



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 06:59 PM BST

PDB ID : 2AFJ
Title : SPRY domain-containing SOCS box protein 2 (SSB-2)
Authors : Masters, S.L.; Yao, S.; Willson, T.A.; Zhang, J.G.; Palmer, K.R.; Smith, B.J.;
Babon, J.J.; Nicola, N.A.; Norton, R.S.; Nicholson, S.E.
Deposited on : 2005-07-26

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
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

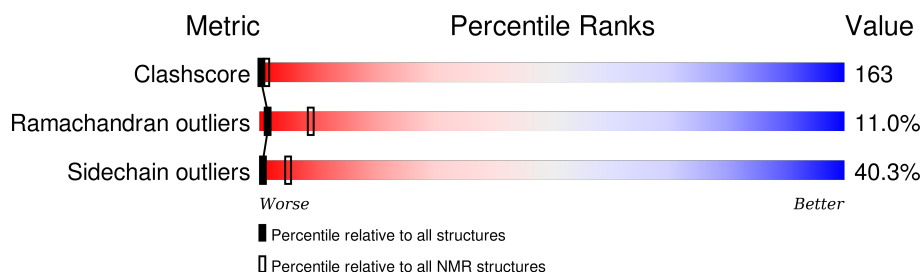
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 36%.

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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	226	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:29-A:97, A:105-A:113, A:128-A:135, A:163-A:219 (143)	1.21	14

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3458 atoms, of which 1703 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called gene rich cluster, C9 gene.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	226	Total	C	H	N	O	S	0
			3458	1096	1703	324	330	5	

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

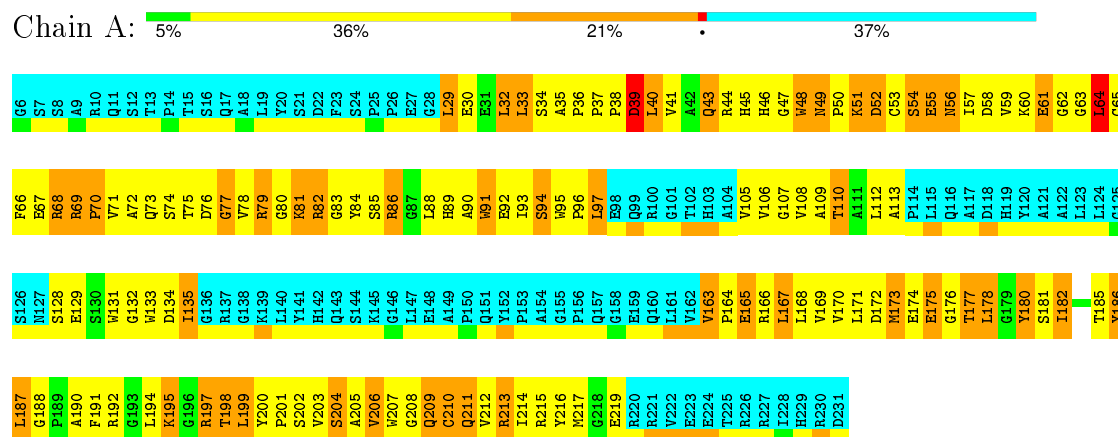
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	6	GLY	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	7	SER	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	8	SER	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	9	ALA	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	10	ARG	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	11	GLN	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	225	THR	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	226	ARG	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	227	ARG	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	228	ILE	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	229	HIS	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	230	ARG	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838
A	231	ASP	-	CLONING ARTIFACT	UNP O88838

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: gene rich cluster, C9 gene

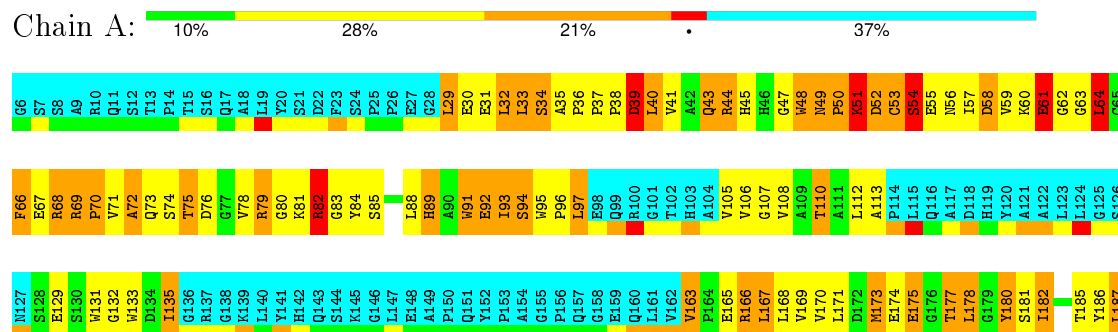


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

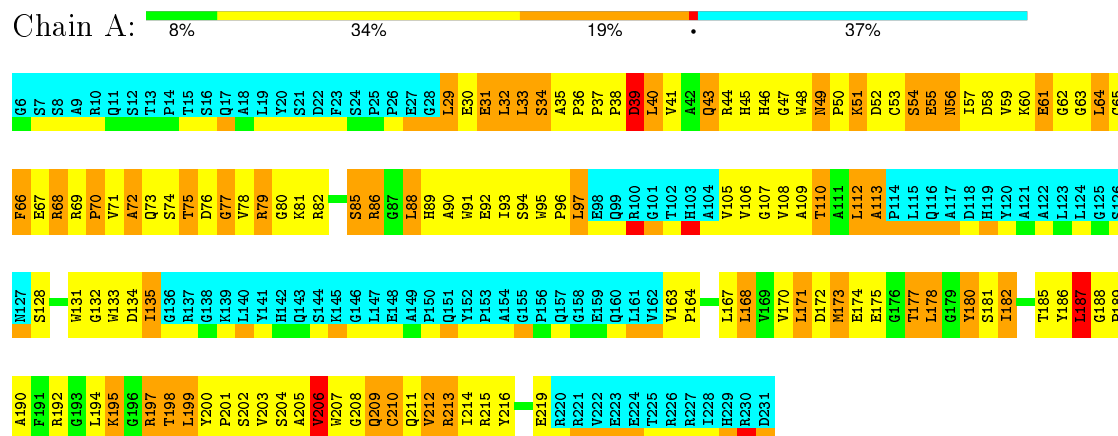
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





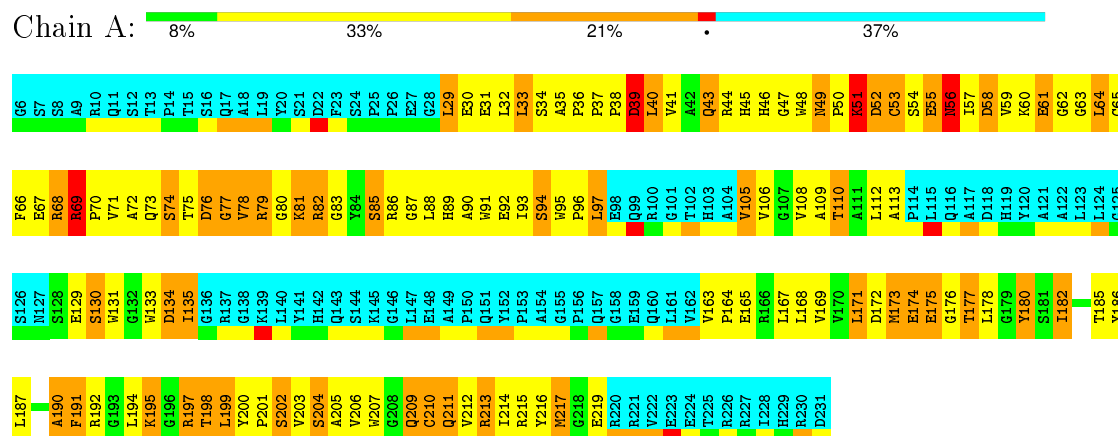
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



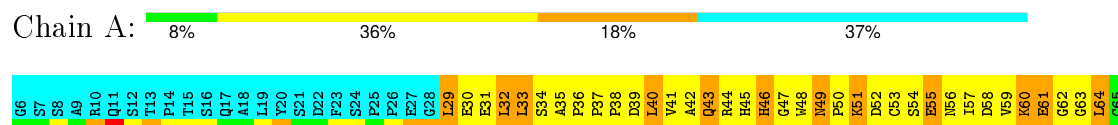
4.2.3 Score per residue for model 3

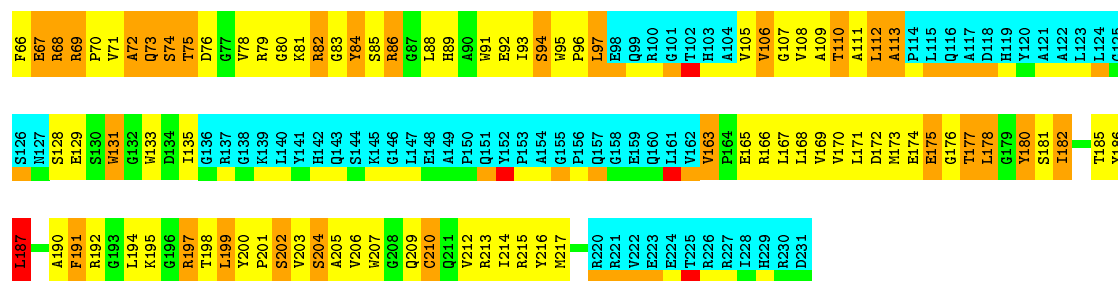
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.4 Score per residue for model 4

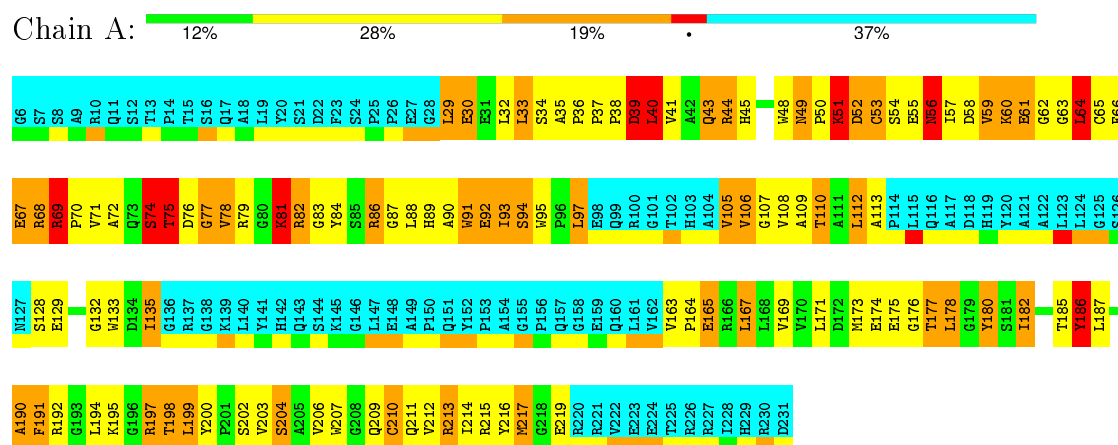
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





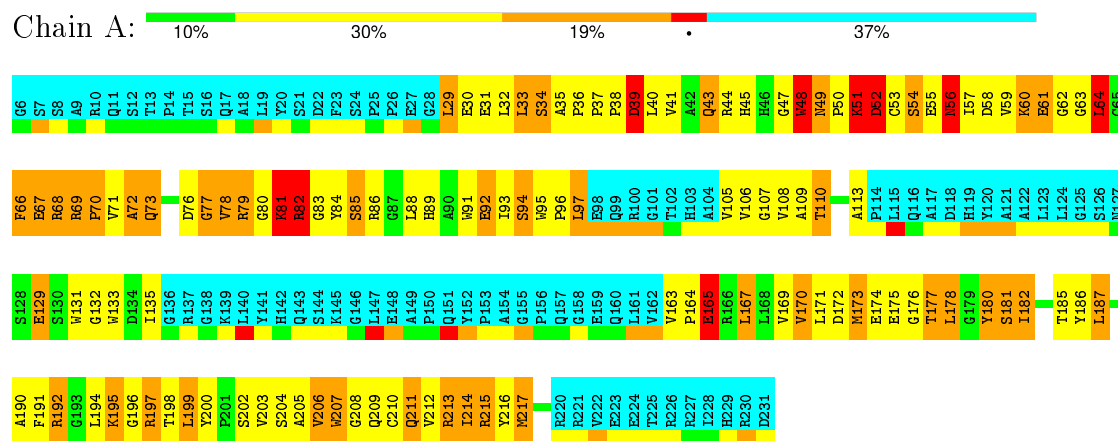
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



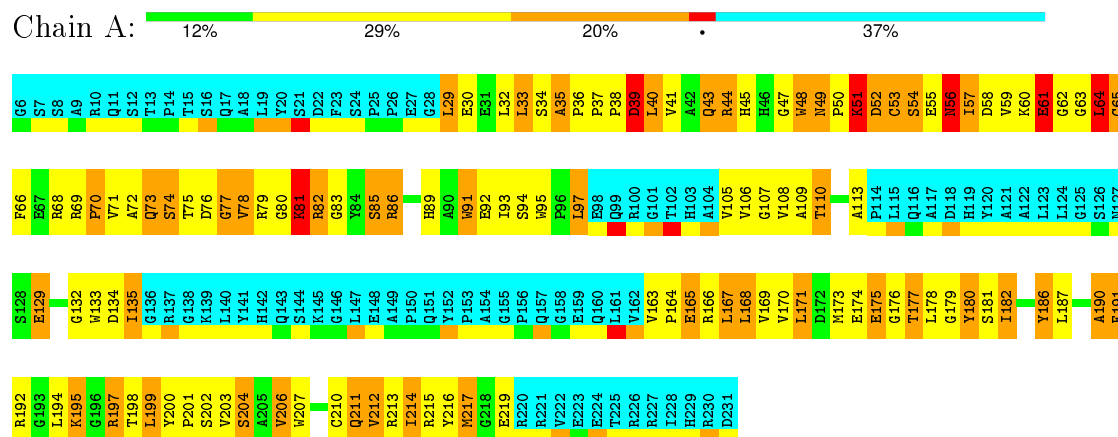
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



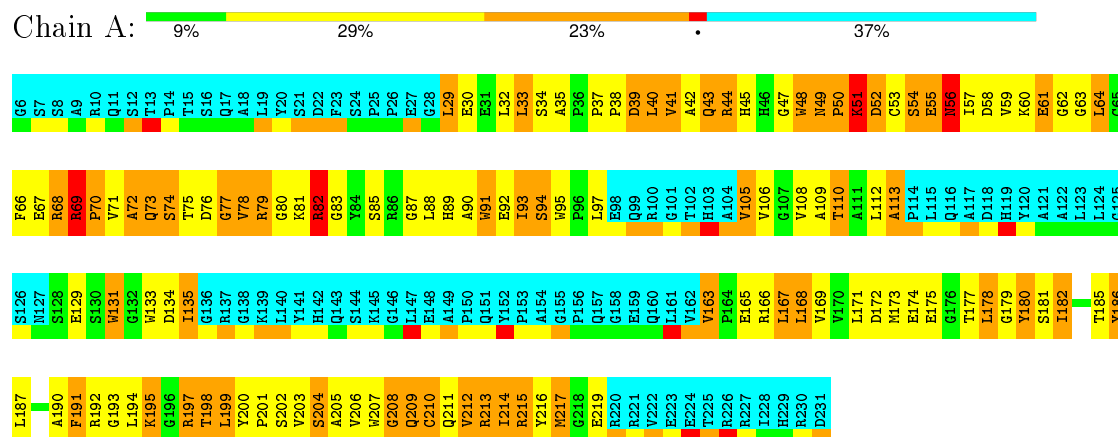
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



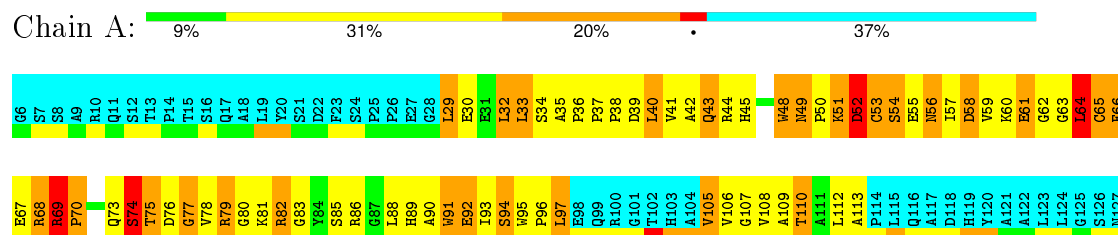
4.2.8 Score per residue for model 8

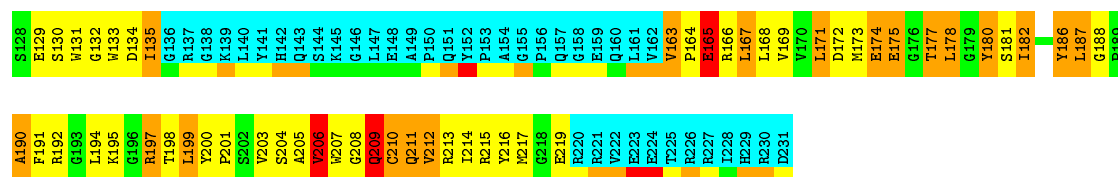
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.9 Score per residue for model 9

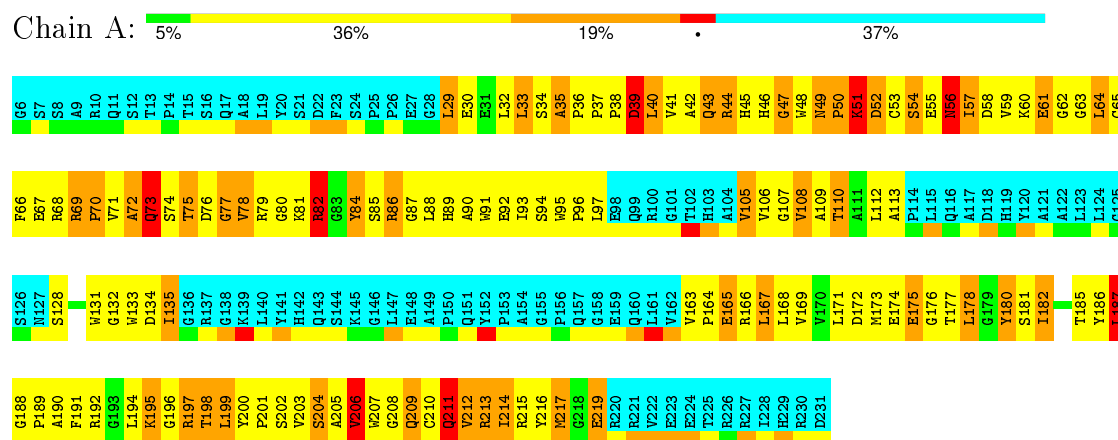
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





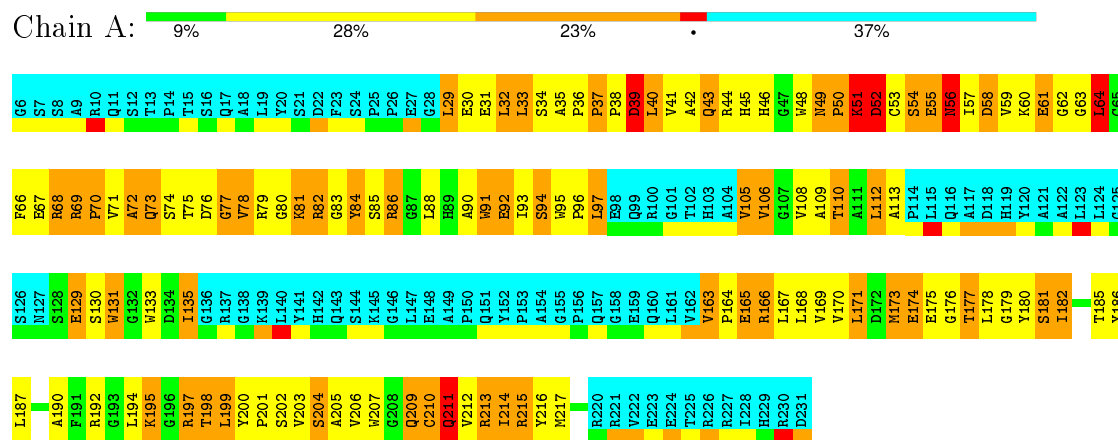
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.11 Score per residue for model 11

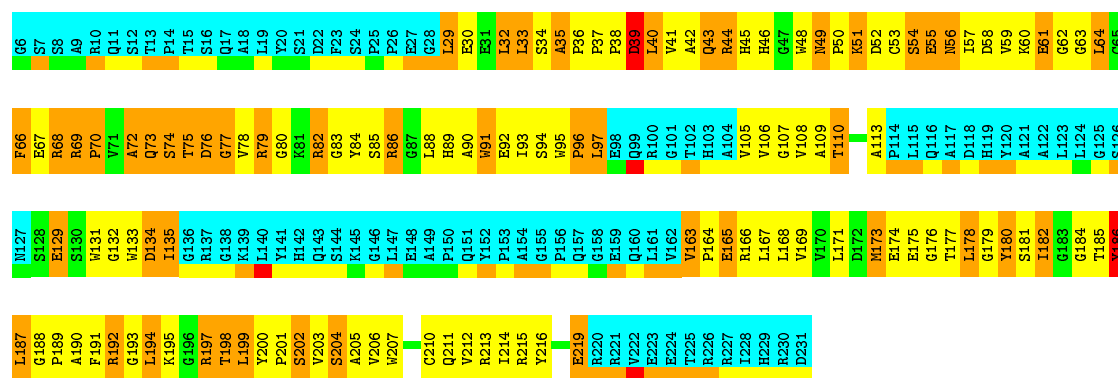
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.12 Score per residue for model 12

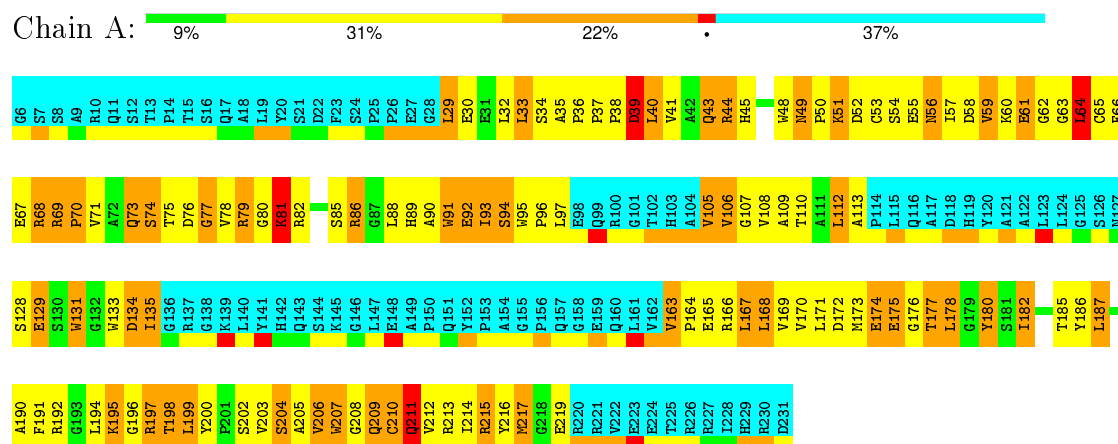
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





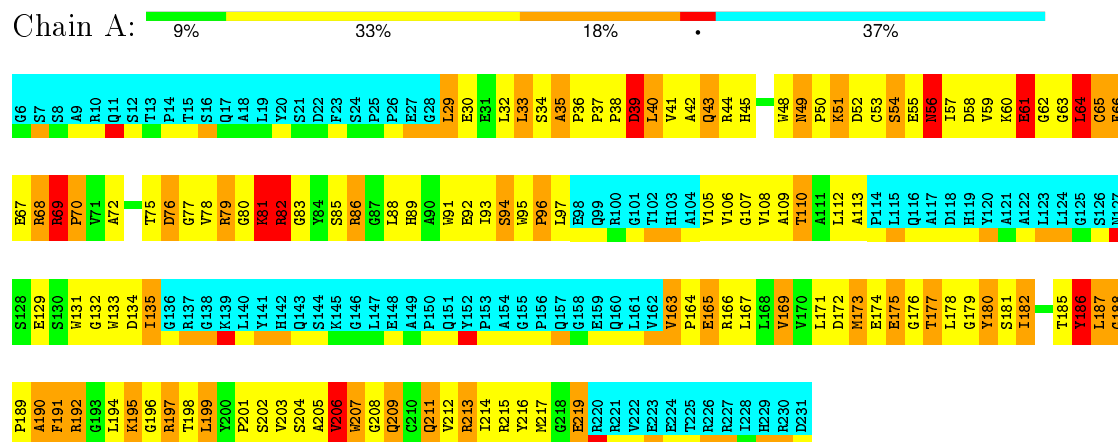
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



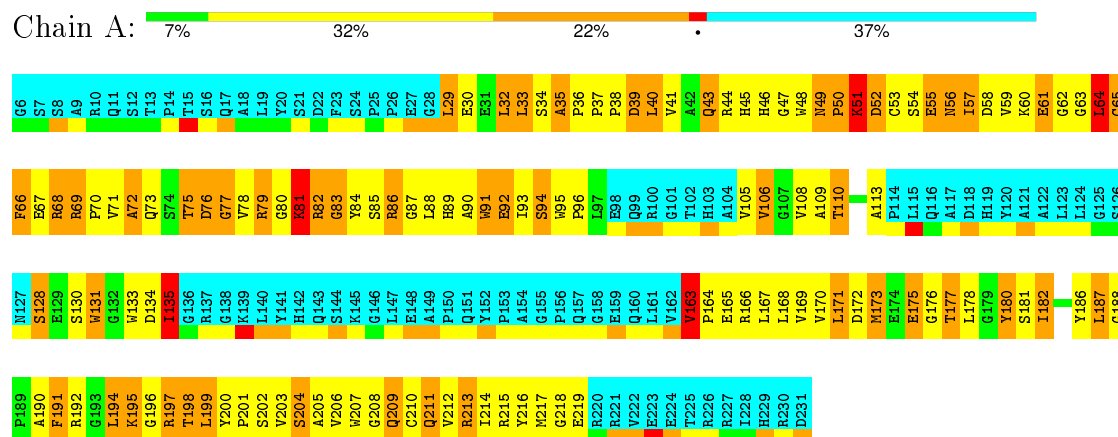
4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



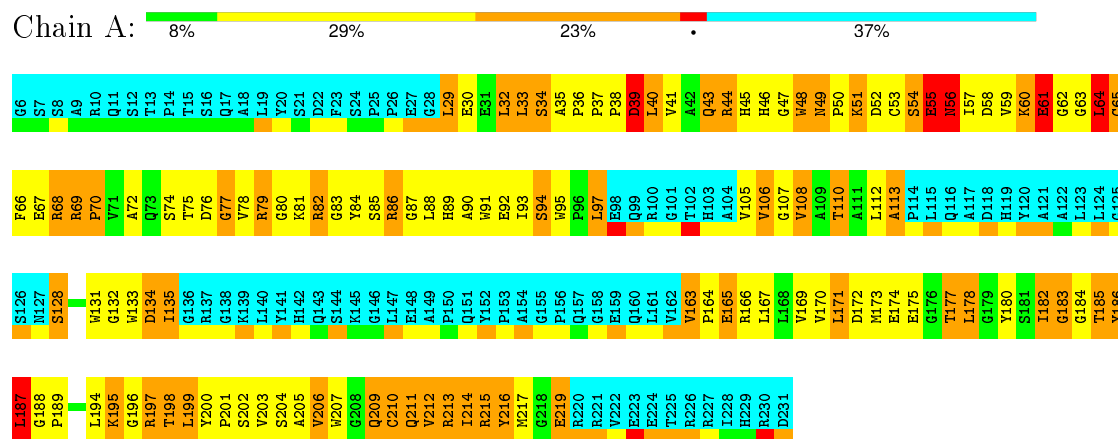
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



