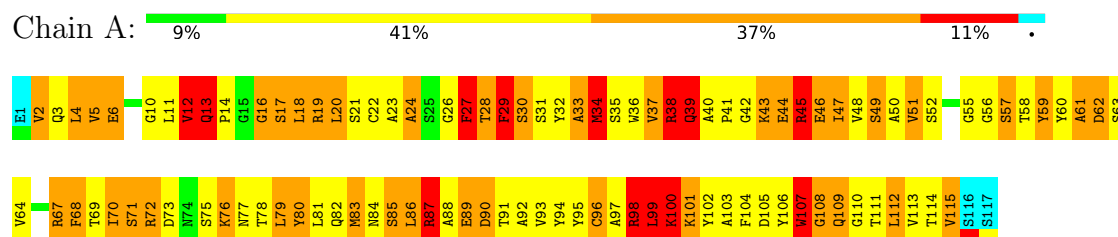
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: VH-P8



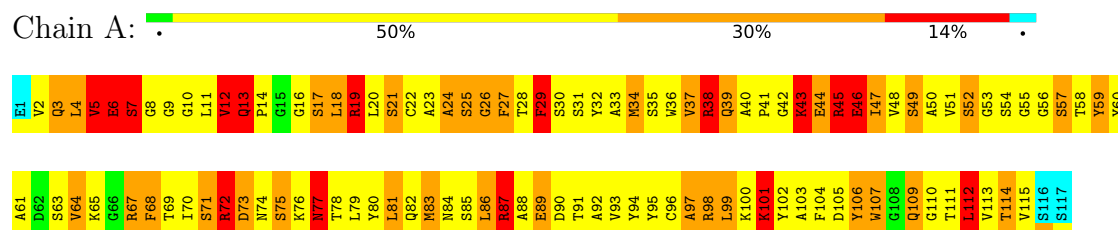
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: VH-P8



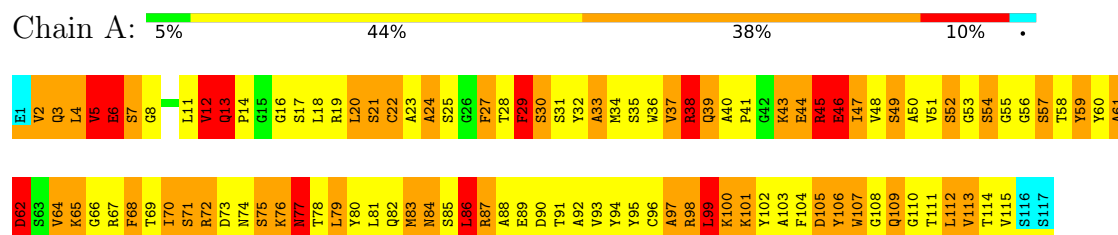
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: VH-P8



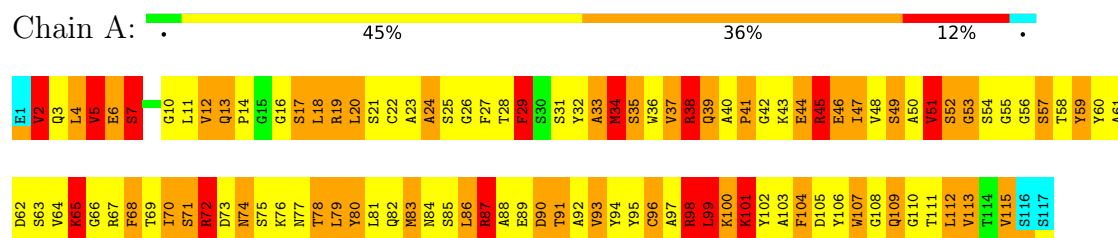
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: VH-P8



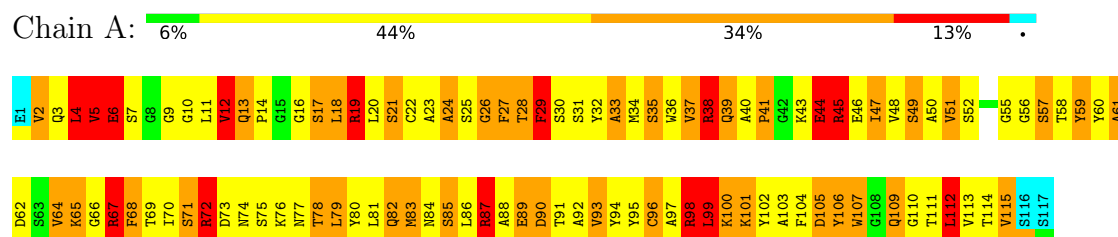
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: VH-P8



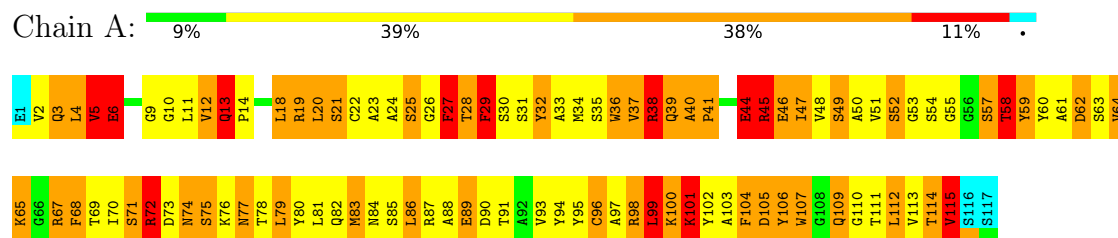
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: VH-P8



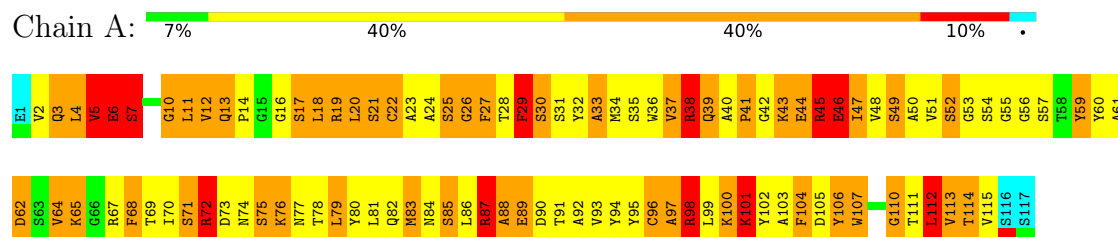
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: VH-P8



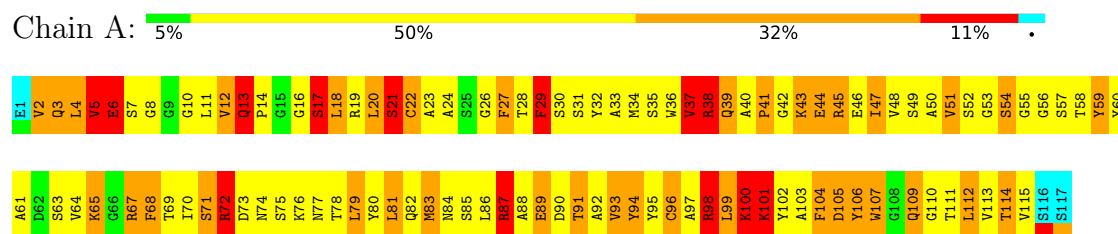
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: VH-P8



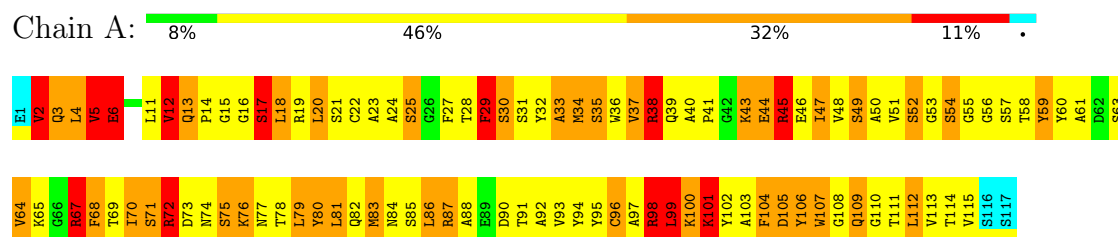
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: VH-P8



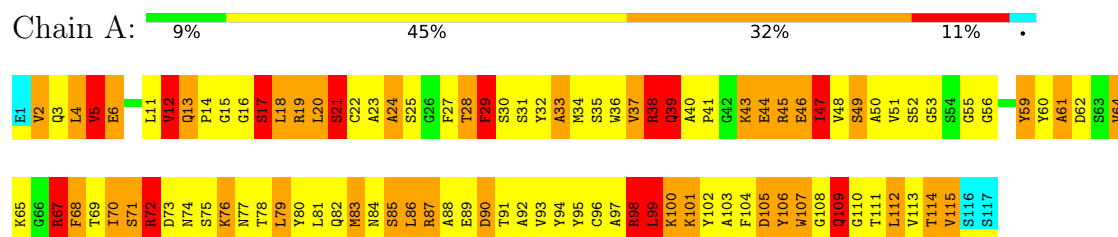
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: VH-P8



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: VH-P8



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.42±0.01	0±0/886 (0.0± 0.0%)	1.28±0.02	2±1/1198 (0.2± 0.1%)
All	All	1.42	3/17720 (0.0%)	1.28	38/23960 (0.2%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	6.2±1.0
All	All	0	124

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	10	GLY	N-CA	5.70	1.49	1.44	5	2
1	A	37	VAL	N-CA	5.34	1.53	1.46	18	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	104	PHE	CA-CB-CG	-6.40	107.40	113.80	9	3
1	A	29	PHE	CA-CB-CG	-6.40	107.40	113.80	16	14
1	A	42	GLY	N-CA-C	-5.68	108.10	114.40	3	4
1	A	43	LYS	N-CA-C	-5.61	106.32	112.72	4	8
1	A	15	GLY	N-CA-C	-5.54	107.35	115.72	3	6
1	A	27	PHE	CA-CB-CG	-5.16	108.64	113.80	13	1
1	A	32	TYR	N-CA-C	-5.03	107.18	113.72	16	1
1	A	61	ALA	CB-CA-C	-5.02	109.27	115.89	1	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	38	ARG	Sidechain	20
1	A	19	ARG	Sidechain	19
1	A	67	ARG	Sidechain	19
1	A	45	ARG	Sidechain	17
1	A	72	ARG	Sidechain	17
1	A	87	ARG	Sidechain	16
1	A	98	ARG	Sidechain	16

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	868	0	846	392±14
All	All	17360	0	16920	7847