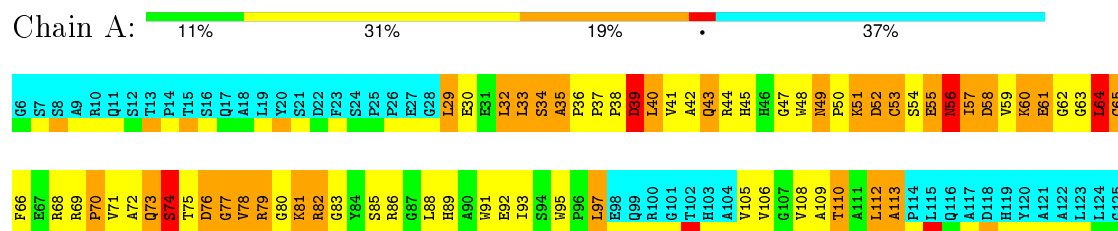
4.2.16 Score per residue for model 16

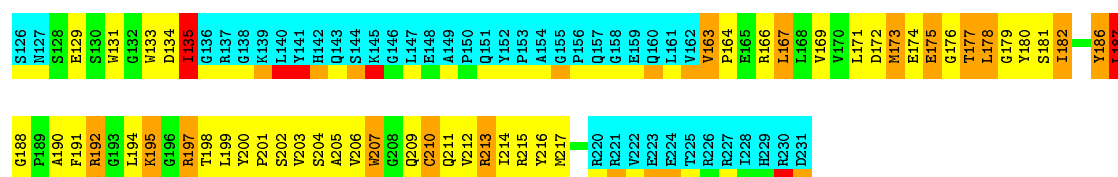
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.17 Score per residue for model 17

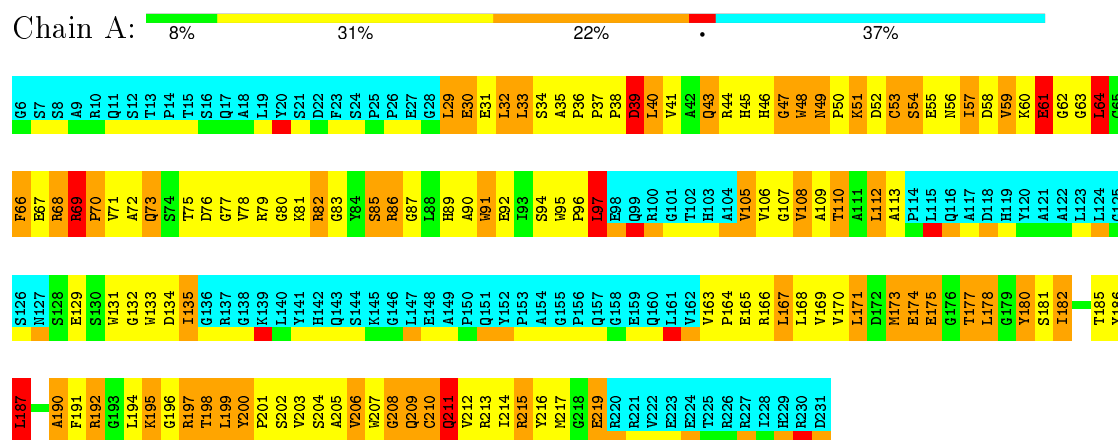
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





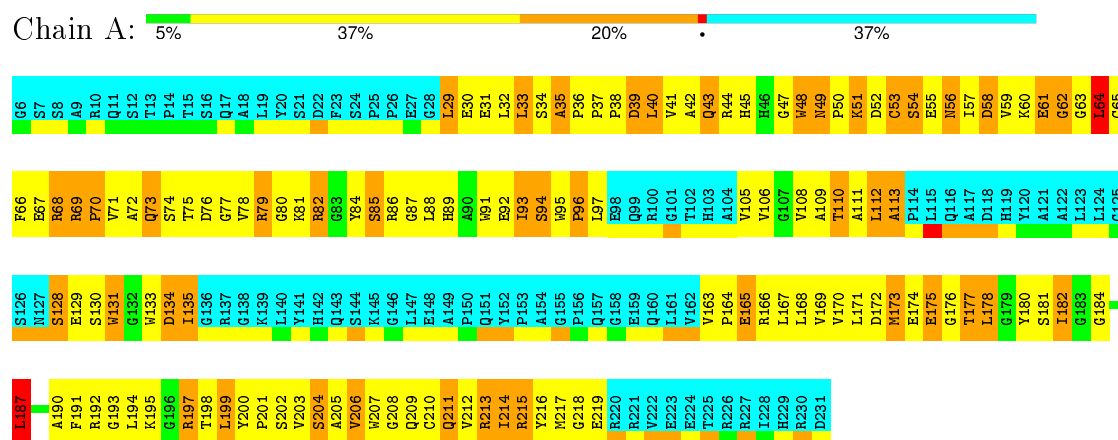
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



L187	G188	P189	A190	F191	R192	G193	L194	K195	G196	R197	T198	L199	Y200	P201	S202	V203	S204	A205	V206	W207	Q208	Q209	C210	Q211	V212	R213	L214	R215	Y216	W217	G218	E219	R220	R221	V222	E223	E224	T225	R226	R227	L228	H229	R230	D231															
M127	S128	E129	S130	W131	G132	W133	D134	I135	G136	R137	G138	K139	L140	Y141	H142	Q143	S144	K145	G146	L147	E148	A149	P150	Q151	Y152	P153	A154	G155	P156	Q157	G158	E159	Q160	L161	V162	V163	P164	E165	R166	L167	L168	V169	W170	L171	D172	M173	E174	E175	G176	T177	L178	G179	Y180	S181	I182	G183	G184	T185	Y186
F66	E67	R68	R69	P70		Q73	S74	T75	D76	G77	W78	R79	G80	R81	R82	G83	W84	S85	R86	G87	L88	R89	A90	W91	E92	I93	S94	W95	P96	L97	E98	Q99	R100	G101	T102	H103	A104	V105	Y106	G107	V108	A109	T110	A111	L112	A113	P114	L115	Q116	A117	D118	H119	Y120	A121	A122	L123	L124	G125	S126
G6	S7	A8	R9	R10	Q11	S12	T13	P14	T15	S16	Q17	A18	L19	Y20	S21	D22	P23	S24	P25	P26	E27	G28	L29	E30	E31	L32	L33	S34	A35	P36	P37	P38	D39	L40	V41	A42	Q43	R44	H45	H46	G47	W48	W49	P50	R51	D52	C53	S54	E55	R56	I57	D58	V59	K60	E61	G62	G63	L64	C65

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 194 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.6
X-PLOR	structure solution	2.9.3
X-PLOR	refinement	2.9.3

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 6311
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	945
Number of shifts mapped to atoms	945
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	36%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1112	1090	1090	359±23
All	All	22240	21800	21800	7173