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 229.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:VAL:HG11	1:A:48:VAL:HG23	1.14	1.15	12	19
1:A:4:LEU:HD13	1:A:107:TRP:CD2	1.12	1.80	1	9
1:A:24:ALA:HB3	1:A:29:PHE:CE2	1.09	1.80	10	20
1:A:34:MET:HE2	1:A:79:LEU:HD11	1.08	1.25	12	5
1:A:48:VAL:HG21	1:A:83:MET:HE2	1.06	1.23	18	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:83:MET:HE3	1.06	1.14	9	6
1:A:20:LEU:HD13	1:A:83:MET:HE3	1.05	1.07	4	9
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG21	1.05	1.06	9	3
1:A:61:ALA:HB3	1:A:64:VAL:HG22	1.05	1.27	18	5
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CZ	1.04	1.88	15	14
1:A:64:VAL:HG11	1:A:68:PHE:CD1	1.04	1.87	5	16
1:A:37:VAL:HG13	1:A:94:TYR:CG	1.03	1.88	12	19
1:A:12:VAL:HG11	1:A:18:LEU:HD22	1.03	1.13	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:VAL:HG21	1:A:94:TYR:CE2	1.03	1.87	17	6
1:A:18:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD11	1.03	1.82	14	3
1:A:34:MET:CE	1:A:79:LEU:HD11	1.01	1.84	15	18
1:A:64:VAL:HG11	1:A:68:PHE:CE1	1.01	1.89	14	18
1:A:4:LEU:HD22	1:A:107:TRP:CZ2	1.01	1.90	19	9
1:A:37:VAL:HG11	1:A:48:VAL:CG2	1.01	1.85	20	14
1:A:98:ARG:CZ	1:A:103:ALA:HB1	1.00	1.86	1	9
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:HD13	1.00	1.79	20	11
1:A:2:VAL:HG13	1:A:27:PHE:CD2	0.99	1.92	7	4
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HD13	0.99	1.00	2	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:20:LEU:HD11	0.98	1.88	16	3
1:A:2:VAL:HG13	1:A:27:PHE:CD1	0.98	1.93	10	4
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD13	0.98	1.89	2	1
1:A:61:ALA:HB3	1:A:64:VAL:CG2	0.97	1.89	18	12
1:A:34:MET:HE3	1:A:79:LEU:HD11	0.96	1.35	15	9
1:A:20:LEU:CD2	1:A:83:MET:HE3	0.96	1.90	14	6
1:A:94:TYR:O	1:A:111:THR:HG22	0.96	1.61	2	7
1:A:18:LEU:HD23	1:A:20:LEU:HD11	0.96	0.98	14	2
1:A:20:LEU:HD23	1:A:83:MET:CE	0.96	1.91	10	6
1:A:12:VAL:HG11	1:A:18:LEU:HD12	0.96	1.33	9	2
1:A:20:LEU:HD13	1:A:83:MET:CE	0.96	1.90	1	9
1:A:40:ALA:HB3	1:A:44:GLU:O	0.95	1.62	14	15
1:A:70:ILE:HD11	1:A:79:LEU:HD12	0.95	1.39	6	9
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HD23	0.95	1.37	16	3
1:A:48:VAL:HG21	1:A:94:TYR:CZ	0.95	1.96	19	2
1:A:37:VAL:HG21	1:A:48:VAL:HB	0.95	1.39	17	19
1:A:98:ARG:C	1:A:99:LEU:HD13	0.95	1.86	5	3
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:NH1	0.95	1.77	17	4
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:HD23	0.94	1.61	16	3
1:A:18:LEU:CG	1:A:113:VAL:HG11	0.94	1.90	2	3
1:A:91:THR:HG23	1:A:113:VAL:O	0.94	1.62	10	9
1:A:18:LEU:HD12	1:A:113:VAL:HG11	0.94	1.36	4	1
1:A:94:TYR:CE2	1:A:113:VAL:HG21	0.94	1.97	14	5
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG12	0.94	1.91	15	3
1:A:5:VAL:N	1:A:23:ALA:HB3	0.94	1.76	3	18
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:CD1	0.94	1.92	2	4
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG21	0.94	1.93	9	3
1:A:20:LEU:HD22	1:A:36:TRP:CH2	0.94	1.97	6	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:83:MET:HE3	0.94	1.93	1	9
1:A:24:ALA:HB3	1:A:29:PHE:CD2	0.93	1.97	17	20
1:A:40:ALA:HB1	1:A:41:PRO:HD2	0.93	1.38	20	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:VAL:HG12	1:A:83:MET:HE2	0.93	1.40	17	1
1:A:12:VAL:HG13	1:A:115:VAL:HG13	0.93	1.38	3	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:VAL:HG12	0.93	1.34	17	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG11	0.92	1.93	4	1
1:A:12:VAL:HG11	1:A:17:SER:O	0.92	1.65	10	3
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:VAL:HG11	0.92	1.40	2	5
1:A:34:MET:HE1	1:A:79:LEU:HD11	0.92	1.38	14	9
1:A:12:VAL:O	1:A:115:VAL:HG12	0.92	1.65	11	16
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HD12	0.92	1.42	14	4
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:HG23	0.92	1.65	9	8
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:HD11	0.92	1.64	8	2
1:A:2:VAL:HG12	1:A:27:PHE:CD2	0.92	1.99	9	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD22	0.91	1.96	20	3
1:A:37:VAL:HG23	1:A:94:TYR:CD2	0.91	1.99	18	1
1:A:52:SER:OG	1:A:99:LEU:HD13	0.91	1.66	9	2
1:A:2:VAL:HG11	1:A:106:TYR:CD2	0.91	2.00	12	10
1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:VAL:N	0.90	1.80	5	19
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:HD11	0.90	1.42	9	1
1:A:36:TRP:HB2	1:A:96:CYS:HA	0.90	1.44	20	20
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:HD22	0.90	1.64	18	6
1:A:48:VAL:HG13	1:A:68:PHE:CE2	0.90	2.02	16	19
1:A:22:CYS:SG	1:A:34:MET:HE1	0.90	2.06	8	5
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:HD13	0.89	1.92	8	5
1:A:4:LEU:HD13	1:A:4:LEU:N	0.89	1.83	5	11
1:A:20:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG12	0.89	1.42	20	3
1:A:18:LEU:HD22	1:A:113:VAL:HG12	0.89	1.40	7	4
1:A:12:VAL:HG22	1:A:18:LEU:CD1	0.89	1.96	14	4
1:A:40:ALA:HA	1:A:93:VAL:HG23	0.88	1.44	18	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:HG12	0.88	1.45	15	3
1:A:35:SER:HB2	1:A:99:LEU:HD11	0.88	1.45	5	3
1:A:3:GLN:O	1:A:4:LEU:HD23	0.88	1.68	10	9
1:A:61:ALA:HB3	1:A:64:VAL:HG23	0.88	1.46	13	10
1:A:61:ALA:HB2	1:A:68:PHE:CE2	0.88	2.04	8	18
1:A:20:LEU:HD23	1:A:36:TRP:CH2	0.88	2.04	15	1
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD22	0.87	1.85	7	6
1:A:33:ALA:HB2	1:A:53:GLY:O	0.87	1.69	12	3
1:A:18:LEU:HD23	1:A:20:LEU:CD1	0.87	1.94	14	2
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CD2	0.87	2.04	7	5
1:A:11:LEU:O	1:A:12:VAL:HG13	0.87	1.70	9	7
1:A:100:LYS:CD	1:A:103:ALA:HB3	0.87	1.99	1	7
1:A:70:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD21	0.86	1.44	18	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:VAL:HG23	1:A:115:VAL:CA	0.86	2.01	17	5
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:HE2	0.86	1.46	1	17
1:A:37:VAL:HG13	1:A:94:TYR:CD1	0.86	2.04	7	19
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD22	0.86	1.83	8	6
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:CG	0.86	2.01	11	1
1:A:10:GLY:O	1:A:18:LEU:HD11	0.86	1.70	6	4
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:SER:N	0.86	1.85	6	2
1:A:29:PHE:HB3	1:A:79:LEU:HD22	0.86	1.48	13	18
1:A:20:LEU:HD12	1:A:81:LEU:CB	0.86	2.01	17	1
1:A:12:VAL:HG23	1:A:115:VAL:HA	0.86	1.48	2	4
1:A:37:VAL:HG12	1:A:38:ARG:H	0.85	1.30	20	19
1:A:2:VAL:HG12	1:A:4:LEU:CD2	0.85	2.01	17	3
1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:LEU:HD11	0.85	1.49	13	7
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:HD22	0.85	1.86	5	2
1:A:48:VAL:HG21	1:A:83:MET:CE	0.84	2.01	18	16
1:A:20:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG13	0.84	1.47	10	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:83:MET:SD	0.84	2.13	8	3
1:A:52:SER:CB	1:A:99:LEU:HD22	0.84	2.03	3	2
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:HG13	0.84	1.72	16	8
1:A:33:ALA:HB1	1:A:52:SER:HA	0.83	1.50	5	11
1:A:87:ARG:O	1:A:115:VAL:HG11	0.83	1.73	12	7
1:A:86:LEU:CB	1:A:115:VAL:HG11	0.83	2.03	10	2
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:HG23	0.83	1.72	20	19
1:A:34:MET:CE	1:A:79:LEU:HD22	0.83	2.04	3	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CG1	0.83	2.04	10	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:94:TYR:CB	0.82	2.05	2	16
1:A:92:ALA:HB3	1:A:113:VAL:CG2	0.82	2.02	17	6
1:A:99:LEU:HD22	1:A:99:LEU:H	0.82	1.35	5	1
1:A:52:SER:HB2	1:A:99:LEU:HD21	0.82	1.51	1	4
1:A:93:VAL:HG13	1:A:112:LEU:CA	0.82	2.05	14	1
1:A:37:VAL:HG22	1:A:38:ARG:H	0.82	1.33	18	1
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CG	0.82	2.10	11	5
1:A:57:SER:O	1:A:58:THR:HG23	0.82	1.73	16	11
1:A:14:PRO:HD3	1:A:88:ALA:HB2	0.82	1.49	4	15
1:A:99:LEU:H	1:A:99:LEU:HD22	0.82	1.34	12	1
1:A:34:MET:N	1:A:99:LEU:HD11	0.81	1.90	2	5
1:A:35:SER:CB	1:A:99:LEU:HD11	0.81	2.05	8	3
1:A:52:SER:HB3	1:A:99:LEU:HD22	0.81	1.51	3	1
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CE1	0.81	2.10	15	4
1:A:2:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD11	0.81	1.49	6	3
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG11	0.81	2.03	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:CB	0.81	2.06	2	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:O	0.81	1.74	2	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:27:PHE:CD1	0.81	2.10	13	3
1:A:34:MET:HE3	1:A:79:LEU:CD1	0.81	2.05	8	9
1:A:111:THR:HG23	1:A:111:THR:O	0.81	1.74	14	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG13	0.81	2.06	14	2
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:SD	0.81	2.15	20	17
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:HG23	0.80	1.77	19	20
1:A:12:VAL:HG11	1:A:18:LEU:CD1	0.80	2.07	9	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:20:LEU:HD11	0.80	1.54	16	2
1:A:12:VAL:HG12	1:A:18:LEU:HD22	0.80	1.51	4	1
1:A:12:VAL:O	1:A:115:VAL:HG23	0.80	1.77	7	2
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:HB3	0.79	1.53	2	4
1:A:48:VAL:HG12	1:A:83:MET:CE	0.79	2.07	17	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:83:MET:CG	0.79	2.07	19	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:83:MET:O	0.79	1.76	4	3
1:A:37:VAL:HA	1:A:94:TYR:HB3	0.79	1.55	7	19
1:A:22:CYS:HB2	1:A:79:LEU:HD21	0.79	1.54	2	5
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD23	0.79	1.93	15	14
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:LEU:HD21	0.79	1.55	16	6
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:N	0.79	1.92	2	1
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:HG11	0.79	2.02	11	5
1:A:20:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HB3	0.79	1.53	17	1
1:A:100:LYS:HG3	1:A:103:ALA:HB3	0.78	1.53	7	5
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG22	0.78	1.55	7	1
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:HB2	0.78	1.78	19	19
1:A:98:ARG:NE	1:A:103:ALA:HB1	0.78	1.93	18	2
1:A:36:TRP:C	1:A:37:VAL:HG12	0.78	2.03	18	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG22	0.78	1.53	5	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:23:ALA:CB	0.78	2.07	16	4
1:A:20:LEU:HD12	1:A:20:LEU:N	0.78	1.94	3	8
1:A:36:TRP:CZ2	1:A:81:LEU:HD12	0.78	2.14	17	18
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG21	0.78	2.08	4	1
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:HB2	0.78	1.56	3	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:107:TRP:CE2	0.77	2.14	17	9
1:A:29:PHE:HB3	1:A:79:LEU:HD12	0.77	1.54	2	1
1:A:52:SER:OG	1:A:99:LEU:HD22	0.77	1.79	2	1
1:A:98:ARG:NH1	1:A:103:ALA:HB1	0.77	1.94	13	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:CG2	0.77	2.01	9	2
1:A:12:VAL:HG22	1:A:18:LEU:HD12	0.77	1.56	1	4
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:CE	0.77	2.08	1	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:VAL:CG1	1:A:4:LEU:HD11	0.77	2.08	2	3
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:HD12	0.77	1.95	3	10
1:A:99:LEU:HD13	1:A:99:LEU:N	0.77	1.94	12	2
1:A:92:ALA:HB3	1:A:113:VAL:HG21	0.77	1.55	17	2
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:HD23	0.77	1.95	17	4
1:A:2:VAL:CG1	1:A:4:LEU:HD21	0.76	2.10	16	5
1:A:47:ILE:HD13	1:A:49:SER:N	0.76	1.95	20	20
1:A:94:TYR:OH	1:A:113:VAL:HG21	0.76	1.81	7	4
1:A:10:GLY:O	1:A:18:LEU:HD21	0.76	1.80	17	4
1:A:35:SER:HB2	1:A:99:LEU:HD23	0.76	1.54	3	2
1:A:80:TYR:C	1:A:81:LEU:HD23	0.76	2.06	19	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:HG13	0.76	1.54	14	2
1:A:113:VAL:HG23	1:A:113:VAL:O	0.76	1.81	18	5
1:A:20:LEU:HD21	1:A:113:VAL:CG1	0.76	2.11	3	5
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD22	0.76	1.58	4	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:86:LEU:HD22	0.76	1.56	5	1
1:A:2:VAL:HG22	1:A:4:LEU:CD2	0.75	2.11	12	2
1:A:83:MET:HE1	1:A:94:TYR:CE2	0.75	2.15	7	15
1:A:4:LEU:HD22	1:A:4:LEU:N	0.75	1.97	2	4
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG13	0.75	2.10	5	2
1:A:86:LEU:HB3	1:A:115:VAL:HG11	0.75	1.57	10	3
1:A:37:VAL:HB	1:A:48:VAL:HG12	0.75	1.57	18	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:27:PHE:CD2	0.75	2.15	11	4
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:HG13	0.75	1.79	16	14
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:CD1	0.75	2.11	9	2
1:A:93:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HA	0.75	1.56	14	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HB	0.75	1.58	19	2
1:A:27:PHE:O	1:A:28:THR:HG23	0.75	1.81	20	1
1:A:2:VAL:HG11	1:A:98:ARG:NH1	0.75	1.97	3	1
1:A:51:VAL:HG11	1:A:72:ARG:NH1	0.75	1.95	9	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:20:LEU:HD21	0.75	1.58	10	6
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:CG	0.74	2.12	20	18
1:A:29:PHE:CZ	1:A:78:THR:N	0.74	2.56	13	20
1:A:2:VAL:HG22	1:A:4:LEU:CD1	0.74	2.12	6	5
1:A:9:GLY:N	1:A:20:LEU:HD12	0.74	1.97	9	4
1:A:72:ARG:HA	1:A:79:LEU:CB	0.74	2.12	17	19
1:A:34:MET:HE1	1:A:79:LEU:HD22	0.74	1.58	3	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:NH2	0.74	1.98	3	1
1:A:80:TYR:O	1:A:81:LEU:HD23	0.74	1.82	19	5
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD12	0.74	2.12	9	4
1:A:2:VAL:HG11	1:A:106:TYR:OH	0.74	1.83	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:HG	0.74	1.60	11	1
1:A:4:LEU:C	1:A:5:VAL:HG22	0.74	2.08	15	10
1:A:34:MET:CA	1:A:99:LEU:HD11	0.74	2.12	19	4
1:A:18:LEU:HD22	1:A:113:VAL:HG22	0.73	1.60	14	2
1:A:83:MET:O	1:A:86:LEU:HD11	0.73	1.83	8	2
1:A:36:TRP:C	1:A:37:VAL:HG23	0.73	2.08	20	18
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:SER:H	0.73	1.40	6	2
1:A:99:LEU:HD22	1:A:99:LEU:N	0.73	1.96	12	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:THR:N	0.73	2.56	16	20
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CE2	0.73	2.17	2	11
1:A:18:LEU:HD21	1:A:83:MET:CG	0.73	2.13	4	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:83:MET:CB	0.73	2.71	10	20
1:A:20:LEU:HD22	1:A:20:LEU:H	0.73	1.43	9	6
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:CG1	0.73	2.12	14	5
1:A:37:VAL:CG1	1:A:48:VAL:HG23	0.73	2.12	19	18
1:A:24:ALA:HB3	1:A:29:PHE:HE2	0.73	1.42	3	16
1:A:12:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD13	0.73	1.58	6	1
1:A:37:VAL:CG1	1:A:47:ILE:HG12	0.73	2.13	18	1
1:A:61:ALA:CB	1:A:64:VAL:HG23	0.73	2.13	12	9
1:A:100:LYS:CG	1:A:103:ALA:HB3	0.73	2.13	7	7
1:A:5:VAL:HG22	1:A:6:GLU:OE2	0.73	1.84	5	1
1:A:34:MET:HE2	1:A:79:LEU:CD1	0.73	2.12	12	2
1:A:37:VAL:CG1	1:A:94:TYR:CD1	0.72	2.72	9	16
1:A:34:MET:SD	1:A:79:LEU:HD11	0.72	2.24	15	6
1:A:4:LEU:HB2	1:A:107:TRP:CZ3	0.72	2.19	12	20
1:A:93:VAL:HG13	1:A:111:THR:O	0.72	1.83	19	17
1:A:48:VAL:HG21	1:A:83:MET:SD	0.72	2.24	4	15
1:A:100:LYS:HD2	1:A:103:ALA:HB3	0.72	1.59	13	3
1:A:115:VAL:HG13	1:A:115:VAL:O	0.72	1.82	7	1
1:A:12:VAL:HG12	1:A:17:SER:H	0.72	1.43	19	3
1:A:47:ILE:HD13	1:A:48:VAL:N	0.72	2.00	18	20
1:A:59:TYR:C	1:A:60:TYR:CD1	0.72	2.68	9	20
1:A:35:SER:CB	1:A:99:LEU:HD23	0.72	2.15	14	3
1:A:96:CYS:SG	1:A:107:TRP:CE3	0.72	2.83	4	3
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:HG23	0.72	1.85	14	2
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:HG12	0.72	1.85	18	1
1:A:10:GLY:O	1:A:113:VAL:HG12	0.72	1.84	2	4
1:A:51:VAL:HG13	1:A:70:ILE:HG12	0.72	1.59	3	3
1:A:20:LEU:HD12	1:A:20:LEU:H	0.71	1.46	11	8
1:A:51:VAL:HG22	1:A:55:GLY:HA2	0.71	1.61	2	7
1:A:4:LEU:H	1:A:4:LEU:HD22	0.71	1.44	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:C	1:A:12:VAL:HG22	0.71	2.10	10	6
1:A:88:ALA:CA	1:A:115:VAL:HG11	0.71	2.14	11	4
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:VAL:HG21	0.71	1.61	13	2
1:A:70:ILE:HD11	1:A:79:LEU:CD2	0.71	2.15	3	1
1:A:34:MET:HE2	1:A:79:LEU:HD21	0.71	1.63	16	2
1:A:47:ILE:HD13	1:A:48:VAL:H	0.70	1.46	18	13
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:HG11	0.70	2.00	11	2
1:A:68:PHE:CZ	1:A:83:MET:HB2	0.70	2.21	18	18
1:A:26:GLY:O	1:A:28:THR:HG23	0.70	1.86	12	4
1:A:70:ILE:HA	1:A:81:LEU:HD22	0.70	1.60	19	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:CB	0.70	2.75	17	17
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HB	0.70	1.62	20	3
1:A:47:ILE:HD12	1:A:59:TYR:CD2	0.70	2.22	18	14
1:A:29:PHE:CD1	1:A:29:PHE:N	0.70	2.60	16	20
1:A:12:VAL:CG2	1:A:86:LEU:HD22	0.70	2.17	5	1
1:A:35:SER:HA	1:A:50:ALA:CB	0.70	2.16	20	20
1:A:4:LEU:HD22	1:A:4:LEU:H	0.70	1.46	8	3
1:A:94:TYR:CE1	1:A:113:VAL:HG13	0.70	2.22	18	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG13	0.69	1.63	2	4
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:HG23	0.69	1.86	3	3
1:A:98:ARG:HD2	1:A:103:ALA:HB1	0.69	1.64	7	1
1:A:37:VAL:HG12	1:A:38:ARG:N	0.69	2.02	17	19
1:A:48:VAL:CG1	1:A:81:LEU:HD13	0.69	2.17	15	16
1:A:70:ILE:HD11	1:A:79:LEU:HD23	0.69	1.63	3	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:79:LEU:HD21	0.69	1.62	8	4
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:CD2	0.69	2.17	16	3
1:A:102:TYR:CE1	1:A:103:ALA:HB2	0.69	2.22	9	1
1:A:28:THR:C	1:A:29:PHE:CG	0.69	2.70	20	20
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CD1	0.69	2.56	11	12
1:A:34:MET:HE2	1:A:96:CYS:SG	0.69	2.27	4	1
1:A:35:SER:CB	1:A:50:ALA:HB1	0.69	2.16	6	11
1:A:111:THR:HG23	1:A:112:LEU:N	0.69	2.03	15	19
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CZ2	0.69	2.23	8	11
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:H	0.69	1.44	2	1
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:HD13	0.69	1.88	17	1
1:A:2:VAL:HG12	1:A:4:LEU:HD21	0.69	1.64	17	3
1:A:2:VAL:HG12	1:A:4:LEU:CD1	0.69	2.18	14	2
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:CD2	0.69	2.23	18	4
1:A:2:VAL:CG2	1:A:27:PHE:CD2	0.68	2.77	12	7
1:A:29:PHE:CB	1:A:79:LEU:HD22	0.68	2.19	9	15
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:CG2	0.68	2.41	20	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:TYR:O	1:A:64:VAL:HG23	0.68	1.87	18	4
1:A:111:THR:O	1:A:111:THR:CG2	0.68	2.41	14	1
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:CG1	0.68	2.40	18	1
1:A:70:ILE:HA	1:A:81:LEU:CD2	0.68	2.17	18	20
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CD1	0.68	2.55	5	8
1:A:37:VAL:HG13	1:A:94:TYR:CD2	0.68	2.24	15	1
1:A:37:VAL:HG22	1:A:94:TYR:HB3	0.68	1.65	19	2
1:A:29:PHE:CD2	1:A:79:LEU:HD23	0.68	2.23	17	5
1:A:18:LEU:HD22	1:A:113:VAL:HG13	0.68	1.64	5	2
1:A:37:VAL:CG2	1:A:94:TYR:CD2	0.68	2.77	18	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:94:TYR:CZ	0.68	2.77	17	2
1:A:4:LEU:HD13	1:A:107:TRP:CG	0.68	2.24	3	9
1:A:33:ALA:HB3	1:A:100:LYS:HG2	0.68	1.64	13	3
1:A:37:VAL:HG13	1:A:94:TYR:HB3	0.68	1.66	2	13
1:A:18:LEU:HD13	1:A:83:MET:O	0.68	1.88	10	1
1:A:48:VAL:HG12	1:A:81:LEU:HD13	0.68	1.66	15	9
1:A:22:CYS:SG	1:A:36:TRP:CG	0.68	2.86	8	15
1:A:36:TRP:CZ2	1:A:81:LEU:CD1	0.67	2.77	6	18
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:HG22	0.67	1.90	15	8
1:A:2:VAL:CG2	1:A:27:PHE:CD1	0.67	2.76	19	4
1:A:21:SER:CB	1:A:79:LEU:O	0.67	2.42	3	20
1:A:35:SER:HB2	1:A:50:ALA:HB1	0.67	1.66	3	3
1:A:9:GLY:H	1:A:20:LEU:HD12	0.67	1.48	9	5
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD2	0.67	2.57	8	5
1:A:40:ALA:HB1	1:A:41:PRO:CD	0.67	2.17	20	18
1:A:64:VAL:CG1	1:A:68:PHE:CD1	0.67	2.78	2	16
1:A:94:TYR:CE2	1:A:113:VAL:CG2	0.67	2.77	5	6
1:A:32:TYR:O	1:A:33:ALA:HB2	0.67	1.90	17	6
1:A:4:LEU:CB	1:A:107:TRP:CZ3	0.67	2.78	12	20
1:A:36:TRP:CZ2	1:A:81:LEU:HG	0.67	2.24	15	20
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:HD21	0.67	2.14	17	3
1:A:35:SER:HA	1:A:50:ALA:HB1	0.67	1.63	17	18
1:A:22:CYS:CB	1:A:79:LEU:HD21	0.67	2.20	2	2
1:A:4:LEU:HD21	1:A:106:TYR:HB2	0.67	1.65	7	4
1:A:88:ALA:CA	1:A:115:VAL:HG22	0.67	2.20	7	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:HD12	0.67	1.67	8	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:112:LEU:O	0.67	1.89	15	1
1:A:37:VAL:HG22	1:A:38:ARG:N	0.67	2.03	18	1
1:A:37:VAL:HG11	1:A:48:VAL:H	0.67	1.50	18	1
1:A:22:CYS:SG	1:A:107:TRP:CZ3	0.67	2.88	18	5
1:A:20:LEU:HD22	1:A:36:TRP:HH2	0.67	1.46	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:HB2	1:A:115:VAL:HG11	0.67	1.67	8	2
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CD2	0.66	2.25	2	11
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:HG21	0.66	1.67	4	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG11	0.66	1.66	11	4
1:A:5:VAL:HG13	1:A:109:GLN:CB	0.66	2.20	9	2
1:A:12:VAL:HG23	1:A:115:VAL:N	0.66	2.03	17	2
1:A:32:TYR:N	1:A:32:TYR:CD1	0.66	2.62	1	19
1:A:83:MET:HE1	1:A:94:TYR:CD2	0.66	2.25	14	14
1:A:32:TYR:O	1:A:33:ALA:HB3	0.66	1.89	6	6
1:A:100:LYS:HB2	1:A:103:ALA:HB3	0.66	1.67	12	2
1:A:5:VAL:H	1:A:23:ALA:HB3	0.66	1.51	17	6
1:A:94:TYR:CE2	1:A:113:VAL:CG1	0.66	2.78	19	7
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD23	0.66	1.67	7	2
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:CB	0.66	2.21	8	6
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:HG22	0.66	2.15	4	4
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CD2	0.66	2.59	10	4
1:A:20:LEU:CD2	1:A:36:TRP:CH2	0.66	2.79	15	1
1:A:90:ASP:C	1:A:115:VAL:HG21	0.66	2.16	2	2
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:HD11	0.66	2.14	6	2
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:HD21	0.66	1.91	5	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:HH12	0.66	1.50	10	2
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:CD1	0.66	2.20	11	1
1:A:12:VAL:CG2	1:A:18:LEU:HD12	0.66	2.21	1	3
1:A:18:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG12	0.66	1.67	15	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:27:PHE:C	0.65	2.74	16	12
1:A:100:LYS:CE	1:A:103:ALA:HB3	0.65	2.21	11	3
1:A:2:VAL:HG11	1:A:106:TYR:CG	0.65	2.26	13	7
1:A:18:LEU:HD12	1:A:113:VAL:CG1	0.65	2.19	4	2
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG22	0.65	2.21	14	2
1:A:48:VAL:CG1	1:A:68:PHE:CE2	0.65	2.78	19	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:113:VAL:CG1	0.65	2.21	12	4
1:A:4:LEU:HD21	1:A:106:TYR:CE2	0.65	2.27	9	1
1:A:81:LEU:HB3	1:A:83:MET:SD	0.65	2.30	19	2
1:A:13:GLN:CB	1:A:14:PRO:HD2	0.65	2.22	8	17
1:A:18:LEU:HD22	1:A:20:LEU:HD11	0.65	1.66	7	1
1:A:12:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HG	0.65	1.66	18	1
1:A:2:VAL:HG12	1:A:4:LEU:HD11	0.65	1.68	7	5
1:A:47:ILE:HD12	1:A:59:TYR:HD2	0.65	1.51	18	1
1:A:13:GLN:CB	1:A:14:PRO:CD	0.65	2.74	8	15
1:A:64:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CG	0.65	2.80	11	4
1:A:93:VAL:C	1:A:94:TYR:CD1	0.65	2.75	18	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:CYS:O	1:A:97:ALA:HB2	0.65	1.91	10	11
1:A:99:LEU:HD22	1:A:99:LEU:C	0.65	2.17	18	2
1:A:4:LEU:CB	1:A:23:ALA:O	0.65	2.45	13	13
1:A:95:TYR:CE2	1:A:110:GLY:CA	0.65	2.79	13	17
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:HG12	0.65	2.07	3	1
1:A:52:SER:CB	1:A:99:LEU:HD13	0.65	2.22	9	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:70:ILE:C	0.65	2.17	19	1
1:A:40:ALA:HB2	1:A:45:ARG:HB2	0.65	1.68	20	1
1:A:104:PHE:N	1:A:106:TYR:CE2	0.64	2.65	14	7
1:A:22:CYS:CB	1:A:34:MET:HE1	0.64	2.22	18	4
1:A:5:VAL:HG12	1:A:108:GLY:O	0.64	1.92	8	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:HH22	0.64	1.50	3	2
1:A:86:LEU:HD23	1:A:90:ASP:CG	0.64	2.17	4	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:68:PHE:HE2	0.64	1.52	19	9
1:A:39:GLN:CB	1:A:95:TYR:CD1	0.64	2.79	14	2
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:CG1	0.64	2.76	16	2
1:A:35:SER:CB	1:A:99:LEU:HD21	0.64	2.22	19	1
1:A:52:SER:CB	1:A:99:LEU:HD21	0.64	2.22	20	5
1:A:18:LEU:CB	1:A:20:LEU:HD11	0.64	2.22	13	2
1:A:96:CYS:HB3	1:A:107:TRP:CE3	0.64	2.27	18	17
1:A:52:SER:OG	1:A:99:LEU:HD21	0.64	1.92	4	3
1:A:72:ARG:HA	1:A:79:LEU:HB2	0.64	1.69	17	7
1:A:93:VAL:HG12	1:A:95:TYR:CE1	0.64	2.28	3	9
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:H	0.64	1.52	4	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:H	0.64	1.51	15	8
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:HG23	0.64	2.18	5	1
1:A:2:VAL:HG11	1:A:98:ARG:HH12	0.64	1.52	7	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:98:ARG:NH2	0.64	2.66	7	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:THR:CA	0.64	2.81	3	20
1:A:12:VAL:HG11	1:A:17:SER:C	0.64	2.18	13	2
1:A:103:ALA:O	1:A:106:TYR:CE2	0.64	2.51	15	1
1:A:104:PHE:O	1:A:105:ASP:CB	0.63	2.46	4	19
1:A:84:ASN:O	1:A:85:SER:CB	0.63	2.44	4	17
1:A:37:VAL:HG12	1:A:46:GLU:O	0.63	1.93	7	17
1:A:2:VAL:CG1	1:A:27:PHE:CD1	0.63	2.79	14	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:83:MET:CB	0.63	2.81	18	3
1:A:48:VAL:HG13	1:A:49:SER:N	0.63	2.06	18	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CB	0.63	2.22	19	2
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:CB	0.63	2.46	11	9
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:CB	0.63	2.46	2	19
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CH2	0.63	2.28	8	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:CG	1:A:20:LEU:HD11	0.63	2.23	4	2
1:A:112:LEU:HD12	1:A:112:LEU:C	0.63	2.18	8	9
1:A:99:LEU:CB	1:A:104:PHE:CE2	0.63	2.81	7	1
1:A:98:ARG:CG	1:A:104:PHE:HA	0.63	2.23	11	3
1:A:12:VAL:HG11	1:A:18:LEU:CD2	0.63	2.02	20	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:98:ARG:NH1	0.63	2.67	15	7
1:A:12:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD13	0.63	2.24	4	1
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD12	0.63	2.18	10	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:112:LEU:N	0.63	2.09	14	1
1:A:88:ALA:CA	1:A:115:VAL:HG12	0.62	2.24	3	1
1:A:39:GLN:HB2	1:A:95:TYR:CD1	0.62	2.28	14	9
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:H	0.62	1.53	9	2
1:A:22:CYS:SG	1:A:36:TRP:CD2	0.62	2.92	14	14
1:A:28:THR:C	1:A:29:PHE:CD1	0.62	2.77	14	20
1:A:97:ALA:HA	1:A:107:TRP:CD1	0.62	2.29	5	13
1:A:69:THR:HG23	1:A:69:THR:O	0.62	1.94	10	15
1:A:56:GLY:O	1:A:58:THR:HG23	0.62	1.94	3	1
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:CD1	0.62	2.29	19	2
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:CB	0.62	2.24	6	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:83:MET:HB3	0.62	2.29	19	14
1:A:98:ARG:O	1:A:104:PHE:CE1	0.62	2.53	13	15
1:A:27:PHE:CZ	1:A:98:ARG:NH1	0.62	2.66	2	5
1:A:29:PHE:HB3	1:A:79:LEU:HD13	0.62	1.71	3	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:81:LEU:CD2	0.62	2.20	18	4
1:A:80:TYR:N	1:A:80:TYR:CD1	0.62	2.65	14	16
1:A:27:PHE:CG	1:A:28:THR:N	0.62	2.67	20	4
1:A:12:VAL:HG13	1:A:12:VAL:O	0.62	1.93	3	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:79:LEU:HD13	0.62	2.24	3	1
1:A:39:GLN:CB	1:A:95:TYR:CE1	0.62	2.81	14	6
1:A:48:VAL:HG23	1:A:68:PHE:CE2	0.62	2.28	18	1
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:CB	0.62	2.46	18	20
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG12	0.62	1.71	3	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD21	0.62	2.24	5	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:79:LEU:CA	0.62	2.24	10	18
1:A:10:GLY:N	1:A:18:LEU:HD21	0.62	2.08	1	2
1:A:98:ARG:CD	1:A:103:ALA:HB1	0.62	2.23	7	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:107:TRP:NE1	0.62	2.68	9	1
1:A:2:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD23	0.62	1.71	12	2
1:A:47:ILE:CD1	1:A:49:SER:N	0.62	2.63	20	19
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:TYR:CZ	0.62	2.78	14	3
1:A:34:MET:HE3	1:A:79:LEU:CD2	0.62	2.23	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:HG	0.62	1.71	13	1
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:HG	0.62	2.20	19	8
1:A:27:PHE:O	1:A:27:PHE:CD1	0.62	2.53	1	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:CG1	0.62	2.77	12	3
1:A:104:PHE:O	1:A:106:TYR:CZ	0.62	2.53	19	8
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:CD	0.61	2.48	20	18
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:HB3	0.61	2.30	17	2
1:A:27:PHE:O	1:A:27:PHE:CD2	0.61	2.53	13	2
1:A:12:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD22	0.61	1.70	15	2
1:A:79:LEU:O	1:A:80:TYR:CD1	0.61	2.53	3	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:111:THR:CG2	0.61	2.24	6	2
1:A:36:TRP:CE2	1:A:81:LEU:CD1	0.61	2.83	20	19
1:A:64:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CD2	0.61	2.83	1	3
1:A:12:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD22	0.61	2.24	4	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:23:ALA:CB	0.61	2.78	16	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:83:MET:HE2	0.61	2.25	1	17
1:A:94:TYR:C	1:A:95:TYR:CD1	0.61	2.79	6	12
1:A:102:TYR:O	1:A:102:TYR:CD1	0.61	2.54	7	9
1:A:12:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD23	0.61	2.26	7	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:N	0.61	2.10	13	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:27:PHE:CG	0.61	2.30	11	8
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:CG1	0.61	2.24	2	1
1:A:12:VAL:HG23	1:A:17:SER:N	0.61	2.11	3	1
1:A:12:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD23	0.61	2.25	7	2
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:O	0.61	2.19	20	8
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:CD2	0.61	2.72	8	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:ARG:N	0.61	2.09	15	2
1:A:49:SER:OG	1:A:81:LEU:HD13	0.61	1.96	16	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:28:THR:O	0.61	2.54	15	17
1:A:36:TRP:NE1	1:A:81:LEU:HD11	0.61	2.10	16	19
1:A:39:GLN:CG	1:A:95:TYR:CE1	0.61	2.84	6	13
1:A:73:ASP:CB	1:A:78:THR:O	0.61	2.49	2	7
1:A:2:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD12	0.61	1.72	4	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:20:LEU:HD11	0.61	1.72	4	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:111:THR:O	0.61	1.96	18	2
1:A:35:SER:O	1:A:97:ALA:O	0.61	2.18	16	20
1:A:40:ALA:HB1	1:A:43:LYS:HB3	0.61	1.72	8	10
1:A:70:ILE:CD1	1:A:81:LEU:HD21	0.61	2.22	18	5
1:A:29:PHE:CB	1:A:79:LEU:CD1	0.61	2.79	3	1
1:A:34:MET:CE	1:A:79:LEU:CD1	0.61	2.78	19	8
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:TYR:CE2	0.61	2.79	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:O	1:A:12:VAL:CG1	0.61	2.48	9	5
1:A:81:LEU:HD13	1:A:83:MET:HE2	0.61	1.72	17	1
1:A:40:ALA:CA	1:A:93:VAL:HG23	0.61	2.23	18	1
1:A:27:PHE:O	1:A:28:THR:CG2	0.61	2.48	20	1
1:A:38:ARG:C	1:A:45:ARG:HG2	0.60	2.21	3	15
1:A:48:VAL:CG1	1:A:83:MET:SD	0.60	2.89	19	17
1:A:98:ARG:O	1:A:104:PHE:CD1	0.60	2.54	8	14
1:A:3:GLN:CA	1:A:4:LEU:HD13	0.60	2.26	20	11
1:A:28:THR:O	1:A:29:PHE:CD2	0.60	2.54	20	8
1:A:20:LEU:HD12	1:A:112:LEU:O	0.60	1.96	12	2
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CD2	0.60	2.60	7	4
1:A:100:LYS:O	1:A:104:PHE:CD2	0.60	2.54	9	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:99:LEU:N	0.60	2.64	13	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:83:MET:SD	0.60	2.36	19	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:79:LEU:HD12	0.60	2.26	2	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:HA	0.60	1.70	10	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CD1	0.60	2.64	13	1
1:A:10:GLY:H	1:A:18:LEU:HD21	0.60	1.56	1	1
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:CG1	0.60	2.50	2	7
1:A:99:LEU:HD12	1:A:99:LEU:H	0.60	1.53	2	3
1:A:100:LYS:HE2	1:A:103:ALA:HB1	0.60	1.72	12	1
1:A:39:GLN:CD	1:A:95:TYR:CE1	0.60	2.79	11	6
1:A:79:LEU:C	1:A:80:TYR:CD1	0.60	2.79	3	5
1:A:18:LEU:HD22	1:A:113:VAL:CG2	0.60	2.26	14	2
1:A:47:ILE:CG2	1:A:61:ALA:HA	0.60	2.26	4	20
1:A:64:VAL:CG1	1:A:68:PHE:CE1	0.60	2.84	15	7
1:A:18:LEU:HD21	1:A:83:MET:SD	0.60	2.36	12	3
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CE2	0.60	2.32	7	4
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.60	2.80	2	14
1:A:22:CYS:CB	1:A:34:MET:CE	0.60	2.79	8	7
1:A:27:PHE:CE2	1:A:28:THR:C	0.60	2.80	2	5
1:A:69:THR:CG2	1:A:82:GLN:CG	0.60	2.80	9	12
1:A:97:ALA:HA	1:A:107:TRP:CG	0.60	2.32	20	12
1:A:69:THR:HG21	1:A:82:GLN:HG3	0.60	1.73	19	6
1:A:100:LYS:CE	1:A:103:ALA:CB	0.60	2.80	11	5
1:A:2:VAL:CG1	1:A:27:PHE:CD2	0.60	2.82	9	3
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:CA	0.60	2.85	10	18
1:A:2:VAL:CG1	1:A:4:LEU:CD1	0.60	2.80	2	2
1:A:34:MET:CG	1:A:107:TRP:CZ2	0.60	2.85	2	2
1:A:27:PHE:CD1	1:A:27:PHE:O	0.60	2.55	7	11
1:A:24:ALA:CB	1:A:29:PHE:CD2	0.60	2.84	1	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PHE:CD1	1:A:98:ARG:NH1	0.60	2.70	12	2
1:A:20:LEU:HB3	1:A:83:MET:HE3	0.60	1.71	15	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:103:ALA:HB1	0.59	2.11	1	3
1:A:27:PHE:CD2	1:A:98:ARG:NH2	0.59	2.70	10	2
1:A:49:SER:CB	1:A:81:LEU:CD1	0.59	2.80	19	1
1:A:39:GLN:O	1:A:45:ARG:CB	0.59	2.50	20	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:68:PHE:CD2	0.59	2.31	16	7
1:A:104:PHE:O	1:A:106:TYR:CE1	0.59	2.55	12	6
1:A:37:VAL:CG1	1:A:94:TYR:CG	0.59	2.80	20	2
1:A:37:VAL:HG23	1:A:94:TYR:CG	0.59	2.33	18	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD23	0.59	2.23	16	2
1:A:20:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HB2	0.59	1.73	17	1
1:A:12:VAL:CG2	1:A:18:LEU:CD1	0.59	2.79	14	3
1:A:23:ALA:O	1:A:24:ALA:HB2	0.59	1.97	20	13
1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:VAL:C	0.59	2.22	17	5
1:A:94:TYR:HE2	1:A:113:VAL:HG21	0.59	1.52	14	1
1:A:94:TYR:O	1:A:95:TYR:CD1	0.59	2.56	6	5
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:CD2	0.59	2.46	18	6
1:A:4:LEU:C	1:A:5:VAL:CG2	0.59	2.76	17	8
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG21	0.59	1.73	11	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:113:VAL:HG12	0.59	1.74	16	1
1:A:98:ARG:CB	1:A:103:ALA:O	0.59	2.50	15	4
1:A:11:LEU:HD23	1:A:114:THR:HB	0.59	1.73	17	4
1:A:48:VAL:HG13	1:A:68:PHE:CD2	0.59	2.32	20	9
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:H	0.59	1.58	13	2
1:A:37:VAL:HG11	1:A:47:ILE:C	0.59	2.22	17	2
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:O	0.59	2.21	14	20
1:A:47:ILE:HG23	1:A:61:ALA:HA	0.59	1.75	16	19
1:A:112:LEU:CD1	1:A:113:VAL:N	0.59	2.65	20	16
1:A:64:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CZ	0.59	2.79	15	3
1:A:86:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG21	0.59	2.28	19	2
1:A:49:SER:HB2	1:A:81:LEU:CD1	0.59	2.28	19	1
1:A:12:VAL:O	1:A:13:GLN:O	0.59	2.21	8	20
1:A:68:PHE:CE2	1:A:83:MET:HB3	0.59	2.33	18	8
1:A:76:LYS:N	1:A:76:LYS:CD	0.59	2.66	14	11
1:A:95:TYR:CZ	1:A:110:GLY:HA2	0.59	2.32	8	8
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:HD13	0.59	1.98	18	5
1:A:51:VAL:HG12	1:A:72:ARG:CZ	0.59	2.27	2	1
1:A:10:GLY:O	1:A:18:LEU:HD12	0.59	1.98	3	2
1:A:64:VAL:HG11	1:A:68:PHE:CG	0.59	2.32	5	1
1:A:35:SER:HB3	1:A:99:LEU:HD23	0.59	1.74	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:C	1:A:18:LEU:CD2	0.59	2.76	17	3
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:ALA:HB3	0.59	1.75	14	2
1:A:101:LYS:O	1:A:102:TYR:HB3	0.59	1.98	7	9
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:CD1	0.59	2.74	4	11
1:A:18:LEU:HD23	1:A:20:LEU:CG	0.59	2.28	5	1
1:A:34:MET:C	1:A:99:LEU:HD11	0.59	2.22	19	2
1:A:11:LEU:HD23	1:A:114:THR:O	0.59	1.98	18	2
1:A:48:VAL:HG13	1:A:68:PHE:CZ	0.59	2.33	19	1
1:A:35:SER:CB	1:A:99:LEU:CD2	0.58	2.81	19	4
1:A:4:LEU:HB3	1:A:107:TRP:CZ3	0.58	2.33	19	5
1:A:98:ARG:NH1	1:A:103:ALA:CB	0.58	2.66	17	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:83:MET:HG3	0.58	1.75	19	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:29:PHE:HA	0.58	2.33	2	8
1:A:10:GLY:C	1:A:113:VAL:HG12	0.58	2.23	4	1
1:A:32:TYR:O	1:A:33:ALA:CB	0.58	2.51	19	8
1:A:16:GLY:O	1:A:17:SER:CB	0.58	2.51	15	18
1:A:35:SER:OG	1:A:50:ALA:HB1	0.58	1.98	1	7
1:A:51:VAL:CG1	1:A:72:ARG:CZ	0.58	2.81	2	1
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:HD13	0.58	1.97	8	4
1:A:39:GLN:O	1:A:45:ARG:HB2	0.58	1.98	20	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:80:TYR:CD1	0.58	2.57	6	10
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:CB	0.58	2.28	13	8
1:A:98:ARG:HG3	1:A:107:TRP:CD1	0.58	2.33	11	2
1:A:12:VAL:HG21	1:A:113:VAL:CG2	0.58	2.28	16	1
1:A:71:SER:CB	1:A:80:TYR:O	0.58	2.52	19	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:83:MET:SD	0.58	2.92	19	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:107:TRP:CE3	0.58	2.30	15	6
1:A:6:GLU:O	1:A:7:SER:CB	0.58	2.52	14	7
1:A:22:CYS:SG	1:A:36:TRP:CB	0.58	2.92	13	18
1:A:50:ALA:HB3	1:A:59:TYR:HB2	0.58	1.73	18	14
1:A:3:GLN:N	1:A:4:LEU:HD13	0.58	2.13	9	10
1:A:34:MET:HG3	1:A:107:TRP:CZ2	0.58	2.33	2	5
1:A:91:THR:HA	1:A:115:VAL:HG23	0.58	1.74	2	1
1:A:95:TYR:CZ	1:A:110:GLY:HA3	0.58	2.34	14	3
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:CB	0.58	2.52	18	3
1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:VAL:CA	0.58	2.28	19	16
1:A:83:MET:SD	1:A:94:TYR:CE2	0.58	2.97	18	10
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:CG1	0.58	2.76	8	4
1:A:37:VAL:CG1	1:A:38:ARG:N	0.58	2.66	17	12
1:A:106:TYR:C	1:A:107:TRP:CD1	0.58	2.82	14	5
1:A:12:VAL:CG1	1:A:115:VAL:HG13	0.58	2.22	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:SER:OG	1:A:81:LEU:HD22	0.58	1.97	20	3
1:A:30:SER:CB	1:A:72:ARG:CZ	0.58	2.82	15	1
1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:OD1	0.58	2.37	13	2
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD13	0.58	2.13	9	2
1:A:94:TYR:CE2	1:A:113:VAL:HG13	0.58	2.33	1	7
1:A:27:PHE:O	1:A:28:THR:OG1	0.58	2.22	8	13
1:A:18:LEU:CD1	1:A:20:LEU:HD21	0.58	2.28	4	1
1:A:87:ARG:O	1:A:115:VAL:HG21	0.58	1.99	16	4
1:A:11:LEU:O	1:A:18:LEU:CD2	0.58	2.52	18	3
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:HG2	0.58	1.75	4	10
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HB3	0.58	1.75	12	2
1:A:4:LEU:HB2	1:A:107:TRP:CE3	0.57	2.34	3	15
1:A:20:LEU:HD21	1:A:112:LEU:O	0.57	1.99	18	3
1:A:27:PHE:O	1:A:32:TYR:CE1	0.57	2.57	12	12
1:A:100:LYS:O	1:A:104:PHE:CG	0.57	2.57	9	1
1:A:4:LEU:HD11	1:A:106:TYR:HB2	0.57	1.75	19	6
1:A:5:VAL:C	1:A:6:GLU:CG	0.57	2.77	13	2
1:A:36:TRP:CE3	1:A:96:CYS:SG	0.57	2.97	17	3
1:A:31:SER:OG	1:A:32:TYR:CD1	0.57	2.52	16	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:49:SER:N	0.57	2.66	18	1
1:A:27:PHE:O	1:A:32:TYR:CD1	0.57	2.57	1	10
1:A:34:MET:HG3	1:A:107:TRP:CH2	0.57	2.34	2	6
1:A:27:PHE:CD2	1:A:28:THR:N	0.57	2.72	2	3
1:A:64:VAL:HG21	1:A:68:PHE:CD1	0.57	2.33	18	2
1:A:60:TYR:CE2	1:A:68:PHE:O	0.57	2.58	4	12
1:A:39:GLN:OE1	1:A:95:TYR:CE1	0.57	2.57	17	3
1:A:37:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HA	0.57	1.75	19	2
1:A:88:ALA:O	1:A:89:GLU:CB	0.57	2.52	18	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:78:THR:HA	0.57	2.35	20	20
1:A:12:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HB2	0.57	1.75	6	2
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CG2	0.57	2.50	19	5
1:A:27:PHE:CZ	1:A:29:PHE:HA	0.57	2.35	19	20
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:CG	0.57	2.52	20	3
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:HD11	0.57	1.77	11	2
1:A:102:TYR:CD1	1:A:103:ALA:N	0.57	2.73	20	3
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:CD1	0.57	2.77	16	2
1:A:38:ARG:HA	1:A:46:GLU:C	0.57	2.24	20	1
1:A:36:TRP:O	1:A:37:VAL:HB	0.57	1.99	19	12
1:A:51:VAL:HG23	1:A:58:THR:HG22	0.57	1.76	2	1
1:A:2:VAL:HG11	1:A:98:ARG:CZ	0.57	2.29	3	1
1:A:100:LYS:CB	1:A:103:ALA:HB3	0.57	2.29	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:CYS:CB	1:A:107:TRP:CE3	0.57	2.88	8	11
1:A:5:VAL:HG12	1:A:5:VAL:O	0.57	1.99	3	3
1:A:22:CYS:SG	1:A:34:MET:CE	0.57	2.93	14	5
1:A:104:PHE:O	1:A:106:TYR:CD1	0.57	2.58	9	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:20:LEU:N	0.57	2.66	13	6
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:C	0.57	2.24	2	1
1:A:64:VAL:O	1:A:65:LYS:C	0.57	2.46	14	5
1:A:95:TYR:CE2	1:A:110:GLY:HA3	0.57	2.34	18	6
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:VAL:HG11	0.57	1.77	13	1
1:A:4:LEU:HB3	1:A:107:TRP:CH2	0.57	2.35	18	7
1:A:18:LEU:HD11	1:A:86:LEU:HG	0.57	1.75	10	1
1:A:22:CYS:SG	1:A:107:TRP:CE3	0.56	2.97	2	4
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:CG1	0.56	2.68	3	2
1:A:39:GLN:CB	1:A:93:VAL:O	0.56	2.53	5	9
1:A:71:SER:O	1:A:80:TYR:O	0.56	2.23	10	15
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CZ3	0.56	2.35	11	11
1:A:60:TYR:CD2	1:A:68:PHE:O	0.56	2.57	16	9
1:A:76:LYS:O	1:A:77:ASN:CB	0.56	2.52	13	15
1:A:81:LEU:CD1	1:A:83:MET:HE2	0.56	2.30	4	7
1:A:41:PRO:HG3	1:A:91:THR:HG23	0.56	1.75	9	1
1:A:48:VAL:HG12	1:A:83:MET:SD	0.56	2.39	19	1
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:CG	0.56	2.78	12	9
1:A:24:ALA:HB1	1:A:28:THR:O	0.56	2.00	1	1
1:A:4:LEU:HG	1:A:107:TRP:CE3	0.56	2.36	20	11
1:A:22:CYS:SG	1:A:36:TRP:HB2	0.56	2.41	18	11
1:A:61:ALA:CB	1:A:64:VAL:CG2	0.56	2.84	4	8
1:A:33:ALA:O	1:A:98:ARG:NE	0.56	2.39	5	2
1:A:86:LEU:H	1:A:86:LEU:HD22	0.56	1.59	7	2
1:A:98:ARG:HD3	1:A:104:PHE:CG	0.56	2.35	11	2
1:A:98:ARG:NH1	1:A:104:PHE:CE2	0.56	2.73	11	1
1:A:51:VAL:HG11	1:A:72:ARG:CZ	0.56	2.31	12	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:32:TYR:N	0.56	2.73	16	1
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:HD23	0.56	2.25	3	6
1:A:35:SER:O	1:A:36:TRP:HB3	0.56	2.01	6	20
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:CZ	0.56	2.31	1	1
1:A:12:VAL:O	1:A:115:VAL:CG1	0.56	2.53	2	10
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:CG2	0.56	2.48	6	9
1:A:4:LEU:CD2	1:A:107:TRP:CD2	0.56	2.89	4	9
1:A:71:SER:C	1:A:72:ARG:HD3	0.56	2.25	17	2
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:HG23	0.56	2.01	15	1
1:A:24:ALA:O	1:A:77:ASN:CA	0.56	2.53	2	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:GLN:HG3	1:A:95:TYR:CE1	0.56	2.36	8	8
1:A:95:TYR:CZ	1:A:110:GLY:CA	0.56	2.88	8	8
1:A:24:ALA:O	1:A:77:ASN:C	0.56	2.48	19	13
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:CG1	0.56	2.53	5	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:20:LEU:N	0.56	2.10	14	3
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:HG13	0.56	2.25	9	5
1:A:94:TYR:CE1	1:A:113:VAL:CG1	0.56	2.88	18	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:CD1	0.56	2.54	19	1
1:A:35:SER:CA	1:A:50:ALA:HB1	0.56	2.31	4	11
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:VAL:CG1	0.56	2.25	2	6
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:CG1	0.56	2.78	2	4
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:CG2	0.56	2.31	15	11
1:A:10:GLY:HA3	1:A:18:LEU:HD12	0.56	1.77	12	2
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:HB	0.56	1.77	1	3