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 163.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:HB3	1.15	1.39	6	20
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:HG23	1.13	1.20	18	5
1:A:105:VAL:HG13	1:A:204:SER:O	1.13	1.42	20	4
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:HD13	1.12	1.21	8	2
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD22	1.11	1.44	6	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:169:VAL:HG11	1.11	1.81	5	9
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:HG11	1.10	1.81	19	7
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:O	1.09	1.47	17	10
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:HB3	1.09	1.78	15	8
1:A:167:LEU:HD22	1:A:168:LEU:N	1.09	1.61	18	2
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HD22	1.08	1.13	19	17
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:O	1.08	1.47	19	8
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HD12	1.07	1.20	1	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD22	1.06	1.84	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:HD2	1.06	1.28	19	9
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:HG22	1.04	1.22	14	5
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HG22	1.04	1.86	16	4
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HD23	1.04	1.24	3	4
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HD13	1.04	1.83	10	5
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:CE	1.03	1.81	8	8
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD22	1.03	1.71	6	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:N	1.02	1.68	4	14
1:A:167:LEU:HD22	1:A:182:ILE:HG22	1.02	1.05	16	2
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD13	1.02	1.52	13	3
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:CG	1.02	1.84	5	7
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HD13	1.02	1.83	8	2
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:N	1.02	1.93	8	18
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CE3	1.01	1.90	10	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:CD2	1.01	1.85	14	16
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HG23	1.01	1.51	9	8
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HD22	1.01	1.86	17	15
1:A:106:VAL:HG13	1:A:202:SER:O	1.01	1.56	12	6
1:A:105:VAL:HG23	1:A:205:ALA:HA	1.00	1.32	9	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:203:VAL:HG23	1.00	1.86	10	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:HA	1.00	1.91	20	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:CA	0.99	1.87	13	8
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:HD11	0.99	1.57	6	13
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CD2	0.99	1.92	9	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD22	0.98	1.77	14	3
1:A:214:ILE:HD13	1:A:214:ILE:O	0.98	1.57	16	2
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:HD22	0.97	1.59	14	8
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CE1	0.97	1.94	14	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:202:SER:O	0.97	1.60	15	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:199:LEU:HD23	0.97	1.60	15	10
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:HG23	0.96	1.90	2	10
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:HD12	0.96	1.90	9	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CE1	0.96	1.95	4	14
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:HA	0.96	1.32	18	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HB	0.96	1.95	20	4
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:CE1	0.95	1.96	8	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:180:TYR:OH	0.95	1.61	5	3
1:A:167:LEU:HD13	1:A:167:LEU:O	0.95	1.61	18	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:HD12	0.95	1.81	10	11
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:HA	0.94	1.89	10	6
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:C	0.94	1.82	13	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:HD12	1:A:182:ILE:HG22	0.94	1.39	13	2
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:HG23	0.94	1.33	2	9
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD22	0.94	1.79	19	9
1:A:178:LEU:HD11	1:A:199:LEU:O	0.94	1.60	1	10
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD22	0.93	1.98	2	6
1:A:36:PRO:O	1:A:40:LEU:HD12	0.93	1.62	18	2
1:A:35:ALA:HB3	1:A:36:PRO:HD3	0.93	1.40	13	10
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:CB	0.93	1.93	20	2
1:A:108:VAL:HG23	1:A:200:TYR:C	0.93	1.84	4	4
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:CE1	0.93	1.98	18	1
1:A:85:SER:OG	1:A:171:LEU:HD21	0.92	1.63	15	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HB	0.92	2.00	20	4
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG21	0.92	1.99	11	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:HD3	0.92	1.38	15	5
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD23	0.92	1.65	16	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD12	0.92	1.36	19	2
1:A:191:PHE:CE1	1:A:194:LEU:HD23	0.92	2.00	12	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:HG21	0.91	2.00	14	2
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CD1	0.91	2.00	19	12
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CE	0.91	2.33	19	6
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HD12	0.91	1.96	19	4
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:CD	0.91	1.94	15	5
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CB	0.91	1.95	17	19
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:HG	0.91	1.66	6	18
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:O	0.91	1.65	2	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:CB	0.91	1.95	19	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HB3	0.91	1.42	11	19
1:A:108:VAL:HG11	1:A:199:LEU:HD13	0.91	1.43	14	4
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CG1	0.91	2.53	17	6
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:HG21	0.90	1.96	14	2
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:CD2	0.90	2.01	6	5
1:A:30:GLU:HA	1:A:33:LEU:HD23	0.90	1.41	6	16
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:CB	0.90	1.97	1	8
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CD2	0.90	2.24	3	10
1:A:92:GLU:OE2	1:A:168:LEU:HD12	0.90	1.67	18	3
1:A:78:VAL:CG1	1:A:205:ALA:HB3	0.89	1.97	11	1
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HG3	0.89	1.45	10	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:C	0.89	1.88	8	9
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:HB2	0.89	1.44	1	4
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:HD12	0.89	1.98	1	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:168:LEU:HD12	0.89	1.87	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:HD21	0.89	1.43	6	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:HG11	0.89	2.03	9	7
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD21	0.89	1.88	11	2
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CZ3	0.88	2.03	10	2
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD12	0.88	1.68	5	7
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CZ	0.88	2.03	6	2
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CD1	0.88	2.03	19	3
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:CD	0.88	1.98	12	9
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:CE1	0.88	2.04	5	6
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:N	0.88	2.06	2	7
1:A:163:VAL:HG11	1:A:182:ILE:HG21	0.88	1.44	4	2
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD22	0.87	1.83	13	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:HD2	0.87	1.47	7	1
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD13	0.87	1.84	7	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG21	0.87	1.47	2	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:HB2	0.87	1.45	9	4
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HB2	0.87	1.42	20	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CG	0.87	2.00	9	11
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:HG11	0.87	2.05	10	8
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:O	0.87	1.69	6	4
1:A:59:VAL:HB	1:A:65:CYS:C	0.87	1.90	17	1
1:A:35:ALA:HB3	1:A:36:PRO:CD	0.87	1.99	13	10
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD11	0.87	1.90	7	2
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:CD	0.86	2.38	16	3
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HB2	0.86	1.45	20	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CE1	0.86	2.64	10	5
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HG11	0.86	2.05	14	5
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:CD	0.86	1.90	8	2
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD13	0.86	1.90	20	3
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:CB	0.86	2.01	20	2
1:A:48:TRP:HZ2	1:A:66:PHE:HA	0.86	1.30	20	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:180:TYR:OH	0.86	1.71	9	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:HG21	0.85	2.06	14	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD23	0.85	1.46	14	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:214:ILE:O	0.85	1.70	13	4
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:N	0.85	2.39	14	4
1:A:194:LEU:O	1:A:194:LEU:HD23	0.85	1.70	10	8
1:A:106:VAL:HA	1:A:203:VAL:HG23	0.85	1.48	8	3
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:HD12	0.85	1.71	16	2
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:HB2	0.85	1.47	8	4
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:CD1	0.85	2.01	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:CB	0.85	2.24	6	20
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:O	0.85	1.70	10	2
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:CE1	0.85	2.07	11	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:HB3	0.85	1.48	9	4
1:A:134:ASP:O	1:A:135:ILE:HG23	0.85	1.72	17	5
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CD2	0.84	2.59	17	2
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:HD13	0.84	1.92	18	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG23	0.84	1.48	17	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HG23	0.84	2.08	5	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:167:LEU:HD11	0.84	2.01	6	2
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CD2	0.84	2.08	2	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:59:VAL:HG13	0.84	1.49	15	2
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:HB2	0.84	1.49	4	3
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:CE1	0.84	2.07	20	4
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CG2	0.84	2.60	16	6
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:HA	0.84	1.50	17	4
1:A:55:GLU:O	1:A:57:ILE:N	0.84	2.11	5	18
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	0.84	1.49	11	2
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:HB2	0.84	1.50	13	2
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:HA	0.84	1.49	8	3
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:CG2	0.83	2.03	14	4
1:A:82:ARG:HD3	1:A:83:GLY:N	0.83	1.87	14	7
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HG11	0.83	1.89	14	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:200:TYR:O	0.83	1.72	4	4
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD22	0.83	2.07	17	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:OE2	0.83	1.74	10	1
1:A:133:TRP:HB3	1:A:163:VAL:HG11	0.83	1.49	9	2
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:HD12	0.83	1.88	14	4
1:A:93:ILE:HG22	1:A:180:TYR:OH	0.83	1.74	14	1
1:A:205:ALA:HB1	1:A:212:VAL:HG21	0.83	1.48	6	2
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:HD13	0.83	1.74	15	4
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:CG	0.82	2.03	6	6
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HG21	0.82	1.73	3	3
1:A:43:GLN:H	1:A:43:GLN:NE2	0.82	1.72	17	1
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:HE3	0.82	1.89	14	9
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:HG22	0.82	1.98	16	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CD1	0.82	2.09	4	1
1:A:169:VAL:HG23	1:A:179:GLY:O	0.82	1.74	14	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LYS:O	0.82	1.97	7	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:HG13	0.82	2.09	10	2
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG3	0.82	1.47	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:CD1	0.82	2.05	3	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG22	0.82	2.10	17	2
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE1	0.82	2.09	6	5
1:A:33:LEU:HD13	1:A:44:ARG:NH2	0.82	1.88	20	1
1:A:80:GLY:C	1:A:203:VAL:HG12	0.82	1.95	7	1
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HG21	0.82	1.89	17	4
1:A:182:ILE:O	1:A:185:THR:N	0.82	2.12	16	2
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:HD2	0.81	2.05	12	8
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HG	0.81	1.50	7	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:HA2	0.81	1.75	14	5
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:HD13	0.81	1.76	19	1
1:A:187:LEU:HD23	1:A:191:PHE:CZ	0.81	2.09	5	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CE3	0.81	2.09	6	3
1:A:167:LEU:HD22	1:A:182:ILE:CG2	0.81	2.00	16	2
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG2	0.81	1.50	16	4
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:HG11	0.81	1.76	4	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG22	0.81	2.10	5	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:66:PHE:CD1	0.81	2.48	18	4
1:A:78:VAL:HG21	1:A:205:ALA:HB3	0.81	1.50	16	6
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HG12	0.81	2.16	12	8
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG23	0.81	1.49	9	1
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:HD13	0.81	1.96	13	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CG	0.81	2.10	14	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:48:TRP:N	0.80	2.49	6	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:O	0.80	2.28	20	4
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD2	0.80	2.10	17	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG13	0.80	2.10	17	1
1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:HE2	0.80	2.07	17	4
1:A:72:ALA:HB3	1:A:76:ASP:HB3	0.80	1.53	18	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:CG	0.80	2.07	8	1
1:A:206:VAL:HG12	1:A:210:CYS:SG	0.80	2.17	10	3
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:CD2	0.80	2.07	7	3
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:CA	0.80	2.57	10	9
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:CG2	0.80	2.06	9	1
1:A:48:TRP:HE1	1:A:59:VAL:HG21	0.80	1.35	17	1
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:HD3	0.80	1.92	10	2
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CD2	0.79	2.08	6	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:75:THR:HG22	0.79	1.50	1	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:TRP:N	0.79	1.91	10	14
1:A:163:VAL:HG13	1:A:164:PRO:HD2	0.79	1.55	5	4
1:A:68:ARG:NE	1:A:72:ALA:HB2	0.79	1.92	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:CD1	0.79	2.08	3	1
1:A:209:GLN:O	1:A:210:CYS:O	0.79	2.00	11	5
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:CD1	0.79	2.06	1	3
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:HB	0.79	1.51	19	1
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:HD13	0.79	1.78	9	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:213:ARG:HA	0.79	1.55	9	2
1:A:178:LEU:HD21	1:A:199:LEU:O	0.79	1.77	8	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:61:GLU:N	0.79	2.51	9	4
1:A:64:LEU:HD13	1:A:214:ILE:N	0.79	1.93	8	1
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:CD	0.79	2.45	9	5
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:HG23	0.78	1.77	4	9
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HB3	0.78	1.54	16	5
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD22	0.78	1.55	17	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HG3	0.78	1.54	8	2
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:HA	0.78	1.55	12	2
1:A:78:VAL:HG11	1:A:205:ALA:HB3	0.78	1.55	11	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HD13	0.78	1.98	18	2
1:A:108:VAL:HG21	1:A:133:TRP:CZ3	0.78	2.13	19	1
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:O	0.78	2.01	3	8
1:A:108:VAL:HG13	1:A:200:TYR:C	0.78	1.99	11	6
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HB2	0.78	1.56	15	1
1:A:48:TRP:CA	1:A:214:ILE:HD13	0.78	2.08	10	3
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD11	0.77	1.55	13	4
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:HB3	0.77	1.56	5	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG12	0.77	2.15	12	4
1:A:93:ILE:HD13	1:A:214:ILE:HG13	0.77	1.56	12	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:CB	0.77	2.08	20	3
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:HD12	0.77	1.94	13	7
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD12	0.77	1.95	4	3
1:A:180:TYR:C	1:A:187:LEU:HD22	0.77	2.00	13	1
1:A:89:HIS:HB2	1:A:171:LEU:HD23	0.77	1.57	9	4
1:A:54:SER:CB	1:A:75:THR:HG23	0.77	2.08	9	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:178:LEU:HD11	0.77	1.56	4	3
1:A:48:TRP:HA	1:A:214:ILE:HG21	0.77	1.54	20	3
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:HD12	0.77	1.79	10	1
1:A:135:ILE:HD11	1:A:163:VAL:HB	0.77	1.56	14	2
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CG2	0.77	2.66	16	2
1:A:53:CYS:HA	1:A:79:ARG:N	0.77	1.94	20	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:O	0.77	2.38	5	4
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:HB3	0.77	1.55	20	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:C	0.77	2.47	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:GLN:CD	1:A:43:GLN:C	0.77	2.44	3	2
1:A:95:TRP:HH2	1:A:204:SER:O	0.77	1.61	20	6
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CD1	0.77	2.15	13	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HG	0.76	1.57	9	5
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:HG2	0.76	1.80	8	4
1:A:167:LEU:HD12	1:A:182:ILE:CG2	0.76	2.09	13	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:59:VAL:HG13	0.76	2.11	15	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD23	0.76	2.15	9	2
1:A:171:LEU:HD21	1:A:173:MET:HE1	0.76	1.55	8	1
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:HG23	0.76	1.81	15	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:CD2	0.76	2.09	14	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CD1	0.76	2.73	8	7
1:A:197:ARG:NH2	1:A:199:LEU:HD21	0.76	1.95	8	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:HA	0.76	2.10	9	2
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:HA	0.76	1.81	12	3
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:CB	0.76	2.11	7	2
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HG	0.76	1.55	17	1
1:A:180:TYR:N	1:A:187:LEU:HD11	0.76	1.96	8	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:214:ILE:HG22	0.76	1.58	9	1
1:A:91:TRP:HB2	1:A:93:ILE:HD11	0.76	1.57	13	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG12	0.76	1.58	5	1
1:A:213:ARG:NE	1:A:213:ARG:HA	0.76	1.96	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:HG22	0.76	2.15	17	4
1:A:171:LEU:HD12	1:A:172:ASP:N	0.76	1.96	20	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:HD3	0.76	1.56	20	3
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:HG22	0.76	2.16	12	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:187:LEU:HD22	0.76	2.16	20	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD11	0.76	2.10	7	1
1:A:182:ILE:N	1:A:182:ILE:HD13	0.75	1.95	6	3
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD13	0.75	1.82	2	2
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:HA	0.75	1.81	4	9
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:HG22	0.75	2.07	14	4
1:A:135:ILE:HD13	1:A:135:ILE:N	0.75	1.96	13	3
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD23	0.75	2.00	18	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CE1	0.75	2.74	8	3
1:A:33:LEU:HD11	1:A:44:ARG:HH21	0.75	1.41	18	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG22	0.75	2.17	16	2
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:HD22	0.75	1.80	7	1
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:CD	0.75	2.65	19	19
1:A:81:LYS:C	1:A:202:SER:HA	0.75	2.01	7	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:HD22	0.75	2.17	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:HD12	0.75	1.82	2	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HB2	0.75	1.57	9	2
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CG	0.75	2.70	17	1
1:A:164:PRO:HD2	1:A:182:ILE:HG21	0.75	1.59	18	2
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:HD13	0.75	1.96	11	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HE2	0.75	1.82	9	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:CD1	0.75	2.08	8	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CZ	0.75	2.75	2	9
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CG1	0.75	2.69	8	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:CB	0.75	2.11	15	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:135:ILE:HD11	0.74	1.58	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CG	0.74	2.75	10	3
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:CE2	0.74	2.17	6	4
1:A:167:LEU:CB	1:A:182:ILE:HG22	0.74	2.12	6	5
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:CD	0.74	2.65	15	2
1:A:178:LEU:HD12	1:A:178:LEU:N	0.74	1.97	11	1
1:A:63:GLY:O	1:A:64:LEU:C	0.74	2.25	16	20
1:A:199:LEU:H	1:A:199:LEU:HD12	0.74	1.39	10	8
1:A:51:LYS:O	1:A:79:ARG:O	0.74	2.05	15	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:182:ILE:HD12	0.74	2.18	20	1
1:A:48:TRP:HH2	1:A:212:VAL:HG12	0.74	1.42	12	3
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:HD3	0.74	2.12	20	4
1:A:105:VAL:HG23	1:A:134:ASP:HA	0.74	1.57	8	2
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:HD12	0.74	1.59	3	1
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:HD23	0.74	1.83	11	1
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:CD2	0.74	2.55	13	11
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:HG22	0.74	1.60	5	4
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HB3	0.74	1.59	3	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:CB	0.74	2.12	9	2
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CE1	0.74	2.76	4	9
1:A:167:LEU:CD1	1:A:182:ILE:HG22	0.74	2.12	14	2
1:A:82:ARG:HD3	1:A:83:GLY:H	0.74	1.43	1	6
1:A:51:LYS:C	1:A:80:GLY:HA3	0.74	2.02	20	2
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:HE2	0.74	1.96	19	7
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CD2	0.74	2.18	14	2
1:A:35:ALA:O	1:A:37:PRO:HD3	0.74	1.83	8	7
1:A:205:ALA:CB	1:A:212:VAL:HG11	0.74	2.13	3	2
1:A:47:GLY:O	1:A:49:ASN:N	0.74	2.21	6	2
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:HD2	0.73	1.98	9	4
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:CG	0.73	2.11	17	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CB	0.73	2.70	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:CG2	0.73	2.13	13	13
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:HD2	0.73	1.99	5	2
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:CB	0.73	2.11	8	3
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:HD21	0.73	2.13	15	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:48:TRP:N	0.73	2.57	18	3
1:A:76:ASP:O	1:A:77:GLY:C	0.73	2.27	8	10
1:A:93:ILE:HG21	1:A:180:TYR:OH	0.73	1.83	6	4
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HD21	0.73	2.13	19	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HG	0.73	1.60	12	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:C	0.73	2.04	19	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CG	0.73	2.77	10	7
1:A:95:TRP:HE1	1:A:97:LEU:HD23	0.73	1.44	16	2
1:A:66:PHE:CZ	1:A:78:VAL:HG11	0.73	2.18	16	2
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:HG12	0.73	1.59	8	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:216:TYR:CE2	0.73	2.76	13	2
1:A:91:TRP:HZ2	1:A:171:LEU:HD22	0.73	1.43	2	7
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HG23	0.73	2.19	10	3
1:A:82:ARG:CD	1:A:83:GLY:N	0.73	2.51	15	1
1:A:59:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CD1	0.73	2.71	19	4
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:N	0.73	2.22	19	1
1:A:85:SER:CB	1:A:171:LEU:HD21	0.73	2.13	15	2
1:A:187:LEU:HD21	1:A:191:PHE:CZ	0.73	2.17	12	1
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:ND2	0.73	2.52	12	11
1:A:108:VAL:HG21	1:A:178:LEU:CD1	0.73	2.13	4	2
1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CE	0.73	2.67	17	7
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:HA	0.73	1.60	17	4
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CD1	0.73	2.18	11	2
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:NE	0.73	1.98	3	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG23	0.73	2.19	5	1
1:A:177:THR:HB	1:A:194:LEU:HD22	0.73	1.61	10	2
1:A:56:ASN:H	1:A:56:ASN:ND2	0.73	1.81	20	3
1:A:66:PHE:HE2	1:A:212:VAL:HG22	0.72	1.41	5	1
1:A:213:ARG:HE	1:A:213:ARG:HA	0.72	1.43	5	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:HG2	0.72	1.60	10	7
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:CE	0.72	2.37	9	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:44:ARG:NH2	0.72	1.99	18	2
1:A:187:LEU:HD11	1:A:194:LEU:HD12	0.72	1.60	14	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:39:ASP:O	0.72	2.27	1	2
1:A:186:TYR:CG	1:A:186:TYR:O	0.72	2.41	12	3
1:A:72:ALA:HB1	1:A:76:ASP:HA	0.72	1.59	8	2
1:A:187:LEU:HD22	1:A:191:PHE:CE1	0.72	2.19	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:OE1	0.72	2.27	2	6
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:HD13	0.72	1.58	18	4
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CD2	0.72	2.72	17	8
1:A:199:LEU:HD12	1:A:199:LEU:N	0.72	2.00	5	6
1:A:40:LEU:HD13	1:A:40:LEU:C	0.72	2.05	8	7
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:CD	0.72	2.53	5	4
1:A:178:LEU:HD23	1:A:178:LEU:N	0.72	1.99	9	5
1:A:199:LEU:HD12	1:A:199:LEU:H	0.72	1.44	8	4
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CG	0.72	2.43	12	11
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CE2	0.72	2.77	15	7
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CZ	0.72	2.78	17	3
1:A:39:ASP:O	1:A:39:ASP:CG	0.72	2.27	10	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:CZ3	0.72	2.20	6	1
1:A:37:PRO:CA	1:A:41:VAL:HG21	0.72	2.14	14	2
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:HG22	0.72	1.83	14	2
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CD2	0.72	2.78	17	4
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:HD2	0.72	1.85	12	10
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:HD13	0.72	2.15	10	3
1:A:197:ARG:NH1	1:A:199:LEU:HD11	0.72	2.00	4	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CD1	0.72	2.78	7	4
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CZ	0.72	2.77	8	5
1:A:106:VAL:CA	1:A:203:VAL:HG23	0.72	2.14	8	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:66:PHE:CE2	0.72	2.78	10	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CE1	0.72	2.20	6	4
1:A:44:ARG:NE	1:A:57:ILE:O	0.71	2.24	5	1
1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	0.71	1.44	10	3
1:A:56:ASN:HB3	1:A:71:VAL:HG21	0.71	1.62	15	1
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:N	0.71	2.23	5	4
1:A:81:LYS:CE	1:A:109:ALA:HB3	0.71	2.16	2	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:HE	0.71	1.46	4	2
1:A:54:SER:H	1:A:78:VAL:HA	0.71	1.45	9	4
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:CB	0.71	2.69	3	7
1:A:49:ASN:O	1:A:53:CYS:HB3	0.71	1.86	9	8
1:A:50:PRO:HG2	1:A:53:CYS:HB2	0.71	1.63	1	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD23	0.71	2.06	10	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:O	0.71	2.38	12	9
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HD11	0.71	2.15	5	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:NE	0.71	2.01	5	2
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:HG22	0.71	2.21	4	1
1:A:50:PRO:O	1:A:52:ASP:N	0.71	2.23	7	2
1:A:44:ARG:CB	1:A:59:VAL:HG13	0.71	2.16	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:HB2	0.71	2.20	16	3
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:CG	0.71	2.14	10	3
1:A:39:ASP:OD1	1:A:40:LEU:N	0.71	2.24	20	4
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:HD2	0.71	1.61	15	8
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:HD12	0.71	2.15	11	1
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:N	0.70	2.23	20	16
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:CZ	0.70	2.16	5	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HA	0.70	1.61	13	6
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:CD1	0.70	2.56	10	8
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG21	0.70	2.22	9	5
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:N	0.70	2.01	5	3
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:CD1	0.70	2.21	18	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CD1	0.70	2.75	13	8
1:A:108:VAL:HG11	1:A:199:LEU:CD1	0.70	2.17	10	4
1:A:186:TYR:CD2	1:A:186:TYR:O	0.70	2.44	16	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:HG23	0.70	2.21	7	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD13	0.70	2.21	18	3
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:HD23	0.70	2.01	1	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:CA	0.70	2.17	19	7
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:CD1	0.70	2.16	10	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CG	0.70	2.17	6	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CD2	0.70	2.79	1	4
1:A:70:PRO:HD2	1:A:75:THR:HG21	0.70	1.62	1	1
1:A:38:PRO:O	1:A:39:ASP:C	0.69	2.31	14	20
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:HD3	0.69	2.07	9	11
1:A:112:LEU:O	1:A:113:ALA:C	0.69	2.30	16	11
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:C	0.69	2.29	5	2
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CD1	0.69	2.80	7	2
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HD21	0.69	1.64	19	1
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HB2	0.69	1.63	12	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:66:PHE:CE2	0.69	2.05	9	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:53:CYS:SG	0.69	2.65	8	2
1:A:40:LEU:C	1:A:43:GLN:OE1	0.69	2.30	18	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:135:ILE:HD12	0.69	2.22	9	1
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:HD22	0.69	2.07	9	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:40:LEU:C	0.69	2.61	17	4
1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CD	0.69	2.54	1	4
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:HA2	0.69	1.63	8	4
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:CB	0.69	2.75	20	2
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CG	0.69	2.80	20	3
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:CD	0.69	2.40	15	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG22	0.69	1.64	20	3
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:CB	0.69	2.61	19	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:44:ARG:N	0.69	2.41	8	5
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:N	0.69	2.03	17	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:48:TRP:N	0.69	2.61	6	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:66:PHE:CD2	0.69	2.80	10	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:164:PRO:HB2	0.69	2.22	10	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:HB3	0.69	1.64	6	1
1:A:207:TRP:CG	1:A:208:GLY:N	0.69	2.60	6	3
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:HD12	0.69	2.07	11	2
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:ND2	0.69	2.02	16	4
1:A:171:LEU:HD12	1:A:201:PRO:HG3	0.69	1.61	7	2
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LYS:C	0.69	2.27	7	1
1:A:76:ASP:O	1:A:78:VAL:N	0.69	2.26	12	3
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE2	0.69	2.23	11	2
1:A:191:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HD23	0.69	2.21	12	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CE2	0.69	2.81	2	3
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CD2	0.69	2.23	1	12
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:ND2	0.69	2.03	9	4
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD23	0.69	1.46	9	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG11	0.69	2.22	6	3
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CD2	0.69	2.80	10	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:HD12	0.69	1.64	20	2
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HB	0.69	2.23	20	1
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:HD23	0.69	1.88	7	3
1:A:167:LEU:HD22	1:A:167:LEU:C	0.69	2.07	18	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:202:SER:O	0.69	2.39	15	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:HD12	0.69	1.64	11	1
1:A:184:GLY:O	1:A:186:TYR:CD1	0.69	2.46	16	1
1:A:54:SER:CB	1:A:78:VAL:HG11	0.69	2.18	1	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG2	0.69	2.18	2	5
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HG21	0.69	1.63	17	1
1:A:109:ALA:CA	1:A:199:LEU:HD12	0.69	2.17	17	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:H	0.69	1.48	4	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:167:LEU:HD21	0.68	1.64	8	3
1:A:48:TRP:HZ2	1:A:212:VAL:O	0.68	1.72	5	2
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:CG2	0.68	2.76	13	3
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:CA	0.68	2.19	8	3
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD2	0.68	2.56	13	2
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CE2	0.68	2.77	16	3
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:C	0.68	2.32	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:NE2	0.68	2.47	4	7
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:H	0.68	1.49	17	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:76:ASP:O	0.68	1.88	13	2
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:HD13	0.68	2.18	10	4
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:CG2	0.68	2.77	19	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:197:ARG:HD2	0.68	1.64	15	1
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:CD	0.68	2.62	11	11
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CE1	0.68	2.23	14	6
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:C	0.68	2.08	12	5
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HB2	0.68	1.66	2	7
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:C	0.68	2.32	16	5
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:HG21	0.68	2.04	17	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CG	0.68	2.81	18	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HD22	0.68	2.19	8	5
1:A:37:PRO:O	1:A:42:ALA:HB2	0.68	1.87	12	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:194:LEU:O	0.68	1.88	13	5
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:CA	0.68	2.41	7	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:45:HIS:N	0.68	2.62	5	9
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:HG23	0.68	2.18	5	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:HG13	0.68	2.19	20	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:NE	0.68	2.57	10	1
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:HD21	0.67	2.02	2	6
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:CG2	0.67	2.76	2	3
1:A:95:TRP:CH2	1:A:204:SER:O	0.67	2.44	20	9
1:A:91:TRP:NE1	1:A:216:TYR:CZ	0.67	2.62	2	6
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:HD3	0.67	2.19	16	15
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD13	0.67	2.10	11	3
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD13	0.67	1.88	16	2
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HA	0.67	1.65	18	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:201:PRO:HA	0.67	1.63	11	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:214:ILE:HG22	0.67	2.24	12	5
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:O	0.67	1.88	6	2
1:A:79:ARG:NE	1:A:79:ARG:O	0.67	2.28	20	5
1:A:34:SER:O	1:A:35:ALA:O	0.67	2.12	12	6
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD13	0.67	2.24	15	4
1:A:56:ASN:CB	1:A:71:VAL:HG21	0.67	2.19	15	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CE1	0.67	2.77	10	15
1:A:97:LEU:HD22	1:A:211:GLN:HA	0.67	1.65	17	1
1:A:163:VAL:HG11	1:A:182:ILE:HB	0.67	1.66	16	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CZ	0.67	2.24	15	3
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:N	0.67	2.26	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:HD12	1:A:167:LEU:N	0.67	2.05	17	1
1:A:171:LEU:CG	1:A:178:LEU:HD23	0.67	2.20	7	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:N	0.67	2.04	15	7
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CG1	0.67	2.83	15	7
1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CD1	0.67	2.62	12	3
1:A:168:LEU:O	1:A:168:LEU:HD23	0.67	1.89	18	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:CA	0.67	2.20	15	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:HG3	0.67	1.64	11	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HA	0.67	1.66	2	1
1:A:59:VAL:HA	1:A:65:CYS:O	0.67	1.89	7	2
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD12	0.67	2.10	4	2
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:HG23	0.67	1.67	6	2
1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:O	0.67	1.89	8	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HG11	0.67	2.25	10	2
1:A:50:PRO:HG3	1:A:203:VAL:HG13	0.67	1.66	1	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:45:HIS:CE1	0.67	2.78	13	8
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:CD1	0.67	2.70	10	5
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG12	0.67	1.66	1	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:203:VAL:O	0.67	2.42	1	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:CA	0.67	2.15	18	1
1:A:92:GLU:N	1:A:215:ARG:O	0.67	2.28	18	20
1:A:64:LEU:HD13	1:A:214:ILE:H	0.67	1.48	8	2
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:HG13	0.67	1.90	16	3
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:105:VAL:N	0.67	1.88	18	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:HD12	0.67	2.25	2	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HG3	0.67	1.90	5	1
1:A:187:LEU:HD23	1:A:191:PHE:HZ	0.67	1.49	5	1
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:N	0.67	2.27	5	9
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:CZ3	0.67	2.48	9	2
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CG	0.67	2.25	17	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:CD1	0.67	2.73	8	4
1:A:80:GLY:N	1:A:203:VAL:O	0.67	2.28	19	3
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD23	0.66	1.89	9	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:58:ASP:OD1	0.66	1.90	17	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:59:VAL:HG13	0.66	2.20	20	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:197:ARG:CD	0.66	2.21	15	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HB2	0.66	2.10	2	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:HG13	0.66	2.25	14	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:O	0.66	1.89	18	4
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG21	0.66	1.65	4	3
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CD2	0.66	2.63	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CG1	0.66	2.78	8	2
1:A:56:ASN:ND2	1:A:75:THR:HG21	0.66	2.06	20	1
1:A:54:SER:CA	1:A:78:VAL:HG11	0.66	2.21	1	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:CD	0.66	2.72	13	18
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD13	0.66	2.04	1	2
1:A:56:ASN:ND2	1:A:56:ASN:H	0.66	1.88	14	10
1:A:59:VAL:CB	1:A:66:PHE:HA	0.66	2.19	9	4
1:A:177:THR:HG22	1:A:198:THR:HB	0.66	1.66	10	2
1:A:35:ALA:O	1:A:37:PRO:CD	0.66	2.44	10	3
1:A:36:PRO:HB2	1:A:37:PRO:CD	0.66	2.21	20	3
1:A:68:ARG:CZ	1:A:207:TRP:CZ3	0.66	2.79	18	1
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:HD2	0.66	2.20	15	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CE2	0.66	2.25	2	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:CG1	0.66	2.76	17	6
1:A:206:VAL:HG12	1:A:211:GLN:OE1	0.66	1.91	17	1
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HD23	0.66	2.20	7	3
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:C	0.66	2.10	13	1
1:A:57:ILE:HG23	1:A:67:GLU:O	0.66	1.91	16	4
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:CE1	0.66	2.84	20	5
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:HD2	0.66	2.21	7	6
1:A:40:LEU:CD2	1:A:40:LEU:O	0.66	2.40	13	2
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:HD2	0.66	2.04	12	3
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HG23	0.66	1.68	7	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:180:TYR:CE1	0.66	2.78	18	1
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD12	0.66	2.12	1	6
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:HD12	0.66	1.68	9	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:CG2	0.66	2.58	8	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:CG	0.66	2.21	8	2
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:CD	0.66	2.74	5	2
1:A:163:VAL:O	1:A:163:VAL:HG13	0.66	1.90	10	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:HA	0.66	1.68	6	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:O	0.66	1.90	12	4
1:A:82:ARG:CD	1:A:82:ARG:N	0.66	2.57	14	3
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG23	0.66	1.68	5	1
1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:CE	0.66	2.04	4	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:105:VAL:O	0.66	1.90	20	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:CA	0.65	2.44	2	2
1:A:64:LEU:CG	1:A:214:ILE:HG22	0.65	2.21	10	1
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:CD	0.65	2.74	15	5
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:HB3	0.65	1.91	3	6
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:CD2	0.65	2.78	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:HA	0.65	1.67	7	2
1:A:51:LYS:CE	1:A:80:GLY:HA2	0.65	2.21	15	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:HB3	0.65	1.67	19	4
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:N	0.65	2.59	5	3
1:A:197:ARG:CD	1:A:197:ARG:C	0.65	2.64	11	9
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:CD1	0.65	2.20	17	2
1:A:76:ASP:CB	1:A:207:TRP:CD1	0.65	2.80	19	2
1:A:213:ARG:NE	1:A:213:ARG:O	0.65	2.29	2	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CA	0.65	2.22	4	8
1:A:72:ALA:HB3	1:A:207:TRP:CE3	0.65	2.26	17	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:HB2	0.65	2.20	1	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:CG2	0.65	2.80	20	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:213:ARG:O	0.65	1.91	10	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:N	0.65	2.07	3	6
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:NE	0.65	2.29	17	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:O	0.65	2.29	18	5
1:A:185:THR:O	1:A:187:LEU:N	0.65	2.30	16	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:CZ	0.65	2.85	20	1
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:CG	0.65	2.21	7	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:214:ILE:HG22	0.65	1.66	3	2
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CZ	0.65	2.26	11	2
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:HG23	0.65	1.90	12	1
1:A:177:THR:C	1:A:178:LEU:HD12	0.65	2.13	7	4
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:CG1	0.65	2.80	9	5
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:CB	0.65	2.21	3	2
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:N	0.65	2.65	16	2
1:A:64:LEU:HD11	1:A:212:VAL:O	0.65	1.92	19	2
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:O	0.65	2.49	8	1
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:182:ILE:CD1	0.65	2.80	20	2
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:HD13	0.65	2.04	7	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG11	0.65	2.27	12	4
1:A:191:PHE:CE1	1:A:194:LEU:CD2	0.65	2.80	12	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:169:VAL:CG1	0.65	2.79	1	5
1:A:209:GLN:O	1:A:210:CYS:C	0.65	2.34	18	5
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:CG2	0.65	2.60	4	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HG21	0.65	2.27	20	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HD13	0.65	1.68	2	1
1:A:197:ARG:C	1:A:197:ARG:CD	0.65	2.65	2	10
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:O	0.65	2.50	15	3
1:A:105:VAL:N	1:A:204:SER:O	0.65	2.29	9	2
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CZ	0.65	2.80	11	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:GLY:C	1:A:48:TRP:CE3	0.65	2.70	7	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:N	0.65	2.30	18	1
1:A:94:SER:CB	1:A:165:GLU:O	0.64	2.45	14	4
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:78:VAL:HG11	0.64	2.27	10	2
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HG23	0.64	2.22	3	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE1	0.64	2.28	3	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:HA3	0.64	1.70	13	5
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.64	2.65	15	3
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:N	0.64	2.07	19	1
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:H	0.64	2.03	18	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HD3	0.64	1.68	11	1
1:A:51:LYS:O	1:A:53:CYS:N	0.64	2.30	15	4
1:A:214:ILE:HD13	1:A:214:ILE:C	0.64	2.13	16	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CG1	0.64	2.80	13	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:C	0.64	2.12	20	2
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HB3	0.64	2.28	4	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:C	0.64	2.12	20	3
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:CD1	0.64	2.80	15	2
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:HB3	0.64	1.70	11	1
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:NE	0.64	2.28	16	4
1:A:94:SER:C	1:A:212:VAL:HG23	0.64	2.13	4	3
1:A:56:ASN:ND2	1:A:56:ASN:N	0.64	2.45	15	6
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:NE	0.64	2.08	5	1
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:CD2	0.64	2.50	3	4
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:HD23	0.64	2.12	6	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:212:VAL:HG23	0.64	2.27	14	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:HA	0.64	1.68	17	2
1:A:88:LEU:HD12	1:A:172:ASP:OD2	0.64	1.92	10	2
1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:HE3	0.64	2.21	11	3
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CB	0.64	2.45	2	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG1	0.64	2.22	5	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:CB	0.64	2.81	9	4
1:A:72:ALA:CB	1:A:207:TRP:CZ3	0.64	2.81	7	2
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:CB	0.64	2.45	1	11
1:A:206:VAL:HG11	1:A:209:GLN:HB3	0.64	1.69	10	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:44:ARG:N	0.64	2.30	18	1
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:ND2	0.64	2.30	7	6
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG23	0.64	1.92	4	5
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:HB3	0.64	1.70	19	1
1:A:187:LEU:HD23	1:A:187:LEU:O	0.64	1.93	12	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:CB	0.64	2.76	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:PRO:O	1:A:41:VAL:N	0.64	2.31	13	6
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:ND1	0.64	2.31	15	12
1:A:190:ALA:O	1:A:194:LEU:HB2	0.64	1.93	15	19
1:A:91:TRP:HB2	1:A:216:TYR:CD2	0.64	2.27	4	6
1:A:135:ILE:H	1:A:135:ILE:HD12	0.64	1.51	5	1
1:A:178:LEU:HD21	1:A:198:THR:CG2	0.64	2.22	5	2
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:HD1	0.64	1.53	20	1
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CE1	0.64	2.80	6	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:CB	0.63	2.24	11	3
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CE2	0.63	2.51	3	8
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CG	0.63	2.45	9	6
1:A:52:ASP:N	1:A:80:GLY:HA3	0.63	2.07	9	3
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:HB2	0.63	2.22	19	3
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CB	0.63	2.23	8	4
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HB2	0.63	1.68	8	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CB	0.63	2.80	20	3
1:A:169:VAL:HG23	1:A:180:TYR:CZ	0.63	2.28	20	1
1:A:186:TYR:O	1:A:186:TYR:CD2	0.63	2.51	20	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:75:THR:HG21	0.63	1.70	7	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HG23	0.63	1.68	18	2
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HG21	0.63	1.93	2	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CE1	0.63	2.86	16	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HD11	0.63	2.07	11	1
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CE2	0.63	2.82	2	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD13	0.63	2.14	4	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:207:TRP:CZ2	0.63	2.27	18	2
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:C	0.63	2.13	2	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:HG23	0.63	2.29	10	3
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:N	0.63	2.30	15	18
1:A:175:GLU:HB3	1:A:177:THR:OG1	0.63	1.93	17	19
1:A:77:GLY:O	1:A:78:VAL:CG1	0.63	2.46	9	3
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CD2	0.63	2.46	19	4
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD21	0.63	1.69	7	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:43:GLN:C	0.63	2.52	6	1
1:A:82:ARG:HD2	1:A:83:GLY:N	0.63	2.08	5	3
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:HG22	0.63	1.70	9	1
1:A:93:ILE:HB	1:A:167:LEU:HD12	0.63	1.67	9	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:59:VAL:HB	0.63	2.28	20	1
1:A:94:SER:O	1:A:96:PRO:HD3	0.63	1.93	9	8
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:HE22	0.63	1.97	14	2
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ILE:H	0.63	1.96	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:C	0.63	2.51	5	4
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:HG22	0.63	2.28	13	4
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:C	0.63	2.14	15	5
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:105:VAL:HG22	0.63	2.29	9	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HB3	0.63	2.29	13	3
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG22	0.63	1.69	8	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:HD2	0.63	1.71	15	1
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CE1	0.63	2.52	7	8
1:A:39:ASP:O	1:A:42:ALA:N	0.63	2.31	8	5
1:A:169:VAL:HG13	1:A:180:TYR:CD2	0.63	2.28	16	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:HB2	0.63	2.28	7	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:49:ASN:HA	0.63	1.70	16	7
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:CD1	0.63	2.29	14	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:214:ILE:CG2	0.63	2.81	17	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:HE	0.63	2.07	3	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HG3	0.63	1.71	2	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:O	0.63	1.94	13	9
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:HB	0.63	2.29	5	7
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CG	0.63	2.07	5	1
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD22	0.63	1.52	17	1
1:A:110:THR:N	1:A:129:GLU:O	0.63	2.31	19	4
1:A:80:GLY:CA	1:A:203:VAL:CG1	0.63	2.76	7	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:133:TRP:O	0.63	2.51	12	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HD22	0.62	1.69	2	2
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HB	0.62	2.29	2	1
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:HA	0.62	1.69	14	1
1:A:105:VAL:CB	1:A:204:SER:O	0.62	2.47	9	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG13	0.62	1.69	18	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:66:PHE:CE2	0.62	2.87	10	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:197:ARG:CD	0.62	2.23	12	1
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:HD3	0.62	2.09	2	2
1:A:135:ILE:HD11	1:A:164:PRO:CD	0.62	2.24	17	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HG2	0.62	2.09	13	4
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD22	0.62	1.71	10	5
1:A:56:ASN:HB3	1:A:75:THR:HG23	0.62	1.68	19	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:54:SER:O	0.62	2.32	1	2
1:A:56:ASN:ND2	1:A:76:ASP:O	0.62	2.32	10	6
1:A:60:LYS:HG2	1:A:61:GLU:N	0.62	2.09	19	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD11	0.62	2.30	8	1
1:A:135:ILE:HG23	1:A:135:ILE:O	0.62	1.93	6	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:HB3	0.62	1.70	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:CG1	0.62	2.78	11	1
1:A:81:LYS:N	1:A:203:VAL:HG12	0.62	2.09	7	1
1:A:56:ASN:C	1:A:57:ILE:HD13	0.62	2.15	7	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CG	0.62	2.25	2	4
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:CD	0.62	2.82	12	2
1:A:50:PRO:HG3	1:A:203:VAL:CG1	0.62	2.25	1	3
1:A:163:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE2	0.62	2.28	7	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:CD1	0.62	2.82	15	2
1:A:37:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HD2	0.62	1.70	8	1
1:A:164:PRO:HB2	1:A:167:LEU:HD11	0.62	1.69	20	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:C	0.62	2.68	2	4
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:O	0.62	2.53	15	8
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:OE1	0.62	2.18	20	3
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HB3	0.62	2.23	17	5
1:A:43:GLN:HB3	1:A:60:LYS:HA	0.62	1.70	17	1
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HA	0.62	2.24	20	2
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:HG11	0.62	2.30	11	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HB	0.62	2.29	14	3
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:CA	0.62	2.25	13	6
1:A:37:PRO:HB2	1:A:41:VAL:CG2	0.62	2.25	17	1
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CD1	0.62	2.68	8	2
1:A:187:LEU:HD22	1:A:191:PHE:CZ	0.62	2.30	4	1
1:A:56:ASN:HD21	1:A:75:THR:HG21	0.62	1.53	20	1
1:A:45:HIS:N	1:A:45:HIS:CD2	0.62	2.68	12	2
1:A:108:VAL:HG23	1:A:199:LEU:HD22	0.62	1.72	15	1
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:HD12	0.62	1.94	17	14
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CD1	0.62	2.30	14	6
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:CB	0.62	2.48	13	5
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:HG2	0.62	1.70	9	1
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:CD1	0.62	2.48	20	2
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:OH	0.62	1.94	10	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:198:THR:HG22	0.62	2.24	3	1
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:NE	0.62	2.10	15	12
1:A:57:ILE:HB	1:A:67:GLU:O	0.62	1.94	19	4
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HB3	0.62	2.15	9	9
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:HB3	0.62	2.09	15	3
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:NE1	0.62	2.09	11	3
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD12	0.61	2.29	15	2
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HB	0.61	1.72	4	4
1:A:178:LEU:HD12	1:A:198:THR:CG2	0.61	2.25	3	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:HA	0.61	1.72	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:N	0.61	2.68	6	2
1:A:167:LEU:HB3	1:A:182:ILE:HG22	0.61	1.72	7	4
1:A:76:ASP:O	1:A:77:GLY:O	0.61	2.17	17	10
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HB	0.61	2.31	8	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HG22	0.61	1.72	1	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:198:THR:HG22	0.61	2.25	13	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD12	0.61	2.11	12	2
1:A:96:PRO:HB3	1:A:211:GLN:O	0.61	1.94	18	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:214:ILE:HB	0.61	2.30	17	8
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:HB3	0.61	2.25	5	2
1:A:91:TRP:N	1:A:91:TRP:CD1	0.61	2.67	5	4
1:A:59:VAL:HG23	1:A:65:CYS:O	0.61	1.96	16	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:O	0.61	1.96	4	4
1:A:182:ILE:O	1:A:183:GLY:C	0.61	2.38	16	2
1:A:48:TRP:NE1	1:A:66:PHE:CE1	0.61	2.68	8	3
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:HG22	0.61	2.30	20	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:C	0.61	2.39	20	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:CG1	0.61	2.63	7	2
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:ARG:HD2	0.61	1.70	6	1
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:HD2	0.61	2.16	5	3
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD1	0.61	2.60	13	7
1:A:54:SER:O	1:A:56:ASN:ND2	0.61	2.34	8	6
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD22	0.61	1.96	14	2
1:A:52:ASP:HB3	1:A:203:VAL:HG11	0.61	1.73	20	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:HD3	0.61	2.31	2	4
1:A:194:LEU:C	1:A:194:LEU:HD23	0.61	2.15	13	8
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:H	0.61	2.09	5	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CD1	0.61	2.54	15	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:CG1	0.61	2.84	6	3
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:O	0.61	1.96	5	6
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HB2	0.61	1.95	19	11
1:A:182:ILE:O	1:A:184:GLY:N	0.61	2.34	16	2
1:A:33:LEU:CD1	1:A:33:LEU:C	0.61	2.65	17	12
1:A:90:ALA:C	1:A:91:TRP:CD1	0.61	2.74	9	8
1:A:60:LYS:O	1:A:61:GLU:O	0.61	2.18	16	8
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:186:TYR:CD2	0.61	2.89	9	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:HB3	0.61	2.31	4	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB3	0.61	1.71	20	2
1:A:177:THR:HA	1:A:194:LEU:HD22	0.61	1.73	3	4
1:A:132:GLY:O	1:A:133:TRP:CD1	0.61	2.54	5	3
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:O	0.61	2.18	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:O	0.61	2.19	8	7
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:HG13	0.61	2.16	9	5
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:HD1	0.61	1.52	16	1
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:CD	0.61	2.25	10	2
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:OG	0.61	1.96	1	2
1:A:56:ASN:ND2	1:A:75:THR:O	0.61	2.34	18	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG23	0.61	2.30	6	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:60:LYS:HA	0.61	2.31	6	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CG2	0.60	2.25	14	5
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:HA3	0.60	2.26	15	5
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:NE2	0.60	2.33	13	7
1:A:91:TRP:HB2	1:A:216:TYR:CG	0.60	2.31	19	4
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:CA	0.60	2.25	11	3
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:CG2	0.60	2.49	6	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CG1	0.60	2.81	14	3
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HD23	0.60	1.71	20	6
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CB	0.60	2.84	16	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CE1	0.60	2.79	14	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:57:ILE:O	0.60	2.50	10	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:CA	0.60	2.79	9	2
1:A:56:ASN:N	1:A:56:ASN:ND2	0.60	2.49	20	4
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:CA	0.60	2.25	6	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:OE1	0.60	1.96	8	1
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:O	0.60	2.40	10	5
1:A:66:PHE:CD1	1:A:211:GLN:HA	0.60	2.32	20	1
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:HB3	0.60	1.96	7	3
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:CD2	0.60	2.50	7	1
1:A:206:VAL:CG2	1:A:207:TRP:CZ3	0.60	2.84	10	1
1:A:186:TYR:O	1:A:186:TYR:CD1	0.60	2.55	12	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:207:TRP:N	0.60	2.65	19	14
1:A:187:LEU:HD12	1:A:191:PHE:CE1	0.60	2.31	14	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:CG2	0.60	2.49	14	4
1:A:59:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CD2	0.60	2.79	9	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG12	0.60	1.96	20	1
1:A:171:LEU:CB	1:A:178:LEU:HD23	0.60	2.25	7	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:CG2	0.60	2.84	7	1
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CZ3	0.60	2.31	10	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:CA	0.60	2.49	12	2
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:CB	0.60	2.26	15	1
1:A:177:THR:CB	1:A:194:LEU:HD22	0.60	2.26	16	14
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CD2	0.60	2.55	9	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ILE:HG21	1:A:75:THR:O	0.60	1.96	1	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:207:TRP:HB3	0.60	1.72	10	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HG11	0.60	2.32	13	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:60:LYS:C	0.60	2.74	6	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:38:PRO:CD	0.60	2.25	2	1
1:A:177:THR:CA	1:A:194:LEU:HD22	0.60	2.26	3	8
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:CD2	0.60	2.78	14	3
1:A:38:PRO:C	1:A:40:LEU:N	0.60	2.54	8	10
1:A:52:ASP:HB2	1:A:79:ARG:O	0.60	1.97	8	2
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:HB	0.60	2.12	8	3
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CZ	0.60	2.90	10	3
1:A:71:VAL:HG13	1:A:207:TRP:CH2	0.60	2.31	18	3
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HD3	0.60	1.97	13	1
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:CD1	0.60	2.60	14	3
1:A:133:TRP:CB	1:A:163:VAL:HG11	0.60	2.25	9	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:171:LEU:HD11	0.60	2.31	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:CG2	0.60	2.84	17	1
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CE2	0.60	2.32	7	2
1:A:110:THR:O	1:A:113:ALA:N	0.60	2.27	19	1
1:A:113:ALA:HB3	1:A:129:GLU:HB2	0.60	1.72	7	2
1:A:95:TRP:CG	1:A:135:ILE:CD1	0.60	2.85	9	1
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CD2	0.60	2.30	7	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:45:HIS:NE2	0.60	2.50	15	2
1:A:171:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HG3	0.60	1.73	4	3
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:O	0.60	2.50	8	2
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:CD	0.60	2.27	20	4
1:A:164:PRO:CB	1:A:167:LEU:HD11	0.60	2.27	20	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:59:VAL:O	0.60	2.50	20	3
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:HD23	0.60	1.71	11	1
1:A:181:SER:OG	1:A:186:TYR:N	0.60	2.35	14	7
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:CG2	0.60	2.49	19	10
1:A:187:LEU:CD2	1:A:191:PHE:CZ	0.60	2.83	5	2
1:A:81:LYS:O	1:A:82:ARG:C	0.60	2.40	8	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:164:PRO:CB	0.60	2.85	10	1
1:A:163:VAL:HA	1:A:167:LEU:HD21	0.60	1.74	14	1
1:A:59:VAL:HG23	1:A:65:CYS:C	0.60	2.17	9	1
1:A:77:GLY:O	1:A:78:VAL:HG13	0.60	1.97	9	3
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:CG2	0.60	2.64	20	3
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:CD1	0.60	2.73	8	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:44:ARG:HH21	0.60	1.53	20	1
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD1	0.60	2.57	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:CG2	0.60	2.50	3	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:168:LEU:N	0.60	2.12	12	1
1:A:86:ARG:CD	1:A:86:ARG:N	0.59	2.65	2	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CZ	0.59	2.31	14	1
1:A:43:GLN:C	1:A:43:GLN:NE2	0.59	2.55	16	2
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CG	0.59	2.32	4	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CG	0.59	2.50	3	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:91:TRP:C	0.59	2.75	7	4
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:CG2	0.59	2.79	10	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:O	0.59	1.97	8	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HG3	0.59	1.72	7	1
1:A:75:THR:OG1	1:A:76:ASP:N	0.59	2.35	9	4
1:A:44:ARG:HG3	1:A:48:TRP:O	0.59	1.96	9	3
1:A:43:GLN:N	1:A:43:GLN:CD	0.59	2.56	17	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:65:CYS:O	0.59	1.97	17	1
1:A:187:LEU:C	1:A:189:PRO:HD2	0.59	2.16	16	2
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD12	0.59	2.17	20	3
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:CG	0.59	2.49	8	4
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CE2	0.59	2.90	20	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:41:VAL:HG23	0.59	1.72	11	1
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:HG2	0.59	1.97	10	6
1:A:167:LEU:HD22	1:A:168:LEU:H	0.59	1.49	9	2
1:A:168:LEU:HD13	1:A:169:VAL:N	0.59	2.13	4	1
1:A:214:ILE:CG1	1:A:214:ILE:O	0.59	2.50	20	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:198:THR:CG2	0.59	2.81	3	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:HG3	0.59	2.27	2	3
1:A:53:CYS:CB	1:A:78:VAL:HB	0.59	2.27	15	4
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:HB	0.59	2.31	8	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:66:PHE:CE1	0.59	2.82	8	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:OG	0.59	1.97	19	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:169:VAL:N	0.59	2.11	10	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:CD1	0.59	2.66	11	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:HA3	0.59	1.97	20	2
1:A:214:ILE:CG2	1:A:214:ILE:O	0.59	2.50	10	4
1:A:43:GLN:O	1:A:59:VAL:O	0.59	2.20	5	5
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CD	0.59	2.65	5	1
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:CD1	0.59	2.63	18	3
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:CB	0.59	2.51	19	1
1:A:39:ASP:HA	1:A:43:GLN:HG3	0.59	1.73	18	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:71:VAL:HG11	0.59	1.75	3	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HG	0.59	2.27	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:HD3	0.59	1.74	10	12
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:HD12	0.59	2.13	5	3
1:A:167:LEU:CB	1:A:182:ILE:HG23	0.59	2.28	5	1
1:A:59:VAL:O	1:A:59:VAL:CG2	0.59	2.51	7	1
1:A:200:TYR:CD1	1:A:200:TYR:O	0.59	2.56	3	1
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:O	0.59	2.50	12	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:71:VAL:CG2	0.59	2.26	15	1
1:A:91:TRP:HH2	1:A:171:LEU:HD13	0.59	1.57	2	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:HB2	0.59	2.33	5	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:198:THR:CG2	0.59	2.81	13	2
1:A:91:TRP:HE1	1:A:169:VAL:HG21	0.59	1.56	17	3
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:CB	0.59	2.51	8	2
1:A:43:GLN:HG2	1:A:60:LYS:HA	0.59	1.73	8	2
1:A:57:ILE:HG22	1:A:75:THR:CG2	0.59	2.25	1	1
1:A:79:ARG:HD2	1:A:203:VAL:O	0.59	1.96	7	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:HD12	0.59	2.33	10	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:198:THR:O	0.59	2.51	4	10
1:A:82:ARG:O	1:A:83:GLY:C	0.59	2.41	15	7
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HG12	0.59	2.31	8	1
1:A:197:ARG:HH11	1:A:199:LEU:HD11	0.59	1.56	4	2
1:A:167:LEU:HD12	1:A:180:TYR:CE1	0.59	2.33	1	1
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:O	0.59	2.21	1	2
1:A:54:SER:CB	1:A:78:VAL:CG1	0.59	2.81	1	1
1:A:96:PRO:CG	1:A:211:GLN:O	0.59	2.51	6	3
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:HG23	0.59	1.72	10	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HB	0.59	2.32	3	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:O	0.59	2.51	12	2
1:A:55:GLU:O	1:A:56:ASN:C	0.59	2.42	8	14
1:A:33:LEU:HG	1:A:34:SER:N	0.59	2.13	13	18
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:CG1	0.59	2.86	14	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:CA	0.59	2.28	1	4
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:HA	0.59	1.95	7	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HB2	0.59	2.12	12	3
1:A:91:TRP:CE3	1:A:216:TYR:CZ	0.59	2.91	13	1
1:A:94:SER:HG	1:A:213:ARG:HG2	0.59	1.57	6	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:214:ILE:O	0.58	2.51	14	3
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:NH2	0.58	2.36	5	3
1:A:44:ARG:NH1	1:A:45:HIS:CD2	0.58	2.71	9	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:CG1	0.58	2.81	9	3
1:A:105:VAL:HG13	1:A:134:ASP:HA	0.58	1.75	7	2
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CD2	0.58	2.56	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD22	1:A:44:ARG:HB2	0.58	1.74	19	3
1:A:44:ARG:HG3	1:A:58:ASP:OD2	0.58	1.98	17	1
1:A:76:ASP:CB	1:A:207:TRP:NE1	0.58	2.65	4	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:167:LEU:HD11	0.58	2.28	20	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD2	0.58	2.70	18	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CG	0.58	2.55	12	2
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:NH2	0.58	2.35	20	3
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:HB3	0.58	1.98	3	10
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:HB2	0.58	1.98	5	3
1:A:199:LEU:CD1	1:A:199:LEU:N	0.58	2.60	15	6
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:N	0.58	2.59	19	6
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:HG23	0.58	2.25	17	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:CB	0.58	2.81	8	4
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:HD21	0.58	1.97	12	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:N	0.58	2.51	16	8
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CE1	0.58	2.90	5	4
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:CD1	0.58	2.87	15	3
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:NH2	0.58	2.13	8	2
1:A:58:ASP:N	1:A:67:GLU:O	0.58	2.35	1	13
1:A:52:ASP:O	1:A:203:VAL:HG12	0.58	1.98	9	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:C	0.58	2.72	20	3
1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:GLY:N	0.58	2.12	8	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:NE1	0.58	2.67	4	1
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:CB	0.58	2.52	15	4
1:A:194:LEU:CD2	1:A:197:ARG:CD	0.58	2.82	15	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HD13	0.58	2.33	15	4
1:A:36:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HD3	0.58	1.74	11	2
1:A:108:VAL:HA	1:A:200:TYR:O	0.58	1.98	15	7
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:HG13	0.58	1.98	14	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:HD3	0.58	1.75	16	3
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:CG2	0.58	2.86	4	2
1:A:90:ALA:HB1	1:A:169:VAL:O	0.58	1.98	20	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:133:TRP:O	0.58	2.51	7	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HG22	0.58	1.75	6	1
1:A:198:THR:C	1:A:199:LEU:HD23	0.58	2.18	11	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:HD3	0.58	2.22	13	7
1:A:110:THR:HG22	1:A:198:THR:O	0.58	1.99	13	5
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:O	0.58	2.22	16	4
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HB	0.58	2.38	8	6
1:A:88:LEU:O	1:A:89:HIS:CD2	0.58	2.56	4	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:CG2	0.58	2.86	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:CYS:SG	1:A:54:SER:N	0.58	2.75	3	2
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:N	0.58	2.66	2	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:106:VAL:HG21	0.58	2.32	11	3
1:A:44:ARG:NH1	1:A:45:HIS:NE2	0.58	2.51	9	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:HG22	0.58	2.18	4	1
1:A:49:ASN:O	1:A:49:ASN:ND2	0.58	2.37	19	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:CB	0.58	2.87	1	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:167:LEU:CD2	0.58	2.27	15	2
1:A:200:TYR:O	1:A:200:TYR:CD1	0.58	2.56	6	1
1:A:32:LEU:O	1:A:32:LEU:HD13	0.58	1.98	11	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:CD1	0.58	2.66	1	6
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:CE1	0.58	2.57	10	5
1:A:93:ILE:O	1:A:180:TYR:OH	0.58	2.21	17	3
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:CG2	0.58	2.28	8	3
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HB	0.58	2.33	7	1
1:A:187:LEU:O	1:A:187:LEU:CG	0.58	2.51	12	1
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:CG2	0.58	2.50	15	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:HA	0.58	1.75	9	3
1:A:106:VAL:CB	1:A:203:VAL:HG23	0.58	2.28	8	1
1:A:40:LEU:HA	1:A:43:GLN:NE2	0.58	2.13	18	4
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:HD11	0.58	2.34	20	1
1:A:135:ILE:C	1:A:135:ILE:CD1	0.58	2.71	7	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:41:VAL:HG23	0.58	1.73	7	1
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CG	0.58	2.57	3	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:58:ASP:CB	0.58	2.28	6	1
1:A:178:LEU:HD21	1:A:198:THR:HG22	0.58	1.74	5	2
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:CE1	0.58	2.34	17	3
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:N	0.58	2.36	19	5
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:CB	0.58	2.82	13	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:CB	0.58	2.82	9	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:CG2	0.58	2.82	15	7
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:CB	0.58	2.72	8	4
1:A:49:ASN:ND2	1:A:53:CYS:HB3	0.58	2.14	11	3
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HB	0.58	1.99	12	4
1:A:45:HIS:HA	1:A:49:ASN:CB	0.58	2.29	1	1
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CE1	0.58	2.56	2	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG11	0.58	1.76	5	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:80:GLY:N	0.58	2.67	3	6
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:CE	0.58	2.52	8	3
1:A:163:VAL:HB	1:A:167:LEU:HD21	0.58	1.75	4	2
1:A:178:LEU:CD1	1:A:199:LEU:O	0.57	2.52	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:LEU:CD1	1:A:194:LEU:HD12	0.57	2.27	14	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:CG	0.57	2.57	16	5
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:N	0.57	2.36	17	6
1:A:49:ASN:O	1:A:78:VAL:CG2	0.57	2.52	5	1
1:A:178:LEU:C	1:A:194:LEU:HD11	0.57	2.18	9	3
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HG3	0.57	2.18	4	6
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:O	0.57	2.22	4	1
1:A:84:TYR:C	1:A:84:TYR:CD1	0.57	2.78	10	1
1:A:107:GLY:CA	1:A:132:GLY:HA3	0.57	2.28	18	8
1:A:187:LEU:HD11	1:A:194:LEU:CD1	0.57	2.29	14	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CB	0.57	2.67	7	5
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HD12	0.57	1.99	15	3
1:A:106:VAL:CG1	1:A:202:SER:O	0.57	2.52	3	2
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CD2	0.57	2.34	7	1
1:A:96:PRO:HD2	1:A:211:GLN:O	0.57	2.00	6	2
1:A:39:ASP:O	1:A:40:LEU:C	0.57	2.40	8	6
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CE2	0.57	2.34	10	5
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:HB2	0.57	1.98	1	2
1:A:91:TRP:CD1	1:A:91:TRP:N	0.57	2.71	11	2
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:HG21	0.57	2.29	7	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:178:LEU:N	0.57	2.67	1	6
1:A:164:PRO:HA	1:A:167:LEU:HD11	0.57	1.75	17	1
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HD12	0.57	2.20	17	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:CB	0.57	2.83	1	4
1:A:85:SER:CB	1:A:171:LEU:HD11	0.57	2.29	7	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:167:LEU:N	0.57	2.14	14	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:HG23	0.57	2.35	15	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:212:VAL:O	0.57	2.52	19	2
1:A:167:LEU:CD1	1:A:167:LEU:N	0.57	2.65	4	3
1:A:91:TRP:CE2	1:A:216:TYR:OH	0.57	2.57	16	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HD12	0.57	2.29	20	2
1:A:133:TRP:CE2	1:A:187:LEU:HD22	0.57	2.34	20	1
1:A:48:TRP:H	1:A:59:VAL:HG21	0.57	1.58	18	2
1:A:50:PRO:CB	1:A:203:VAL:CG1	0.57	2.83	1	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HG21	0.57	2.29	1	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:CZ	0.57	2.30	10	1
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:HD2	0.57	2.29	13	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HB2	0.57	2.29	18	2
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HD13	0.57	1.72	11	1
1:A:177:THR:HA	1:A:194:LEU:CD2	0.57	2.29	11	10
1:A:44:ARG:O	1:A:44:ARG:CZ	0.57	2.52	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HA	0.57	2.40	8	3
1:A:91:TRP:C	1:A:91:TRP:CD1	0.57	2.77	19	4
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:HB3	0.57	1.77	13	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:135:ILE:HG13	0.57	2.34	18	1
1:A:46:HIS:CG	1:A:61:GLU:OE1	0.57	2.57	12	1
1:A:177:THR:C	1:A:178:LEU:HD23	0.57	2.20	1	4
1:A:61:GLU:O	1:A:62:GLY:C	0.57	2.42	19	20
1:A:64:LEU:HG	1:A:212:VAL:O	0.57	1.99	5	1
1:A:168:LEU:O	1:A:181:SER:O	0.57	2.23	12	8
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:CB	0.57	2.67	15	3
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:O	0.57	1.99	20	2
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:O	0.57	2.53	16	3
1:A:50:PRO:HD2	1:A:78:VAL:HG23	0.57	1.75	8	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:HG2	0.57	2.30	11	3
1:A:105:VAL:CG2	1:A:105:VAL:O	0.57	2.52	20	3
1:A:80:GLY:HA3	1:A:203:VAL:HG12	0.57	1.75	19	2
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CG2	0.57	2.53	2	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD21	0.57	2.30	8	2
1:A:206:VAL:CG2	1:A:207:TRP:CE3	0.57	2.79	10	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:186:TYR:N	0.57	2.71	13	2
1:A:187:LEU:HD21	1:A:191:PHE:CE2	0.57	2.35	12	1
1:A:182:ILE:H	1:A:182:ILE:HD12	0.57	1.59	18	2
1:A:89:HIS:CD2	1:A:171:LEU:O	0.57	2.58	1	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:CG	0.57	2.83	13	1
1:A:40:LEU:HA	1:A:60:LYS:HG2	0.57	1.75	14	2
1:A:169:VAL:HG13	1:A:180:TYR:CD1	0.57	2.35	9	2
1:A:40:LEU:CD2	1:A:58:ASP:HB3	0.57	2.30	17	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CD2	0.57	2.58	16	2
1:A:76:ASP:HB2	1:A:207:TRP:CD1	0.57	2.34	19	3
1:A:50:PRO:HA	1:A:78:VAL:HG23	0.57	1.77	6	1
1:A:85:SER:CB	1:A:89:HIS:CE1	0.56	2.88	2	2
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:HD3	0.56	2.00	15	3
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HB3	0.56	2.15	15	3
1:A:94:SER:HB3	1:A:166:ARG:HA	0.56	1.76	12	3
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:HB3	0.56	2.29	20	4
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:NE2	0.56	2.15	20	1
1:A:39:ASP:O	1:A:58:ASP:OD2	0.56	2.23	1	2
1:A:187:LEU:CD2	1:A:187:LEU:O	0.56	2.53	12	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:HB2	0.56	2.35	1	3
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:NE2	0.56	2.38	5	1
1:A:79:ARG:C	1:A:79:ARG:HD2	0.56	2.21	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:NE	1:A:72:ALA:CB	0.56	2.67	17	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:CB	0.56	2.53	19	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:173:MET:SD	0.56	2.98	1	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:CB	0.56	2.53	7	1
1:A:47:GLY:HA3	1:A:59:VAL:CG2	0.56	2.30	18	1
1:A:79:ARG:CD	1:A:79:ARG:O	0.56	2.54	20	2
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:O	0.56	1.98	12	6
1:A:167:LEU:CD1	1:A:182:ILE:CG2	0.56	2.83	14	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:207:TRP:HB3	0.56	1.77	5	1
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:O	0.56	2.24	11	5
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:ND2	0.56	2.59	10	6
1:A:187:LEU:HG	1:A:191:PHE:CE1	0.56	2.35	12	5
1:A:167:LEU:CD2	1:A:181:SER:O	0.56	2.53	9	1
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:HD22	0.56	2.12	12	3
1:A:81:LYS:CG	1:A:201:PRO:O	0.56	2.53	7	2
1:A:75:THR:HG23	1:A:76:ASP:N	0.56	2.16	8	3
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:N	0.56	2.16	4	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:87:GLY:N	0.56	2.68	19	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:178:LEU:N	0.56	2.60	7	2
1:A:79:ARG:CD	1:A:203:VAL:O	0.56	2.53	7	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:207:TRP:CZ3	0.56	2.73	18	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:CG1	0.56	2.54	6	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:80:GLY:CA	0.56	2.30	15	1
1:A:69:ARG:HB2	1:A:70:PRO:CD	0.56	2.30	19	11
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:OG	0.56	2.54	19	3
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:NE2	0.56	2.39	20	10
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:CE3	0.56	2.35	16	3
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG13	0.56	1.59	17	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:58:ASP:HA	0.56	2.30	7	2
1:A:108:VAL:C	1:A:199:LEU:HD13	0.56	2.20	19	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:HG21	0.56	1.99	13	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:CG	0.56	2.83	17	5
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CE1	0.56	2.35	1	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:CG2	0.56	2.88	7	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:N	0.56	2.63	6	2
1:A:54:SER:O	1:A:56:ASN:N	0.56	2.39	2	3
1:A:57:ILE:HG21	1:A:68:ARG:NE	0.56	2.16	17	1
1:A:61:GLU:O	1:A:63:GLY:N	0.56	2.38	19	5
1:A:50:PRO:CD	1:A:51:LYS:HE2	0.56	2.30	4	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:O	0.56	2.57	7	1
1:A:51:LYS:NZ	1:A:82:ARG:CZ	0.56	2.69	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ARG:CZ	1:A:53:CYS:SG	0.56	2.94	11	2
1:A:29:LEU:HD23	1:A:29:LEU:H	0.56	1.60	13	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:167:LEU:CD1	0.56	2.81	6	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:CA	0.56	2.31	12	4
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG23	0.56	1.76	15	2
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:H	0.56	1.58	5	2
1:A:91:TRP:HE3	1:A:169:VAL:HG11	0.56	1.57	18	4
1:A:163:VAL:CB	1:A:167:LEU:HD21	0.56	2.31	15	2
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:HG22	0.56	2.36	20	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:73:GLN:N	0.56	2.39	12	1
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:CB	0.56	2.54	14	6
1:A:95:TRP:CE2	1:A:212:VAL:HG21	0.56	2.36	4	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HG3	0.56	1.77	19	2
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:CA	0.56	2.30	3	7
1:A:43:GLN:N	1:A:43:GLN:NE2	0.56	2.52	17	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CE2	0.56	2.35	16	2
1:A:91:TRP:NE1	1:A:216:TYR:CE2	0.56	2.74	16	1
1:A:48:TRP:HA	1:A:214:ILE:HD13	0.56	1.77	8	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HG2	0.56	1.76	10	4
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:CG1	0.56	2.52	4	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE2	0.56	2.35	6	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HB3	0.56	1.78	12	2
1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:HD2	0.56	2.16	15	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:55:GLU:HG3	0.56	2.30	11	1
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:CB	0.56	2.31	18	3
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:CE3	0.56	2.59	9	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CE2	0.56	2.93	9	1
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:CD1	0.56	2.65	18	2
1:A:105:VAL:HG23	1:A:134:ASP:CA	0.56	2.31	8	2
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CB	0.56	2.54	18	3
1:A:110:THR:OG1	1:A:199:LEU:CD2	0.56	2.53	20	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:HB	0.56	2.36	1	2
1:A:29:LEU:CD2	1:A:71:VAL:HG22	0.56	2.31	15	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HG2	0.56	2.36	15	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:48:TRP:O	0.56	2.38	5	2
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:HB	0.56	2.36	17	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:211:GLN:CA	0.56	2.31	17	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:50:PRO:HG3	0.56	2.31	7	2
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:HA	0.56	1.78	7	1
1:A:56:ASN:ND2	1:A:77:GLY:O	0.55	2.39	11	2
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:N	0.55	2.16	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:HD13	0.55	1.60	16	3
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:N	0.55	2.16	20	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:45:HIS:CD2	0.55	2.36	20	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:CA	0.55	2.31	19	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:133:TRP:O	0.55	1.99	7	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:CZ	0.55	2.36	10	1
1:A:45:HIS:CE1	1:A:50:PRO:HG2	0.55	2.36	3	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:O	0.55	2.02	6	1
1:A:88:LEU:O	1:A:88:LEU:HD23	0.55	2.00	11	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:CZ	0.55	2.55	2	3
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CE1	0.55	2.36	2	5
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:CB	0.55	2.54	8	5
1:A:50:PRO:C	1:A:52:ASP:H	0.55	2.04	20	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:34:SER:N	0.55	2.14	10	2
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:HG21	0.55	2.16	4	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:NE1	0.55	2.15	4	1
1:A:50:PRO:CD	1:A:51:LYS:HE3	0.55	2.31	19	1
1:A:167:LEU:HD11	1:A:180:TYR:HE1	0.55	1.62	18	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:180:TYR:OH	0.55	2.55	1	5
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CE2	0.55	2.36	9	2
1:A:43:GLN:OE1	1:A:61:GLU:N	0.55	2.39	3	4
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:N	0.55	2.40	8	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:CG	0.55	2.55	4	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:N	0.55	2.39	10	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG13	0.55	2.36	10	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG12	0.55	2.37	12	3
1:A:68:ARG:CZ	1:A:207:TRP:CH2	0.55	2.89	18	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:167:LEU:HD11	0.55	1.76	11	1
1:A:94:SER:CA	1:A:165:GLU:O	0.55	2.55	11	3
1:A:216:TYR:CD1	1:A:217:MET:N	0.55	2.74	7	9
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:N	0.55	2.39	19	4
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:CB	0.55	2.32	12	3
1:A:73:GLN:CG	1:A:74:SER:N	0.55	2.69	9	2
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:H	0.55	1.61	7	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:OD1	0.55	2.54	16	1
1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CD	0.55	2.66	4	2
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:NE2	0.55	2.55	19	2
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG22	0.55	1.77	7	2
1:A:57:ILE:HB	1:A:68:ARG:HG2	0.55	1.78	10	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HG12	0.55	2.37	6	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:N	0.55	2.16	20	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:CG	0.55	2.55	16	3
1:A:164:PRO:HA	1:A:167:LEU:CD1	0.55	2.31	17	1
1:A:68:ARG:HE	1:A:72:ALA:HB2	0.55	1.59	17	1
1:A:54:SER:OG	1:A:76:ASP:O	0.55	2.25	20	2
1:A:167:LEU:CG	1:A:180:TYR:CE1	0.55	2.89	1	2
1:A:106:VAL:CG1	1:A:203:VAL:HG23	0.55	2.31	7	1
1:A:32:LEU:O	1:A:36:PRO:HD2	0.55	2.01	6	2
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:CG1	0.55	2.69	14	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:CA	0.55	2.31	17	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HG	0.55	2.31	17	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:210:CYS:SG	0.55	2.94	6	2
1:A:73:GLN:O	1:A:75:THR:N	0.55	2.40	13	5
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:HB2	0.55	1.76	7	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:78:VAL:HB	0.55	2.15	10	2
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CD1	0.55	2.59	3	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:CB	0.55	2.55	15	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:72:ALA:N	0.55	2.70	3	3
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:CB	0.55	2.31	9	1
1:A:110:THR:N	1:A:199:LEU:HB3	0.55	2.17	4	4
1:A:110:THR:CG2	1:A:197:ARG:O	0.55	2.55	10	2
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:CA	0.55	2.32	19	1
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:CG	0.55	2.73	18	2
1:A:37:PRO:HB2	1:A:41:VAL:HB	0.55	1.78	7	1
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:CD1	0.55	2.66	7	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:CG2	0.55	2.32	18	2
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:O	0.55	2.60	10	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HB	0.55	2.37	18	2
1:A:167:LEU:HB3	1:A:180:TYR:CE1	0.55	2.37	4	4
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:163:VAL:HG21	0.55	2.37	8	1
1:A:109:ALA:O	1:A:200:TYR:N	0.55	2.40	11	4
1:A:135:ILE:CD1	1:A:135:ILE:C	0.55	2.75	1	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CA	0.55	2.30	10	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:43:GLN:HE21	1:A:44:ARG:N	0.55	1.99	2	1
1:A:63:GLY:O	1:A:65:CYS:N	0.55	2.40	20	7
1:A:44:ARG:NH1	1:A:57:ILE:O	0.55	2.39	19	4
1:A:163:VAL:CG1	1:A:183:GLY:N	0.55	2.70	16	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CE3	0.55	2.37	16	2
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:C	0.55	2.45	19	4
1:A:59:VAL:O	1:A:59:VAL:HG23	0.55	2.01	7	2
1:A:57:ILE:HG13	1:A:78:VAL:CG1	0.55	2.32	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD11	1:A:211:GLN:NE2	0.55	2.17	12	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:O	0.55	2.25	15	1
1:A:95:TRP:NE1	1:A:212:VAL:HG21	0.55	2.17	4	3
1:A:164:PRO:HD2	1:A:167:LEU:HD21	0.55	1.79	5	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:207:TRP:NE1	0.55	2.54	5	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:71:VAL:O	0.55	2.40	17	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:CB	0.55	2.54	7	1
1:A:75:THR:HG22	1:A:76:ASP:N	0.55	2.17	10	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:80:GLY:CA	0.55	2.32	10	2
1:A:207:TRP:CH2	1:A:209:GLN:OE1	0.55	2.60	6	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:CD	0.54	2.30	2	2
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:CB	0.54	2.90	2	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.24	2	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CG	0.54	2.55	11	2
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.54	14	1
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CE1	0.54	2.60	17	1
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:CE	0.54	2.54	17	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CB	0.54	2.89	20	3
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CB	0.54	2.90	8	1
1:A:41:VAL:HA	1:A:45:HIS:NE2	0.54	2.16	6	2
1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:CD2	0.54	2.15	19	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:TRP:C	0.54	2.44	19	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CD	0.54	2.55	3	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:216:TYR:CZ	0.54	2.96	16	1
1:A:93:ILE:CB	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.55	12	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:HD12	0.54	1.79	20	2
1:A:72:ALA:CB	1:A:207:TRP:NE1	0.54	2.71	1	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:180:TYR:HE2	0.54	1.61	7	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:163:VAL:CG2	0.54	2.33	18	1
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:CG2	0.54	2.56	12	1
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:CD2	0.54	2.55	11	1
1:A:82:ARG:C	1:A:82:ARG:HD2	0.54	2.23	5	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:CE	0.54	2.55	9	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG13	0.54	1.79	9	1
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:HG22	0.54	2.02	16	3
1:A:43:GLN:HG2	1:A:60:LYS:CA	0.54	2.33	8	2
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HG3	0.54	2.03	10	2
1:A:54:SER:OG	1:A:77:GLY:O	0.54	2.15	7	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HB	0.54	1.79	13	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:O	0.54	2.56	2	3
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:HA	0.54	1.79	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ILE:N	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.40	14	1
1:A:187:LEU:HD12	1:A:191:PHE:HE1	0.54	1.61	14	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:32:LEU:HB3	0.54	1.78	5	1
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HG	0.54	2.03	17	1
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CG	0.54	2.36	17	1
1:A:45:HIS:NE2	1:A:50:PRO:HG3	0.54	2.17	12	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:N	0.54	2.17	15	2
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HD13	0.54	1.79	11	1
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:HD3	0.54	2.33	5	3
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:CG2	0.54	2.33	8	3
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CE2	0.54	2.96	20	1
1:A:90:ALA:C	1:A:91:TRP:CE3	0.54	2.81	13	1
1:A:167:LEU:HD11	1:A:180:TYR:CE1	0.54	2.38	18	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:CD1	0.54	2.84	3	1
1:A:178:LEU:H	1:A:194:LEU:HD21	0.54	1.63	6	9
1:A:186:TYR:O	1:A:188:GLY:N	0.54	2.40	17	4
1:A:105:VAL:HB	1:A:204:SER:O	0.54	2.02	9	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:HG22	0.54	2.36	9	1
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CG	0.54	2.90	19	3
1:A:43:GLN:OE1	1:A:48:TRP:CZ3	0.54	2.61	16	1
1:A:64:LEU:CG	1:A:214:ILE:O	0.54	2.56	18	4
1:A:58:ASP:OD1	1:A:67:GLU:CB	0.54	2.56	1	1
1:A:44:ARG:HB2	1:A:59:VAL:O	0.54	2.03	14	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:NZ	0.54	2.40	9	1
1:A:135:ILE:HD11	1:A:164:PRO:HD2	0.54	1.79	17	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG2	0.54	2.32	12	2
1:A:52:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NH2	0.54	2.41	17	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:55:GLU:OE1	0.54	2.02	8	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:41:VAL:N	0.54	2.18	20	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:173:MET:CE	0.54	2.91	10	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:71:VAL:CG1	0.54	2.33	3	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:HD11	0.54	1.80	6	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HB	0.54	1.78	11	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:CE3	0.54	2.38	3	2
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.03	4	3
1:A:64:LEU:O	1:A:213:ARG:CZ	0.54	2.55	3	3
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:CB	0.54	2.80	17	1
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:CB	0.54	2.76	19	3
1:A:167:LEU:CB	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.56	19	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CG2	0.54	2.33	10	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:CE2	0.54	2.91	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:CE2	0.54	2.37	6	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD22	0.54	2.36	16	2
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:CG2	0.54	2.86	1	3
1:A:43:GLN:H	1:A:43:GLN:CD	0.54	2.06	17	2
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:HD2	0.54	2.23	9	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CG	0.54	2.56	9	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CG	0.54	2.70	13	2
1:A:109:ALA:N	1:A:199:LEU:HD12	0.54	2.17	17	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CZ	0.54	2.56	17	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:81:LYS:N	0.54	2.40	17	3
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:HB2	0.54	2.33	10	4
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:CD1	0.54	2.33	20	2
1:A:167:LEU:CD1	1:A:181:SER:O	0.54	2.56	1	1
1:A:79:ARG:CB	1:A:204:SER:OG	0.54	2.55	1	1
1:A:68:ARG:NH2	1:A:207:TRP:CH2	0.54	2.75	18	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:43:GLN:CD	0.54	2.77	18	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG13	0.54	2.38	18	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:77:GLY:O	0.54	2.41	11	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:HB3	0.54	2.38	14	4
1:A:68:ARG:C	1:A:68:ARG:CD	0.54	2.76	18	2
1:A:205:ALA:HB1	1:A:212:VAL:HG11	0.54	1.78	3	3
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:CG1	0.54	2.33	16	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:NH1	0.54	2.69	1	2
1:A:51:LYS:C	1:A:53:CYS:H	0.54	2.07	1	4
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:HB2	0.54	2.03	10	1
1:A:80:GLY:CA	1:A:203:VAL:HG12	0.54	2.33	18	1
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:CG	0.54	2.76	18	1
1:A:207:TRP:CD1	1:A:207:TRP:C	0.54	2.81	3	1
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:OD1	0.54	2.25	3	2
1:A:37:PRO:O	1:A:42:ALA:CB	0.54	2.56	12	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:59:VAL:CG1	0.54	2.86	15	1
1:A:134:ASP:O	1:A:135:ILE:CG2	0.53	2.57	19	5
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:CD1	0.53	2.16	19	3
1:A:85:SER:C	1:A:89:HIS:CE1	0.53	2.81	12	2
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:CD	0.53	2.13	12	2
1:A:207:TRP:CE2	1:A:209:GLN:HB2	0.53	2.38	10	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:214:ILE:CG2	0.53	2.91	13	3
1:A:43:GLN:CD	1:A:44:ARG:N	0.53	2.61	18	3
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:CE3	0.53	2.61	6	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HG23	0.53	2.24	2	4
1:A:172:ASP:OD1	1:A:173:MET:N	0.53	2.42	16	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:OE1	1:A:209:GLN:CG	0.53	2.57	14	1
1:A:53:CYS:CA	1:A:78:VAL:HB	0.53	2.33	4	4
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.91	12	2
1:A:164:PRO:HG2	1:A:167:LEU:HD11	0.53	1.78	20	1
1:A:87:GLY:O	1:A:173:MET:N	0.53	2.40	19	3
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:HG11	0.53	1.79	1	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:215:ARG:O	0.53	2.03	13	1
1:A:186:TYR:C	1:A:186:TYR:CD1	0.53	2.81	12	1
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ILE:N	0.53	2.62	6	18
1:A:68:ARG:HD3	1:A:69:ARG:N	0.53	2.19	5	2
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CG	0.53	2.38	6	2
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG11	0.53	2.33	3	3
1:A:59:VAL:CB	1:A:65:CYS:O	0.53	2.57	17	1
1:A:184:GLY:O	1:A:186:TYR:N	0.53	2.41	16	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:30:GLU:N	0.53	2.15	19	9
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:NH2	0.53	2.42	7	3
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HB3	0.53	2.33	13	7
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:NH2	0.53	2.42	8	2
1:A:52:ASP:CB	1:A:80:GLY:HA2	0.53	2.32	18	4
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:CB	0.53	2.33	19	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:211:GLN:O	0.53	2.56	6	2
1:A:48:TRP:HD1	1:A:64:LEU:HD12	0.53	1.63	10	1
1:A:69:ARG:CG	1:A:70:PRO:HD3	0.53	2.34	10	2
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:HD12	0.53	2.03	13	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:213:ARG:HB2	0.53	2.32	12	1
1:A:39:ASP:CB	1:A:43:GLN:OE1	0.53	2.57	5	5
1:A:69:ARG:N	1:A:70:PRO:HD2	0.53	2.17	15	4
1:A:82:ARG:CZ	1:A:83:GLY:N	0.53	2.72	9	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:134:ASP:OD1	0.53	2.04	16	1
1:A:43:GLN:C	1:A:43:GLN:CD	0.53	2.67	7	3
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:CA	0.53	2.54	4	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HD3	0.53	2.03	18	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:OG1	0.53	2.56	2	2
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG3	0.53	2.34	18	7
1:A:109:ALA:N	1:A:200:TYR:O	0.53	2.41	5	1
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:CB	0.53	2.56	17	4
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:HB2	0.53	2.33	7	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:C	0.53	2.75	13	2
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:N	0.53	2.18	12	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:55:GLU:OE1	0.53	2.57	12	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:131:TRP:O	0.53	2.04	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PRO:O	1:A:211:GLN:NE2	0.53	2.39	15	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:C	0.53	2.24	5	6
1:A:59:VAL:CA	1:A:65:CYS:O	0.53	2.56	17	1
1:A:49:ASN:O	1:A:79:ARG:O	0.53	2.27	17	2
1:A:105:VAL:HG21	1:A:134:ASP:HB2	0.53	1.81	8	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:H	0.53	1.63	4	1
1:A:40:LEU:CB	1:A:58:ASP:OD2	0.53	2.57	19	2
1:A:178:LEU:HD13	1:A:198:THR:HG22	0.53	1.80	3	1
1:A:96:PRO:O	1:A:211:GLN:O	0.53	2.26	3	1
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:OE1	0.53	2.47	2	2
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:OG	0.53	2.02	17	3
1:A:93:ILE:HG23	1:A:180:TYR:CZ	0.53	2.39	5	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:43:GLN:NE2	0.53	2.72	8	2
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:NE1	0.53	2.19	4	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:CD1	0.53	2.89	4	1
1:A:56:ASN:HD22	1:A:56:ASN:N	0.53	2.01	15	2
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:N	0.53	2.19	10	2
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:CG1	0.53	2.86	20	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:CA	0.53	2.56	19	1
1:A:52:ASP:N	1:A:80:GLY:HA2	0.53	2.18	1	1
1:A:45:HIS:CE1	1:A:51:LYS:NZ	0.53	2.77	7	1
1:A:48:TRP:HZ3	1:A:78:VAL:HG11	0.53	1.60	10	1
1:A:66:PHE:CD2	1:A:208:GLY:HA2	0.53	2.39	13	1
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:209:GLN:OE1	0.53	2.62	6	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CD1	0.53	2.34	6	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:HE1	0.53	1.59	11	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:CG2	0.53	2.87	2	2
1:A:55:GLU:N	1:A:55:GLU:OE1	0.53	2.41	2	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:203:VAL:HG22	0.53	2.39	5	2
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:HB2	0.53	1.81	11	2
1:A:108:VAL:O	1:A:131:TRP:O	0.53	2.26	4	5
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:CB	0.53	2.91	4	1
1:A:109:ALA:HB1	1:A:130:SER:HA	0.53	1.80	19	1
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:HB3	0.53	2.23	19	1
1:A:113:ALA:HB2	1:A:129:GLU:O	0.53	2.03	19	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:57:ILE:O	0.53	2.03	1	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:CB	0.53	2.92	7	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:CB	0.53	2.57	10	2
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:O	0.53	2.03	18	1