1:A:69:THR:HG22	1:A:82:GLN:HB2	0.56	1.78	18	19
1:A:20:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG13	0.56	2.31	3	3
1:A:12:VAL:HG12	1:A:17:SER:C	0.56	2.24	20	3
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:CG1	0.56	2.54	7	2
1:A:71:SER:C	1:A:72:ARG:CD	0.56	2.79	10	2
1:A:48:VAL:HG13	1:A:81:LEU:CD1	0.56	2.31	18	1
1:A:38:ARG:HB3	1:A:47:ILE:N	0.56	2.16	20	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HG12	0.56	2.24	7	5
1:A:2:VAL:CG2	1:A:98:ARG:NH1	0.56	2.69	13	3
1:A:99:LEU:C	1:A:100:LYS:CG	0.56	2.79	12	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:23:ALA:HB3	0.56	2.30	16	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:112:LEU:O	0.56	2.54	20	4
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:O	0.56	2.24	20	17
1:A:12:VAL:HG22	1:A:114:THR:O	0.56	2.01	9	1
1:A:82:GLN:C	1:A:83:MET:SD	0.56	2.89	17	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:29:PHE:HA	0.55	2.36	8	12
1:A:18:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG11	0.55	1.73	2	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:31:SER:CB	0.55	2.55	10	6
1:A:36:TRP:HB2	1:A:96:CYS:SG	0.55	2.41	4	6
1:A:6:GLU:CA	1:A:96:CYS:SG	0.55	2.94	6	6
1:A:32:TYR:CB	1:A:98:ARG:NH2	0.55	2.70	9	1
1:A:94:TYR:CE2	1:A:113:VAL:HG11	0.55	2.35	19	2
1:A:98:ARG:HB3	1:A:107:TRP:CD1	0.55	2.36	19	1
1:A:3:GLN:O	1:A:4:LEU:CD2	0.55	2.54	15	9
1:A:48:VAL:HB	1:A:81:LEU:CD1	0.55	2.32	15	9
1:A:98:ARG:CZ	1:A:103:ALA:CB	0.55	2.84	6	2
1:A:22:CYS:SG	1:A:34:MET:HE2	0.55	2.41	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:CG	0.55	2.31	13	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:86:LEU:HD11	0.55	1.76	13	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:83:MET:CG	0.55	2.82	19	1
1:A:80:TYR:O	1:A:81:LEU:CD2	0.55	2.54	19	1
1:A:112:LEU:C	1:A:113:VAL:CG2	0.55	2.79	4	5
1:A:12:VAL:O	1:A:12:VAL:HG22	0.55	2.02	3	1
1:A:35:SER:CB	1:A:50:ALA:CB	0.55	2.85	20	8
1:A:18:LEU:HD21	1:A:83:MET:CB	0.55	2.31	4	1
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:CG	0.55	2.54	18	8
1:A:72:ARG:HD3	1:A:72:ARG:N	0.55	2.15	10	2
1:A:93:VAL:CG1	1:A:111:THR:O	0.55	2.55	18	3
1:A:31:SER:HB3	1:A:32:TYR:CE1	0.55	2.36	1	6
1:A:80:TYR:CD1	1:A:80:TYR:N	0.55	2.74	9	3
1:A:83:MET:O	1:A:86:LEU:CD1	0.55	2.55	8	1
1:A:51:VAL:HG21	1:A:72:ARG:NH2	0.55	2.16	12	1
1:A:36:TRP:NE1	1:A:81:LEU:CD1	0.55	2.70	16	16
1:A:72:ARG:HA	1:A:79:LEU:HA	0.55	1.78	1	18
1:A:87:ARG:O	1:A:88:ALA:C	0.55	2.50	8	15
1:A:91:THR:HG22	1:A:92:ALA:N	0.55	2.16	14	2
1:A:29:PHE:O	1:A:33:ALA:HA	0.55	2.00	16	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:94:TYR:CD2	0.55	2.36	17	1
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLY:C	0.55	2.50	20	19
1:A:96:CYS:C	1:A:107:TRP:CB	0.55	2.80	16	10
1:A:94:TYR:CZ	1:A:113:VAL:HG21	0.55	2.37	5	1
1:A:13:GLN:HB2	1:A:14:PRO:HD2	0.55	1.76	15	7
1:A:83:MET:CE	1:A:94:TYR:CE2	0.55	2.90	16	6
1:A:2:VAL:HG13	1:A:27:PHE:HD1	0.55	1.57	10	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:C	0.55	2.50	15	17
1:A:35:SER:OG	1:A:50:ALA:CB	0.55	2.55	2	1
1:A:37:VAL:HG21	1:A:48:VAL:CB	0.55	2.25	17	16
1:A:95:TYR:CE2	1:A:110:GLY:HA2	0.55	2.37	1	9
1:A:101:LYS:O	1:A:102:TYR:CB	0.55	2.55	13	9
1:A:34:MET:SD	1:A:107:TRP:CH2	0.55	2.99	3	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:19:ARG:H	0.55	1.61	17	1
1:A:37:VAL:HG11	1:A:48:VAL:N	0.55	2.17	18	3
1:A:44:GLU:O	1:A:44:GLU:CG	0.55	2.54	20	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:23:ALA:CB	0.55	2.84	1	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:TYR:CE1	0.55	2.85	6	3
1:A:99:LEU:O	1:A:100:LYS:CB	0.55	2.52	10	4
1:A:39:GLN:O	1:A:40:ALA:HB2	0.55	2.02	16	11
1:A:103:ALA:O	1:A:104:PHE:CB	0.55	2.55	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ASP:O	1:A:107:TRP:N	0.55	2.40	9	1
1:A:64:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CE1	0.55	2.88	15	2
1:A:20:LEU:CD2	1:A:20:LEU:N	0.55	2.62	16	2
1:A:18:LEU:CG	1:A:113:VAL:CG1	0.54	2.78	2	2
1:A:87:ARG:CG	1:A:87:ARG:O	0.54	2.55	19	5
1:A:6:GLU:N	1:A:6:GLU:CD	0.54	2.65	11	7
1:A:99:LEU:HB3	1:A:104:PHE:CE2	0.54	2.36	7	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:17:SER:O	0.54	2.55	13	2
1:A:29:PHE:HB3	1:A:79:LEU:CD2	0.54	2.29	17	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:51:VAL:O	0.54	2.01	19	3
1:A:48:VAL:HA	1:A:61:ALA:HB2	0.54	1.78	20	1
1:A:3:GLN:O	1:A:24:ALA:HA	0.54	2.02	19	19
1:A:64:VAL:HG12	1:A:67:ARG:HB3	0.54	1.78	6	4
1:A:39:GLN:NE2	1:A:95:TYR:CE1	0.54	2.75	9	2
1:A:98:ARG:HD3	1:A:104:PHE:CD1	0.54	2.36	14	3
1:A:39:GLN:OE1	1:A:95:TYR:CD1	0.54	2.60	20	3
1:A:25:SER:O	1:A:27:PHE:N	0.54	2.41	12	7
1:A:28:THR:O	1:A:29:PHE:CG	0.54	2.60	2	6
1:A:11:LEU:C	1:A:12:VAL:CG2	0.54	2.80	8	3
1:A:18:LEU:CD2	1:A:83:MET:SD	0.54	2.95	12	4
1:A:5:VAL:HG23	1:A:23:ALA:HB3	0.54	1.79	12	3
1:A:35:SER:HB3	1:A:99:LEU:CD2	0.54	2.33	19	2
1:A:49:SER:OG	1:A:81:LEU:CD1	0.54	2.56	16	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:23:ALA:HB3	0.54	1.80	1	1
1:A:34:MET:SD	1:A:34:MET:C	0.54	2.90	8	12
1:A:69:THR:HG21	1:A:82:GLN:CG	0.54	2.32	1	11
1:A:12:VAL:HG11	1:A:18:LEU:HD21	0.54	1.79	3	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:83:MET:O	0.54	2.51	4	3
1:A:64:VAL:CB	1:A:68:PHE:CD1	0.54	2.90	15	4
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:NE	0.54	2.41	14	6
1:A:92:ALA:HB1	1:A:94:TYR:CE1	0.54	2.37	15	2
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:CD2	0.54	2.80	18	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:83:MET:HE3	0.54	2.37	17	1
1:A:21:SER:CA	1:A:79:LEU:O	0.54	2.56	20	14
1:A:39:GLN:HG3	1:A:95:TYR:CD1	0.54	2.37	6	6
1:A:27:PHE:C	1:A:28:THR:HG23	0.54	2.28	3	5
1:A:33:ALA:CB	1:A:53:GLY:N	0.54	2.71	12	2
1:A:48:VAL:HG11	1:A:83:MET:HG3	0.54	1.79	17	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:83:MET:HG3	0.54	2.32	17	1
1:A:41:PRO:CD	1:A:91:THR:O	0.54	2.55	5	13
1:A:98:ARG:HB3	1:A:103:ALA:O	0.54	2.03	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PHE:O	1:A:28:THR:CB	0.54	2.55	20	3
1:A:18:LEU:HD23	1:A:20:LEU:HD21	0.54	1.79	5	1
1:A:90:ASP:H	1:A:115:VAL:HG11	0.54	1.63	7	1
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:CD	0.54	2.56	14	2
1:A:37:VAL:O	1:A:95:TYR:O	0.54	2.25	18	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:83:MET:HE2	0.54	2.16	18	1
1:A:6:GLU:OE2	1:A:109:GLN:CB	0.54	2.56	20	11
1:A:13:GLN:HB3	1:A:14:PRO:HD2	0.54	1.79	13	7
1:A:36:TRP:CZ2	1:A:81:LEU:CG	0.54	2.91	20	19
1:A:36:TRP:HE1	1:A:81:LEU:CG	0.54	2.15	16	16
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:CG	0.54	2.38	8	3
1:A:5:VAL:O	1:A:23:ALA:CB	0.54	2.56	2	5
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:HG2	0.54	2.02	2	3
1:A:97:ALA:CA	1:A:107:TRP:CD1	0.54	2.91	16	8
1:A:88:ALA:H	1:A:115:VAL:HG12	0.54	1.61	3	2
1:A:12:VAL:CG1	1:A:17:SER:C	0.54	2.81	19	4
1:A:16:GLY:C	1:A:84:ASN:CB	0.54	2.81	11	3
1:A:52:SER:O	1:A:57:SER:CB	0.54	2.56	5	5
1:A:33:ALA:O	1:A:98:ARG:CD	0.54	2.56	5	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:CG1	0.54	2.56	9	3
1:A:52:SER:OG	1:A:99:LEU:CD2	0.54	2.56	13	1
1:A:70:ILE:O	1:A:70:ILE:HD13	0.54	2.03	19	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:28:THR:O	0.54	2.60	2	8
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:LYS:CB	0.54	2.56	16	4
1:A:13:GLN:CG	1:A:14:PRO:HD2	0.54	2.33	12	9
1:A:93:VAL:HA	1:A:112:LEU:HA	0.54	1.80	14	3
1:A:69:THR:CG2	1:A:82:GLN:HB2	0.54	2.33	12	20
1:A:64:VAL:HB	1:A:68:PHE:CG	0.54	2.37	17	7
1:A:73:ASP:HB3	1:A:76:LYS:HB2	0.54	1.80	19	12
1:A:4:LEU:HD11	1:A:106:TYR:HE2	0.54	1.62	9	1
1:A:95:TYR:O	1:A:96:CYS:O	0.54	2.26	18	5
1:A:37:VAL:CG1	1:A:47:ILE:HA	0.54	2.33	17	3
1:A:43:LYS:CG	1:A:43:LYS:O	0.53	2.56	5	8
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:CG2	0.53	2.57	5	2
1:A:4:LEU:CD1	1:A:4:LEU:N	0.53	2.69	6	1
1:A:20:LEU:O	1:A:81:LEU:N	0.53	2.41	6	2
1:A:51:VAL:HG11	1:A:72:ARG:NE	0.53	2.17	8	2
1:A:39:GLN:HB3	1:A:95:TYR:CE1	0.53	2.38	14	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:36:TRP:HH2	0.53	1.59	15	1
1:A:30:SER:OG	1:A:72:ARG:CZ	0.53	2.56	5	1
1:A:98:ARG:HD2	1:A:103:ALA:HB3	0.53	1.78	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:GLN:HG2	1:A:95:TYR:CE1	0.53	2.38	15	1
1:A:29:PHE:O	1:A:33:ALA:CA	0.53	2.56	16	1
1:A:29:PHE:CD2	1:A:79:LEU:CD2	0.53	2.92	16	6
1:A:25:SER:O	1:A:26:GLY:C	0.53	2.52	10	8
1:A:57:SER:O	1:A:58:THR:CG2	0.53	2.56	2	9
1:A:87:ARG:O	1:A:115:VAL:CG1	0.53	2.56	16	5
1:A:40:ALA:CB	1:A:41:PRO:HD2	0.53	2.27	16	5
1:A:100:LYS:CD	1:A:101:LYS:O	0.53	2.56	11	1
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:N	0.53	2.77	18	3
1:A:39:GLN:C	1:A:93:VAL:O	0.53	2.51	10	17
1:A:51:VAL:CG1	1:A:70:ILE:HG21	0.53	2.33	6	1
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:HD22	0.53	2.19	7	5
1:A:18:LEU:CG	1:A:113:VAL:HG21	0.53	2.34	8	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:VAL:CB	0.53	2.34	10	1
1:A:37:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG12	0.53	1.78	18	1
1:A:47:ILE:HG23	1:A:61:ALA:CA	0.53	2.33	9	12
1:A:106:TYR:O	1:A:107:TRP:O	0.53	2.26	2	19
1:A:81:LEU:HD12	1:A:83:MET:HE2	0.53	1.79	4	9
1:A:73:ASP:N	1:A:73:ASP:OD1	0.53	2.41	5	3
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:SER:N	0.53	2.69	12	2
1:A:87:ARG:CD	1:A:87:ARG:N	0.53	2.71	6	1
1:A:34:MET:O	1:A:34:MET:SD	0.53	2.66	19	2
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLN:CB	0.53	2.56	9	3
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:CG2	0.53	2.87	4	1
1:A:76:LYS:O	1:A:78:THR:HG22	0.53	2.03	14	2
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:CG2	0.53	2.56	15	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:83:MET:HA	0.53	2.39	20	10
1:A:94:TYR:HB2	1:A:111:THR:CG2	0.53	2.34	19	20
1:A:36:TRP:CB	1:A:96:CYS:SG	0.53	2.97	12	3
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:GLU:OE2	0.53	2.03	7	3
1:A:67:ARG:CG	1:A:67:ARG:O	0.53	2.56	7	1
1:A:34:MET:SD	1:A:79:LEU:CD1	0.53	2.97	15	3
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:CD1	0.53	2.55	17	3
1:A:98:ARG:C	1:A:99:LEU:HD12	0.53	2.29	11	1
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:CG2	0.53	2.82	17	1
1:A:61:ALA:CB	1:A:68:PHE:CE2	0.53	2.91	10	8
1:A:88:ALA:CA	1:A:115:VAL:CG1	0.53	2.86	3	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:CG1	0.53	2.55	14	6
1:A:49:SER:OG	1:A:81:LEU:CD2	0.53	2.56	20	3
1:A:96:CYS:CB	1:A:107:TRP:HB3	0.53	2.34	9	6
1:A:97:ALA:C	1:A:107:TRP:CD1	0.53	2.87	14	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG12	0.53	1.81	9	1
1:A:84:ASN:O	1:A:86:LEU:CD2	0.53	2.56	18	1
1:A:3:GLN:O	1:A:4:LEU:CB	0.53	2.56	1	5
1:A:31:SER:CB	1:A:32:TYR:CE1	0.53	2.92	1	4
1:A:87:ARG:O	1:A:87:ARG:CG	0.53	2.57	1	6
1:A:90:ASP:O	1:A:91:THR:C	0.53	2.52	4	19
1:A:18:LEU:HD21	1:A:20:LEU:HD11	0.53	1.81	11	1
1:A:2:VAL:HG12	1:A:4:LEU:HD23	0.53	1.80	17	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:83:MET:HB3	0.53	2.34	16	12
1:A:4:LEU:HB3	1:A:23:ALA:O	0.53	2.03	2	12
1:A:23:ALA:O	1:A:107:TRP:CZ3	0.53	2.62	17	4
1:A:48:VAL:CG2	1:A:83:MET:SD	0.53	2.97	4	3
1:A:98:ARG:NH1	1:A:104:PHE:CZ	0.53	2.76	11	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:31:SER:OG	0.53	2.26	16	1
1:A:101:LYS:O	1:A:102:TYR:C	0.52	2.52	2	10
1:A:76:LYS:N	1:A:76:LYS:HD2	0.52	2.19	14	1
1:A:30:SER:O	1:A:54:SER:CB	0.52	2.57	16	1
1:A:98:ARG:CG	1:A:98:ARG:NH1	0.52	2.72	20	1
1:A:47:ILE:CG2	1:A:61:ALA:CA	0.52	2.88	4	13
1:A:51:VAL:HG22	1:A:55:GLY:CA	0.52	2.32	2	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:72:ARG:NE	0.52	2.20	17	3
1:A:35:SER:CA	1:A:50:ALA:CB	0.52	2.88	20	9
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:CG1	0.52	2.34	3	6
1:A:33:ALA:HB3	1:A:100:LYS:HD3	0.52	1.81	4	1
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:HG13	0.52	2.05	17	1
1:A:48:VAL:HG23	1:A:68:PHE:HE2	0.52	1.64	18	1
1:A:33:ALA:O	1:A:100:LYS:CD	0.52	2.57	19	1
1:A:99:LEU:HA	1:A:104:PHE:CD2	0.52	2.39	17	11
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:CD2	0.52	2.56	15	3
1:A:98:ARG:N	1:A:107:TRP:CD1	0.52	2.78	11	11
1:A:70:ILE:CD1	1:A:79:LEU:HD23	0.52	2.33	3	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:76:LYS:N	0.52	2.19	19	6
1:A:34:MET:HA	1:A:99:LEU:HD11	0.52	1.78	14	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:LEU:HD11	0.52	1.81	20	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:23:ALA:HB3	0.52	2.35	1	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:O	0.52	2.63	14	3
1:A:64:VAL:CG1	1:A:68:PHE:CG	0.52	2.92	5	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:113:VAL:HB	0.52	1.81	18	3
1:A:2:VAL:HG13	1:A:27:PHE:CG	0.52	2.38	14	2
1:A:96:CYS:C	1:A:107:TRP:HB3	0.52	2.29	15	16
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CD1	0.52	2.66	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ASP:O	1:A:106:TYR:C	0.52	2.52	9	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG21	0.52	1.82	19	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:CD2	0.52	2.82	2	1
1:A:96:CYS:O	1:A:97:ALA:CB	0.52	2.57	10	3
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:CD1	0.52	2.83	6	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:6:GLU:OE2	0.52	2.57	7	1
1:A:98:ARG:HG2	1:A:104:PHE:HA	0.52	1.82	14	2
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD1	0.52	2.67	2	1
1:A:87:ARG:O	1:A:89:GLU:N	0.52	2.42	8	5
1:A:2:VAL:CG1	1:A:4:LEU:CD2	0.52	2.87	10	2
1:A:86:LEU:HD23	1:A:90:ASP:OD1	0.52	2.05	4	1
1:A:91:THR:HB	1:A:115:VAL:HG22	0.52	1.82	6	2
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:VAL:CG2	0.52	2.34	13	2
1:A:60:TYR:O	1:A:64:VAL:CG2	0.52	2.57	18	3
1:A:5:VAL:HG23	1:A:23:ALA:HB2	0.52	1.79	16	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:94:TYR:CE2	0.52	2.40	18	1
1:A:24:ALA:HB3	1:A:29:PHE:HD2	0.52	1.56	19	1
1:A:38:ARG:O	1:A:39:GLN:CB	0.52	2.57	18	8
1:A:16:GLY:O	1:A:84:ASN:CB	0.52	2.58	4	1
1:A:48:VAL:C	1:A:49:SER:OG	0.52	2.53	16	2
1:A:10:GLY:H	1:A:18:LEU:HD11	0.52	1.64	17	1
1:A:48:VAL:HB	1:A:94:TYR:CD2	0.52	2.40	18	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:107:TRP:CE2	0.52	2.38	19	1
1:A:24:ALA:O	1:A:77:ASN:HA	0.52	2.05	20	19
1:A:41:PRO:C	1:A:43:LYS:N	0.52	2.66	14	14
1:A:53:GLY:O	1:A:54:SER:C	0.52	2.52	17	10
1:A:6:GLU:C	1:A:6:GLU:CD	0.52	2.78	14	5
1:A:97:ALA:CA	1:A:107:TRP:CG	0.52	2.93	14	8
1:A:64:VAL:HG12	1:A:67:ARG:CB	0.52	2.35	12	3
1:A:96:CYS:SG	1:A:107:TRP:CZ3	0.52	3.03	4	3
1:A:100:LYS:HE2	1:A:103:ALA:HB3	0.52	1.80	11	2
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:HH11	0.52	1.65	6	2
1:A:16:GLY:HA3	1:A:85:SER:N	0.52	2.20	15	4
1:A:99:LEU:CB	1:A:104:PHE:CD2	0.52	2.92	7	1
1:A:52:SER:HB2	1:A:57:SER:CB	0.52	2.35	9	1
1:A:98:ARG:CD	1:A:100:LYS:HG2	0.52	2.35	15	1
1:A:94:TYR:HE1	1:A:113:VAL:HG22	0.52	1.65	18	1
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:H	0.52	1.65	1	3
1:A:11:LEU:C	1:A:18:LEU:CD1	0.52	2.83	2	1
1:A:13:GLN:HB3	1:A:14:PRO:CD	0.52	2.34	8	2
1:A:18:LEU:CD2	1:A:113:VAL:HB	0.52	2.35	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD22	1:A:83:MET:SD	0.52	2.45	15	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:HD21	0.52	1.82	19	1
1:A:100:LYS:HZ2	1:A:103:ALA:CB	0.52	2.18	19	1
1:A:34:MET:SD	1:A:35:SER:O	0.51	2.68	7	5
1:A:47:ILE:O	1:A:61:ALA:HA	0.51	2.05	18	16
1:A:73:ASP:OD1	1:A:73:ASP:N	0.51	2.42	6	5
1:A:29:PHE:CD2	1:A:79:LEU:HD12	0.51	2.40	2	1
1:A:47:ILE:HG21	1:A:59:TYR:CD2	0.51	2.40	18	4
1:A:12:VAL:HG12	1:A:86:LEU:HD13	0.51	1.81	4	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:HB2	0.51	2.39	5	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.51	2.68	15	7
1:A:34:MET:SD	1:A:35:SER:N	0.51	2.83	20	3
1:A:72:ARG:HG3	1:A:79:LEU:CB	0.51	2.34	10	2
1:A:113:VAL:O	1:A:113:VAL:CG2	0.51	2.54	18	3
1:A:6:GLU:OE1	1:A:7:SER:N	0.51	2.43	14	1
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:O	0.51	2.28	14	1
1:A:64:VAL:HB	1:A:68:PHE:CD1	0.51	2.40	15	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:83:MET:CE	0.51	2.79	20	1
1:A:31:SER:OG	1:A:32:TYR:CE1	0.51	2.62	1	1
1:A:30:SER:O	1:A:31:SER:C	0.51	2.53	16	10
1:A:12:VAL:HG11	1:A:83:MET:O	0.51	2.04	14	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:LEU:CD2	0.51	2.33	19	2
1:A:31:SER:HB3	1:A:32:TYR:CD1	0.51	2.40	7	11
1:A:86:LEU:HB3	1:A:115:VAL:CG1	0.51	2.31	20	4
1:A:38:ARG:CD	1:A:47:ILE:HB	0.51	2.35	2	1
1:A:65:LYS:O	1:A:65:LYS:CG	0.51	2.58	14	4
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:CG2	0.51	2.58	10	8
1:A:64:VAL:HG12	1:A:67:ARG:C	0.51	2.30	5	1
1:A:12:VAL:C	1:A:115:VAL:HA	0.51	2.31	12	7
1:A:12:VAL:HG12	1:A:17:SER:N	0.51	2.18	19	2
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CD2	0.51	2.69	8	4
1:A:11:LEU:O	1:A:18:LEU:CD1	0.51	2.58	2	1
1:A:2:VAL:HG11	1:A:106:TYR:CE2	0.51	2.40	5	4
1:A:72:ARG:HG3	1:A:79:LEU:HB3	0.51	1.82	17	2
1:A:18:LEU:HD12	1:A:20:LEU:CD1	0.51	2.32	16	2
1:A:72:ARG:NH2	1:A:74:ASN:CG	0.51	2.68	20	1
1:A:21:SER:HB3	1:A:79:LEU:O	0.51	2.06	12	7
1:A:69:THR:CG2	1:A:82:GLN:CB	0.51	2.88	1	17
1:A:73:ASP:CB	1:A:76:LYS:HB2	0.51	2.36	5	12
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:HD13	0.51	2.30	20	4
1:A:6:GLU:OE2	1:A:6:GLU:N	0.51	2.43	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:GLU:N	1:A:96:CYS:SG	0.51	2.83	9	2
1:A:9:GLY:CA	1:A:20:LEU:HD12	0.51	2.36	9	1
1:A:33:ALA:C	1:A:100:LYS:HZ1	0.51	2.13	12	1
1:A:95:TYR:CE1	1:A:110:GLY:HA2	0.51	2.40	19	2
1:A:81:LEU:C	1:A:83:MET:SD	0.51	2.94	17	1
1:A:36:TRP:CE2	1:A:81:LEU:HG	0.51	2.41	15	13
1:A:77:ASN:OD1	1:A:77:ASN:N	0.51	2.42	4	4
1:A:6:GLU:OE2	1:A:94:TYR:O	0.51	2.29	9	1
1:A:7:SER:O	1:A:21:SER:N	0.51	2.44	18	2
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:CA	0.51	2.59	18	1
1:A:34:MET:CE	1:A:79:LEU:HD21	0.51	2.35	8	2
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:LYS:CG	0.51	2.59	10	6
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:HD13	0.51	2.21	18	3
1:A:6:GLU:OE2	1:A:110:GLY:CA	0.51	2.59	9	1
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:HG3	0.51	2.06	9	4
1:A:52:SER:O	1:A:55:GLY:C	0.51	2.54	16	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:82:GLN:HG2	0.51	2.36	14	8
1:A:12:VAL:O	1:A:13:GLN:C	0.51	2.54	16	11
1:A:33:ALA:C	1:A:99:LEU:HD11	0.51	2.31	2	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HB2	0.51	2.06	3	8
1:A:2:VAL:HG11	1:A:106:TYR:CD1	0.51	2.40	11	2
1:A:60:TYR:O	1:A:62:ASP:N	0.51	2.43	13	2
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLN:NE2	0.51	2.44	11	1
1:A:48:VAL:O	1:A:68:PHE:CD2	0.51	2.64	19	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:29:PHE:CA	0.51	2.94	20	2
1:A:4:LEU:CG	1:A:107:TRP:CE3	0.51	2.94	4	11
1:A:18:LEU:HD12	1:A:20:LEU:HD21	0.51	1.81	16	2
1:A:20:LEU:C	1:A:21:SER:OG	0.51	2.54	20	2
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:HD23	0.51	2.31	15	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:83:MET:HB3	0.51	2.41	17	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:27:PHE:HB3	0.51	1.83	19	1
1:A:98:ARG:CB	1:A:107:TRP:CD1	0.51	2.94	19	1
1:A:49:SER:HA	1:A:59:TYR:O	0.50	2.05	1	19
1:A:98:ARG:NH1	1:A:98:ARG:CG	0.50	2.75	2	2
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:CG2	0.50	2.58	3	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:109:GLN:HB2	0.50	1.82	5	1
1:A:98:ARG:CD	1:A:98:ARG:H	0.50	2.18	11	2
1:A:45:ARG:HG3	1:A:46:GLU:N	0.50	2.21	12	1
1:A:81:LEU:CB	1:A:83:MET:SD	0.50	2.98	19	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:23:ALA:CB	0.50	2.35	1	1
1:A:41:PRO:HD3	1:A:92:ALA:HA	0.50	1.84	1	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ASN:OD1	1:A:85:SER:N	0.50	2.44	2	2
1:A:6:GLU:O	1:A:6:GLU:CD	0.50	2.54	3	3
1:A:60:TYR:O	1:A:61:ALA:HB3	0.50	2.06	5	2
1:A:72:ARG:HG3	1:A:73:ASP:N	0.50	2.20	5	3
1:A:6:GLU:OE1	1:A:110:GLY:CA	0.50	2.58	17	1
1:A:99:LEU:HA	1:A:104:PHE:CE2	0.50	2.42	3	4
1:A:104:PHE:O	1:A:105:ASP:CG	0.50	2.54	16	6
1:A:17:SER:N	1:A:84:ASN:HA	0.50	2.21	11	4
1:A:98:ARG:HB3	1:A:104:PHE:CA	0.50	2.37	16	2
1:A:20:LEU:HG	1:A:113:VAL:CG2	0.50	2.36	10	1
1:A:41:PRO:CG	1:A:91:THR:O	0.50	2.60	18	3
1:A:6:GLU:OE1	1:A:110:GLY:N	0.50	2.45	17	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:55:GLY:HA2	0.50	2.36	12	8
1:A:72:ARG:HD2	1:A:79:LEU:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:100:LYS:HE2	1:A:103:ALA:CB	0.50	2.36	11	3
1:A:4:LEU:HD12	1:A:27:PHE:HE2	0.50	1.66	8	1
1:A:2:VAL:CG1	1:A:98:ARG:NH1	0.50	2.73	9	1
1:A:77:ASN:O	1:A:77:ASN:CG	0.50	2.54	12	2
1:A:97:ALA:HA	1:A:107:TRP:HB2	0.50	1.83	15	4
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ARG:O	0.50	2.29	14	17
1:A:22:CYS:HB2	1:A:34:MET:HE1	0.50	1.84	12	3
1:A:34:MET:SD	1:A:34:MET:O	0.50	2.70	10	3
1:A:87:ARG:CG	1:A:89:GLU:HG2	0.50	2.36	9	1
1:A:105:ASP:C	1:A:107:TRP:N	0.50	2.67	9	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:94:TYR:CE2	0.50	2.41	17	1
1:A:98:ARG:HG2	1:A:105:ASP:N	0.50	2.21	19	1
1:A:72:ARG:C	1:A:73:ASP:OD1	0.50	2.55	20	10
1:A:101:LYS:C	1:A:103:ALA:N	0.50	2.69	14	11
1:A:38:ARG:O	1:A:39:GLN:CG	0.50	2.60	11	3
1:A:5:VAL:HG13	1:A:109:GLN:HB2	0.50	1.82	6	1
1:A:81:LEU:HB3	1:A:83:MET:CE	0.50	2.37	19	1
1:A:11:LEU:HA	1:A:114:THR:O	0.50	2.05	8	9
1:A:30:SER:HB2	1:A:72:ARG:NE	0.50	2.21	9	1