1:A:94:SER:HA	1:A:167:LEU:HD12	0.53	1.81	2	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:194:LEU:C	0.53	2.23	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:TRP:CG	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.92	14	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD12	0.53	2.38	14	2
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:CA	0.53	2.57	10	3
1:A:206:VAL:CG1	1:A:211:GLN:OE1	0.53	2.57	17	1
1:A:79:ARG:HG2	1:A:80:GLY:N	0.53	2.19	3	2
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:HD3	0.53	2.16	16	2
1:A:209:GLN:O	1:A:211:GLN:N	0.53	2.41	8	2
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CA	0.53	2.57	4	2
1:A:84:TYR:O	1:A:84:TYR:CD2	0.53	2.62	6	2
1:A:208:GLY:O	1:A:211:GLN:NE2	0.53	2.42	10	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HD23	0.53	1.81	13	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:CD1	0.53	2.87	12	1
1:A:91:TRP:HE1	1:A:171:LEU:HD22	0.53	1.64	11	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:HA	0.53	1.79	13	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.92	5	2
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:CD	0.53	2.57	9	1
1:A:88:LEU:O	1:A:89:HIS:ND1	0.53	2.42	19	4
1:A:37:PRO:CB	1:A:38:PRO:HD2	0.53	2.34	8	1
1:A:203:VAL:HG22	1:A:204:SER:N	0.53	2.19	15	2
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:O	0.53	2.57	20	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:CE	0.53	2.57	13	3
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:OH	0.53	2.58	10	1
1:A:207:TRP:CD1	1:A:208:GLY:N	0.53	2.77	10	2
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HB2	0.53	2.39	3	1
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.56	9	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:205:ALA:HB1	0.52	2.40	17	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:N	0.52	2.40	16	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:CB	0.52	2.57	8	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:O	0.52	2.27	1	3
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:CD1	0.52	2.58	3	2
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CB	0.52	2.34	18	3
1:A:88:LEU:CB	1:A:172:ASP:OD2	0.52	2.57	19	1
1:A:86:ARG:HG2	1:A:87:GLY:N	0.52	2.19	19	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:CG	0.52	2.56	11	2
1:A:53:CYS:SG	1:A:54:SER:O	0.52	2.67	3	1
1:A:207:TRP:CD2	1:A:208:GLY:N	0.52	2.78	2	1
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:HE1	0.52	1.60	2	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:CD	0.52	2.34	5	1
1:A:94:SER:N	1:A:213:ARG:O	0.52	2.43	9	2
1:A:68:ARG:CG	1:A:207:TRP:HB2	0.52	2.34	16	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:HG3	0.52	2.20	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PRO:CB	1:A:37:PRO:CD	0.52	2.86	20	3
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:HB	0.52	1.81	20	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:C	0.52	2.23	20	1
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:CD2	0.52	2.77	7	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HG13	0.52	2.20	7	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:NE	0.52	2.18	10	1
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD22	0.52	2.03	13	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:OH	0.52	2.05	6	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:213:ARG:HA	0.52	1.81	6	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:HA2	0.52	1.79	12	4
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CG	0.52	2.71	5	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:CG	0.52	2.35	9	1
1:A:58:ASP:O	1:A:58:ASP:OD1	0.52	2.27	19	3
1:A:68:ARG:NH1	1:A:76:ASP:OD2	0.52	2.42	1	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:76:ASP:O	0.52	2.04	7	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:HD3	0.52	2.33	2	5
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:CB	0.52	2.35	20	2
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:CD	0.52	2.58	2	9
1:A:40:LEU:CG	1:A:58:ASP:OD1	0.52	2.58	9	2
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:CD1	0.52	2.79	9	1
1:A:91:TRP:HZ2	1:A:171:LEU:HD13	0.52	1.61	3	3
1:A:182:ILE:N	1:A:185:THR:OG1	0.52	2.43	16	1
1:A:39:ASP:CB	1:A:43:GLN:HB3	0.52	2.35	8	1
1:A:213:ARG:CD	1:A:213:ARG:C	0.52	2.77	20	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:OD2	0.52	2.42	20	1
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:CYS:CB	0.52	2.34	1	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:203:VAL:CG2	0.52	2.77	10	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HG23	0.52	2.34	10	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	0.52	2.16	10	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CD1	0.52	2.63	13	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:58:ASP:N	0.52	2.71	2	4
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HB2	0.52	2.34	5	5
1:A:52:ASP:CG	1:A:80:GLY:HA3	0.52	2.25	12	4
1:A:163:VAL:H	1:A:164:PRO:HD2	0.52	1.65	17	3
1:A:131:TRP:CD1	1:A:131:TRP:N	0.52	2.76	14	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:40:LEU:C	0.52	2.75	8	4
1:A:66:PHE:CB	1:A:211:GLN:HA	0.52	2.34	16	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:CG1	0.52	2.34	1	2
1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD23	0.52	1.64	19	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:207:TRP:HB3	0.52	2.33	10	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD23	0.52	2.40	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:ARG:NE	1:A:213:ARG:CA	0.52	2.70	5	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HG	0.52	2.20	9	1
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HG22	0.52	2.04	17	1
1:A:50:PRO:C	1:A:52:ASP:N	0.52	2.62	20	2
1:A:44:ARG:HG2	1:A:55:GLU:HA	0.52	1.81	8	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:78:VAL:HG11	0.52	2.40	8	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:O	0.52	2.03	18	4
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HE22	0.52	2.06	20	2
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:CG	0.52	2.57	10	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:40:LEU:HD11	0.52	1.81	13	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:C	0.52	2.48	12	1
1:A:86:ARG:C	1:A:89:HIS:NE2	0.52	2.63	13	7
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:OG1	0.52	2.28	5	3
1:A:51:LYS:C	1:A:53:CYS:N	0.52	2.60	6	5
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:HE2	0.52	2.04	17	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:CG2	0.52	2.86	1	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HE3	0.52	2.05	8	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.34	11	2
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:O	0.52	2.56	7	2
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CE1	0.52	2.98	7	1
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:OG1	0.52	2.26	10	4
1:A:37:PRO:CG	1:A:40:LEU:HD12	0.52	2.35	10	1
1:A:171:LEU:CD1	1:A:201:PRO:HG3	0.52	2.34	11	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG22	0.52	2.04	11	1
1:A:173:MET:O	1:A:174:GLU:C	0.52	2.47	12	18
1:A:79:ARG:HA	1:A:203:VAL:O	0.52	2.05	12	7
1:A:109:ALA:CA	1:A:129:GLU:O	0.52	2.58	9	1
1:A:107:GLY:O	1:A:202:SER:O	0.52	2.28	4	3
1:A:41:VAL:HA	1:A:45:HIS:CD2	0.52	2.39	20	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CD1	0.52	2.97	10	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:HD22	0.52	1.63	13	2
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:CB	0.52	2.35	18	1
1:A:51:LYS:NZ	1:A:81:LYS:N	0.52	2.57	15	1
1:A:179:GLY:O	1:A:187:LEU:HD21	0.52	2.03	11	1
1:A:90:ALA:O	1:A:91:TRP:CD1	0.52	2.62	16	4
1:A:88:LEU:C	1:A:89:HIS:CD2	0.52	2.83	20	4
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:CD	0.52	2.35	17	12
1:A:106:VAL:CG1	1:A:107:GLY:N	0.52	2.73	10	2
1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CD1	0.52	2.78	9	2
1:A:82:ARG:CZ	1:A:83:GLY:CA	0.52	2.87	9	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:52:ASP:N	0.52	2.03	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:NE	0.52	2.42	8	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:93:ILE:HG13	0.52	2.40	4	2
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:NE	0.52	2.43	11	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CD2	0.52	2.35	13	1
1:A:38:PRO:HD2	1:A:41:VAL:HG21	0.52	1.82	13	1
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:CD	0.52	2.48	2	2
1:A:105:VAL:C	1:A:106:VAL:CG2	0.52	2.78	13	7
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HA	0.52	2.05	19	8
1:A:105:VAL:CA	1:A:204:SER:O	0.52	2.58	9	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:210:CYS:SG	0.52	2.45	9	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:67:GLU:O	0.52	2.57	16	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HB	0.52	1.81	8	2
1:A:37:PRO:HG3	1:A:41:VAL:HG21	0.52	1.80	1	1
1:A:79:ARG:HD2	1:A:80:GLY:N	0.52	2.20	7	1
1:A:170:VAL:CG1	1:A:187:LEU:HD23	0.52	2.35	11	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HB	0.51	2.40	2	1
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	0.51	1.82	2	3
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.51	2.03	2	4
1:A:173:MET:O	1:A:175:GLU:N	0.51	2.43	4	17
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:CG	0.51	2.58	14	1
1:A:94:SER:O	1:A:213:ARG:N	0.51	2.43	8	6
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:NE	0.51	2.73	5	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:CB	0.51	2.36	5	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:CG	0.51	2.25	9	1
1:A:49:ASN:C	1:A:49:ASN:ND2	0.51	2.63	9	4
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.20	4	3
1:A:50:PRO:HB2	1:A:80:GLY:HA3	0.51	1.81	11	2
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.35	20	2
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:NE	0.51	2.43	7	1
1:A:68:ARG:HD2	1:A:207:TRP:CB	0.51	2.35	7	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:HG13	0.51	2.39	18	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:59:VAL:O	0.51	2.04	3	2
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:181:SER:HA	1:A:186:TYR:CD2	0.51	2.40	12	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.35	12	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:167:LEU:O	0.51	2.05	11	1
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:HD23	0.51	2.21	11	1
1:A:84:TYR:HE1	1:A:171:LEU:HD11	0.51	1.62	5	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:OG	0.51	2.05	5	2
1:A:52:ASP:O	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.58	9	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:61:GLU:CA	0.51	2.92	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.51	2.05	20	2
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CD1	0.51	2.41	16	2
1:A:81:LYS:O	1:A:83:GLY:N	0.51	2.43	8	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:206:VAL:CG2	0.51	2.58	4	1
1:A:80:GLY:H	1:A:203:VAL:HG13	0.51	1.65	7	1
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:HD3	0.51	1.80	10	1
1:A:177:THR:HA	1:A:198:THR:HG22	0.51	1.82	9	3
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CG	0.51	2.58	15	2
1:A:164:PRO:O	1:A:166:ARG:N	0.51	2.43	12	3
1:A:92:GLU:OE2	1:A:166:ARG:NH1	0.51	2.43	1	1
1:A:52:ASP:C	1:A:80:GLY:HA2	0.51	2.25	1	1
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:HG12	0.51	2.24	7	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:HG12	0.51	2.36	10	2
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:HG21	0.51	2.40	13	2
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:O	0.51	2.28	2	5
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:HG23	0.51	1.81	5	1
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CD	0.51	2.74	17	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:CG2	0.51	2.35	16	2
1:A:54:SER:CB	1:A:76:ASP:O	0.51	2.58	16	2
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:THR:HB	0.51	1.82	4	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:167:LEU:N	0.51	2.61	20	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:80:GLY:CA	0.51	2.35	19	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:53:CYS:SG	0.51	2.83	10	1
1:A:47:GLY:HA2	1:A:64:LEU:CD2	0.51	2.36	18	1
1:A:47:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD22	0.51	1.82	18	1
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:HB3	0.51	2.36	2	2
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:HA	0.51	2.41	14	8
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:CD2	0.51	2.93	9	1
1:A:59:VAL:C	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.25	16	2
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HB3	0.51	1.83	8	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:59:VAL:N	0.51	2.43	8	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CZ	0.51	2.98	4	1
1:A:79:ARG:HG2	1:A:203:VAL:O	0.51	2.04	1	1
1:A:95:TRP:HE1	1:A:106:VAL:HG21	0.51	1.64	7	1
1:A:81:LYS:O	1:A:203:VAL:N	0.51	2.43	7	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:HD13	0.51	1.76	10	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:58:ASP:OD2	0.51	2.28	11	1
1:A:43:GLN:HE21	1:A:44:ARG:CA	0.51	2.19	2	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:109:ALA:HB3	0.51	1.80	2	1
1:A:107:GLY:HA2	1:A:132:GLY:HA3	0.51	1.83	18	8
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:CB	0.51	2.94	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ARG:NE	1:A:83:GLY:N	0.51	2.59	9	1
1:A:180:TYR:H	1:A:187:LEU:HD13	0.51	1.66	17	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NE	0.51	2.43	19	1
1:A:133:TRP:HB2	1:A:180:TYR:CD2	0.51	2.41	18	1
1:A:205:ALA:HB2	1:A:212:VAL:HG11	0.51	1.82	3	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD12	0.51	1.81	12	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:186:TYR:HD2	0.51	1.66	12	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:61:GLU:OE1	0.51	2.63	12	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:HG2	0.51	2.41	15	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG11	0.51	1.64	11	1
1:A:52:ASP:O	1:A:78:VAL:C	0.51	2.49	2	1
1:A:39:ASP:O	1:A:39:ASP:OD1	0.51	2.29	5	2
1:A:167:LEU:CD2	1:A:167:LEU:C	0.51	2.78	9	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:201:PRO:N	0.51	2.20	9	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:HG22	0.51	2.35	12	7
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:HB2	0.51	2.41	17	1
1:A:91:TRP:HZ3	1:A:171:LEU:HD22	0.51	1.66	17	1
1:A:180:TYR:N	1:A:187:LEU:HD13	0.51	2.21	17	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:CA	0.51	2.78	16	4
1:A:38:PRO:HD2	1:A:41:VAL:CG2	0.51	2.36	13	3
1:A:113:ALA:CA	1:A:128:SER:HB2	0.51	2.36	19	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.89	1	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:HA	0.51	1.81	7	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:CG	0.51	2.79	7	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:60:LYS:NZ	0.51	2.44	13	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:CG2	0.51	2.36	15	2
1:A:135:ILE:CD1	1:A:163:VAL:CG2	0.51	2.88	18	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:HB2	0.51	2.19	18	1
1:A:96:PRO:O	1:A:97:LEU:C	0.51	2.48	18	2
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:CG	0.51	2.35	11	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD13	0.51	1.76	6	2
1:A:33:LEU:O	1:A:40:LEU:HD11	0.51	2.06	5	1
1:A:34:SER:O	1:A:35:ALA:C	0.51	2.49	18	3
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG2	0.51	2.58	8	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CB	0.51	2.36	13	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HB	0.51	2.41	13	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:CE	0.51	2.78	14	5
1:A:88:LEU:C	1:A:89:HIS:CG	0.51	2.85	14	12
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:CG	0.51	2.40	14	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:CG2	0.51	2.36	5	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HE2	0.51	2.21	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:VAL:HG22	1:A:107:GLY:N	0.51	2.21	9	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:C	0.51	2.49	9	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:CZ	0.51	2.59	16	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG22	0.51	2.40	20	1
1:A:80:GLY:HA3	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.36	19	2
1:A:96:PRO:HG3	1:A:212:VAL:HG22	0.51	1.82	18	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HG12	0.51	2.40	6	1
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:CD2	0.51	2.36	11	1
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CD2	0.51	2.89	2	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:OH	0.51	2.06	19	3
1:A:169:VAL:CB	1:A:180:TYR:CD1	0.51	2.93	14	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:CB	0.51	2.59	14	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HB	0.51	1.66	5	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:CD2	0.51	2.79	9	6
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HG12	0.51	2.40	17	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CD2	0.51	2.94	11	2
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:CB	0.51	2.74	8	1
1:A:109:ALA:O	1:A:200:TYR:CE2	0.51	2.64	3	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CG	0.50	2.40	2	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:HE3	0.50	1.82	16	6
1:A:177:THR:HG23	1:A:195:LYS:HA	0.50	1.83	11	4
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:C	0.50	2.50	19	4
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:CB	0.50	2.59	12	4
1:A:64:LEU:CD2	1:A:214:ILE:HG22	0.50	2.35	9	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:N	0.50	2.59	20	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:HH11	0.50	2.20	1	1
1:A:106:VAL:HA	1:A:202:SER:O	0.50	2.06	10	2
1:A:50:PRO:CG	1:A:80:GLY:HA3	0.50	2.36	10	2
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:HG13	0.50	2.41	18	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:HD2	0.50	1.82	3	2
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG22	0.50	2.06	3	1
1:A:51:LYS:HZ3	1:A:81:LYS:N	0.50	2.04	15	1
1:A:164:PRO:HG2	1:A:182:ILE:HG21	0.50	1.82	11	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:HG3	0.50	2.41	12	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:200:TYR:C	0.50	2.79	13	8
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:CA	0.50	2.59	13	5
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:HB3	0.50	2.36	11	2
1:A:86:ARG:NH1	1:A:86:ARG:O	0.50	2.43	5	1
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:CG1	0.50	2.58	11	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:CB	0.50	2.32	4	2
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CB	0.50	2.35	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLY:C	1:A:203:VAL:CG1	0.50	2.75	7	1
1:A:82:ARG:O	1:A:84:TYR:N	0.50	2.43	15	1
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:O	0.50	2.06	12	2
1:A:189:PRO:O	1:A:191:PHE:N	0.50	2.43	14	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG21	0.50	2.36	14	3
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:CG2	0.50	2.37	5	1
1:A:73:GLN:HG3	1:A:74:SER:N	0.50	2.20	9	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:CB	0.50	2.74	18	2
1:A:96:PRO:HG2	1:A:211:GLN:O	0.50	2.07	13	3
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:CG	0.50	2.60	19	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:NE2	0.50	2.44	13	1
1:A:133:TRP:HB2	1:A:180:TYR:CE2	0.50	2.42	18	1
1:A:48:TRP:HE3	1:A:53:CYS:HG	0.50	1.47	18	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:HB3	0.50	2.41	15	2
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:CD1	0.50	2.57	2	1
1:A:106:VAL:HG12	1:A:107:GLY:N	0.50	2.20	10	3
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:NE	0.50	2.44	14	1
1:A:69:ARG:HB2	1:A:70:PRO:HD3	0.50	1.82	16	6
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:HA	0.50	1.82	5	3
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:HA	0.50	1.84	1	2
1:A:66:PHE:CE2	1:A:78:VAL:HG11	0.50	2.41	16	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CD2	0.50	2.41	20	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:58:ASP:OD2	0.50	2.05	19	2
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD12	0.50	2.36	12	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:CG2	0.50	2.91	14	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:72:ALA:N	0.50	2.20	3	3
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HG2	0.50	2.06	5	3
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:HA	0.50	2.33	8	1
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:CD1	0.50	2.52	20	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:CE1	0.50	2.94	1	1
1:A:105:VAL:HG13	1:A:134:ASP:CA	0.50	2.36	7	1
1:A:92:GLU:HG3	1:A:93:ILE:N	0.50	2.20	14	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:54:SER:O	0.50	2.06	5	1
1:A:214:ILE:HG22	1:A:214:ILE:O	0.50	2.06	8	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:CG2	0.50	2.95	20	1
1:A:57:ILE:HG23	1:A:68:ARG:HB2	0.50	1.84	7	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:OG	0.50	2.59	13	1
1:A:65:CYS:SG	1:A:65:CYS:O	0.50	2.70	13	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:CD	0.50	2.59	18	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:HG13	0.50	2.06	6	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:200:TYR:O	0.50	2.05	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:HD3	0.50	2.07	17	4
1:A:163:VAL:H	1:A:164:PRO:CD	0.50	2.18	14	1
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:CD	0.50	2.60	6	2
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:OD1	0.50	2.59	15	2
1:A:81:LYS:CG	1:A:81:LYS:O	0.50	2.58	5	2
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:CZ	0.50	2.42	13	2
1:A:43:GLN:O	1:A:47:GLY:N	0.50	2.42	4	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:HB2	0.50	2.36	8	1
1:A:40:LEU:HA	1:A:43:GLN:HE22	0.50	1.67	8	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:CG	0.50	2.49	7	1
1:A:32:LEU:O	1:A:36:PRO:CD	0.50	2.59	6	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:HB2	0.50	2.07	11	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:CB	0.50	2.37	11	8
1:A:165:GLU:O	1:A:213:ARG:NH2	0.50	2.44	9	1
1:A:197:ARG:CZ	1:A:199:LEU:HD21	0.50	2.36	8	1
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HB3	0.50	1.80	15	2
1:A:66:PHE:HZ	1:A:212:VAL:HG22	0.50	1.67	19	1
1:A:216:TYR:CZ	1:A:219:GLU:OE2	0.50	2.65	3	1
1:A:96:PRO:CG	1:A:213:ARG:HB2	0.50	2.37	12	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:CG	0.50	2.88	2	2
1:A:182:ILE:CD1	1:A:186:TYR:CD2	0.50	2.94	9	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:HA	0.50	2.07	6	3
1:A:197:ARG:CG	1:A:197:ARG:NH1	0.50	2.74	17	1
1:A:206:VAL:O	1:A:210:CYS:O	0.50	2.29	4	1
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:HG22	0.50	2.22	4	1
1:A:110:THR:HB	1:A:113:ALA:HB3	0.50	1.83	15	3
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HA	0.50	2.07	15	3
1:A:29:LEU:CD2	1:A:71:VAL:CG2	0.50	2.90	15	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CD2	0.49	2.41	12	6
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:HG21	0.49	1.83	5	2
1:A:82:ARG:CG	1:A:82:ARG:NH1	0.49	2.75	14	3
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CE2	0.49	2.42	14	1
1:A:95:TRP:HZ3	1:A:203:VAL:HG22	0.49	1.67	5	2
1:A:68:ARG:CD	1:A:72:ALA:HB2	0.49	2.37	17	1
1:A:57:ILE:CD1	1:A:68:ARG:HB3	0.49	2.37	16	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CD2	0.49	2.42	16	1
1:A:207:TRP:O	1:A:208:GLY:O	0.49	2.30	8	2
1:A:54:SER:N	1:A:78:VAL:HA	0.49	2.20	20	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:GLN:C	0.49	2.50	1	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:105:VAL:HG13	0.49	1.61	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ILE:HB	1:A:180:TYR:OH	0.49	2.07	12	4
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:CG2	0.49	2.94	14	2
1:A:187:LEU:CG	1:A:191:PHE:CZ	0.49	2.95	5	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CG1	0.49	2.37	9	3
1:A:181:SER:OG	1:A:185:THR:N	0.49	2.46	8	2
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:CD1	0.49	2.55	4	1
1:A:59:VAL:HG23	1:A:66:PHE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:213:ARG:HA	0.49	1.82	1	2
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HA	0.49	2.36	7	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:58:ASP:HB2	0.49	1.84	6	1
1:A:177:THR:CB	1:A:194:LEU:HG	0.49	2.37	12	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CG	0.49	2.42	2	3
1:A:29:LEU:CD1	1:A:29:LEU:C	0.49	2.79	14	2
1:A:37:PRO:HD2	1:A:38:PRO:CD	0.49	2.37	5	2
1:A:54:SER:O	1:A:77:GLY:O	0.49	2.29	5	1
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HB3	0.49	2.37	19	4
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:105:VAL:C	0.49	2.86	8	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:CD1	0.49	2.96	20	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG21	0.49	2.42	19	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:78:VAL:CG1	0.49	2.37	1	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:HB3	0.49	2.38	1	1
1:A:170:VAL:HB	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.84	7	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:70:PRO:HG3	0.49	1.84	7	1
1:A:95:TRP:O	1:A:165:GLU:N	0.49	2.45	10	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:57:ILE:O	0.49	2.07	10	1
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:H	0.49	2.10	15	1
1:A:207:TRP:CG	1:A:207:TRP:O	0.49	2.66	11	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:105:VAL:O	0.49	2.06	2	7
1:A:169:VAL:HG23	1:A:180:TYR:CE1	0.49	2.42	20	2
1:A:49:ASN:O	1:A:53:CYS:CB	0.49	2.60	9	2
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:HB2	0.49	2.07	11	4
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:CE2	0.49	2.43	4	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:59:VAL:CG1	0.49	2.38	20	2
1:A:50:PRO:CG	1:A:51:LYS:HE3	0.49	2.37	19	1
1:A:79:ARG:HG3	1:A:203:VAL:C	0.49	2.28	1	1
1:A:39:ASP:O	1:A:39:ASP:OD2	0.49	2.31	18	2
1:A:51:LYS:C	1:A:51:LYS:HE2	0.49	2.27	10	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:CZ	0.49	2.90	10	1
1:A:191:PHE:HA	1:A:194:LEU:CB	0.49	2.37	12	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HG12	0.49	2.08	20	4
1:A:163:VAL:CA	1:A:167:LEU:HD21	0.49	2.37	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:HB3	0.49	2.08	14	2
1:A:97:LEU:HB2	1:A:135:ILE:CG2	0.49	2.37	5	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:HE3	0.49	2.06	19	2
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HG2	0.49	2.38	6	2
1:A:133:TRP:HE1	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.66	20	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:133:TRP:CZ3	0.49	2.93	19	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:O	0.49	2.07	12	1
1:A:85:SER:HB2	1:A:89:HIS:CE1	0.49	2.43	16	2
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD1	0.49	2.80	6	7
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD23	0.49	2.28	16	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:ALA:O	0.49	2.31	19	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:CG2	0.49	2.96	8	1
1:A:74:SER:OG	1:A:75:THR:N	0.49	2.45	8	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:N	0.49	2.75	4	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:106:VAL:HG21	0.49	2.42	4	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CG2	0.49	2.96	20	1
1:A:94:SER:HA	1:A:165:GLU:O	0.49	2.07	19	3
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:204:SER:O	0.49	2.66	1	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:202:SER:CB	0.49	2.38	7	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:214:ILE:HG21	0.49	2.43	13	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:184:GLY:CA	0.49	2.38	12	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:77:GLY:O	0.49	2.08	14	2
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:CG1	0.49	2.80	15	5
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HB3	0.49	2.38	17	2
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:HD12	0.49	2.07	11	2
1:A:51:LYS:O	1:A:82:ARG:NE	0.49	2.45	8	2
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CZ	0.49	2.42	1	1
1:A:72:ALA:O	1:A:76:ASP:O	0.49	2.30	1	1
1:A:53:CYS:HB3	1:A:79:ARG:N	0.49	2.22	7	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HG21	0.49	1.85	7	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:HD11	0.49	1.82	3	1
1:A:86:ARG:N	1:A:89:HIS:CE1	0.49	2.81	12	1
1:A:44:ARG:O	1:A:49:ASN:HA	0.49	2.07	5	1
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:CG2	0.49	2.91	17	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:71:VAL:HG11	0.49	2.38	3	2
1:A:58:ASP:C	1:A:58:ASP:OD1	0.49	2.49	4	4
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HB2	0.49	2.38	8	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HG21	0.49	2.42	8	1
1:A:73:GLN:O	1:A:74:SER:O	0.49	2.30	8	2
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:CG	0.49	2.96	12	2
1:A:107:GLY:HA3	1:A:132:GLY:HA2	0.49	1.84	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:CD2	0.49	2.79	10	2
1:A:93:ILE:CG2	1:A:212:VAL:CG2	0.49	2.90	10	1
1:A:195:LYS:O	1:A:198:THR:OG1	0.49	2.31	3	2
1:A:44:ARG:HG3	1:A:59:VAL:HG13	0.49	1.84	18	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:76:ASP:CB	0.49	2.33	18	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:71:VAL:HG22	0.49	1.83	15	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.38	18	4
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:CD	0.49	2.81	5	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:CG	0.49	2.28	19	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG13	0.49	2.43	4	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:75:THR:CG2	0.49	2.38	4	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG21	0.49	1.83	20	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:HD21	0.49	1.68	20	2
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:OG	0.49	2.30	7	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HB	0.49	1.83	10	2
1:A:68:ARG:NH1	1:A:70:PRO:O	0.49	2.46	18	1
1:A:82:ARG:C	1:A:82:ARG:CD	0.49	2.77	15	1
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:CD1	0.49	2.56	2	2
1:A:105:VAL:C	1:A:106:VAL:HG23	0.49	2.28	20	4
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:OG1	0.49	2.07	20	2
1:A:89:HIS:O	1:A:171:LEU:O	0.49	2.30	20	5
1:A:49:ASN:O	1:A:78:VAL:HG23	0.49	2.08	5	1
1:A:178:LEU:N	1:A:194:LEU:HD21	0.49	2.22	9	3
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HB2	0.49	2.27	8	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:OD1	0.49	2.31	11	3
1:A:110:THR:HB	1:A:113:ALA:HB2	0.49	1.84	7	4
1:A:54:SER:HB2	1:A:75:THR:CG2	0.49	2.38	7	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:92:GLU:N	0.49	2.81	7	1
1:A:187:LEU:CG	1:A:191:PHE:CE1	0.49	2.96	12	1
1:A:185:THR:O	1:A:186:TYR:C	0.48	2.52	16	4
1:A:54:SER:CB	1:A:75:THR:CG2	0.48	2.88	9	2
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:CB	0.48	2.38	8	1
1:A:181:SER:CB	1:A:186:TYR:HB2	0.48	2.38	8	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:C	0.48	2.51	19	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CA	0.48	2.82	20	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:CD1	0.48	2.81	20	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:204:SER:OG	0.48	2.60	1	1
1:A:57:ILE:HD11	1:A:66:PHE:CD1	0.48	2.43	1	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:HD21	0.48	2.43	7	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:HB2	0.48	2.08	7	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:50:PRO:HG3	0.48	2.37	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:ARG:HD2	1:A:197:ARG:C	0.48	2.28	11	1
1:A:205:ALA:O	1:A:206:VAL:O	0.48	2.31	2	3
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:HB2	0.48	1.67	2	2
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CD1	0.48	2.96	6	3
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:HD2	0.48	2.38	5	2
1:A:64:LEU:CG	1:A:212:VAL:O	0.48	2.61	5	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:52:ASP:N	0.48	2.44	9	1
1:A:92:GLU:CG	1:A:167:LEU:O	0.48	2.61	17	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HB	0.48	2.42	10	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:GLN:O	0.48	2.30	18	2
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:CD1	0.48	2.38	12	1
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:OE1	0.48	2.31	14	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD1	0.48	2.08	4	2
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:H	0.48	1.69	4	1
1:A:73:GLN:O	1:A:75:THR:OG1	0.48	2.32	13	2
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CG	0.48	2.44	20	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:O	0.48	2.42	19	1
1:A:57:ILE:CD1	1:A:207:TRP:HA	0.48	2.37	6	1
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:CD1	0.48	2.58	2	1
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:CG	0.48	2.61	17	9
1:A:73:GLN:O	1:A:74:SER:C	0.48	2.52	7	6
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HG	0.48	2.44	9	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:CA	0.48	2.76	9	1
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:HB2	0.48	2.08	19	6
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HG21	0.48	2.43	17	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:HE	0.48	1.68	6	3
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:HB2	0.48	1.86	8	1
1:A:168:LEU:CD1	1:A:168:LEU:C	0.48	2.82	4	1
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CD	0.48	2.38	4	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:44:ARG:NH1	0.48	2.22	1	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:CD2	0.48	2.93	11	2
1:A:171:LEU:HA	1:A:178:LEU:CB	0.48	2.39	13	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:CZ	0.48	2.38	3	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:O	0.48	2.08	11	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:HB2	0.48	2.43	2	2
1:A:86:ARG:CZ	1:A:86:ARG:O	0.48	2.62	5	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:211:GLN:HG3	0.48	2.39	17	1
1:A:45:HIS:CA	1:A:50:PRO:HD3	0.48	2.38	16	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:C	0.48	2.82	16	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CG	0.48	3.02	20	2
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HB2	0.48	2.29	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:LEU:HB2	1:A:191:PHE:CE1	0.48	2.43	19	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HD13	0.48	2.39	7	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:CA	0.48	2.38	7	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:CG2	0.48	2.96	10	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:76:ASP:O	0.48	2.52	3	3
1:A:207:TRP:CD2	1:A:207:TRP:C	0.48	2.86	14	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:203:VAL:CG2	0.48	2.96	13	3
1:A:94:SER:HB3	1:A:165:GLU:O	0.48	2.08	15	6
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HG	0.48	2.39	13	3
1:A:68:ARG:HD2	1:A:68:ARG:O	0.48	2.09	16	3
1:A:43:GLN:OE1	1:A:59:VAL:C	0.48	2.52	8	4
1:A:167:LEU:HA	1:A:182:ILE:HG22	0.48	1.85	4	4
1:A:79:ARG:HG3	1:A:204:SER:OG	0.48	2.08	1	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.38	7	1
1:A:177:THR:CA	1:A:194:LEU:CD2	0.48	2.92	11	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:HD12	0.48	1.82	10	1
1:A:96:PRO:HD3	1:A:213:ARG:CD	0.48	2.38	6	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HG	0.48	2.09	11	2
1:A:94:SER:CB	1:A:166:ARG:HA	0.48	2.38	12	1
1:A:194:LEU:HD12	1:A:194:LEU:O	0.48	2.08	12	1
1:A:79:ARG:CD	1:A:79:ARG:C	0.48	2.82	5	1
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:HG	0.48	1.68	9	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:HE3	0.48	1.68	19	2
1:A:164:PRO:C	1:A:167:LEU:HD11	0.48	2.29	17	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:202:SER:CB	0.48	2.38	15	4
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HA	0.48	1.85	1	4
1:A:108:VAL:O	1:A:131:TRP:CB	0.48	2.61	19	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:HG23	0.48	2.38	13	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HE2	0.48	2.08	13	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:GLN:OE1	0.48	2.32	18	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:45:HIS:H	0.48	2.27	12	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:CA	0.48	2.38	14	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:45:HIS:N	0.48	2.23	17	2
1:A:86:ARG:NE	1:A:86:ARG:C	0.48	2.67	5	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:214:ILE:HG13	0.48	2.38	9	3
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HB3	0.48	2.37	16	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:HE1	0.48	2.27	4	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:68:ARG:O	0.48	2.09	6	3
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD2	0.48	2.08	19	2
1:A:82:ARG:NH1	1:A:82:ARG:HG2	0.48	2.24	1	1
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:H	0.48	1.68	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:N	0.48	2.67	15	1
1:A:54:SER:CB	1:A:75:THR:OG1	0.48	2.62	2	1
1:A:216:TYR:CD1	1:A:219:GLU:HB2	0.48	2.43	5	4
1:A:187:LEU:HB3	1:A:191:PHE:CE2	0.48	2.44	5	1
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:CZ	0.48	2.38	17	1
1:A:167:LEU:CB	1:A:180:TYR:CE1	0.48	2.97	4	1
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:CD1	0.48	2.80	11	3
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:NE2	0.48	2.66	20	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:OD1	0.48	2.31	10	2
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:HG23	0.48	2.44	7	1
1:A:163:VAL:O	1:A:163:VAL:CG1	0.48	2.62	10	1
1:A:48:TRP:C	1:A:214:ILE:HD13	0.48	2.29	11	2
1:A:93:ILE:CD1	1:A:215:ARG:O	0.48	2.62	13	1
1:A:216:TYR:CD2	1:A:219:GLU:HB2	0.48	2.44	13	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:163:VAL:HG23	0.48	1.86	18	1
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:N	0.48	2.43	18	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:207:TRP:CE3	0.48	2.44	3	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:CD	0.48	2.87	3	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CD1	0.48	2.43	3	1
1:A:194:LEU:CD1	1:A:198:THR:HA	0.48	2.39	12	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CE3	0.48	2.67	16	2
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:HB3	0.48	2.09	10	7
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:CD1	0.48	2.82	4	3
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HB3	0.48	2.28	11	3
1:A:164:PRO:O	1:A:165:GLU:C	0.48	2.50	12	3
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:CG2	0.48	2.91	10	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG23	0.48	1.85	13	1
1:A:64:LEU:HD23	1:A:214:ILE:O	0.48	2.08	18	1
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HB2	0.47	2.09	16	5
1:A:173:MET:C	1:A:175:GLU:N	0.47	2.67	8	15
1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:NZ	0.47	2.23	5	1
1:A:109:ALA:HA	1:A:129:GLU:O	0.47	2.09	9	2
1:A:108:VAL:CG2	1:A:178:LEU:HD11	0.47	2.38	8	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:HB	0.47	2.38	20	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:135:ILE:CG1	0.47	2.96	7	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:212:VAL:O	0.47	2.67	18	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:44:ARG:NH1	0.47	2.23	18	1
1:A:87:GLY:N	1:A:173:MET:HB3	0.47	2.24	15	3
1:A:29:LEU:HD12	1:A:55:GLU:OE1	0.47	2.08	12	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:O	0.47	2.62	15	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:80:GLY:HA2	0.47	1.83	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CE3	0.47	2.81	9	1
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:HZ3	0.47	1.88	9	2
1:A:48:TRP:HB3	1:A:59:VAL:HG11	0.47	1.86	9	1
1:A:197:ARG:HG3	1:A:197:ARG:NH1	0.47	2.24	17	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:83:GLY:N	0.47	2.77	8	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:210:CYS:HB3	0.47	2.39	4	1
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CZ	0.47	2.44	4	1
1:A:44:ARG:NE	1:A:59:VAL:CG1	0.47	2.77	1	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:75:THR:O	0.47	2.62	1	1
1:A:170:VAL:HG21	1:A:187:LEU:HD22	0.47	1.86	1	1
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:HG3	0.47	2.39	18	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:NE	0.47	2.76	3	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:CG	0.47	2.62	3	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:212:VAL:HG21	0.47	2.44	11	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG22	0.47	2.41	9	3
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:CG1	0.47	2.97	17	1
1:A:197:ARG:HH21	1:A:199:LEU:HD21	0.47	1.68	8	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:HB3	0.47	2.08	10	4
1:A:76:ASP:OD2	1:A:207:TRP:HA	0.47	2.10	1	1
1:A:187:LEU:HG	1:A:187:LEU:O	0.47	2.09	12	2
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:HE	0.47	2.13	6	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:205:ALA:CB	0.47	2.20	2	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:O	0.47	2.32	9	2
1:A:89:HIS:CD2	1:A:89:HIS:N	0.47	2.82	20	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:200:TYR:O	0.47	2.63	13	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:OD1	0.47	2.48	14	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:44:ARG:NH1	0.47	2.24	17	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:HA	0.47	2.39	1	3
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:O	0.47	2.62	12	4
1:A:166:ARG:HG3	1:A:167:LEU:N	0.47	2.24	4	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HG21	0.47	2.44	4	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:32:LEU:CB	0.47	2.40	4	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:50:PRO:HD3	0.47	1.85	3	2
1:A:57:ILE:HG13	1:A:78:VAL:HG11	0.47	1.84	7	1
1:A:30:GLU:OE2	1:A:56:ASN:OD1	0.47	2.33	13	1
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.47	2.63	2	3
1:A:33:LEU:CG	1:A:34:SER:N	0.47	2.76	18	20
1:A:89:HIS:N	1:A:89:HIS:CD2	0.47	2.81	14	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:CB	0.47	2.77	12	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:HD13	0.47	1.85	9	1
1:A:166:ARG:HB2	1:A:166:ARG:NH1	0.47	2.25	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:HG3	0.47	2.39	17	1
1:A:61:GLU:C	1:A:63:GLY:N	0.47	2.67	19	3
1:A:68:ARG:HB3	1:A:207:TRP:HB2	0.47	1.85	16	1
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:HD3	0.47	1.69	20	2
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HG3	0.47	1.85	4	1
1:A:170:VAL:CG1	1:A:187:LEU:HD11	0.47	2.39	4	1
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:HB2	0.47	2.08	19	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:202:SER:HB3	0.47	1.86	7	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:CG1	0.47	2.97	11	2
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:CG	0.47	2.62	13	1
1:A:44:ARG:C	1:A:46:HIS:N	0.47	2.67	3	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:HG3	0.47	2.08	2	3
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CD	0.47	2.39	1	4
1:A:109:ALA:CB	1:A:130:SER:HA	0.47	2.39	19	4
1:A:59:VAL:CA	1:A:66:PHE:HA	0.47	2.40	17	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:HB3	0.47	2.40	12	4
1:A:50:PRO:CG	1:A:53:CYS:HB2	0.47	2.37	1	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:49:ASN:C	0.47	2.53	6	1
1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.88	12	1
1:A:86:ARG:C	1:A:89:HIS:CE1	0.47	2.88	12	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:SD	0.47	2.73	1	6
1:A:44:ARG:NH2	1:A:59:VAL:CG2	0.47	2.78	5	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HB3	0.47	2.50	5	1
1:A:69:ARG:H	1:A:70:PRO:HD2	0.47	1.69	15	3
1:A:133:TRP:HE3	1:A:163:VAL:HG13	0.47	1.66	9	1
1:A:207:TRP:O	1:A:211:GLN:NE2	0.47	2.48	17	1
1:A:164:PRO:CA	1:A:167:LEU:HD11	0.47	2.40	17	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HG3	0.47	2.44	16	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:198:THR:HB	0.47	2.39	8	2
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:HB2	0.47	2.38	1	6
1:A:30:GLU:HG3	1:A:73:GLN:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:HG3	0.47	1.86	8	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:59:VAL:O	0.47	2.53	10	3
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:CE2	0.47	2.97	4	1
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:HB3	0.47	2.09	19	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:199:LEU:O	0.47	2.60	19	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:HB3	0.47	1.87	3	2
1:A:72:ALA:O	1:A:74:SER:N	0.47	2.48	1	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:CB	0.47	2.98	7	1
1:A:48:TRP:HE3	1:A:214:ILE:CG2	0.47	2.21	7	1
1:A:82:ARG:O	1:A:200:TYR:CD2	0.47	2.67	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CB	0.47	2.98	13	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:CD	0.47	2.63	13	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:214:ILE:HG13	0.47	2.38	13	1
1:A:85:SER:CB	1:A:89:HIS:CD2	0.47	2.97	3	1
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CD2	0.47	2.68	3	1
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:HE3	0.47	1.91	6	1
1:A:43:GLN:O	1:A:43:GLN:HG2	0.47	2.09	15	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:OD1	0.47	2.09	15	1
1:A:51:LYS:CG	1:A:83:GLY:O	0.47	2.63	11	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:44:ARG:HB2	0.47	2.25	2	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:60:LYS:CE	0.47	2.40	14	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:40:LEU:HD21	0.47	2.40	5	1
1:A:43:GLN:C	1:A:59:VAL:O	0.47	2.54	5	1
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:HD2	0.47	1.87	7	3
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CG	0.47	2.40	11	2
1:A:48:TRP:HH2	1:A:57:ILE:CG2	0.47	2.20	20	1
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:HG22	0.47	2.39	13	2
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:CD1	0.47	2.93	19	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:OG1	0.47	2.09	19	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:OD2	0.47	2.33	1	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:TRP:H	0.47	1.65	7	2
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:CG	0.47	2.62	11	2
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HB	0.47	2.40	11	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:CB	0.47	2.98	3	2
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:CG	0.47	2.40	5	2
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:HB2	0.47	2.40	9	1
1:A:110:THR:CA	1:A:199:LEU:HB2	0.47	2.40	17	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:NH2	0.47	2.24	1	1
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CG	0.47	2.40	6	2
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:HD2	0.47	1.86	13	1
1:A:208:GLY:O	1:A:210:CYS:N	0.47	2.48	15	1
1:A:197:ARG:CD	1:A:197:ARG:O	0.47	2.63	13	5
1:A:208:GLY:O	1:A:211:GLN:OE1	0.47	2.31	10	2
1:A:163:VAL:HG13	1:A:167:LEU:HD21	0.47	1.87	5	1
1:A:33:LEU:O	1:A:36:PRO:HD2	0.47	2.10	5	1
1:A:86:ARG:CB	1:A:173:MET:HG2	0.47	2.40	5	1
1:A:110:THR:CB	1:A:199:LEU:HD23	0.47	2.40	9	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:55:GLU:HB2	0.47	2.40	18	2
1:A:182:ILE:C	1:A:184:GLY:N	0.47	2.67	16	2
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:HD3	0.47	2.40	16	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:80:GLY:HA3	0.47	1.85	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HA	0.47	2.45	20	1
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CE1	0.47	2.45	19	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:75:THR:C	0.47	2.30	1	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HB	0.47	2.40	7	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:43:GLN:O	0.47	2.53	7	1
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:CG	0.47	2.54	10	3
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:O	0.47	2.68	13	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HG2	0.47	2.10	18	1
1:A:213:ARG:N	1:A:213:ARG:CD	0.47	2.78	6	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:HB3	0.47	2.10	15	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:202:SER:CB	0.46	2.40	8	3
1:A:37:PRO:HB3	1:A:41:VAL:HG21	0.46	1.83	14	1
1:A:86:ARG:NH2	1:A:87:GLY:CA	0.46	2.77	5	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:HB3	0.46	1.86	9	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:CG2	0.46	2.40	20	2
1:A:73:GLN:O	1:A:76:ASP:OD1	0.46	2.33	19	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:TRP:O	0.46	2.33	1	1
1:A:82:ARG:CA	1:A:202:SER:HB3	0.46	2.40	7	1
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HB2	0.46	2.40	10	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:GLY:O	0.46	2.33	10	2
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:CD1	0.46	2.62	13	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:HB3	0.46	2.45	18	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:HD12	0.46	2.40	12	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:CG	0.46	2.36	12	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:67:GLU:H	0.46	1.71	15	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:HB2	0.46	1.71	14	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:HA	0.46	2.25	19	2
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HD12	0.46	1.78	9	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:214:ILE:CG1	0.46	2.40	17	1
1:A:87:GLY:O	1:A:172:ASP:OD1	0.46	2.34	16	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:50:PRO:HG3	0.46	2.25	4	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:CB	0.46	2.93	20	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:37:PRO:HD2	0.46	1.83	20	3
1:A:110:THR:O	1:A:111:ALA:C	0.46	2.52	19	1
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:HB	0.46	2.40	7	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:55:GLU:OE2	0.46	2.55	10	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:55:GLU:OE2	0.46	2.10	10	1
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:N	0.46	2.26	6	2
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:HD11	0.46	2.40	3	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:HD13	0.46	1.86	3	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CE1	0.46	3.03	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HB	0.46	2.25	6	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:197:ARG:HD2	0.46	1.85	12	1
1:A:52:ASP:HB2	1:A:79:ARG:C	0.46	2.31	11	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG13	0.46	2.45	2	1
1:A:39:ASP:C	1:A:39:ASP:OD1	0.46	2.54	11	2
1:A:95:TRP:CB	1:A:164:PRO:HA	0.46	2.40	9	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:CG1	0.46	2.97	17	1
1:A:214:ILE:CD1	1:A:214:ILE:O	0.46	2.47	16	1
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:HB2	0.46	2.09	8	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CE2	0.46	2.45	4	1
1:A:171:LEU:CD1	1:A:171:LEU:C	0.46	2.78	20	1
1:A:111:ALA:C	1:A:113:ALA:N	0.46	2.68	19	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HG22	0.46	2.45	19	1
1:A:187:LEU:HD12	1:A:187:LEU:O	0.46	2.10	19	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:203:VAL:N	0.46	2.25	7	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:164:PRO:HB2	0.46	2.46	10	1
1:A:44:ARG:O	1:A:46:HIS:N	0.46	2.49	3	2
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HB3	0.46	2.41	15	1
1:A:30:GLU:OE1	1:A:75:THR:CG2	0.46	2.64	11	1
1:A:33:LEU:O	1:A:41:VAL:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:201:PRO:O	0.46	2.10	14	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:50:PRO:HD2	0.46	2.10	9	2
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:HB2	0.46	2.29	19	1
1:A:173:MET:CE	1:A:173:MET:HA	0.46	2.41	1	1
1:A:71:VAL:HA	1:A:207:TRP:CH2	0.46	2.45	18	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:O	0.46	2.64	3	1
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:HD2	0.46	1.70	10	2
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:HD22	0.46	1.71	14	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:50:PRO:HB3	0.46	2.26	13	4
1:A:53:CYS:HB2	1:A:78:VAL:HG23	0.46	1.86	8	1
1:A:94:SER:HA	1:A:167:LEU:CD2	0.46	2.40	20	1
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ALA:N	0.46	2.49	19	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:H	0.46	1.64	19	1
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:HD12	0.46	2.31	10	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:CA	0.46	2.63	10	1
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:OG1	0.46	2.33	10	1
1:A:191:PHE:HA	1:A:194:LEU:HB3	0.46	1.87	12	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:211:GLN:O	0.46	2.32	15	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HB	0.46	2.08	2	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:CG1	0.46	2.98	2	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:CD1	0.46	2.40	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:GLY:HA2	1:A:216:TYR:OH	0.46	2.11	16	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:186:TYR:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HA	0.46	2.51	1	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HG	0.46	2.46	13	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:HE1	0.46	2.29	15	2
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:HD12	0.46	1.85	3	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD13	0.46	2.28	6	1
1:A:32:LEU:O	1:A:32:LEU:CD1	0.46	2.63	11	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:HG3	0.46	2.10	14	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CB	0.46	2.24	5	1
1:A:68:ARG:HG3	1:A:207:TRP:CE2	0.46	2.46	5	1
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:HB3	0.46	2.10	5	2
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:OG	0.46	2.32	4	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:HD1	0.46	2.24	3	3
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:HB2	0.46	2.10	19	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:167:LEU:HD23	0.46	1.88	1	1
1:A:165:GLU:HA	1:A:165:GLU:OE1	0.46	2.10	10	1
1:A:164:PRO:HD2	1:A:182:ILE:CG2	0.46	2.41	12	1
1:A:86:ARG:HD2	1:A:89:HIS:NE2	0.46	2.24	15	1
1:A:207:TRP:CD2	1:A:207:TRP:O	0.46	2.69	11	1
1:A:197:ARG:CG	1:A:197:ARG:O	0.46	2.63	14	8
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:O	0.46	2.33	5	1
1:A:53:CYS:HB2	1:A:78:VAL:HB	0.46	1.88	15	2
1:A:92:GLU:HB3	1:A:215:ARG:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CB	0.46	2.63	19	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:201:PRO:O	0.46	2.11	7	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:OE2	0.46	2.69	3	1
1:A:44:ARG:O	1:A:47:GLY:N	0.46	2.48	15	2
1:A:77:GLY:CA	1:A:207:TRP:CB	0.46	2.94	6	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:CA	0.46	2.64	6	1
1:A:106:VAL:CA	1:A:202:SER:O	0.46	2.64	15	1
1:A:33:LEU:CG	1:A:55:GLU:HG3	0.46	2.41	11	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:202:SER:HB3	0.46	2.41	2	2
1:A:173:MET:SD	1:A:173:MET:O	0.46	2.74	5	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:210:CYS:SG	0.46	2.50	9	1
1:A:184:GLY:O	1:A:185:THR:C	0.46	2.54	16	1
1:A:193:GLY:O	1:A:197:ARG:HB3	0.46	2.11	8	4
1:A:53:CYS:CB	1:A:78:VAL:HA	0.46	2.41	8	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:169:VAL:CG2	0.46	2.93	8	1
1:A:55:GLU:O	1:A:57:ILE:O	0.46	2.33	12	2
1:A:55:GLU:HG3	1:A:56:ASN:N	0.46	2.26	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLY:HA2	1:A:133:TRP:CE3	0.46	2.46	7	1
1:A:210:CYS:SG	1:A:210:CYS:O	0.46	2.73	7	1
1:A:69:ARG:CG	1:A:70:PRO:HD2	0.46	2.40	13	1
1:A:44:ARG:NE	1:A:50:PRO:HG3	0.46	2.26	6	1
1:A:197:ARG:HG2	1:A:197:ARG:O	0.46	2.10	15	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD1	0.46	2.45	5	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:213:ARG:CA	0.46	2.34	9	1
1:A:68:ARG:CZ	1:A:72:ALA:HA	0.46	2.41	17	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:61:GLU:OE1	0.46	2.34	16	1
1:A:174:GLU:HG2	1:A:175:GLU:N	0.46	2.25	8	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:HG21	0.46	2.46	4	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CA	0.46	2.98	20	1
1:A:66:PHE:HE2	1:A:78:VAL:HG11	0.46	1.71	20	1
1:A:79:ARG:C	1:A:79:ARG:CD	0.46	2.84	20	1
1:A:173:MET:HA	1:A:173:MET:HE2	0.46	1.86	1	1
1:A:85:SER:OG	1:A:171:LEU:HD11	0.46	2.11	7	1
1:A:94:SER:HB3	1:A:213:ARG:HB2	0.46	1.87	7	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CB	0.46	2.40	10	1
1:A:187:LEU:CG	1:A:187:LEU:O	0.46	2.64	10	1
1:A:89:HIS:HB2	1:A:91:TRP:CH2	0.46	2.47	13	1
1:A:86:ARG:HD3	1:A:86:ARG:N	0.46	2.26	18	1
1:A:214:ILE:HG12	1:A:215:ARG:N	0.46	2.25	6	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HA	0.46	2.41	15	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:211:GLN:N	0.46	2.48	15	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:NH2	0.46	2.26	11	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:CG	0.45	2.40	14	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:182:ILE:HG21	0.45	2.41	5	2
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:HD2	0.45	2.29	9	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:180:TYR:OH	0.45	2.11	9	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:CG	0.45	2.83	17	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:61:GLU:CD	0.45	2.83	16	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:HG3	0.45	1.87	16	2
1:A:213:ARG:HD2	1:A:213:ARG:C	0.45	2.31	20	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:182:ILE:HB	0.45	2.41	19	1
1:A:72:ALA:O	1:A:76:ASP:OD2	0.45	2.34	19	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:67:GLU:HB3	0.45	2.11	1	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:CZ	0.45	2.41	1	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:HD1	0.45	1.93	13	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:HB	0.45	1.87	18	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:207:TRP:CZ3	0.45	2.46	3	1
1:A:85:SER:HB2	1:A:89:HIS:ND1	0.45	2.26	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:HB3	1:A:182:ILE:CG2	0.45	2.41	15	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:205:ALA:CA	0.45	2.23	2	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HB2	0.45	2.12	14	4
1:A:95:TRP:CA	1:A:212:VAL:HG23	0.45	2.41	14	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:CB	0.45	2.23	14	3
1:A:29:LEU:O	1:A:30:GLU:C	0.45	2.54	15	5
1:A:37:PRO:HD2	1:A:38:PRO:HD3	0.45	1.89	18	2
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:HA	0.45	2.11	9	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CE2	0.45	2.99	17	1
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:CD1	0.45	2.46	19	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:HA2	0.45	1.88	1	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:HG3	0.45	2.11	3	1
1:A:96:PRO:HB3	1:A:165:GLU:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:N	0.45	2.26	2	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:O	0.45	2.55	14	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HB2	0.45	2.12	10	2
1:A:133:TRP:C	1:A:134:ASP:OD1	0.45	2.55	16	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:NE	0.45	2.27	16	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:O	0.45	2.34	16	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HB2	0.45	2.11	15	3
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:THR:CB	0.45	2.41	4	1
1:A:57:ILE:CD1	1:A:66:PHE:HB3	0.45	2.42	19	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:ARG:N	0.45	2.26	1	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HG2	0.45	2.11	13	1
1:A:92:GLU:HB3	1:A:215:ARG:HB3	0.45	1.88	12	3
1:A:29:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG3	0.45	2.42	2	1
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:HB	0.45	1.89	20	2
1:A:106:VAL:CG2	1:A:107:GLY:N	0.45	2.79	9	1
1:A:195:LYS:HE3	1:A:196:GLY:N	0.45	2.26	13	5
1:A:213:ARG:HB3	1:A:213:ARG:CZ	0.45	2.41	4	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HE3	0.45	2.11	18	2
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:HB2	0.45	2.11	19	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:34:SER:N	0.45	2.78	10	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CB	0.45	3.00	13	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:180:TYR:CE2	0.45	2.46	3	2
1:A:60:LYS:N	1:A:65:CYS:O	0.45	2.50	15	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:68:ARG:N	0.45	2.27	2	1
1:A:178:LEU:HD12	1:A:201:PRO:HD3	0.45	1.88	2	1
1:A:72:ALA:HA	1:A:76:ASP:CB	0.45	2.42	14	1
1:A:39:ASP:O	1:A:41:VAL:N	0.45	2.49	8	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:CB	0.45	2.65	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:TYR:CE1	1:A:86:ARG:NH1	0.45	2.84	4	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:133:TRP:CE3	0.45	3.00	19	1
1:A:111:ALA:O	1:A:112:LEU:C	0.45	2.54	19	1
1:A:81:LYS:CA	1:A:202:SER:HB2	0.45	2.42	19	1
1:A:197:ARG:HE	1:A:199:LEU:HD11	0.45	1.71	10	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:55:GLU:CG	0.45	2.40	13	1
1:A:194:LEU:CD1	1:A:197:ARG:HD2	0.45	2.42	12	1
1:A:46:HIS:C	1:A:61:GLU:OE1	0.45	2.55	12	1
1:A:84:TYR:OH	1:A:91:TRP:NE1	0.45	2.40	11	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:179:GLY:O	0.45	2.55	14	1
1:A:207:TRP:C	1:A:207:TRP:CE3	0.45	2.90	14	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:NE1	0.45	2.27	14	1
1:A:30:GLU:OE2	1:A:34:SER:OG	0.45	2.34	5	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:CB	0.45	2.41	9	1
1:A:199:LEU:CD2	1:A:199:LEU:N	0.45	2.80	17	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:H	0.45	2.09	16	3
1:A:208:GLY:O	1:A:209:GLN:C	0.45	2.54	15	3
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CD1	0.45	2.65	20	1
1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:O	0.45	2.63	7	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:213:ARG:HA	0.45	2.41	7	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:82:ARG:NH2	0.45	2.70	7	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD23	0.45	2.46	13	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:105:VAL:O	0.45	2.70	13	1
1:A:170:VAL:HG21	1:A:187:LEU:HD21	0.45	1.87	6	1
1:A:93:ILE:HG21	1:A:180:TYR:HH	0.45	1.71	12	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:HB	0.45	2.46	2	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:CD	0.45	2.41	14	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:HA	0.45	2.27	13	3
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:HG2	0.45	2.12	17	1
1:A:68:ARG:CB	1:A:207:TRP:HB2	0.45	2.41	7	3
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HG2	0.45	1.85	8	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HD12	0.45	2.47	20	1
1:A:166:ARG:HG2	1:A:167:LEU:N	0.45	2.25	1	1
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:CZ	0.45	2.65	1	1
1:A:166:ARG:CA	1:A:167:LEU:HD13	0.45	2.42	7	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CA	0.45	2.41	7	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HE2	0.45	2.11	18	3
1:A:48:TRP:HD1	1:A:64:LEU:HD11	0.45	1.70	18	1
1:A:213:ARG:N	1:A:213:ARG:HD2	0.45	2.26	6	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:31:GLU:N	0.45	2.26	11	2
1:A:72:ALA:CB	1:A:76:ASP:HA	0.45	2.38	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:O	0.45	2.12	2	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:209:GLN:HG2	0.45	2.12	14	1
1:A:82:ARG:HG2	1:A:82:ARG:NH1	0.45	2.26	14	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HG	0.45	2.32	17	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CD1	0.45	3.04	18	1
1:A:44:ARG:O	1:A:45:HIS:C	0.45	2.56	3	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:O	0.45	2.65	6	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:OD1	0.45	2.12	11	1
1:A:92:GLU:HG3	1:A:167:LEU:O	0.45	2.12	17	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:44:ARG:CZ	0.45	2.42	17	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HB3	0.45	2.12	18	4
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:CZ	0.45	2.64	8	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:CD1	0.45	2.44	8	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:CB	0.45	2.41	1	1
1:A:171:LEU:CB	1:A:178:LEU:HB3	0.45	2.42	18	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:CB	0.45	2.42	18	1
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:C	0.45	2.55	15	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HG11	0.45	2.13	2	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:C	0.45	2.55	10	3
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:O	0.45	2.12	5	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HG	0.45	2.46	9	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:H	0.45	1.72	7	4
1:A:172:ASP:C	1:A:172:ASP:OD1	0.45	2.55	8	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG21	0.45	2.46	20	1
1:A:88:LEU:CD2	1:A:88:LEU:C	0.45	2.85	20	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:CE	0.45	2.41	19	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:50:PRO:HG3	0.45	1.89	3	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:202:SER:O	0.45	2.65	15	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:ARG:CD	0.44	2.85	4	2
1:A:172:ASP:OD1	1:A:172:ASP:C	0.44	2.55	16	4
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD11	0.44	1.87	17	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:CB	0.44	2.95	8	1
1:A:45:HIS:NE2	1:A:55:GLU:HB3	0.44	2.27	8	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	8	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:OE1	0.44	2.34	8	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:HB2	0.44	2.11	19	1
1:A:75:THR:HB	1:A:207:TRP:CH2	0.44	2.46	13	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:202:SER:CB	0.44	2.42	3	2
1:A:113:ALA:O	1:A:129:GLU:OE1	0.44	2.34	13	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:182:ILE:CG2	0.44	2.42	18	1
1:A:195:LYS:C	1:A:198:THR:HG23	0.44	2.32	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:CB	0.44	2.42	2	1
1:A:36:PRO:O	1:A:40:LEU:CD1	0.44	2.59	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD21	0.44	2.48	5	1
1:A:86:ARG:O	1:A:86:ARG:HD3	0.44	2.12	5	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HG12	0.44	2.33	9	3
1:A:135:ILE:CD1	1:A:163:VAL:HB	0.44	2.39	9	1
1:A:106:VAL:CG1	1:A:180:TYR:OH	0.44	2.58	9	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:NE	0.44	2.27	1	2
1:A:192:ARG:NE	1:A:192:ARG:HA	0.44	2.27	18	3
1:A:43:GLN:CD	1:A:58:ASP:OD2	0.44	2.56	1	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:129:GLU:CB	0.44	2.41	1	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:HB3	0.44	2.13	10	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:C	0.44	2.90	18	2
1:A:96:PRO:CD	1:A:213:ARG:CB	0.44	2.96	12	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CD	0.44	2.56	15	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:HB2	0.44	2.13	15	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:213:ARG:NH2	0.44	2.27	14	1
1:A:107:GLY:HA3	1:A:132:GLY:HA3	0.44	1.89	16	4
1:A:30:GLU:O	1:A:33:LEU:HG	0.44	2.12	16	8
1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HE3	0.44	1.70	4	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:CG1	0.44	2.85	20	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CA	0.44	2.26	20	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:56:ASN:HB3	0.44	1.87	19	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:CA	0.44	2.41	1	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:201:PRO:HG3	0.44	2.41	7	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HB2	0.44	1.89	12	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HB2	0.44	2.13	16	3
1:A:189:PRO:C	1:A:191:PHE:H	0.44	2.16	14	1
1:A:187:LEU:HD13	1:A:190:ALA:HB3	0.44	1.88	9	1
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:CB	0.44	2.92	7	1
1:A:197:ARG:HH21	1:A:199:LEU:HD11	0.44	1.71	10	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:HG22	0.44	1.89	10	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:40:LEU:N	0.44	2.70	13	1
1:A:187:LEU:HB3	1:A:191:PHE:CZ	0.44	2.47	3	1
1:A:33:LEU:CB	1:A:55:GLU:HG2	0.44	2.42	6	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:HG22	0.44	1.88	12	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HB2	0.44	2.38	9	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:197:ARG:O	0.44	2.12	4	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HD3	0.44	1.90	10	1
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	13	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:205:ALA:HB3	0.44	1.79	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ARG:HH11	1:A:82:ARG:CG	0.44	2.25	14	2
1:A:52:ASP:OD1	1:A:81:LYS:HB3	0.44	2.12	10	2
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HB3	0.44	2.33	6	3
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:C	0.44	2.32	7	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HG22	0.44	2.47	7	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:194:LEU:C	0.44	2.86	10	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:164:PRO:HB2	0.44	1.90	10	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:68:ARG:CD	0.44	2.43	10	1
1:A:95:TRP:HZ3	1:A:203:VAL:CG2	0.44	2.25	13	1
1:A:61:GLU:HG3	1:A:62:GLY:N	0.44	2.27	13	1
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:HB2	0.44	2.13	6	2
1:A:79:ARG:HA	1:A:204:SER:OG	0.44	2.13	3	1
1:A:163:VAL:N	1:A:182:ILE:HG21	0.44	2.26	6	1
1:A:181:SER:CB	1:A:187:LEU:HB2	0.44	2.42	6	1
1:A:59:VAL:HG13	1:A:66:PHE:HA	0.44	1.88	6	2
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:O	0.44	2.39	6	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:N	0.44	2.28	11	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HB2	0.44	2.48	5	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CE	0.44	2.81	5	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:210:CYS:O	0.44	2.12	17	1
1:A:76:ASP:CA	1:A:207:TRP:NE1	0.44	2.81	4	1
1:A:77:GLY:CA	1:A:207:TRP:HB3	0.44	2.43	20	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD13	0.44	1.89	1	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:135:ILE:CG1	0.44	3.01	18	1
1:A:96:PRO:HD3	1:A:213:ARG:HD2	0.44	1.90	6	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HG3	0.44	2.13	2	1
1:A:197:ARG:C	1:A:197:ARG:HD2	0.44	2.33	2	3
1:A:130:SER:O	1:A:131:TRP:CD1	0.44	2.71	9	2
1:A:43:GLN:HB3	1:A:60:LYS:CA	0.44	2.43	17	1
1:A:200:TYR:CD1	1:A:200:TYR:N	0.44	2.81	17	2
1:A:45:HIS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.44	2.42	16	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:82:ARG:CZ	0.44	2.86	8	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:59:VAL:HB	0.44	2.48	20	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HG12	0.44	2.28	11	2
1:A:97:LEU:HB2	1:A:164:PRO:HG2	0.44	1.90	10	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:OH	0.44	2.13	10	1
1:A:53:CYS:N	1:A:79:ARG:O	0.44	2.51	10	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:78:VAL:O	0.44	2.65	18	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	2	1
1:A:30:GLU:CD	1:A:31:GLU:N	0.44	2.72	2	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:HE3	0.44	2.33	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:HD12	1:A:40:LEU:HD11	0.44	1.89	5	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:181:SER:O	0.44	2.13	9	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:HA	0.44	2.48	16	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:HG2	0.44	2.12	19	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:54:SER:O	0.44	2.12	1	1
1:A:79:ARG:HB3	1:A:79:ARG:NH1	0.44	2.28	1	1
1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:HD1	0.44	2.11	10	1
1:A:71:VAL:CG1	1:A:75:THR:HB	0.44	2.43	15	1
1:A:182:ILE:HG13	1:A:185:THR:OG1	0.43	2.13	2	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:55:GLU:CD	0.43	2.33	5	1
1:A:132:GLY:C	1:A:133:TRP:CG	0.43	2.91	16	2
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:HG23	0.43	1.84	9	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CG2	0.43	3.01	17	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:C	0.43	2.92	8	1
1:A:29:LEU:O	1:A:33:LEU:N	0.43	2.48	8	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CB	0.43	3.06	4	2
1:A:182:ILE:H	1:A:182:ILE:HD13	0.43	1.72	15	5
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:CG2	0.43	3.00	20	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:CA	0.43	2.42	1	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CE2	0.43	3.06	10	1
1:A:63:GLY:O	1:A:65:CYS:SG	0.43	2.75	3	1
1:A:51:LYS:CE	1:A:80:GLY:CA	0.43	2.93	15	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:211:GLN:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:201:PRO:HD3	0.43	2.43	2	2
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CZ	0.43	3.01	14	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:135:ILE:HD11	0.43	2.36	5	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:200:TYR:C	0.43	2.34	5	1
1:A:50:PRO:HB2	1:A:53:CYS:O	0.43	2.13	5	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:202:SER:CB	0.43	2.43	5	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:76:ASP:N	0.43	2.51	18	2
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HB3	0.43	2.12	10	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:207:TRP:CH2	0.43	2.86	18	1
1:A:43:GLN:O	1:A:43:GLN:CD	0.43	2.56	6	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG12	0.43	2.48	15	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:O	0.43	2.35	15	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD21	0.43	1.90	11	1
1:A:168:LEU:CD2	1:A:170:VAL:HG22	0.43	2.42	2	1
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:N	0.43	2.52	14	1
1:A:61:GLU:CG	1:A:62:GLY:N	0.43	2.80	14	2
1:A:171:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HG3	0.43	1.90	9	1
1:A:197:ARG:O	1:A:198:THR:C	0.43	2.55	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:HIS:CG	1:A:50:PRO:HD3	0.43	2.48	16	1
1:A:87:GLY:O	1:A:173:MET:HB2	0.43	2.14	8	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HD2	0.43	2.28	20	1
1:A:93:ILE:HA	1:A:213:ARG:O	0.43	2.14	1	1
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:N	0.43	2.28	7	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HG23	0.43	1.90	10	1
1:A:48:TRP:HZ3	1:A:78:VAL:CG1	0.43	2.25	10	1
1:A:48:TRP:O	1:A:48:TRP:CE3	0.43	2.72	10	1
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:CD1	0.43	2.79	13	1
1:A:211:GLN:NE2	1:A:213:ARG:NH2	0.43	2.67	3	1
1:A:51:LYS:HB3	1:A:82:ARG:CD	0.43	2.43	12	1
1:A:197:ARG:NH1	1:A:197:ARG:HG3	0.43	2.28	15	1
1:A:182:ILE:N	1:A:182:ILE:CD1	0.43	2.82	11	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:CD2	0.43	2.44	11	1
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:N	0.43	2.28	11	1
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:CD1	0.43	2.87	11	1
1:A:195:LYS:CA	1:A:198:THR:HG23	0.43	2.44	20	5
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CD	0.43	2.22	5	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:H	0.43	2.12	5	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:58:ASP:OD1	0.43	2.64	17	1
1:A:45:HIS:CG	1:A:50:PRO:HG3	0.43	2.49	16	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CZ	0.43	3.05	16	1
1:A:110:THR:CA	1:A:199:LEU:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:51:LYS:O	1:A:81:LYS:N	0.43	2.51	20	1
1:A:85:SER:OG	1:A:218:GLY:O	0.43	2.33	19	1
1:A:184:GLY:HA2	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.42	19	1
1:A:56:ASN:HB2	1:A:68:ARG:CZ	0.43	2.43	7	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HB2	0.43	2.53	7	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:HB3	0.43	2.42	13	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:HA	0.43	1.91	13	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:CB	0.43	3.02	6	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:208:GLY:CA	0.43	2.44	6	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:55:GLU:OE2	0.43	2.14	12	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:45:HIS:CD2	0.43	2.86	15	1
1:A:167:LEU:CA	1:A:182:ILE:HG22	0.43	2.43	11	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:HE2	0.43	2.34	2	5
1:A:182:ILE:O	1:A:185:THR:OG1	0.43	2.28	20	2
1:A:64:LEU:CD2	1:A:212:VAL:O	0.43	2.67	9	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:NE2	0.43	2.28	9	2
1:A:135:ILE:CD1	1:A:135:ILE:N	0.43	2.81	1	3
1:A:214:ILE:CD1	1:A:214:ILE:C	0.43	2.81	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:HA2	0.43	2.43	1	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:CB	0.43	2.43	10	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:207:TRP:O	0.43	2.12	13	1
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:CB	0.43	2.43	13	1
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:HB3	0.43	2.13	13	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HG2	0.43	2.13	6	1
1:A:194:LEU:O	1:A:194:LEU:CD2	0.43	2.67	15	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:214:ILE:HA	0.43	1.91	14	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:40:LEU:HD21	0.43	1.91	5	1
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.81	9	1
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD1	0.43	2.91	16	1
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CG	0.43	2.71	19	2
1:A:213:ARG:HD2	1:A:214:ILE:N	0.43	2.29	20	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:196:GLY:O	0.43	2.14	18	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:HE3	0.43	2.33	18	1
1:A:206:VAL:HB	1:A:210:CYS:SG	0.43	2.54	6	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:60:LYS:CA	0.43	3.02	6	1
1:A:135:ILE:H	1:A:135:ILE:HD13	0.43	1.73	12	1
1:A:198:THR:C	1:A:199:LEU:HG	0.43	2.32	1	5
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:C	0.43	2.33	14	1
1:A:206:VAL:O	1:A:211:GLN:NE2	0.43	2.45	14	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:CG2	0.43	2.96	5	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:NE2	0.43	2.29	17	1
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:CG1	0.43	3.02	17	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:HG22	0.43	2.48	4	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:201:PRO:O	0.43	2.13	20	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:207:TRP:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:133:TRP:C	0.43	2.92	12	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:135:ILE:HG13	0.43	1.89	11	1
1:A:208:GLY:N	1:A:211:GLN:OE1	0.43	2.52	14	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:HB2	0.43	1.91	5	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:69:ARG:N	0.43	2.81	5	1
1:A:173:MET:SD	1:A:173:MET:C	0.43	2.97	9	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:HE3	0.43	2.14	8	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:73:GLN:HB3	0.43	1.91	8	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:169:VAL:HG21	0.43	2.43	8	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:59:VAL:HG12	0.43	1.90	19	1
1:A:86:ARG:HG2	1:A:86:ARG:NH1	0.43	2.28	10	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:HG	0.43	2.14	13	1
1:A:170:VAL:HG11	1:A:187:LEU:HD21	0.43	1.91	18	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:CE	0.43	2.87	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:ARG:HG2	1:A:192:ARG:NH1	0.43	2.29	6	1
1:A:197:ARG:NH1	1:A:197:ARG:CG	0.43	2.77	15	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:CD	0.43	2.35	9	2
1:A:54:SER:OG	1:A:76:ASP:HB3	0.43	2.14	16	1
1:A:50:PRO:CD	1:A:78:VAL:CG2	0.43	2.97	8	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:79:ARG:C	0.43	2.34	8	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:CG	0.43	2.67	8	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:HA	0.43	1.90	19	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:195:LYS:NZ	0.43	2.82	7	1
1:A:53:CYS:HB3	1:A:78:VAL:HA	0.43	1.89	7	1
1:A:133:TRP:CG	1:A:163:VAL:HG21	0.43	2.48	11	1
1:A:50:PRO:CB	1:A:80:GLY:HA3	0.43	2.42	11	1
1:A:109:ALA:HB1	1:A:129:GLU:O	0.43	2.13	9	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:81:LYS:HB3	0.43	2.33	17	1
1:A:171:LEU:HD21	1:A:173:MET:CE	0.43	2.37	8	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:CD2	0.43	2.97	4	1
1:A:79:ARG:NE	1:A:79:ARG:C	0.43	2.72	20	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:59:VAL:CG1	0.43	2.44	10	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:196:GLY:O	0.43	2.67	10	1
1:A:194:LEU:C	1:A:194:LEU:CD2	0.43	2.87	13	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:CG	0.43	2.93	13	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:GLN:HB2	0.43	2.13	13	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:HG13	0.43	1.90	13	1
1:A:55:GLU:HG2	1:A:56:ASN:N	0.43	2.27	13	1
1:A:50:PRO:CA	1:A:53:CYS:O	0.43	2.66	18	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:81:LYS:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:56:ASN:HA	0.43	1.91	15	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:CG	0.43	3.01	15	1
1:A:51:LYS:HZ2	1:A:82:ARG:CD	0.42	2.27	9	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:61:GLU:OE2	0.42	2.14	16	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CD2	0.42	3.07	16	2
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:CG2	0.42	2.44	8	1
1:A:44:ARG:O	1:A:44:ARG:NH2	0.42	2.52	8	1
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:HD22	0.42	2.18	12	2
1:A:210:CYS:SG	1:A:211:GLN:N	0.42	2.92	11	3
1:A:170:VAL:CG1	1:A:170:VAL:O	0.42	2.67	19	1
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:106:VAL:CG2	0.42	2.27	7	1
1:A:181:SER:HA	1:A:186:TYR:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:C	0.42	2.87	13	1
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:HZ3	0.42	1.69	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:HG2	1:A:93:ILE:N	0.42	2.28	15	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:59:VAL:HG21	0.42	1.90	2	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:212:VAL:HA	0.42	2.44	9	1
1:A:197:ARG:HH11	1:A:197:ARG:CG	0.42	2.26	17	2
1:A:37:PRO:HB2	1:A:38:PRO:CD	0.42	2.43	8	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:H	0.42	1.73	20	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:HB	0.42	1.90	19	1
1:A:168:LEU:HD21	1:A:170:VAL:HG22	0.42	1.91	18	2
1:A:187:LEU:HD13	1:A:191:PHE:CZ	0.42	2.49	3	1
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:HG3	0.42	2.35	15	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:HD11	0.42	2.43	11	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HD12	0.42	2.49	2	1
1:A:195:LYS:HD2	1:A:196:GLY:N	0.42	2.29	18	2
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:OD1	0.42	2.13	9	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:134:ASP:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:CG	0.42	2.90	17	1
1:A:192:ARG:N	1:A:192:ARG:HD2	0.42	2.30	17	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:194:LEU:O	0.42	2.57	8	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:45:HIS:N	0.42	2.26	8	1
1:A:76:ASP:C	1:A:76:ASP:OD1	0.42	2.57	4	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:206:VAL:HG23	0.42	2.15	4	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:128:SER:HB2	0.42	1.90	19	1
1:A:64:LEU:CG	1:A:213:ARG:HA	0.42	2.44	7	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:178:LEU:HD11	0.42	1.90	10	1
1:A:171:LEU:C	1:A:171:LEU:HD12	0.42	2.35	13	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HB2	0.42	2.15	3	1
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:84:TYR:C	0.42	2.87	12	1
1:A:56:ASN:O	1:A:70:PRO:HG2	0.42	2.14	15	1
1:A:39:ASP:HA	1:A:43:GLN:HB3	0.42	1.90	2	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:212:VAL:CG2	0.42	3.02	14	1
1:A:205:ALA:O	1:A:206:VAL:C	0.42	2.56	9	1
1:A:112:LEU:CB	1:A:128:SER:HA	0.42	2.44	19	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:208:GLY:N	0.42	2.52	1	1
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:HD3	0.42	1.88	10	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:H	0.42	2.27	18	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:167:LEU:HB2	0.42	1.91	18	1
1:A:207:TRP:CE3	1:A:207:TRP:O	0.42	2.72	18	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:CE2	0.42	2.50	12	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:H	0.42	2.26	15	1
1:A:110:THR:O	1:A:129:GLU:O	0.42	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ARG:CZ	1:A:86:ARG:C	0.42	2.87	5	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:NZ	0.42	2.30	19	1
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:CG2	0.42	2.64	6	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:C	0.42	2.34	12	1
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD2	0.42	2.79	11	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:186:TYR:HD2	0.42	2.33	9	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG13	0.42	2.40	9	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:58:ASP:CG	0.42	2.35	17	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:HG3	0.42	2.44	16	1
1:A:51:LYS:C	1:A:52:ASP:OD1	0.42	2.58	16	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:C	0.42	2.35	4	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:HB2	0.42	2.29	4	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:195:LYS:HA	0.42	2.44	1	3
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CE2	0.42	3.08	1	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD13	0.42	2.49	1	1
1:A:52:ASP:N	1:A:79:ARG:O	0.42	2.53	11	2
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HA	0.42	1.90	13	1
1:A:68:ARG:HD2	1:A:69:ARG:O	0.42	2.15	13	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HB3	0.42	2.14	12	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:51:LYS:HG3	0.42	2.35	5	1
1:A:171:LEU:CD2	1:A:201:PRO:HG3	0.42	2.44	8	1
1:A:50:PRO:CB	1:A:203:VAL:HG12	0.42	2.45	10	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:C	0.42	2.93	18	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:208:GLY:N	0.42	2.30	15	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:170:VAL:CG2	0.42	2.45	2	1
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:HB2	0.42	2.15	2	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CG1	0.42	2.68	2	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HD2	0.42	2.14	5	1
1:A:39:ASP:HB2	1:A:43:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:169:VAL:HG23	0.42	1.92	8	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:56:ASN:CB	0.42	2.45	19	1
1:A:71:VAL:C	1:A:73:GLN:N	0.42	2.73	1	1
1:A:79:ARG:NH2	1:A:82:ARG:HB2	0.42	2.30	7	1
1:A:164:PRO:O	1:A:165:GLU:HB2	0.42	2.13	10	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:60:LYS:NZ	0.42	2.53	13	1
1:A:110:THR:HG1	1:A:199:LEU:HD23	0.42	1.65	15	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:172:ASP:OD2	1:A:174:GLU:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:HG2	0.42	1.92	14	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:CG	0.42	2.18	14	1
1:A:45:HIS:HD2	1:A:45:HIS:N	0.42	2.11	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:ILE:HG12	1:A:182:ILE:O	0.42	2.14	9	1
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:105:VAL:CA	0.42	2.28	9	1
1:A:105:VAL:O	1:A:203:VAL:HG23	0.42	2.15	16	1
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD21	0.42	1.74	8	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CA	0.42	3.08	8	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HG3	0.42	2.15	20	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:HD13	0.42	2.35	19	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:CG	0.42	2.58	1	1
1:A:96:PRO:CG	1:A:212:VAL:HG22	0.42	2.43	18	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:70:PRO:HB2	0.42	1.92	3	1
1:A:92:GLU:HG2	1:A:215:ARG:CB	0.42	2.45	3	1
1:A:165:GLU:HG3	1:A:166:ARG:N	0.42	2.29	14	1
1:A:174:GLU:HG3	1:A:175:GLU:N	0.42	2.30	14	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HG22	0.42	2.15	14	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD11	0.42	2.30	5	1
1:A:133:TRP:HB3	1:A:163:VAL:CG1	0.42	2.34	9	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:45:HIS:CE1	0.42	2.49	17	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:203:VAL:CG2	0.42	2.97	8	1
1:A:195:LYS:HA	1:A:195:LYS:CE	0.42	2.45	8	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:39:ASP:C	0.42	2.57	20	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:201:PRO:CG	0.42	2.38	7	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:CG1	0.42	2.45	7	1
1:A:181:SER:CB	1:A:186:TYR:HB3	0.42	2.45	7	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:NE2	0.42	2.30	10	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:80:GLY:HA2	0.42	1.91	18	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:HE	0.42	2.26	3	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:85:SER:N	0.42	2.88	12	1
1:A:187:LEU:CD1	1:A:194:LEU:CD1	0.41	2.97	14	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:HG3	0.41	1.92	14	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HD3	0.41	2.29	5	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:214:ILE:CG1	0.41	2.98	17	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:68:ARG:C	0.41	2.35	16	2
1:A:30:GLU:OE2	1:A:74:SER:N	0.41	2.53	8	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:169:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:111:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE2	0.41	2.50	4	1
1:A:88:LEU:HB2	1:A:172:ASP:OD2	0.41	2.15	19	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:213:ARG:NH2	0.41	2.49	1	1
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:HB2	0.41	1.91	10	1
1:A:35:ALA:C	1:A:37:PRO:HD3	0.41	2.35	10	1
1:A:47:GLY:CA	1:A:61:GLU:HG3	0.41	2.45	15	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:82:ARG:HH11	0.41	2.28	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:GLN:HE21	1:A:60:LYS:CG	0.41	2.28	14	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:CD1	0.41	2.96	5	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CE	0.41	2.28	9	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:58:ASP:CB	0.41	2.45	17	1
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:HB	0.41	2.15	16	1
1:A:37:PRO:CB	1:A:38:PRO:CD	0.41	2.98	8	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.98	20	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:112:LEU:C	0.41	2.88	20	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:81:LYS:N	0.41	2.74	19	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:78:VAL:CG1	0.41	3.02	10	1
1:A:95:TRP:O	1:A:165:GLU:HA	0.41	2.15	6	1
1:A:108:VAL:O	1:A:130:SER:HA	0.41	2.15	15	1
1:A:68:ARG:O	1:A:69:ARG:HD2	0.41	2.15	15	1
1:A:69:ARG:N	1:A:70:PRO:CD	0.41	2.82	15	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:ND1	0.41	2.31	14	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HG3	0.41	2.30	5	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD11	0.41	2.50	7	2
1:A:194:LEU:O	1:A:195:LYS:C	0.41	2.59	18	2
1:A:129:GLU:OE1	1:A:129:GLU:O	0.41	2.39	17	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:202:SER:HA	0.41	1.92	17	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:CZ	0.41	2.98	8	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:105:VAL:O	0.41	2.73	4	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.45	20	1
1:A:173:MET:O	1:A:176:GLY:N	0.41	2.53	19	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:HE	0.41	1.75	19	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:CA	0.41	2.83	19	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:HG21	0.41	1.91	7	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:70:PRO:HG3	0.41	2.45	7	1
1:A:60:LYS:HB2	1:A:65:CYS:SG	0.41	2.55	13	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:CB	0.41	2.88	12	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:166:ARG:CD	0.41	2.89	15	1
1:A:214:ILE:HG23	1:A:214:ILE:O	0.41	2.15	5	2
1:A:93:ILE:HG13	1:A:213:ARG:O	0.41	2.16	5	1
1:A:59:VAL:HG23	1:A:66:PHE:CA	0.41	2.45	9	1
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:HB3	0.41	2.51	20	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:H	0.41	1.76	20	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:205:ALA:O	0.41	2.16	19	1
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HB3	0.41	1.93	13	1
1:A:170:VAL:HB	1:A:187:LEU:HD11	0.41	1.92	18	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:166:ARG:HD2	0.41	2.16	15	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:HA	0.41	1.92	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:VAL:CG2	1:A:204:SER:N	0.41	2.83	15	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:N	0.41	2.45	15	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:HG21	0.41	1.91	5	2
1:A:93:ILE:HG22	1:A:180:TYR:CZ	0.41	2.49	14	1
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:HD2	0.41	2.16	19	3
1:A:35:ALA:N	1:A:36:PRO:HD2	0.41	2.31	18	2
1:A:59:VAL:O	1:A:59:VAL:HG13	0.41	2.15	9	1
1:A:38:PRO:C	1:A:40:LEU:H	0.41	2.17	8	1
1:A:30:GLU:HA	1:A:33:LEU:CD2	0.41	2.45	15	2
1:A:29:LEU:CD1	1:A:32:LEU:HB3	0.41	2.46	4	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG21	0.41	1.73	1	1
1:A:53:CYS:CA	1:A:78:VAL:HG22	0.41	2.44	1	1
1:A:171:LEU:HA	1:A:178:LEU:HB3	0.41	1.92	1	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:78:VAL:HG21	0.41	1.93	7	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:SG	0.41	2.72	13	1
1:A:89:HIS:HB2	1:A:171:LEU:CD2	0.41	2.46	15	2
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:O	0.41	2.39	12	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:169:VAL:HG21	0.41	1.92	12	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:211:GLN:HB3	0.41	2.45	12	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:77:GLY:C	0.41	2.74	11	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:109:ALA:HB3	0.41	1.89	2	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD21	0.41	2.50	5	1
1:A:203:VAL:HG13	1:A:204:SER:N	0.41	2.31	9	1
1:A:194:LEU:O	1:A:197:ARG:N	0.41	2.53	17	1
1:A:186:TYR:N	1:A:186:TYR:CD1	0.41	2.89	17	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:O	0.41	2.38	16	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:HB	0.41	2.45	8	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:CG	0.41	2.82	8	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HA	0.41	2.31	7	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:HG3	0.41	2.46	13	1
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:OE2	0.41	2.15	13	1
1:A:134:ASP:N	1:A:134:ASP:OD1	0.41	2.53	18	1
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD12	0.41	2.36	12	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:40:LEU:HD11	0.41	2.45	11	1
1:A:192:ARG:HD2	1:A:192:ARG:N	0.41	2.30	14	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:129:GLU:O	0.41	2.69	9	1
1:A:30:GLU:O	1:A:34:SER:N	0.41	2.34	8	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:CD	0.41	2.44	4	1
1:A:54:SER:OG	1:A:78:VAL:HG12	0.41	2.16	19	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CD	0.41	2.84	13	1
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:CD	0.41	2.74	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ARG:HG2	1:A:166:ARG:NH1	0.41	2.30	18	1
1:A:181:SER:OG	1:A:187:LEU:HB2	0.41	2.16	6	1
1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:HD1	0.41	2.11	15	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:CB	0.41	2.42	11	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:CG	0.41	2.45	11	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:N	0.41	2.84	2	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:CA	0.41	2.45	5	1
1:A:77:GLY:HA3	1:A:206:VAL:O	0.41	2.16	9	1
1:A:82:ARG:NH1	1:A:219:GLU:HG3	0.41	2.31	9	1
1:A:42:ALA:HB3	1:A:43:GLN:OE1	0.41	2.16	17	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG13	0.41	1.91	16	2
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:N	0.41	2.54	16	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:204:SER:C	0.41	2.17	20	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:214:ILE:HA	0.41	2.46	13	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:44:ARG:HA	0.41	2.15	12	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:205:ALA:HA	0.41	1.93	2	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:CG2	0.41	2.88	2	1
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:HB2	0.41	1.92	2	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HD2	0.41	2.16	2	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:HB2	0.41	2.46	5	1
1:A:180:TYR:O	1:A:186:TYR:HB3	0.41	2.16	5	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:CD	0.41	2.88	9	1
1:A:184:GLY:C	1:A:186:TYR:N	0.41	2.74	16	1
1:A:216:TYR:CZ	1:A:219:GLU:HG3	0.41	2.51	8	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:HB3	0.41	1.93	8	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:59:VAL:HG13	0.41	1.91	4	1
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:HD3	0.41	1.93	20	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HG12	0.41	1.91	7	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:HG2	0.41	2.16	7	1
1:A:80:GLY:N	1:A:203:VAL:HG13	0.41	2.30	7	1
1:A:171:LEU:HB2	1:A:178:LEU:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:HB3	0.41	1.91	3	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:CB	0.41	2.41	3	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:172:ASP:OD2	0.41	2.68	3	1
1:A:181:SER:OG	1:A:186:TYR:C	0.41	2.59	6	1
1:A:206:VAL:HG11	1:A:210:CYS:SG	0.41	2.55	6	1
1:A:164:PRO:CD	1:A:182:ILE:HG21	0.41	2.42	12	1
1:A:92:GLU:HG2	1:A:167:LEU:O	0.41	2.16	15	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CD2	0.41	3.08	15	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:CG1	0.41	3.04	2	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CD1	0.41	2.48	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HB2	0.41	2.46	14	1
1:A:54:SER:CB	1:A:77:GLY:O	0.41	2.69	14	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:OD1	0.41	2.16	9	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:80:GLY:HA3	0.41	2.46	16	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:59:VAL:HB	0.41	2.51	20	1
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:C	0.41	2.59	19	1
1:A:44:ARG:HE	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.29	1	1
1:A:177:THR:HG21	1:A:195:LYS:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:57:ILE:HG12	0.41	2.30	10	1
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:HE1	0.41	1.64	18	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:38:PRO:HD3	0.41	2.46	18	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:50:PRO:HG3	0.41	2.46	6	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:197:ARG:C	0.41	2.34	15	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:31:GLU:N	0.41	2.83	11	1
1:A:172:ASP:OD2	1:A:174:GLU:CG	0.40	2.69	14	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:HE3	0.40	1.76	5	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:129:GLU:OE1	0.40	2.16	9	2
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CD	0.40	2.59	9	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG11	0.40	2.51	17	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HA	0.40	2.45	4	1
1:A:164:PRO:C	1:A:166:ARG:N	0.40	2.74	19	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:CG	0.40	2.39	10	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:HE2	0.40	2.37	13	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HD2	0.40	2.16	15	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:133:TRP:N	0.40	2.86	11	1
1:A:112:LEU:HD23	1:A:112:LEU:H	0.40	1.76	2	1
1:A:47:GLY:HA3	1:A:61:GLU:HB2	0.40	1.93	2	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:73:GLN:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:HG2	0.40	2.16	8	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CD2	0.40	2.51	4	1
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CE2	0.40	3.04	19	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:64:LEU:C	0.40	2.89	19	1
1:A:82:ARG:CD	1:A:83:GLY:H	0.40	2.24	1	1
1:A:171:LEU:HB2	1:A:178:LEU:HD23	0.40	1.93	7	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:69:ARG:NH1	0.40	2.31	7	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:202:SER:HB3	0.40	1.93	13	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:CG1	0.40	2.46	13	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CB	0.40	3.05	18	1
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:HG2	0.40	2.36	18	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:66:PHE:CZ	0.40	3.09	3	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HG2	0.40	2.16	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:CD	0.40	2.46	6	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:166:ARG:HD2	0.40	2.37	15	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG21	0.40	2.52	2	1
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:HE22	0.40	2.13	14	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:97:LEU:HD22	0.40	1.76	5	1
1:A:48:TRP:O	1:A:78:VAL:HG21	0.40	2.17	17	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:CA	0.40	3.05	16	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:46:HIS:C	0.40	2.94	16	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:HG2	0.40	2.16	8	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:HA	0.40	2.35	19	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:CG	0.40	2.96	7	1
1:A:97:LEU:HG	1:A:210:CYS:O	0.40	2.16	12	1
1:A:71:VAL:HG12	1:A:72:ALA:N	0.40	2.31	15	1
1:A:51:LYS:C	1:A:80:GLY:CA	0.40	2.90	15	1
1:A:172:ASP:CG	1:A:174:GLU:HG2	0.40	2.37	14	1
1:A:43:GLN:HE21	1:A:60:LYS:HB3	0.40	1.77	14	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:HE1	0.40	1.64	8	1
1:A:185:THR:O	1:A:185:THR:HG22	0.40	2.16	8	1
1:A:170:VAL:HG13	1:A:170:VAL:O	0.40	2.15	4	1
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:HD11	0.40	1.93	4	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:HA	0.40	1.92	19	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:CB	0.40	2.46	19	1
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:CYS:HB3	0.40	1.92	1	1
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:CG	0.40	3.10	7	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:43:GLN:N	0.40	2.72	18	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:HB3	0.40	2.52	6	1
1:A:45:HIS:O	1:A:49:ASN:HB2	0.40	2.15	6	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:71:VAL:CG2	0.40	2.41	15	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:OD2	0.40	2.39	11	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:H	0.40	2.29	2	1
1:A:51:LYS:O	1:A:79:ARG:C	0.40	2.60	9	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HG21	0.40	1.93	16	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:178:LEU:CD1	0.40	2.46	16	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:HG2	0.40	2.31	4	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ARG:N	0.40	2.32	7	1
1:A:177:THR:HB	1:A:194:LEU:CD2	0.40	2.41	10	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:C	0.40	2.90	10	1
1:A:93:ILE:HG12	1:A:169:VAL:HG23	0.40	1.93	13	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:HE1	0.40	1.66	13	1
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:C	0.40	2.80	13	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:HA	0.40	2.46	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:THR:HG22	1:A:185:THR:O	0.40	2.16	3	1
1:A:180:TYR:O	1:A:186:TYR:CE2	0.40	2.75	12	1
1:A:59:VAL:HG13	1:A:66:PHE:HD1	0.40	1.76	12	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	143/226 (63%)	106±4 (74±3%)	21±3 (15±2%)	16±2 (11±2%)	1	9
All	All	2860/4520 (63%)	2129 (74%)	417 (15%)	314 (11%)	1	9