1:A:72:ARG:CD	1:A:73:ASP:N	0.50	2.75	13	2
1:A:36:TRP:HZ2	1:A:81:LEU:HG	0.50	1.66	15	1
1:A:71:SER:O	1:A:80:TYR:N	0.50	2.44	10	6
1:A:5:VAL:O	1:A:23:ALA:HB3	0.50	2.07	2	2
1:A:41:PRO:O	1:A:43:LYS:N	0.50	2.44	14	4
1:A:73:ASP:OD1	1:A:80:TYR:CE2	0.50	2.65	14	2
1:A:98:ARG:HG3	1:A:99:LEU:N	0.50	2.21	5	1
1:A:100:LYS:HE2	1:A:103:ALA:HB2	0.50	1.83	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:CD1	0.50	2.84	10	4
1:A:30:SER:HB2	1:A:72:ARG:CZ	0.50	2.37	15	4
1:A:95:TYR:CD2	1:A:110:GLY:CA	0.50	2.95	18	2
1:A:12:VAL:C	1:A:13:GLN:O	0.50	2.53	3	20
1:A:20:LEU:O	1:A:21:SER:CB	0.50	2.58	3	10
1:A:73:ASP:HB3	1:A:76:LYS:CD	0.50	2.37	19	11
1:A:48:VAL:CG1	1:A:83:MET:CG	0.50	2.90	9	8
1:A:12:VAL:HG22	1:A:18:LEU:HD13	0.50	1.82	5	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:83:MET:HG3	0.50	2.37	8	3
1:A:104:PHE:O	1:A:105:ASP:HB3	0.49	2.07	16	4
1:A:72:ARG:HD2	1:A:73:ASP:N	0.49	2.22	18	3
1:A:98:ARG:O	1:A:104:PHE:CZ	0.49	2.65	12	2
1:A:35:SER:N	1:A:99:LEU:HD11	0.49	2.22	11	1
1:A:99:LEU:HA	1:A:104:PHE:CE1	0.49	2.42	11	1
1:A:106:TYR:HB2	1:A:107:TRP:CD1	0.49	2.42	11	1
1:A:2:VAL:CG2	1:A:4:LEU:CD2	0.49	2.89	12	1
1:A:16:GLY:O	1:A:17:SER:HB3	0.49	2.07	13	1
1:A:6:GLU:CD	1:A:6:GLU:C	0.49	2.80	3	1
1:A:48:VAL:CG1	1:A:81:LEU:CD1	0.49	2.90	18	2
1:A:35:SER:HB2	1:A:99:LEU:HD21	0.49	1.83	19	1
1:A:51:VAL:HG23	1:A:70:ILE:HG13	0.49	1.82	19	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:70:ILE:CG1	0.49	2.35	20	1
1:A:21:SER:HB2	1:A:79:LEU:O	0.49	2.06	3	5
1:A:89:GLU:O	1:A:89:GLU:CD	0.49	2.55	9	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:74:ASN:C	0.49	2.55	14	2
1:A:51:VAL:HG21	1:A:72:ARG:NE	0.49	2.22	16	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:46:GLU:N	0.49	2.75	20	1
1:A:53:GLY:C	1:A:55:GLY:N	0.49	2.69	17	12
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ASP:CG	0.49	2.56	1	6
1:A:86:LEU:HD12	1:A:86:LEU:H	0.49	1.66	5	3
1:A:52:SER:CB	1:A:57:SER:HB2	0.49	2.37	6	3
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:HG12	0.49	2.07	8	2
1:A:13:GLN:HB2	1:A:14:PRO:CD	0.49	2.37	15	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:113:VAL:CG1	0.49	2.96	19	1
1:A:85:SER:O	1:A:86:LEU:O	0.49	2.31	8	11
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:O	0.49	2.08	15	5
1:A:39:GLN:NE2	1:A:95:TYR:CZ	0.49	2.80	11	1
1:A:95:TYR:CG	1:A:110:GLY:HA2	0.49	2.42	14	2
1:A:37:VAL:HB	1:A:48:VAL:CG1	0.49	2.36	18	1
1:A:70:ILE:C	1:A:70:ILE:CD1	0.49	2.86	19	1
1:A:98:ARG:HG3	1:A:107:TRP:CZ2	0.49	2.43	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:GLU:HA	1:A:96:CYS:SG	0.49	2.47	14	8
1:A:17:SER:HA	1:A:84:ASN:CB	0.49	2.38	3	3
1:A:11:LEU:O	1:A:18:LEU:HB3	0.49	2.08	4	1
1:A:77:ASN:OD1	1:A:77:ASN:C	0.49	2.55	5	2
1:A:98:ARG:CB	1:A:104:PHE:O	0.49	2.61	9	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:38:ARG:CD	0.49	2.38	18	1
1:A:2:VAL:CG2	1:A:98:ARG:CZ	0.49	2.89	1	1
1:A:98:ARG:O	1:A:99:LEU:HB3	0.49	2.08	11	4
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:CG1	0.49	2.37	13	5
1:A:37:VAL:CG1	1:A:46:GLU:O	0.49	2.61	19	3
1:A:84:ASN:C	1:A:84:ASN:OD1	0.49	2.55	14	2
1:A:12:VAL:O	1:A:115:VAL:CG2	0.49	2.60	17	1
1:A:35:SER:O	1:A:36:TRP:CB	0.49	2.60	17	13
1:A:18:LEU:CD2	1:A:20:LEU:CD1	0.49	2.90	7	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:VAL:HB	0.49	1.83	16	3
1:A:104:PHE:CD1	1:A:105:ASP:OD1	0.49	2.65	9	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:94:TYR:CE2	0.49	2.96	15	1
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:HD12	0.49	2.33	16	2
1:A:18:LEU:CG	1:A:113:VAL:HB	0.49	2.38	16	1
1:A:36:TRP:O	1:A:47:ILE:HG12	0.49	2.07	20	1
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:HG	0.49	2.33	1	3
1:A:112:LEU:O	1:A:113:VAL:HG22	0.49	2.08	4	3
1:A:49:SER:OG	1:A:59:TYR:O	0.49	2.30	11	7
1:A:31:SER:HB2	1:A:32:TYR:CD1	0.49	2.42	18	3
1:A:48:VAL:O	1:A:60:TYR:HA	0.49	2.08	20	1
1:A:14:PRO:CD	1:A:88:ALA:HB2	0.49	2.32	4	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:20:LEU:CD2	0.49	2.38	5	1
1:A:34:MET:HE1	1:A:79:LEU:HD21	0.49	1.85	5	1
1:A:98:ARG:O	1:A:104:PHE:CG	0.49	2.66	5	2
1:A:73:ASP:OD2	1:A:80:TYR:CE1	0.49	2.66	6	1
1:A:12:VAL:HG22	1:A:18:LEU:CD2	0.49	2.38	16	2
1:A:24:ALA:HB2	1:A:107:TRP:HH2	0.49	1.67	19	1
1:A:52:SER:HB3	1:A:57:SER:CB	0.48	2.38	6	4
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HB	0.48	1.85	6	11
1:A:70:ILE:HD11	1:A:79:LEU:CD1	0.48	2.27	6	3
1:A:102:TYR:O	1:A:106:TYR:OH	0.48	2.30	7	3
1:A:29:PHE:CD2	1:A:79:LEU:HD22	0.48	2.43	15	1
1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:C	0.48	2.33	20	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:20:LEU:HD21	0.48	1.84	1	1
1:A:73:ASP:HB3	1:A:76:LYS:CG	0.48	2.38	14	13
1:A:48:VAL:O	1:A:49:SER:CB	0.48	2.60	6	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ARG:C	1:A:89:GLU:N	0.48	2.72	17	8
1:A:20:LEU:HD11	1:A:111:THR:HG23	0.48	1.84	6	1
1:A:72:ARG:CD	1:A:72:ARG:C	0.48	2.86	13	1
1:A:92:ALA:CB	1:A:94:TYR:CE1	0.48	2.97	15	1
1:A:87:ARG:CD	1:A:90:ASP:OD2	0.48	2.61	17	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:83:MET:HG2	0.48	2.38	19	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:52:SER:HA	0.48	2.38	15	5
1:A:76:LYS:O	1:A:77:ASN:OD1	0.48	2.31	5	4
1:A:18:LEU:CD1	1:A:20:LEU:HG	0.48	2.36	11	1
1:A:32:TYR:O	1:A:33:ALA:O	0.48	2.31	14	7
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ARG:HD3	0.48	2.09	1	14
1:A:69:THR:O	1:A:69:THR:HG23	0.48	2.08	20	5
1:A:23:ALA:O	1:A:24:ALA:CB	0.48	2.62	20	7
1:A:34:MET:HG2	1:A:107:TRP:CZ2	0.48	2.43	7	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:86:LEU:CD1	0.48	2.38	13	2
1:A:77:ASN:C	1:A:77:ASN:OD1	0.48	2.56	13	2
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:HD3	0.48	2.08	14	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:103:ALA:HB1	0.48	2.24	19	1
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:CB	0.48	2.39	2	8
1:A:90:ASP:OD1	1:A:90:ASP:N	0.48	2.46	19	5
1:A:98:ARG:CB	1:A:104:PHE:HA	0.48	2.39	19	3
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:HB	0.48	2.08	14	3
1:A:76:LYS:C	1:A:77:ASN:OD1	0.48	2.57	15	1
1:A:25:SER:C	1:A:27:PHE:N	0.48	2.71	4	3
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:O	0.48	2.31	5	1
1:A:6:GLU:HA	1:A:22:CYS:HA	0.48	1.83	14	2
1:A:95:TYR:CD1	1:A:110:GLY:HA2	0.48	2.43	14	1
1:A:6:GLU:O	1:A:6:GLU:OE2	0.48	2.32	18	1
1:A:70:ILE:CA	1:A:81:LEU:HD22	0.48	2.33	19	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:HB	0.48	2.08	1	2
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:HG2	0.48	2.09	8	11
1:A:4:LEU:HB2	1:A:23:ALA:O	0.48	2.08	4	5
1:A:100:LYS:HD2	1:A:103:ALA:CB	0.48	2.38	3	2
1:A:14:PRO:HB3	1:A:87:ARG:HA	0.48	1.85	4	4
1:A:12:VAL:CG2	1:A:18:LEU:HD13	0.48	2.38	5	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:82:GLN:CD	0.48	2.34	17	1
1:A:98:ARG:HB2	1:A:104:PHE:HA	0.48	1.84	19	1
1:A:44:GLU:O	1:A:44:GLU:HG3	0.48	2.08	20	1
1:A:62:ASP:OD1	1:A:62:ASP:N	0.48	2.47	1	4
1:A:6:GLU:OE1	1:A:110:GLY:O	0.48	2.31	3	5
1:A:56:GLY:O	1:A:57:SER:C	0.48	2.56	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:TYR:O	1:A:107:TRP:C	0.48	2.57	16	3
1:A:88:ALA:H	1:A:115:VAL:HG11	0.48	1.67	5	1
1:A:34:MET:CG	1:A:107:TRP:CH2	0.48	2.96	7	1
1:A:34:MET:HA	1:A:98:ARG:CG	0.48	2.39	7	1
1:A:95:TYR:CD1	1:A:95:TYR:N	0.48	2.82	18	3
1:A:48:VAL:HG13	1:A:83:MET:HB3	0.48	1.86	9	13
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:HB3	0.48	2.09	12	18
1:A:11:LEU:O	1:A:18:LEU:HD12	0.48	2.09	2	1
1:A:34:MET:SD	1:A:97:ALA:O	0.48	2.72	2	1
1:A:41:PRO:O	1:A:42:GLY:C	0.48	2.56	2	8
1:A:85:SER:O	1:A:86:LEU:C	0.48	2.57	8	3
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:CG	0.48	2.61	10	1
1:A:20:LEU:HB2	1:A:36:TRP:CH2	0.48	2.44	19	2
1:A:82:GLN:C	1:A:83:MET:HE3	0.48	2.34	19	1
1:A:14:PRO:HD3	1:A:88:ALA:CB	0.48	2.38	8	7
1:A:40:ALA:CB	1:A:41:PRO:CD	0.48	2.92	7	17
1:A:47:ILE:HD13	1:A:48:VAL:C	0.48	2.34	20	8
1:A:49:SER:HA	1:A:59:TYR:C	0.48	2.34	16	8
1:A:98:ARG:CG	1:A:103:ALA:O	0.48	2.62	5	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:94:TYR:HD2	0.48	1.69	12	1
1:A:7:SER:C	1:A:21:SER:OG	0.48	2.56	17	1
1:A:95:TYR:O	1:A:96:CYS:C	0.48	2.57	18	3
1:A:104:PHE:O	1:A:105:ASP:HB2	0.47	2.08	13	9
1:A:51:VAL:HG12	1:A:72:ARG:NH2	0.47	2.24	2	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:LYS:CE	0.47	2.62	2	2
1:A:22:CYS:O	1:A:23:ALA:C	0.47	2.54	3	8
1:A:76:LYS:O	1:A:77:ASN:CG	0.47	2.57	5	3
1:A:96:CYS:C	1:A:107:TRP:HB2	0.47	2.34	9	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:36:TRP:HH2	0.47	2.18	15	1
1:A:52:SER:HB3	1:A:57:SER:HB2	0.47	1.86	17	2
1:A:35:SER:C	1:A:97:ALA:O	0.47	2.57	18	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:ASN:N	0.47	2.82	18	1
1:A:71:SER:CA	1:A:80:TYR:O	0.47	2.61	19	1
1:A:38:ARG:CD	1:A:47:ILE:CB	0.47	2.92	2	1
1:A:6:GLU:OE2	1:A:109:GLN:HB3	0.47	2.09	6	8
1:A:29:PHE:HB2	1:A:79:LEU:CD1	0.47	2.38	3	1
1:A:72:ARG:CZ	1:A:72:ARG:CB	0.47	2.90	5	1
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:CG2	0.47	2.77	7	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:98:ARG:NH2	0.47	2.23	9	1
1:A:49:SER:HB2	1:A:83:MET:CE	0.47	2.39	17	1
1:A:75:SER:C	1:A:76:LYS:HD2	0.47	2.34	1	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ALA:O	1:A:112:LEU:HB2	0.47	2.09	17	9
1:A:4:LEU:HD23	1:A:107:TRP:CE3	0.47	2.44	4	1
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:HG22	0.47	2.24	17	2
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:CD	0.47	2.56	14	1
1:A:77:ASN:O	1:A:78:THR:HB	0.47	2.10	18	12
1:A:80:TYR:N	1:A:80:TYR:HD1	0.47	2.06	1	9
1:A:24:ALA:O	1:A:77:ASN:O	0.47	2.32	9	9
1:A:71:SER:N	1:A:80:TYR:O	0.47	2.47	13	8
1:A:21:SER:HB3	1:A:80:TYR:HA	0.47	1.85	20	8
1:A:88:ALA:N	1:A:115:VAL:HB	0.47	2.24	6	2
1:A:90:ASP:O	1:A:91:THR:O	0.47	2.31	18	3
1:A:98:ARG:HB3	1:A:104:PHE:HA	0.47	1.84	16	2
1:A:93:VAL:CG1	1:A:112:LEU:N	0.47	2.76	14	1
1:A:30:SER:OG	1:A:51:VAL:CG2	0.47	2.63	16	1
1:A:39:GLN:CA	1:A:93:VAL:O	0.47	2.62	5	7
1:A:37:VAL:CG1	1:A:38:ARG:H	0.47	2.22	17	6
1:A:3:GLN:N	1:A:4:LEU:CD1	0.47	2.77	9	3
1:A:76:LYS:C	1:A:77:ASN:CG	0.47	2.83	16	5
1:A:60:TYR:CD1	1:A:60:TYR:N	0.47	2.83	5	20
1:A:73:ASP:HB2	1:A:78:THR:O	0.47	2.09	13	10
1:A:38:ARG:O	1:A:39:GLN:HB2	0.47	2.10	2	11
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:HG12	0.47	1.86	2	5
1:A:71:SER:HB3	1:A:80:TYR:HB2	0.47	1.85	3	1
1:A:95:TYR:CD2	1:A:110:GLY:HA2	0.47	2.45	18	3
1:A:100:LYS:CD	1:A:103:ALA:CB	0.47	2.93	19	3
1:A:11:LEU:C	1:A:18:LEU:HD12	0.47	2.34	7	2
1:A:38:ARG:C	1:A:45:ARG:HG3	0.47	2.33	10	2
1:A:92:ALA:O	1:A:113:VAL:N	0.47	2.47	14	1
1:A:12:VAL:HG11	1:A:86:LEU:CD2	0.47	2.39	15	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:29:PHE:N	0.47	2.83	20	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:82:GLN:HG3	0.47	2.40	13	3
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD21	0.47	2.39	3	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:MET:CB	0.47	2.61	14	3
1:A:65:LYS:CG	1:A:65:LYS:O	0.47	2.62	6	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:VAL:CB	0.47	2.39	8	3
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:HG	0.47	2.10	10	2
1:A:22:CYS:HB3	1:A:79:LEU:HD21	0.47	1.87	13	3
1:A:65:LYS:O	1:A:65:LYS:HG3	0.47	2.10	14	1
1:A:6:GLU:O	1:A:6:GLU:OE1	0.47	2.33	15	1
1:A:37:VAL:CG2	1:A:38:ARG:H	0.47	2.14	18	1
1:A:64:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CD1	0.47	2.98	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ASP:O	1:A:65:LYS:CG	0.47	2.63	20	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:77:ASN:C	0.47	2.93	11	15
1:A:36:TRP:NE1	1:A:81:LEU:CG	0.47	2.77	16	13
1:A:98:ARG:NH1	1:A:98:ARG:HG3	0.47	2.25	15	2
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLN:HB2	0.47	2.10	9	5
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:C	0.47	2.57	7	4
1:A:87:ARG:CZ	1:A:87:ARG:HB3	0.47	2.40	7	1
1:A:99:LEU:HA	1:A:104:PHE:CD1	0.47	2.44	11	1
1:A:30:SER:OG	1:A:72:ARG:NH2	0.47	2.48	13	1
1:A:10:GLY:N	1:A:18:LEU:HD11	0.47	2.24	18	1
1:A:64:VAL:CG1	1:A:85:SER:OG	0.47	2.62	18	1
1:A:22:CYS:HB2	1:A:79:LEU:CD2	0.47	2.35	2	2
1:A:84:ASN:CG	1:A:85:SER:N	0.47	2.72	20	7
1:A:91:THR:CG2	1:A:113:VAL:O	0.47	2.57	4	1
1:A:93:VAL:O	1:A:94:TYR:CD1	0.47	2.68	10	4
1:A:99:LEU:C	1:A:100:LYS:HG2	0.47	2.34	7	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:C	0.47	2.93	17	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:31:SER:HB2	0.47	2.10	2	9
1:A:69:THR:CG2	1:A:69:THR:O	0.47	2.63	19	6
1:A:18:LEU:CD2	1:A:83:MET:HG3	0.47	2.40	4	2
1:A:109:GLN:CD	1:A:109:GLN:O	0.47	2.57	8	1
1:A:2:VAL:HB	1:A:106:TYR:CE2	0.47	2.45	9	1
1:A:98:ARG:HD3	1:A:103:ALA:HB1	0.47	1.87	9	1
1:A:107:TRP:H	1:A:107:TRP:CD1	0.47	2.27	9	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:83:MET:HA	0.47	2.44	10	3
1:A:98:ARG:HG2	1:A:104:PHE:CA	0.47	2.40	14	2
1:A:91:THR:CG2	1:A:92:ALA:N	0.47	2.78	14	1
1:A:71:SER:C	1:A:72:ARG:HG2	0.46	2.35	1	7
1:A:38:ARG:HD2	1:A:47:ILE:CA	0.46	2.40	2	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:GLU:HB2	0.46	2.10	3	8
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:ARG:N	0.46	2.26	6	1
1:A:62:ASP:OD1	1:A:63:SER:N	0.46	2.48	6	1
1:A:6:GLU:OE2	1:A:110:GLY:C	0.46	2.58	9	1
1:A:86:LEU:CB	1:A:115:VAL:CG1	0.46	2.93	20	2
1:A:31:SER:HB2	1:A:32:TYR:CE1	0.46	2.45	12	2
1:A:37:VAL:HG22	1:A:94:TYR:CB	0.46	2.37	19	1
1:A:84:ASN:OD1	1:A:84:ASN:C	0.46	2.58	2	4
1:A:41:PRO:HD2	1:A:91:THR:O	0.46	2.10	3	1
1:A:4:LEU:HD21	1:A:107:TRP:H	0.46	1.70	4	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:109:GLN:HB2	0.46	2.39	5	1
1:A:99:LEU:HB2	1:A:104:PHE:CE2	0.46	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ARG:O	1:A:98:ARG:HD2	0.46	2.10	11	1
1:A:92:ALA:O	1:A:112:LEU:CA	0.46	2.63	20	1
1:A:84:ASN:O	1:A:85:SER:OG	0.46	2.33	4	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:108:GLY:O	0.46	2.10	6	1
1:A:98:ARG:HG3	1:A:107:TRP:CE2	0.46	2.45	10	1
1:A:100:LYS:HD3	1:A:101:LYS:O	0.46	2.10	11	1
1:A:5:VAL:C	1:A:6:GLU:HG3	0.46	2.35	14	1
1:A:89:GLU:C	1:A:90:ASP:CG	0.46	2.83	16	1
1:A:37:VAL:C	1:A:95:TYR:H	0.46	2.19	19	2
1:A:37:VAL:CB	1:A:48:VAL:HG12	0.46	2.34	18	1
1:A:53:GLY:O	1:A:55:GLY:N	0.46	2.49	17	6
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ASP:OD1	0.46	2.33	2	3
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:HD12	0.46	2.36	3	2
1:A:12:VAL:HB	1:A:18:LEU:CD2	0.46	2.40	3	1
1:A:71:SER:O	1:A:72:ARG:HG2	0.46	2.11	4	2
1:A:6:GLU:OE2	1:A:6:GLU:O	0.46	2.32	7	1
1:A:72:ARG:CA	1:A:79:LEU:HA	0.46	2.40	10	1
1:A:98:ARG:HB2	1:A:103:ALA:O	0.46	2.11	11	2
1:A:30:SER:O	1:A:54:SER:OG	0.46	2.32	16	1
1:A:37:VAL:HG11	1:A:47:ILE:CG1	0.46	2.39	18	1
1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:HG3	0.46	2.11	2	8
1:A:38:ARG:HD3	1:A:47:ILE:CG1	0.46	2.40	18	2
1:A:6:GLU:OE2	1:A:109:GLN:HB2	0.46	2.10	12	4
1:A:6:GLU:CD	1:A:110:GLY:N	0.46	2.73	9	1
1:A:99:LEU:O	1:A:100:LYS:HB3	0.46	2.10	18	3
1:A:14:PRO:HA	1:A:87:ARG:HA	0.46	1.88	15	4
1:A:38:ARG:NE	1:A:47:ILE:HG13	0.46	2.26	12	2
1:A:13:GLN:HG3	1:A:14:PRO:N	0.46	2.25	19	2
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HB	0.46	2.37	19	1
1:A:98:ARG:HD2	1:A:98:ARG:O	0.46	2.11	19	1
1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:CD2	0.46	2.89	10	4
1:A:6:GLU:HB3	1:A:96:CYS:SG	0.46	2.51	10	7
1:A:24:ALA:CB	1:A:29:PHE:CE2	0.46	2.83	8	6
1:A:12:VAL:HG23	1:A:115:VAL:CB	0.46	2.40	7	1
1:A:106:TYR:C	1:A:107:TRP:O	0.46	2.58	9	1
1:A:99:LEU:HD12	1:A:99:LEU:N	0.46	2.24	15	1
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:N	0.46	2.49	18	1
1:A:2:VAL:HG22	1:A:27:PHE:HD1	0.46	1.68	19	1
1:A:4:LEU:HB3	1:A:24:ALA:HA	0.46	1.87	2	4
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:C	0.46	2.36	7	7
1:A:111:THR:CG2	1:A:112:LEU:N	0.46	2.78	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ARG:HG2	1:A:103:ALA:CB	0.46	2.41	3	2
1:A:20:LEU:CD2	1:A:83:MET:CE	0.46	2.81	9	2
1:A:65:LYS:O	1:A:66:GLY:C	0.46	2.59	15	3
1:A:52:SER:HB3	1:A:99:LEU:HD21	0.46	1.86	11	1
1:A:9:GLY:O	1:A:10:GLY:C	0.46	2.59	12	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:109:GLN:HB2	0.46	1.87	14	1
1:A:50:ALA:CB	1:A:59:TYR:HB2	0.46	2.41	16	3
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:N	0.46	2.48	15	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:113:VAL:HG23	0.46	1.86	16	1
1:A:7:SER:O	1:A:21:SER:OG	0.46	2.34	17	1
1:A:32:TYR:CB	1:A:100:LYS:HE3	0.46	2.40	17	1
1:A:98:ARG:NH1	1:A:103:ALA:HB2	0.46	2.26	17	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:20:LEU:CG	0.46	2.41	18	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:98:ARG:NH1	0.46	2.84	2	1
1:A:97:ALA:HA	1:A:107:TRP:CB	0.46	2.41	19	3
1:A:62:ASP:OD1	1:A:62:ASP:O	0.46	2.34	8	1
1:A:99:LEU:C	1:A:100:LYS:HG3	0.46	2.36	12	1
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:HG22	0.46	2.34	17	1
1:A:36:TRP:NE1	1:A:81:LEU:HG	0.46	2.26	5	11
1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:HG2	0.46	2.11	4	1
1:A:73:ASP:C	1:A:76:LYS:HD3	0.46	2.36	10	4
1:A:16:GLY:C	1:A:17:SER:OG	0.46	2.58	19	2
1:A:72:ARG:HD3	1:A:79:LEU:HD13	0.46	1.85	8	1
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:CB	0.46	2.40	18	4
1:A:12:VAL:O	1:A:115:VAL:CB	0.46	2.64	12	1
1:A:64:VAL:CB	1:A:68:PHE:CE1	0.46	2.99	15	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:76:LYS:HB2	0.46	2.35	15	1
1:A:19:ARG:O	1:A:19:ARG:HG2	0.46	2.11	20	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:N	0.46	2.79	1	1
1:A:12:VAL:CG2	1:A:115:VAL:HA	0.46	2.32	2	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:76:LYS:HD3	0.46	2.36	16	7
1:A:43:LYS:O	1:A:44:GLU:CB	0.46	2.60	19	2
1:A:88:ALA:CA	1:A:115:VAL:HB	0.46	2.41	6	2
1:A:67:ARG:O	1:A:67:ARG:HG3	0.46	2.11	7	1
1:A:98:ARG:HB2	1:A:104:PHE:O	0.46	2.11	9	1
1:A:41:PRO:HG3	1:A:91:THR:O	0.46	2.11	18	2
1:A:38:ARG:CB	1:A:38:ARG:CZ	0.46	2.91	14	1
1:A:33:ALA:C	1:A:34:MET:HG3	0.46	2.35	19	2
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:HD2	0.46	2.11	18	1
1:A:7:SER:OG	1:A:8:GLY:N	0.45	2.47	1	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:O	0.45	2.11	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:ASP:C	1:A:115:VAL:CG2	0.45	2.88	2	1
1:A:75:SER:CB	1:A:76:LYS:HE3	0.45	2.41	19	3
1:A:100:LYS:HD3	1:A:100:LYS:C	0.45	2.36	11	2
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:HD23	0.45	2.36	8	1
1:A:83:MET:SD	1:A:113:VAL:HG11	0.45	2.52	18	1
1:A:33:ALA:O	1:A:100:LYS:HD3	0.45	2.10	19	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:83:MET:HG3	0.45	1.87	2	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:76:LYS:CD	0.45	2.89	16	5
1:A:105:ASP:C	1:A:106:TYR:CD1	0.45	2.94	5	1
1:A:104:PHE:C	1:A:105:ASP:CG	0.45	2.83	6	2
1:A:72:ARG:CD	1:A:72:ARG:N	0.45	2.79	10	1
1:A:38:ARG:HB2	1:A:38:ARG:CZ	0.45	2.40	14	1
1:A:94:TYR:HB2	1:A:111:THR:HG22	0.45	1.89	14	1
1:A:37:VAL:HB	1:A:47:ILE:HG12	0.45	1.88	12	11
1:A:94:TYR:OH	1:A:113:VAL:CG2	0.45	2.61	7	2
1:A:4:LEU:HD23	1:A:107:TRP:CD2	0.45	2.47	4	4
1:A:34:MET:HG3	1:A:35:SER:N	0.45	2.26	5	1
1:A:11:LEU:O	1:A:12:VAL:HG22	0.45	2.11	10	2
1:A:71:SER:O	1:A:72:ARG:HD2	0.45	2.11	17	2
1:A:4:LEU:HD21	1:A:106:TYR:CB	0.45	2.42	14	1
1:A:6:GLU:CG	1:A:109:GLN:HB3	0.45	2.41	19	1
1:A:100:LYS:HB2	1:A:100:LYS:NZ	0.45	2.26	20	1
1:A:10:GLY:C	1:A:18:LEU:CG	0.45	2.89	7	2
1:A:21:SER:HA	1:A:79:LEU:O	0.45	2.11	13	10
1:A:99:LEU:HA	1:A:104:PHE:CZ	0.45	2.47	3	1
1:A:77:ASN:CG	1:A:77:ASN:O	0.45	2.59	5	2
1:A:62:ASP:OD1	1:A:63:SER:OG	0.45	2.34	6	1
1:A:98:ARG:HD2	1:A:103:ALA:O	0.45	2.11	8	1
1:A:4:LEU:HD11	1:A:106:TYR:CE2	0.45	2.46	9	1
1:A:90:ASP:C	1:A:91:THR:O	0.45	2.60	14	3
1:A:4:LEU:CD1	1:A:107:TRP:CD2	0.45	2.78	10	1
1:A:16:GLY:C	1:A:84:ASN:HB2	0.45	2.36	12	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:20:LEU:HD11	0.45	1.79	16	1
1:A:98:ARG:HB3	1:A:104:PHE:N	0.45	2.26	16	1
1:A:2:VAL:CG2	1:A:27:PHE:HB3	0.45	2.41	20	1
1:A:59:TYR:O	1:A:60:TYR:CD1	0.45	2.70	9	10
1:A:104:PHE:O	1:A:105:ASP:OD2	0.45	2.34	6	2
1:A:103:ALA:HA	1:A:106:TYR:OH	0.45	2.11	13	2
1:A:29:PHE:CE1	1:A:74:ASN:HA	0.45	2.46	16	2
1:A:35:SER:N	1:A:99:LEU:HG	0.45	2.27	16	1
1:A:51:VAL:HG21	1:A:72:ARG:CZ	0.45	2.42	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:GLY:O	1:A:17:SER:HB2	0.45	2.12	18	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:N	0.45	2.26	14	2
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:ALA:CB	0.45	2.40	14	2
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:C	0.45	2.37	13	1
1:A:30:SER:OG	1:A:51:VAL:HG22	0.45	2.11	16	1
1:A:52:SER:OG	1:A:99:LEU:HG	0.45	2.11	17	1
1:A:34:MET:HE2	1:A:79:LEU:CD2	0.45	2.42	18	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:100:LYS:HD3	0.45	2.46	19	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:86:LEU:HD13	0.45	2.42	3	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:73:ASP:O	0.45	2.70	3	2
1:A:90:ASP:H	1:A:115:VAL:HG21	0.45	1.72	3	1
1:A:37:VAL:C	1:A:38:ARG:HD3	0.45	2.37	14	7
1:A:13:GLN:CG	1:A:14:PRO:CD	0.45	2.94	12	1
1:A:72:ARG:NH1	1:A:72:ARG:HG3	0.45	2.27	12	2
1:A:52:SER:CB	1:A:57:SER:CB	0.45	2.95	17	2
1:A:38:ARG:NH2	1:A:47:ILE:HG13	0.45	2.27	19	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:31:SER:HB3	0.45	2.12	14	7