All 46 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	61	GLU	20
1	A	64	LEU	20
1	A	39	ASP	18
1	A	70	PRO	16
1	A	77	GLY	15
1	A	69	ARG	15
1	A	187	LEU	14
1	A	56	ASN	14
1	A	165	GLU	12
1	A	74	SER	10
1	A	206	VAL	9
1	A	51	LYS	9
1	A	73	GLN	9
1	A	72	ALA	9
1	A	210	CYS	8
1	A	35	ALA	8
1	A	211	GLN	7
1	A	81	LYS	7
1	A	37	PRO	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	52	ASP	7
1	A	135	ILE	6
1	A	113	ALA	6
1	A	82	ARG	6
1	A	190	ALA	6
1	A	163	VAL	6
1	A	209	GLN	5
1	A	186	TYR	5
1	A	50	PRO	5
1	A	47	GLY	5
1	A	75	THR	5
1	A	55	GLU	3
1	A	96	PRO	3
1	A	128	SER	3
1	A	183	GLY	2
1	A	207	TRP	2
1	A	208	GLY	2
1	A	97	LEU	1
1	A	40	LEU	1
1	A	188	GLY	1
1	A	48	TRP	1
1	A	36	PRO	1
1	A	83	GLY	1
1	A	218	GLY	1
1	A	62	GLY	1
1	A	54	SER	1
1	A	185	THR	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	116/182 (64%)	69±5 (60±4%)	47±5 (40±4%)	0	5
All	All	2320/3640 (64%)	1384 (60%)	936 (40%)	0	5