1:A:76:LYS:O	1:A:77:ASN:HB2	0.45	2.12	7	13
1:A:18:LEU:O	1:A:82:GLN:HA	0.45	2.12	19	4
1:A:38:ARG:O	1:A:39:GLN:OE1	0.45	2.35	2	2
1:A:12:VAL:HB	1:A:18:LEU:CD1	0.45	2.41	3	1
1:A:29:PHE:CD1	1:A:72:ARG:NE	0.45	2.85	3	1
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:HG13	0.45	2.10	5	1
1:A:65:LYS:HG2	1:A:65:LYS:O	0.45	2.12	5	2
1:A:60:TYR:O	1:A:61:ALA:C	0.45	2.60	6	6
1:A:65:LYS:HD2	1:A:65:LYS:N	0.45	2.27	7	1
1:A:16:GLY:O	1:A:17:SER:OG	0.45	2.34	15	2
1:A:114:THR:O	1:A:115:VAL:C	0.45	2.59	16	2
1:A:18:LEU:CG	1:A:19:ARG:N	0.45	2.79	12	2
1:A:34:MET:HA	1:A:99:LEU:CD1	0.45	2.42	14	1
1:A:111:THR:O	1:A:112:LEU:C	0.45	2.57	14	1
1:A:22:CYS:SG	1:A:34:MET:SD	0.45	3.14	2	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:VAL:CG2	0.45	2.39	4	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:82:GLN:O	0.45	2.12	17	2
1:A:4:LEU:HD12	1:A:27:PHE:CE2	0.45	2.46	8	1
1:A:52:SER:CB	1:A:57:SER:N	0.45	2.80	16	1
1:A:20:LEU:O	1:A:81:LEU:HB2	0.45	2.12	6	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:111:THR:CG2	0.45	2.95	6	1
1:A:73:ASP:N	1:A:79:LEU:HA	0.45	2.27	17	2
1:A:16:GLY:C	1:A:84:ASN:HA	0.45	2.37	12	3
1:A:2:VAL:CG1	1:A:106:TYR:CD1	0.45	3.00	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:GLU:CD	1:A:6:GLU:O	0.45	2.59	16	1
1:A:6:GLU:CD	1:A:109:GLN:CB	0.45	2.90	19	1
1:A:38:ARG:HA	1:A:46:GLU:O	0.45	2.12	20	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:LEU:O	0.44	2.60	19	6
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:C	0.44	2.95	6	5
1:A:79:LEU:O	1:A:79:LEU:CD2	0.44	2.58	2	1
1:A:73:ASP:HB3	1:A:76:LYS:CB	0.44	2.42	19	4
1:A:75:SER:C	1:A:76:LYS:CE	0.44	2.90	4	2
1:A:103:ALA:O	1:A:104:PHE:HB2	0.44	2.11	17	3
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:HB2	0.44	1.89	18	2
1:A:43:LYS:C	1:A:44:GLU:O	0.44	2.60	15	5
1:A:4:LEU:CD2	1:A:107:TRP:H	0.44	2.25	8	2
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:HG22	0.44	2.12	9	2
1:A:98:ARG:C	1:A:98:ARG:HD2	0.44	2.36	11	2
1:A:38:ARG:HD2	1:A:47:ILE:CG1	0.44	2.42	12	1
1:A:35:SER:N	1:A:99:LEU:HD12	0.44	2.28	18	1
1:A:24:ALA:HB2	1:A:107:TRP:CH2	0.44	2.46	19	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:113:VAL:HG11	0.44	2.47	19	1
1:A:12:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD13	0.44	2.43	4	1
1:A:10:GLY:CA	1:A:18:LEU:CD2	0.44	2.95	1	1
1:A:37:VAL:CG1	1:A:94:TYR:HB3	0.44	2.40	2	5
1:A:65:LYS:O	1:A:65:LYS:HG2	0.44	2.13	12	5
1:A:72:ARG:CZ	1:A:74:ASN:HB2	0.44	2.43	6	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:100:LYS:HE3	0.44	2.27	6	1
1:A:87:ARG:O	1:A:87:ARG:HG3	0.44	2.12	13	4
1:A:100:LYS:HD2	1:A:103:ALA:HB2	0.44	1.89	19	1
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLN:OE1	0.44	2.34	19	1
1:A:41:PRO:CD	1:A:92:ALA:HA	0.44	2.43	3	3
1:A:75:SER:C	1:A:76:LYS:CD	0.44	2.91	8	2
1:A:73:ASP:HB3	1:A:78:THR:O	0.44	2.12	15	3
1:A:29:PHE:HB2	1:A:72:ARG:HD3	0.44	1.90	5	2
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:LYS:HG2	0.44	2.13	7	4
1:A:98:ARG:HD2	1:A:103:ALA:CB	0.44	2.43	8	2
1:A:40:ALA:N	1:A:93:VAL:HB	0.44	2.28	11	1
1:A:72:ARG:NH1	1:A:72:ARG:CG	0.44	2.78	12	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:76:LYS:CB	0.44	2.90	15	1
1:A:39:GLN:HB3	1:A:93:VAL:HB	0.44	1.89	19	4
1:A:4:LEU:HD12	1:A:27:PHE:HE1	0.44	1.71	20	2
1:A:72:ARG:HD2	1:A:74:ASN:N	0.44	2.28	6	3
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ASP:CB	0.44	2.64	6	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:TYR:CD1	0.44	2.71	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ALA:O	1:A:34:MET:HB3	0.44	2.13	15	4
1:A:7:SER:N	1:A:21:SER:O	0.44	2.50	13	1
1:A:30:SER:HB3	1:A:72:ARG:CZ	0.44	2.41	15	1
1:A:98:ARG:CZ	1:A:103:ALA:HB2	0.44	2.43	17	1
1:A:37:VAL:C	1:A:38:ARG:HG2	0.44	2.38	18	1
1:A:48:VAL:HG13	1:A:81:LEU:HD11	0.44	1.88	18	1
1:A:41:PRO:HD3	1:A:91:THR:O	0.44	2.12	20	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:28:THR:O	0.44	2.65	1	1
1:A:96:CYS:HB2	1:A:107:TRP:HB3	0.44	1.88	3	1
1:A:52:SER:O	1:A:57:SER:HB2	0.44	2.13	8	8
1:A:29:PHE:CZ	1:A:77:ASN:C	0.44	2.96	7	6
1:A:29:PHE:HB2	1:A:72:ARG:CD	0.44	2.42	9	2
1:A:35:SER:N	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.80	11	1
1:A:36:TRP:CB	1:A:96:CYS:HA	0.44	2.40	16	3
1:A:47:ILE:HG21	1:A:59:TYR:HD2	0.44	1.73	19	2
1:A:92:ALA:O	1:A:112:LEU:HA	0.44	2.12	20	1
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:CE	0.44	2.66	4	1
1:A:14:PRO:HA	1:A:86:LEU:O	0.44	2.12	11	2
1:A:12:VAL:CB	1:A:18:LEU:HD12	0.44	2.41	14	1
1:A:30:SER:O	1:A:54:SER:HB3	0.44	2.12	16	1
1:A:48:VAL:O	1:A:49:SER:OG	0.44	2.36	16	1
1:A:81:LEU:HB3	1:A:83:MET:CG	0.44	2.42	17	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:83:MET:O	0.44	2.13	20	5
1:A:91:THR:CA	1:A:115:VAL:HG23	0.44	2.41	2	1
1:A:84:ASN:C	1:A:86:LEU:HD22	0.44	2.38	7	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:109:GLN:HG2	0.44	2.43	9	1
1:A:3:GLN:CB	1:A:25:SER:HB3	0.44	2.43	10	2
1:A:22:CYS:HB2	1:A:34:MET:CE	0.44	2.43	11	1
1:A:33:ALA:O	1:A:98:ARG:NH1	0.44	2.51	16	1
1:A:72:ARG:HD2	1:A:79:LEU:HD13	0.44	1.90	16	1
1:A:4:LEU:HA	1:A:23:ALA:C	0.44	2.38	1	2
1:A:36:TRP:HE1	1:A:81:LEU:HG	0.44	1.73	13	4
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:O	0.44	2.35	4	1
1:A:35:SER:HB2	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.43	8	1
1:A:22:CYS:SG	1:A:36:TRP:CE3	0.44	3.11	12	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:114:THR:OG1	0.44	2.13	18	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:83:MET:HE1	0.44	1.90	19	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:95:TYR:HE1	0.43	1.70	3	5
1:A:71:SER:HB3	1:A:80:TYR:CB	0.43	2.42	3	1
1:A:6:GLU:O	1:A:7:SER:HB3	0.43	2.13	7	2
1:A:18:LEU:HB2	1:A:83:MET:HG3	0.43	1.90	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:VAL:CG1	1:A:106:TYR:OH	0.43	2.62	9	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:83:MET:HG3	0.43	2.43	17	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:103:ALA:CB	0.43	2.81	19	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:98:ARG:NE	0.43	2.28	1	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:27:PHE:CE1	0.43	2.48	2	1
1:A:16:GLY:O	1:A:84:ASN:HB3	0.43	2.13	4	1
1:A:87:ARG:O	1:A:87:ARG:HG2	0.43	2.13	17	3
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:CB	0.43	2.91	6	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:86:LEU:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:72:ARG:CG	1:A:79:LEU:HB2	0.43	2.43	10	1
1:A:26:GLY:C	1:A:28:THR:N	0.43	2.75	12	2
1:A:4:LEU:HA	1:A:23:ALA:O	0.43	2.13	17	1
1:A:36:TRP:HE1	1:A:81:LEU:HD11	0.43	1.74	19	1
1:A:38:ARG:CZ	1:A:47:ILE:HG13	0.43	2.43	1	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:CD1	0.43	2.94	5	1
1:A:21:SER:HB2	1:A:78:THR:OG1	0.43	2.13	6	2
1:A:32:TYR:HB3	1:A:100:LYS:CD	0.43	2.43	8	2
1:A:2:VAL:CG1	1:A:106:TYR:CG	0.43	3.01	13	1
1:A:6:GLU:C	1:A:7:SER:OG	0.43	2.61	17	1
1:A:39:GLN:O	1:A:93:VAL:C	0.43	2.61	18	1
1:A:100:LYS:HZ2	1:A:103:ALA:HB1	0.43	1.73	19	1
1:A:62:ASP:O	1:A:65:LYS:HG2	0.43	2.13	20	1
1:A:4:LEU:HB3	1:A:24:ALA:CA	0.43	2.43	6	3
1:A:57:SER:C	1:A:58:THR:HG23	0.43	2.38	2	1
1:A:84:ASN:O	1:A:85:SER:HB3	0.43	2.13	16	4
1:A:12:VAL:HG21	1:A:17:SER:O	0.43	2.13	8	1
1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:HD3	0.43	2.14	9	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:HG3	0.43	2.13	13	1
1:A:91:THR:N	1:A:115:VAL:HG11	0.43	2.28	17	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:103:ALA:CB	0.43	2.82	20	5
1:A:104:PHE:O	1:A:106:TYR:CE2	0.43	2.71	2	2
1:A:107:TRP:CD1	1:A:107:TRP:N	0.43	2.86	11	2
1:A:93:VAL:CG1	1:A:95:TYR:CE1	0.43	3.01	3	1
1:A:28:THR:HG1	1:A:32:TYR:HE1	0.43	1.52	6	1
1:A:89:GLU:O	1:A:89:GLU:CG	0.43	2.66	9	1
1:A:46:GLU:OE1	1:A:92:ALA:HB2	0.43	2.13	11	1
1:A:12:VAL:CG2	1:A:113:VAL:HB	0.43	2.42	18	1
1:A:60:TYR:HB3	1:A:68:PHE:HB2	0.43	1.91	17	5
1:A:72:ARG:HD2	1:A:79:LEU:HD12	0.43	1.90	3	1
1:A:4:LEU:CG	1:A:107:TRP:CD2	0.43	3.02	9	6
1:A:20:LEU:HD21	1:A:113:VAL:CG2	0.43	2.44	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:VAL:CG2	1:A:4:LEU:HD11	0.43	2.33	6	1
1:A:30:SER:CB	1:A:72:ARG:NE	0.43	2.82	9	1
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLN:CD	0.43	2.62	11	1
1:A:92:ALA:H	1:A:113:VAL:HG23	0.43	1.74	17	1
1:A:71:SER:C	1:A:80:TYR:O	0.43	2.60	19	1
1:A:64:VAL:HG22	1:A:85:SER:OG	0.43	2.13	20	1
1:A:17:SER:O	1:A:17:SER:OG	0.43	2.33	6	1
1:A:96:CYS:HB3	1:A:107:TRP:HB3	0.43	1.89	9	1
1:A:6:GLU:CB	1:A:96:CYS:SG	0.43	3.06	11	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:LYS:CD	0.43	2.66	15	1
1:A:8:GLY:HA3	1:A:20:LEU:CB	0.43	2.44	18	1
1:A:98:ARG:C	1:A:99:LEU:HG	0.43	2.37	19	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:102:TYR:OH	0.43	2.71	20	1
1:A:60:TYR:O	1:A:65:LYS:HA	0.43	2.13	20	1
1:A:18:LEU:HD21	1:A:83:MET:HB2	0.43	1.90	4	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:86:LEU:HG	0.43	2.44	10	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:113:VAL:HG11	0.43	2.43	13	1
1:A:63:SER:O	1:A:65:LYS:HE3	0.43	2.13	14	1
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:CD2	0.43	2.92	15	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:111:THR:HG21	0.43	1.91	15	1
1:A:10:GLY:N	1:A:18:LEU:CD1	0.43	2.81	18	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:100:LYS:NZ	0.43	2.29	19	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:83:MET:CG	0.43	2.97	19	1
1:A:48:VAL:HG21	1:A:94:TYR:CD2	0.43	2.47	19	1
1:A:105:ASP:O	1:A:106:TYR:CD1	0.43	2.72	19	1
1:A:39:GLN:C	1:A:45:ARG:HB2	0.43	2.38	20	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:VAL:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:49:SER:HB2	1:A:81:LEU:HD22	0.43	1.91	2	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:LYS:HE2	0.43	2.14	2	1
1:A:12:VAL:CG2	1:A:114:THR:O	0.43	2.67	9	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:20:LEU:CD1	0.43	2.95	11	2
1:A:98:ARG:HG2	1:A:106:TYR:CD2	0.43	2.49	11	1
1:A:100:LYS:CD	1:A:100:LYS:C	0.43	2.91	11	1
1:A:5:VAL:C	1:A:6:GLU:HG2	0.43	2.37	13	1
1:A:38:ARG:HG3	1:A:47:ILE:CA	0.43	2.44	15	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:76:LYS:CG	0.43	2.92	15	1
1:A:24:ALA:O	1:A:29:PHE:CE2	0.43	2.72	19	1
1:A:38:ARG:CA	1:A:46:GLU:C	0.43	2.92	20	1
1:A:96:CYS:O	1:A:107:TRP:HB2	0.43	2.13	2	1
1:A:30:SER:OG	1:A:72:ARG:NE	0.43	2.51	5	1
1:A:71:SER:HB2	1:A:80:TYR:C	0.43	2.39	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:LYS:C	1:A:67:ARG:N	0.43	2.75	9	1
1:A:4:LEU:CB	1:A:107:TRP:CH2	0.43	3.02	17	2
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:GLU:N	0.43	2.79	12	1
1:A:8:GLY:HA3	1:A:20:LEU:HA	0.43	1.91	13	1
1:A:37:VAL:HG22	1:A:46:GLU:O	0.43	2.14	18	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:107:TRP:CH2	0.43	2.44	19	1
1:A:37:VAL:CG2	1:A:94:TYR:HB3	0.43	2.39	19	1
1:A:4:LEU:CG	1:A:107:TRP:CZ3	0.42	3.02	4	3
1:A:99:LEU:O	1:A:100:LYS:HG3	0.42	2.14	4	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HB2	0.42	2.44	7	2
1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:CG	0.42	2.67	8	1
1:A:72:ARG:CG	1:A:79:LEU:CB	0.42	2.97	10	1
1:A:30:SER:CB	1:A:72:ARG:NH1	0.42	2.82	11	1
1:A:94:TYR:OH	1:A:113:VAL:HG11	0.42	2.14	11	1
1:A:98:ARG:CD	1:A:104:PHE:HA	0.42	2.44	11	2
1:A:48:VAL:CG1	1:A:81:LEU:HD12	0.42	2.44	18	1
1:A:3:GLN:NE2	1:A:25:SER:HB2	0.42	2.29	19	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:83:MET:CG	0.42	2.44	19	1
1:A:22:CYS:HB3	1:A:34:MET:HE2	0.42	1.91	2	1
1:A:77:ASN:O	1:A:78:THR:CB	0.42	2.65	19	4
1:A:109:GLN:O	1:A:109:GLN:NE2	0.42	2.52	8	1
1:A:17:SER:HA	1:A:84:ASN:HB3	0.42	1.90	17	2
1:A:98:ARG:HG3	1:A:107:TRP:NE1	0.42	2.29	10	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:CG	0.42	2.67	14	1
1:A:6:GLU:C	1:A:6:GLU:OE1	0.42	2.63	14	1
1:A:12:VAL:HG12	1:A:17:SER:CA	0.42	2.44	14	1
1:A:37:VAL:CG2	1:A:38:ARG:N	0.42	2.74	18	1
1:A:33:ALA:C	1:A:100:LYS:HG2	0.42	2.39	19	1
1:A:37:VAL:CA	1:A:94:TYR:HB3	0.42	2.41	2	3
1:A:28:THR:OG1	1:A:29:PHE:N	0.42	2.53	11	4
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:CD2	0.42	2.39	4	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:83:MET:SD	0.42	2.54	4	1
1:A:99:LEU:O	1:A:100:LYS:HG2	0.42	2.13	7	3
1:A:6:GLU:OE2	1:A:95:TYR:HA	0.42	2.13	10	1
1:A:39:GLN:O	1:A:40:ALA:CB	0.42	2.67	16	1
1:A:37:VAL:CG1	1:A:47:ILE:C	0.42	2.92	17	1
1:A:72:ARG:CD	1:A:79:LEU:HB2	0.42	2.45	2	1
1:A:20:LEU:O	1:A:21:SER:HB3	0.42	2.14	4	2
1:A:87:ARG:C	1:A:115:VAL:HB	0.42	2.39	6	1
1:A:40:ALA:CB	1:A:43:LYS:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:73:ASP:CB	1:A:76:LYS:HD3	0.42	2.45	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:HG2	0.42	2.14	11	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:HA	0.42	1.68	16	1
1:A:38:ARG:HD3	1:A:47:ILE:HG12	0.42	1.91	18	1
1:A:88:ALA:O	1:A:89:GLU:HB2	0.42	2.12	18	1
1:A:36:TRP:HE1	1:A:81:LEU:CD1	0.42	2.27	19	1
1:A:10:GLY:N	1:A:18:LEU:CD2	0.42	2.80	1	2
1:A:52:SER:OG	1:A:57:SER:CB	0.42	2.68	3	1
1:A:88:ALA:H	1:A:115:VAL:CG2	0.42	2.27	7	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:O	0.42	2.14	7	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:VAL:HB	0.42	1.90	10	1
1:A:26:GLY:O	1:A:27:PHE:HB3	0.42	2.15	11	1
1:A:4:LEU:CA	1:A:23:ALA:O	0.42	2.67	17	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:34:MET:HB3	0.42	1.78	2	1
1:A:103:ALA:C	1:A:106:TYR:CE2	0.42	2.97	3	3
1:A:6:GLU:OE2	1:A:110:GLY:N	0.42	2.53	9	1
1:A:30:SER:HB3	1:A:72:ARG:NH1	0.42	2.29	11	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LYS:HB3	0.42	2.15	15	2
1:A:38:ARG:HD2	1:A:47:ILE:HA	0.42	1.90	18	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:32:TYR:CD1	0.42	2.33	19	1
1:A:22:CYS:CB	1:A:79:LEU:CD2	0.42	2.96	2	1
1:A:35:SER:OG	1:A:99:LEU:HG	0.42	2.15	4	2
1:A:4:LEU:HD12	1:A:27:PHE:CE1	0.42	2.49	6	1
1:A:98:ARG:HB2	1:A:107:TRP:NE1	0.42	2.30	7	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:109:GLN:CG	0.42	2.45	9	1
1:A:6:GLU:O	1:A:7:SER:HB2	0.42	2.14	18	2
1:A:87:ARG:HD3	1:A:90:ASP:OD2	0.42	2.14	17	1
1:A:50:ALA:N	1:A:59:TYR:HB2	0.42	2.30	20	1
1:A:52:SER:CA	1:A:99:LEU:HD22	0.42	2.45	3	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:27:PHE:CE2	0.42	2.50	11	4
1:A:51:VAL:HG11	1:A:72:ARG:HE	0.42	1.75	8	1
1:A:6:GLU:CG	1:A:111:THR:HB	0.42	2.45	11	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:CD2	0.42	2.43	11	1
1:A:19:ARG:HG3	1:A:82:GLN:OE1	0.42	2.14	12	1
1:A:14:PRO:CA	1:A:87:ARG:HA	0.42	2.45	15	2
1:A:49:SER:HB2	1:A:81:LEU:CD2	0.42	2.45	2	1
1:A:50:ALA:O	1:A:58:THR:HA	0.42	2.15	5	3
1:A:94:TYR:CZ	1:A:113:VAL:CG2	0.42	3.02	5	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:79:LEU:CG	0.42	2.44	8	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:113:VAL:HG22	0.42	1.91	10	1
1:A:6:GLU:OE1	1:A:111:THR:HB	0.42	2.15	14	1
1:A:38:ARG:CZ	1:A:47:ILE:HB	0.42	2.45	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:SER:HB3	1:A:80:TYR:C	0.42	2.39	3	1
1:A:75:SER:C	1:A:76:LYS:HE3	0.42	2.40	4	1
1:A:69:THR:HG22	1:A:82:GLN:CB	0.42	2.45	6	3
1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:CD	0.42	2.68	9	1
1:A:98:ARG:HD3	1:A:104:PHE:HA	0.42	1.92	11	1
1:A:98:ARG:HG2	1:A:104:PHE:C	0.42	2.40	14	1
1:A:37:VAL:CG1	1:A:47:ILE:CA	0.42	2.98	17	1
1:A:71:SER:O	1:A:79:LEU:HB2	0.41	2.15	14	2
1:A:101:LYS:O	1:A:103:ALA:N	0.41	2.53	2	2
1:A:72:ARG:NH1	1:A:74:ASN:HB2	0.41	2.31	6	2
1:A:4:LEU:HD23	1:A:107:TRP:HA	0.41	1.91	4	1
1:A:26:GLY:O	1:A:28:THR:N	0.41	2.53	12	1
1:A:11:LEU:C	1:A:18:LEU:HD21	0.41	2.40	16	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:83:MET:HB2	0.41	2.47	18	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:18:LEU:CD2	0.41	2.45	19	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:20:LEU:HB2	0.41	1.91	12	1
1:A:100:LYS:CE	1:A:103:ALA:HB1	0.41	2.45	19	1
1:A:113:VAL:O	1:A:113:VAL:HG23	0.41	2.14	20	1
1:A:36:TRP:C	1:A:37:VAL:CG2	0.41	2.89	3	5
1:A:40:ALA:HA	1:A:93:VAL:N	0.41	2.30	1	1
1:A:73:ASP:HB2	1:A:76:LYS:HB2	0.41	1.92	1	1
1:A:33:ALA:O	1:A:98:ARG:HD3	0.41	2.15	2	1
1:A:36:TRP:HZ2	1:A:81:LEU:CG	0.41	2.26	3	2
1:A:78:THR:OG1	1:A:79:LEU:N	0.41	2.54	3	1
1:A:76:LYS:CD	1:A:76:LYS:N	0.41	2.83	12	1
1:A:36:TRP:CD2	1:A:37:VAL:HG23	0.41	2.50	16	2
1:A:64:VAL:O	1:A:66:GLY:N	0.41	2.53	14	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG13	0.41	1.92	17	1
1:A:49:SER:HB3	1:A:81:LEU:CD1	0.41	2.44	19	1
1:A:98:ARG:H	1:A:107:TRP:CD1	0.41	2.33	1	2
1:A:47:ILE:HG22	1:A:61:ALA:HA	0.41	1.91	4	1
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ARG:C	0.41	2.61	19	2
1:A:38:ARG:O	1:A:39:GLN:HG2	0.41	2.15	18	1
1:A:29:PHE:O	1:A:34:MET:HG3	0.41	2.15	19	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG12	0.41	2.45	9	1
1:A:100:LYS:HB2	1:A:103:ALA:CB	0.41	2.41	12	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:C	0.41	2.64	16	1
1:A:47:ILE:HD12	1:A:59:TYR:HB3	0.41	1.92	19	1
1:A:20:LEU:O	1:A:80:TYR:HA	0.41	2.16	1	2
1:A:71:SER:O	1:A:72:ARG:HD3	0.41	2.15	2	1
1:A:101:LYS:O	1:A:103:ALA:O	0.41	2.38	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD23	0.41	1.90	7	1
1:A:44:GLU:C	1:A:45:ARG:O	0.41	2.64	14	3
1:A:70:ILE:CD1	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.93	3	1
1:A:99:LEU:HB2	1:A:104:PHE:CD2	0.41	2.51	7	1
1:A:41:PRO:C	1:A:43:LYS:H	0.41	2.24	14	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:LYS:HD3	0.41	2.16	15	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:94:TYR:CE2	0.41	3.03	17	1
1:A:5:VAL:C	1:A:6:GLU:O	0.41	2.64	18	1
1:A:21:SER:HB3	1:A:80:TYR:CG	0.41	2.50	18	1
1:A:78:THR:HG23	1:A:80:TYR:CE1	0.41	2.50	18	1
1:A:92:ALA:O	1:A:112:LEU:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:72:ARG:O	1:A:73:ASP:OD1	0.41	2.39	4	1
1:A:98:ARG:N	1:A:107:TRP:NE1	0.41	2.68	5	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:115:VAL:HG23	0.41	1.92	10	1
1:A:10:GLY:HA3	1:A:18:LEU:CD1	0.41	2.45	12	1
1:A:32:TYR:O	1:A:100:LYS:HE3	0.41	2.16	12	1
1:A:100:LYS:O	1:A:102:TYR:N	0.41	2.53	12	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:GLU:OE2	0.41	2.39	14	1
1:A:98:ARG:CD	1:A:100:LYS:CG	0.41	2.98	15	1
1:A:87:ARG:O	1:A:115:VAL:CB	0.41	2.69	16	1
1:A:87:ARG:HB3	1:A:90:ASP:OD1	0.41	2.14	16	1
1:A:91:THR:N	1:A:115:VAL:CG1	0.41	2.83	17	1
1:A:37:VAL:C	1:A:38:ARG:CG	0.41	2.94	18	1
1:A:98:ARG:C	1:A:99:LEU:CG	0.41	2.93	19	1
1:A:38:ARG:HD3	1:A:47:ILE:CB	0.41	2.46	2	1
1:A:98:ARG:HG2	1:A:103:ALA:O	0.41	2.15	5	1
1:A:98:ARG:CB	1:A:107:TRP:HE1	0.41	2.28	5	1
1:A:86:LEU:HB2	1:A:115:VAL:CG1	0.41	2.41	8	1
1:A:32:TYR:HB2	1:A:98:ARG:CZ	0.41	2.46	9	1
1:A:14:PRO:HA	1:A:87:ARG:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:34:MET:CB	1:A:98:ARG:HG2	0.41	2.45	12	1
1:A:52:SER:HB2	1:A:57:SER:HB2	0.41	1.92	12	1
1:A:89:GLU:HG3	1:A:89:GLU:O	0.41	2.16	13	1
1:A:35:SER:HB2	1:A:50:ALA:CB	0.41	2.46	14	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:75:SER:N	0.41	2.53	14	1
1:A:49:SER:HB3	1:A:59:TYR:O	0.41	2.16	16	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:45:ARG:C	0.41	2.94	20	1
1:A:12:VAL:HG13	1:A:115:VAL:CG1	0.41	2.29	3	1
1:A:34:MET:O	1:A:99:LEU:HD11	0.41	2.16	6	1
1:A:13:GLN:OE1	1:A:14:PRO:O	0.41	2.39	17	1
1:A:34:MET:CA	1:A:99:LEU:CD1	0.41	2.94	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ILE:CD1	1:A:59:TYR:HB3	0.41	2.45	19	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:94:TYR:CE1	0.41	3.04	19	1
1:A:38:ARG:HD3	1:A:47:ILE:HB	0.40	1.91	2	1
1:A:24:ALA:N	1:A:77:ASN:O	0.40	2.54	3	1
1:A:29:PHE:HE1	1:A:74:ASN:HA	0.40	1.76	3	1
1:A:12:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD13	0.40	1.92	4	1
1:A:6:GLU:CD	1:A:109:GLN:HB3	0.40	2.41	5	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:100:LYS:NZ	0.40	2.69	17	1
1:A:17:SER:OG	1:A:84:ASN:HB3	0.40	2.16	18	1
1:A:36:TRP:CD2	1:A:37:VAL:CG2	0.40	3.04	20	1
1:A:64:VAL:HG13	1:A:85:SER:HB3	0.40	1.93	20	1
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:HG23	0.40	2.17	20	1
1:A:75:SER:N	1:A:76:LYS:HE3	0.40	2.32	5	1
1:A:34:MET:HA	1:A:98:ARG:HG2	0.40	1.92	7	1
1:A:14:PRO:HB3	1:A:87:ARG:CG	0.40	2.46	16	1
1:A:50:ALA:O	1:A:70:ILE:HG12	0.40	2.17	16	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:LYS:HE3	0.40	2.15	16	1
1:A:38:ARG:CD	1:A:47:ILE:HA	0.40	2.46	18	1
1:A:23:ALA:HA	1:A:78:THR:CB	0.40	2.47	19	1
1:A:104:PHE:N	1:A:106:TYR:CD1	0.40	2.90	9	1
1:A:101:LYS:CG	1:A:102:TYR:N	0.40	2.84	20	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:79:LEU:HG	0.40	1.93	3	1
1:A:11:LEU:O	1:A:17:SER:O	0.40	2.40	18	2
1:A:28:THR:OG1	1:A:32:TYR:CD1	0.40	2.74	6	1
1:A:3:GLN:HB3	1:A:25:SER:HB3	0.40	1.94	10	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:LYS:CD	0.40	2.69	10	1
1:A:50:ALA:O	1:A:70:ILE:CG1	0.40	2.70	16	1
1:A:35:SER:HB2	1:A:99:LEU:CD2	0.40	2.46	19	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:4:LEU:CD1	0.40	2.45	2	1
1:A:11:LEU:O	1:A:18:LEU:HD13	0.40	2.17	3	1
1:A:52:SER:O	1:A:57:SER:N	0.40	2.55	13	1
1:A:49:SER:OG	1:A:83:MET:HE1	0.40	2.17	17	1
1:A:73:ASP:N	1:A:78:THR:O	0.40	2.54	17	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	114/117 (97%)	51±3 (45±2%)	39±4 (34±3%)	23±3 (20±3%)	0	2
All	All	2280/2340 (97%)	1028 (45%)	785 (34%)	467 (20%)	0	2

All 61 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	5	VAL	20
1	A	6	GLU	20
1	A	37	VAL	20
1	A	107	TRP	20
1	A	38	ARG	19
1	A	45	ARG	19
1	A	13	GLN	18
1	A	17	SER	18
1	A	101	LYS	17
1	A	46	GLU	16
1	A	33	ALA	15
1	A	86	LEU	14
1	A	12	VAL	13
1	A	24	ALA	13
1	A	105	ASP	12
1	A	74	ASN	12
1	A	112	LEU	12
1	A	99	LEU	11
1	A	39	GLN	9
1	A	51	VAL	9
1	A	28	THR	9
1	A	96	CYS	9
1	A	44	GLU	9
1	A	97	ALA	8
1	A	109	GLN	8
1	A	41	PRO	8
1	A	7	SER	7
1	A	61	ALA	7
1	A	89	GLU	6
1	A	29	PHE	6
1	A	2	VAL	6
1	A	115	VAL	5
1	A	21	SER	5
1	A	34	MET	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	90	ASP	5
1	A	106	TYR	5
1	A	91	THR	4
1	A	27	PHE	4
1	A	108	GLY	4
1	A	100	LYS	4
1	A	104	PHE	3
1	A	77	ASN	3
1	A	26	GLY	3
1	A	4	LEU	2
1	A	85	SER	2
1	A	8	GLY	2
1	A	9	GLY	2
1	A	88	ALA	2
1	A	110	GLY	2
1	A	62	ASP	2
1	A	25	SER	2
1	A	67	ARG	2
1	A	75	SER	1
1	A	63	SER	1
1	A	16	GLY	1
1	A	53	GLY	1
1	A	65	LYS	1
1	A	113	VAL	1
1	A	40	ALA	1
1	A	58	THR	1
1	A	47	ILE	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	91/94 (97%)	51±4 (56±4%)	40±4 (44±4%)	0	3
All	All	1820/1880 (97%)	1026 (56%)	794 (44%)	0	3