All 102 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	197	ARG	20
1	A	33	LEU	20
1	A	43	GLN	20
1	A	182	ILE	20
1	A	51	LYS	20
1	A	49	ASN	20
1	A	195	LYS	19
1	A	40	LEU	19
1	A	199	LEU	19
1	A	110	THR	19
1	A	29	LEU	19
1	A	192	ARG	19
1	A	82	ARG	18
1	A	177	THR	17
1	A	68	ARG	17
1	A	180	TYR	16
1	A	97	LEU	16
1	A	39	ASP	15
1	A	178	LEU	15
1	A	213	ARG	15
1	A	86	ARG	15
1	A	54	SER	15
1	A	94	SER	14
1	A	64	LEU	14
1	A	56	ASN	14
1	A	79	ARG	14
1	A	131	TRP	13
1	A	135	ILE	13
1	A	175	GLU	13
1	A	173	MET	12
1	A	32	LEU	12
1	A	204	SER	12
1	A	198	THR	12
1	A	211	GLN	12
1	A	209	GLN	11
1	A	217	MET	11
1	A	167	LEU	11
1	A	81	LYS	11
1	A	91	TRP	10
1	A	48	TRP	9
1	A	69	ARG	9
1	A	44	ARG	9
1	A	112	LEU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	85	SER	9
1	A	214	ILE	9
1	A	171	LEU	9
1	A	191	PHE	9
1	A	105	VAL	9
1	A	206	VAL	8
1	A	187	LEU	8
1	A	53	CYS	8
1	A	78	VAL	8
1	A	66	PHE	8
1	A	174	GLU	7
1	A	92	GLU	7
1	A	186	TYR	7
1	A	215	ARG	7
1	A	55	GLU	7
1	A	163	VAL	7
1	A	65	CYS	7
1	A	52	ASP	7
1	A	168	LEU	6
1	A	219	GLU	6
1	A	73	GLN	6
1	A	165	GLU	6
1	A	58	ASP	6
1	A	134	ASP	6
1	A	106	VAL	6
1	A	31	GLU	6
1	A	129	GLU	6
1	A	212	VAL	6
1	A	74	SER	6
1	A	93	ILE	5
1	A	128	SER	5
1	A	60	LYS	5
1	A	61	GLU	5
1	A	34	SER	5
1	A	207	TRP	5
1	A	57	ILE	5
1	A	76	ASP	5
1	A	75	THR	5
1	A	84	TYR	4
1	A	59	VAL	4
1	A	67	GLU	3
1	A	166	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	181	SER	3
1	A	46	HIS	3
1	A	108	VAL	3
1	A	210	CYS	3
1	A	202	SER	3
1	A	194	LEU	2
1	A	170	VAL	2
1	A	30	GLU	2
1	A	88	LEU	2
1	A	130	SER	2
1	A	71	VAL	1
1	A	41	VAL	1
1	A	169	VAL	1
1	A	200	TYR	1
1	A	185	THR	1
1	A	216	TYR	1
1	A	89	HIS	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates 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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 36% for the well-defined parts and 34% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 6311

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	945
Number of shifts mapped to atoms	945
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	204	-0.32 ± 0.05	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	164	0.09 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	202	-0.12 ± 0.09	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	187	0.33 ± 0.23	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 36%, i.e. 621 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1733. 0 out of 28 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	514/697 (74%)	125/277 (45%)	265/286 (93%)	124/134 (93%)
Sidechain	107/885 (12%)	0/521 (0%)	107/321 (33%)	0/43 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/151 (0%)	0/78 (0%)	0/64 (0%)	0/9 (0%)
Overall	621/1733 (36%)	125/876 (14%)	372/671 (55%)	124/186 (67%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 34%, i.e. 945 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2744. 0 out of 37 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	781/1098 (71%)	188/436 (43%)	406/452 (90%)	187/210 (89%)
Sidechain	164/1426 (12%)	0/845 (0%)	164/503 (33%)	0/78 (0%)
Aromatic	0/220 (0%)	0/115 (0%)	0/92 (0%)	0/13 (0%)
Overall	945/2744 (34%)	188/1396 (13%)	570/1047 (54%)	187/301 (62%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