All 81 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	4	LEU	20
1	A	29	PHE	20
1	A	47	ILE	20
1	A	59	TYR	20
1	A	68	PHE	20
1	A	83	MET	20
1	A	12	VAL	19
1	A	49	SER	19
1	A	71	SER	18
1	A	79	LEU	18
1	A	18	LEU	17
1	A	20	LEU	17
1	A	99	LEU	17
1	A	100	LYS	17
1	A	72	ARG	16
1	A	98	ARG	16
1	A	6	GLU	15
1	A	21	SER	15
1	A	65	LYS	15
1	A	89	GLU	15
1	A	5	VAL	15
1	A	64	VAL	14
1	A	13	GLN	13
1	A	39	GLN	13
1	A	44	GLU	13
1	A	63	SER	13
1	A	76	LYS	13
1	A	87	ARG	13
1	A	27	PHE	12
1	A	57	SER	12
1	A	106	TYR	12
1	A	114	THR	12
1	A	30	SER	12
1	A	101	LYS	12
1	A	2	VAL	11
1	A	3	GLN	11
1	A	67	ARG	11
1	A	109	GLN	11
1	A	45	ARG	10
1	A	115	VAL	10
1	A	52	SER	10
1	A	85	SER	9
1	A	17	SER	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	SER	9
1	A	78	THR	8
1	A	113	VAL	8
1	A	7	SER	8
1	A	70	ILE	8
1	A	46	GLU	7
1	A	43	LYS	7
1	A	19	ARG	7
1	A	77	ASN	7
1	A	54	SER	7
1	A	62	ASP	7
1	A	80	TYR	6
1	A	22	CYS	6
1	A	86	LEU	6
1	A	104	PHE	6
1	A	38	ARG	6
1	A	35	SER	5
1	A	58	THR	5
1	A	25	SER	5
1	A	112	LEU	5
1	A	11	LEU	4
1	A	34	MET	4
1	A	81	LEU	4
1	A	82	GLN	3
1	A	73	ASP	3
1	A	93	VAL	3
1	A	31	SER	2
1	A	51	VAL	2
1	A	90	ASP	2
1	A	32	TYR	1
1	A	96	CYS	1
1	A	105	ASP	1
1	A	102	TYR	1
1	A	91	THR	1
1	A	107	TRP	1
1	A	84	ASN	1
1	A	36	TRP	1
1	A	94	TYR	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided