



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:07 PM BST

PDB ID : 1AH2
Title : SERINE PROTEASE PB92 FROM BACILLUS ALCALOPHILUS, NMR, 18
STRUCTURES
Authors : Boelens, R.; Schipper, D.; Martin, J.R.; Karimi-Nejad, Y.; Mulder, F.; Zwan,
J.V.D.; Mariani, M.
Deposited on : 1997-04-11

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

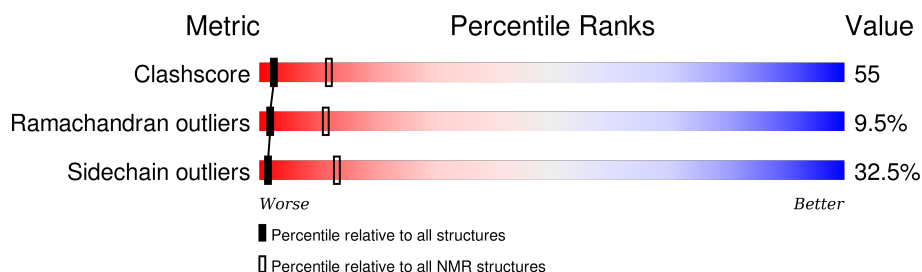
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

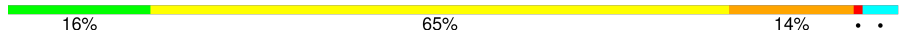
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	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	269	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 18 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:51, A:55-A:96, A:100-A:251, A:256-A:269 (257)	0.70	9

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 and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3721 atoms, of which 1839 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SERINE PROTEASE PB92.

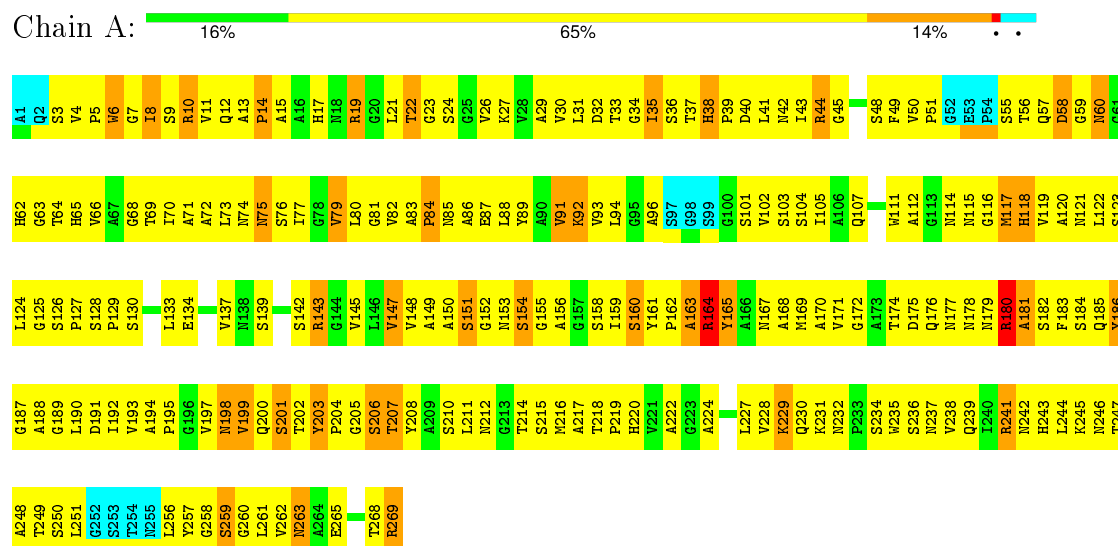
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	269	Total	C	H	N	O	S	0
			3721	1151	1839	348	380	3	

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: SERINE PROTEASE PB92

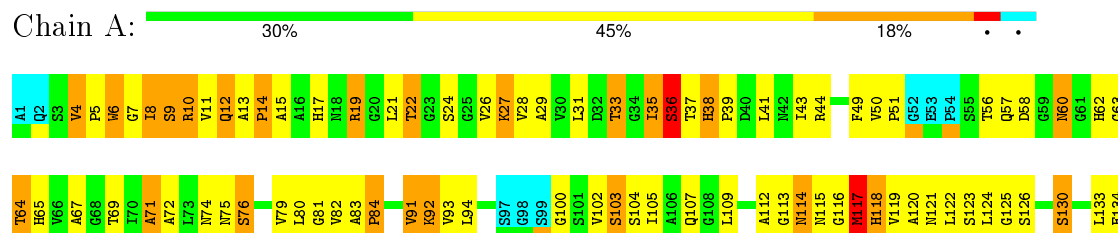


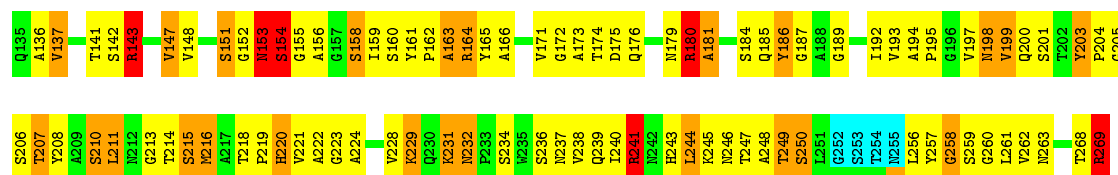
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

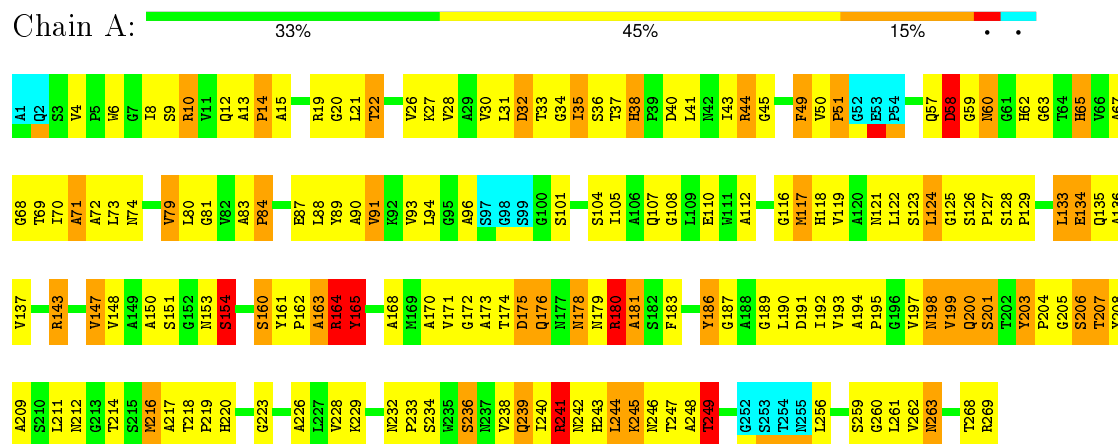
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92





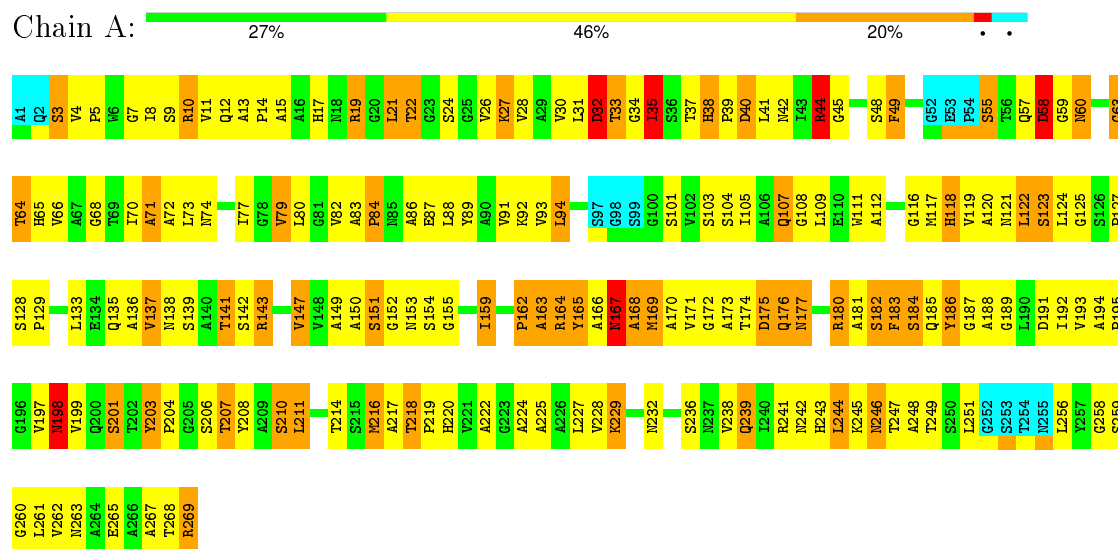
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



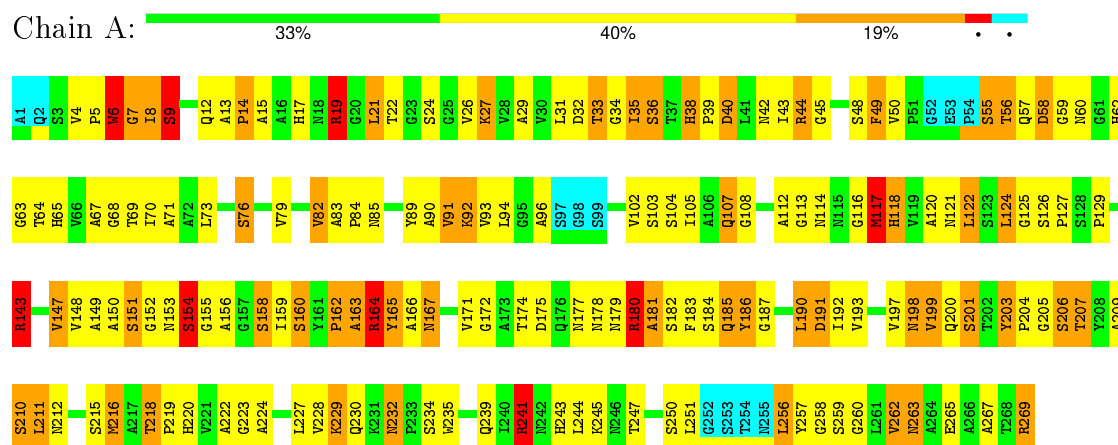
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



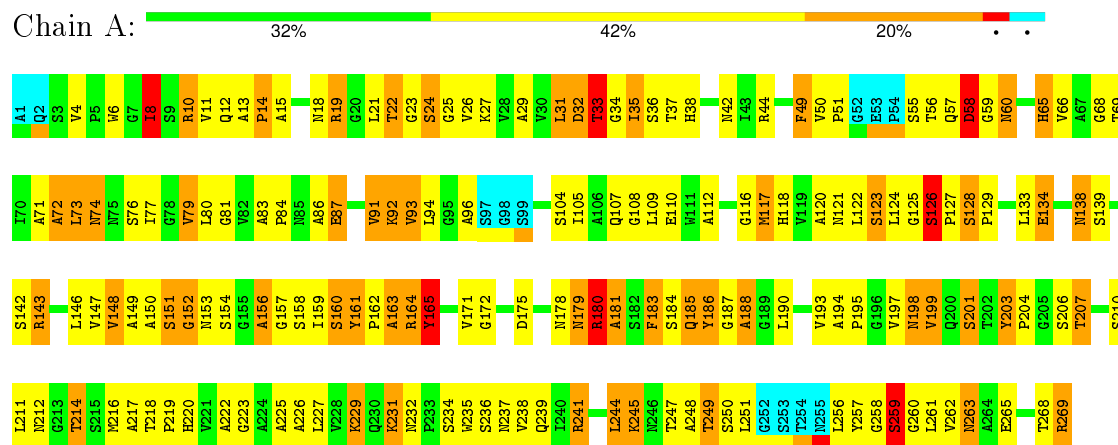
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



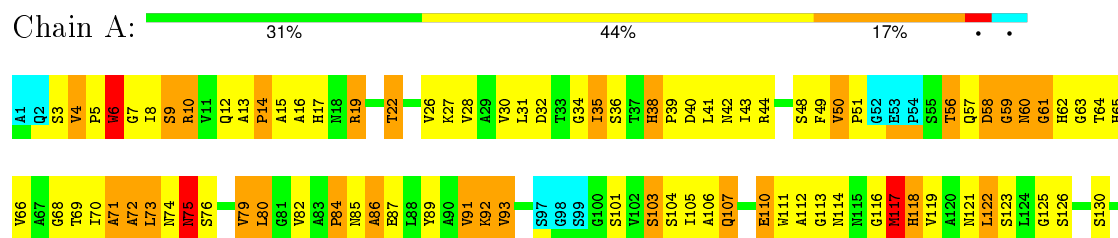
4.2.5 Score per residue for model 5

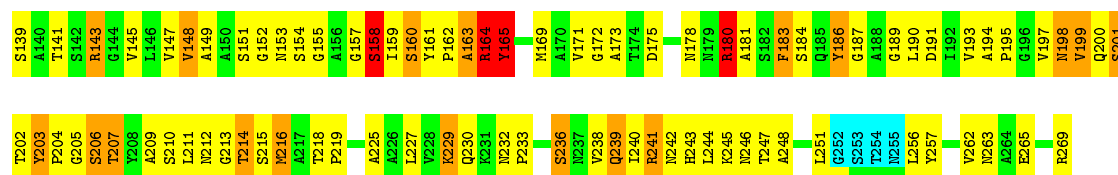
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.6 Score per residue for model 6

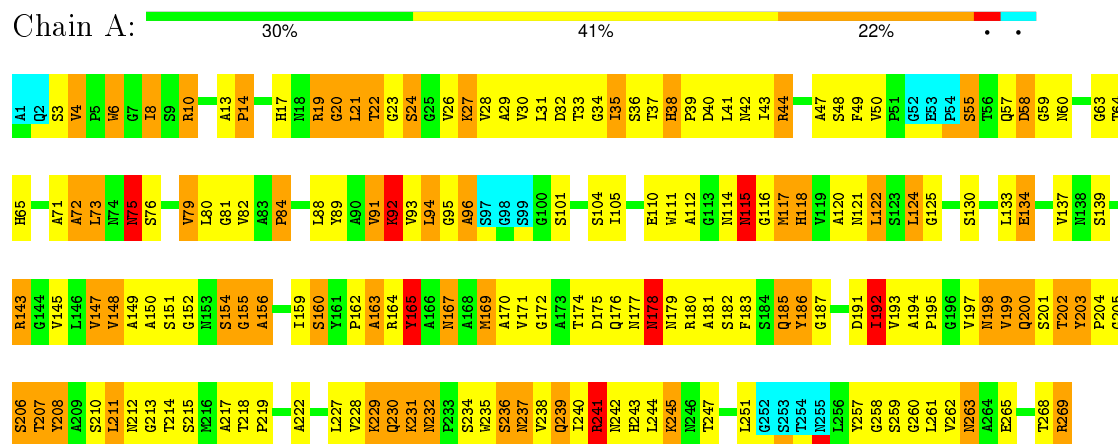
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92





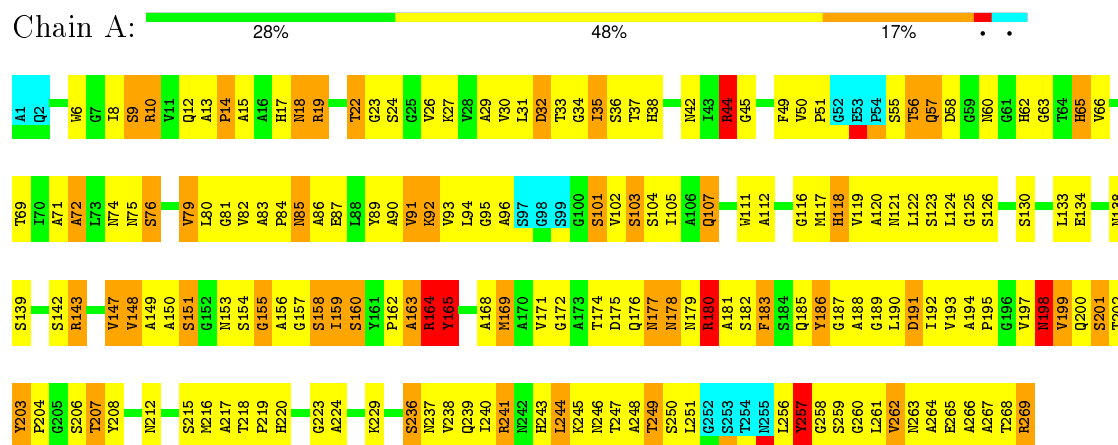
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.8 Score per residue for model 8

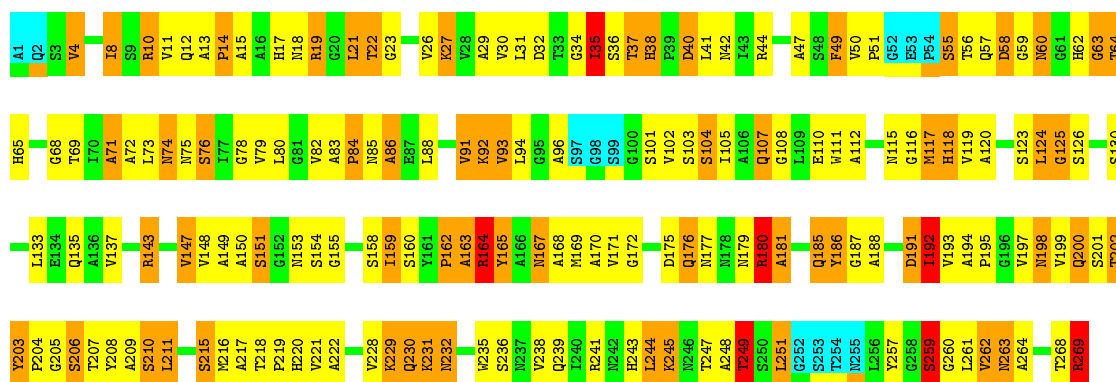
- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

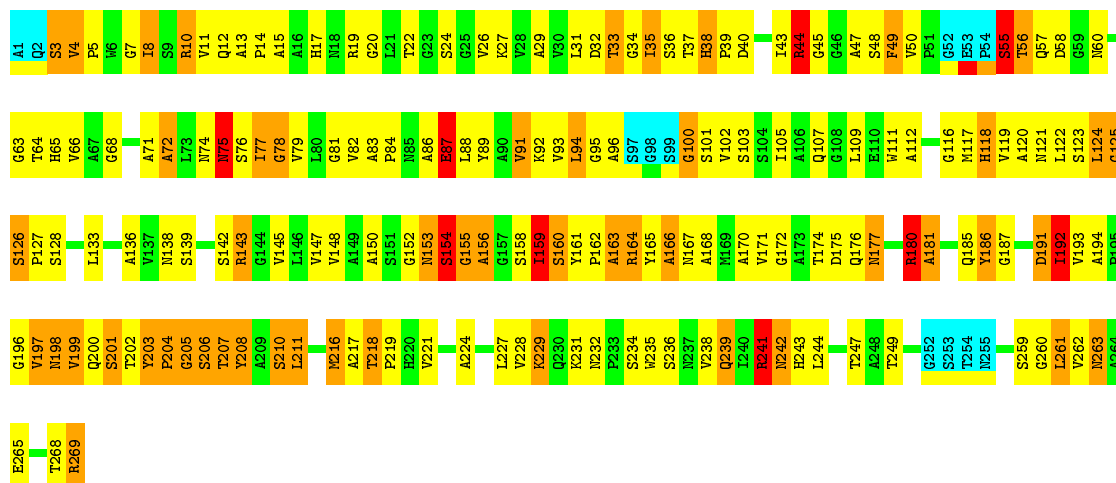




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

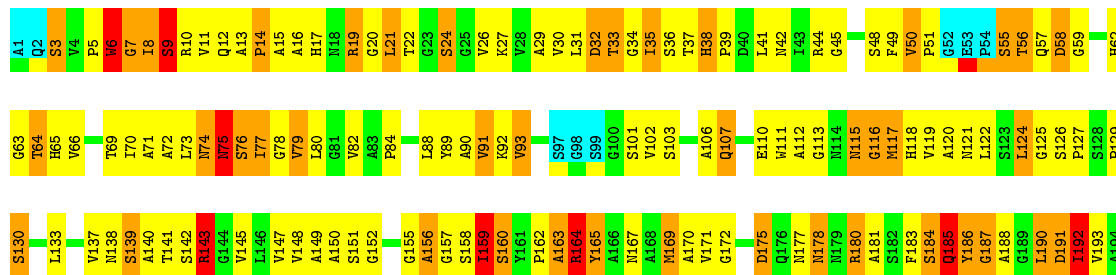
Chain A: 30% 43% 19%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

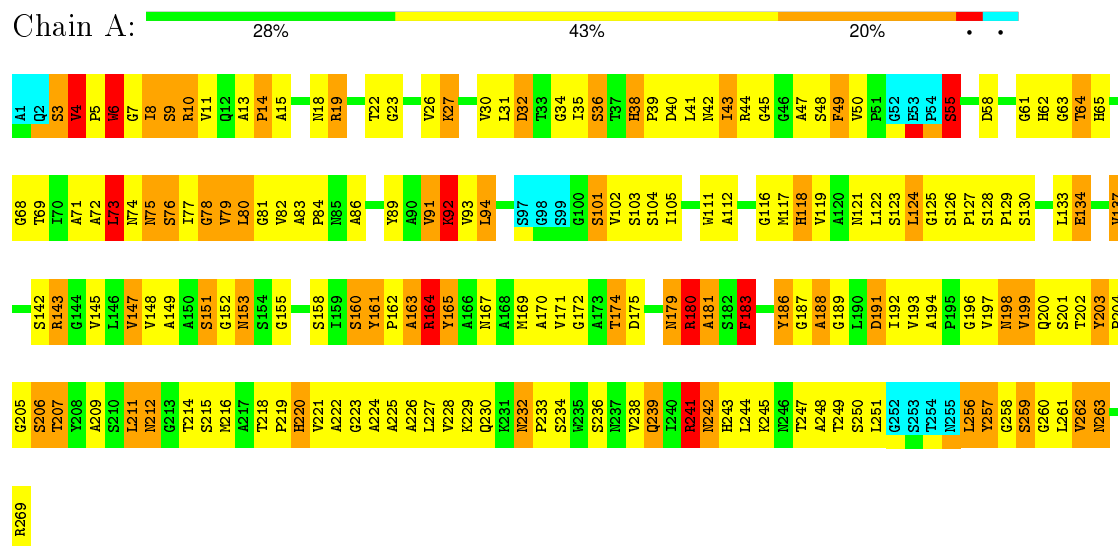
Chain A: 27% 44% 21%





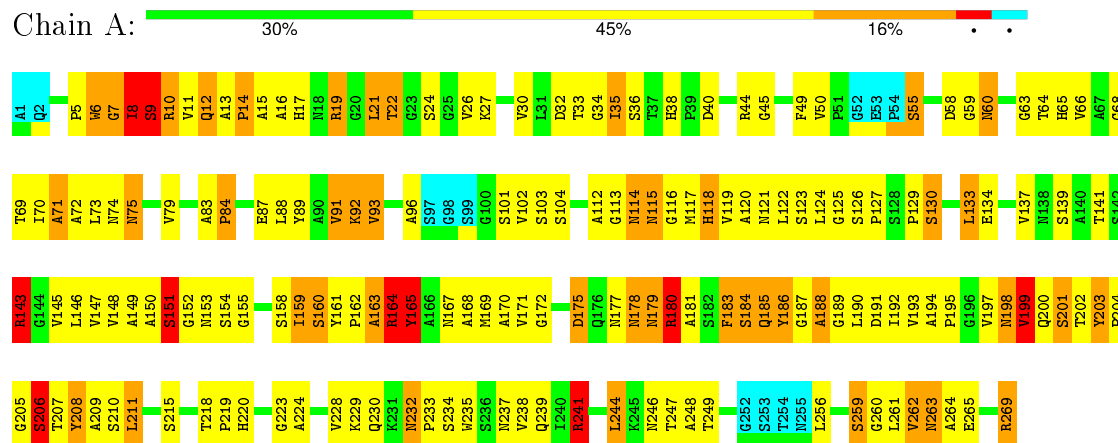
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



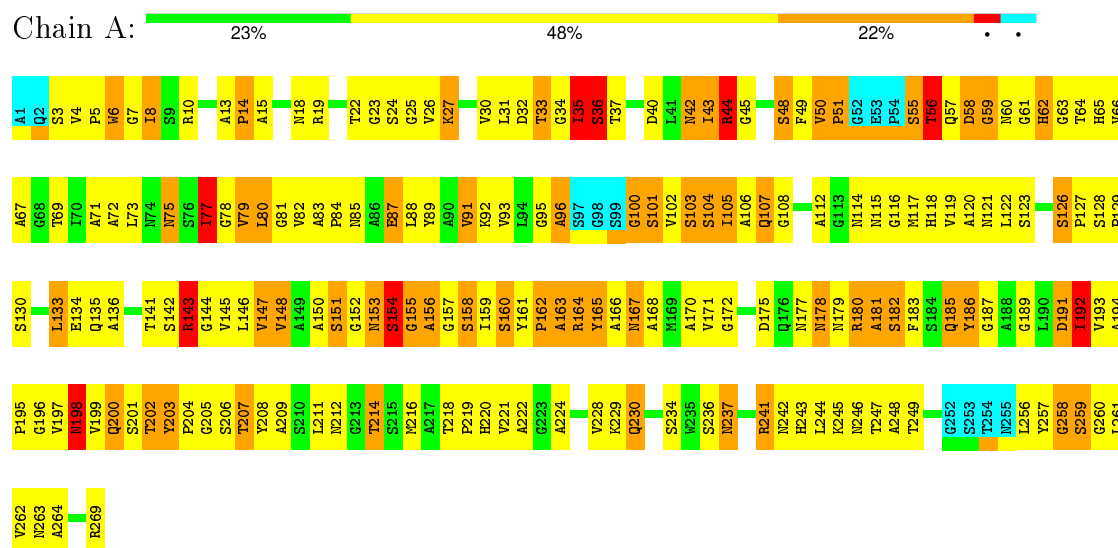
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



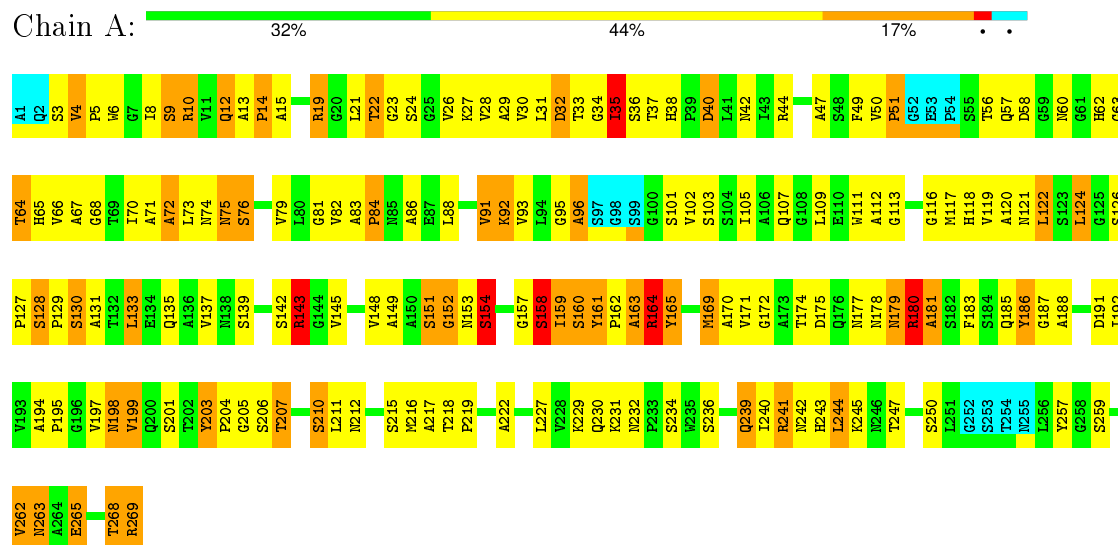
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.15 Score per residue for model 15

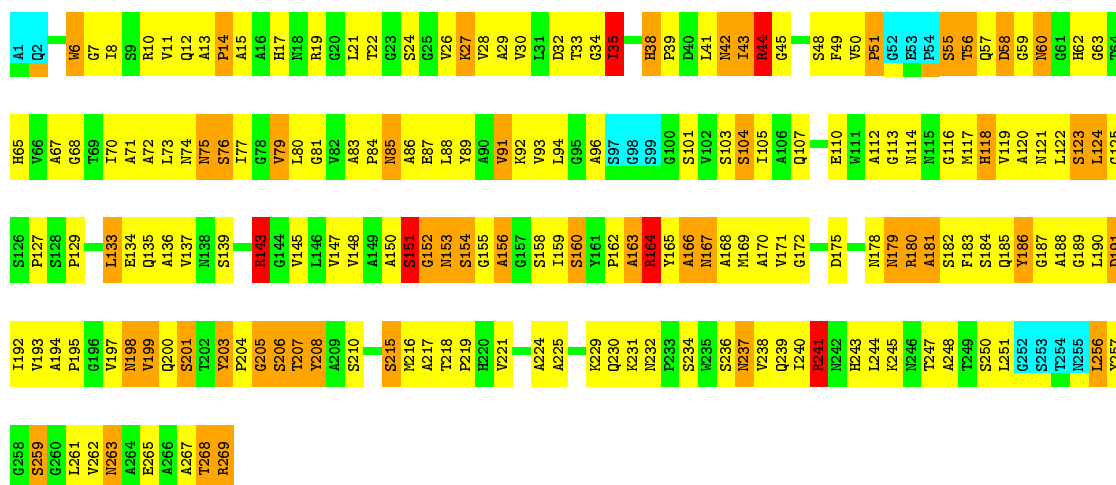
• Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92



4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

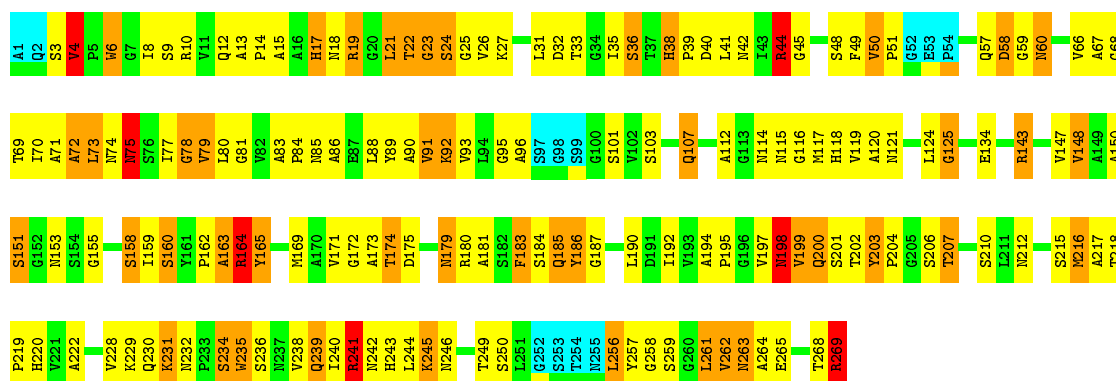




4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

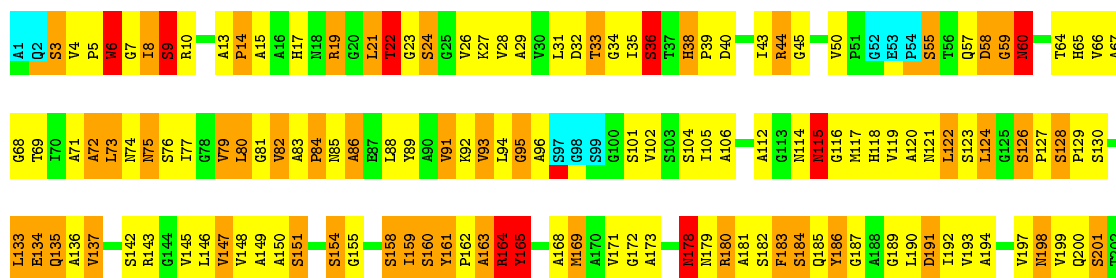
Chain A: 35% 41% 17% • •



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SERINE PROTEASE PB92

Chain A: 29% 40% 22% • •



Y203	P204	G205	S206	T207	Y208	A209	S210	L211	N212	G213	T214	S215	H216	A217	T218	P219	H220		L227	V228	K229	Q230	K231	N232	P233		S236	N237	V238	Q239	T240	K241		L244	K245		S250	L251	G252	S253	T254	N255	L256	Y257	G258	S259	G260	L261	V262	N263		T268	K269
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	--	------	------	------	------	------	------	------	--	------	------	------	------	------	------	--	------	------	--	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	--	------	------

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DGSA*.

Of the 20 calculated structures, 18 were deposited, based on the following criterion: *NO NOE AND H-BOND VIOLATIONS* > 0.5 Å.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
X-PLOR	structure solution	3.1

No chemical shift data was provided. 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.

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	7.4±0.9
All	All	0	133

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	143	ARG	Sidechain	17
1	A	19	ARG	Sidechain	17
1	A	10	ARG	Sidechain	17
1	A	269	ARG	Sidechain	17
1	A	164	ARG	Sidechain	17
1	A	241	ARG	Sidechain	16
1	A	180	ARG	Sidechain	16
1	A	44	ARG	Sidechain	16

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1807	1774	1774	197±18
All	All	32526	31932	31932	3545

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 55.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:HG21	1.01	1.28	3	10
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:N	0.99	1.70	7	12
1:A:186:TYR:CD2	1:A:190:LEU:HD22	0.97	1.94	5	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:HB1	0.96	1.34	1	1
1:A:20:GLY:C	1:A:21:LEU:HD13	0.94	1.83	7	1
1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:HD13	0.94	1.81	15	4
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:HG22	0.94	1.62	18	3
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HD22	0.94	1.35	5	5
1:A:256:LEU:HD13	1:A:257:TYR:N	0.93	1.78	12	3
1:A:194:ALA:HB3	1:A:217:ALA:HB1	0.91	1.38	7	10
1:A:210:SER:O	1:A:211:LEU:HD23	0.91	1.65	7	4
1:A:121:ASN:O	1:A:122:LEU:HD12	0.90	1.66	18	7
1:A:137:VAL:HG23	1:A:167:ASN:HA	0.90	1.40	3	1
1:A:160:SER:O	1:A:163:ALA:HB3	0.89	1.67	16	15
1:A:179:ASN:ND2	1:A:193:VAL:HG21	0.89	1.83	4	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:HD21	0.89	2.03	13	2
1:A:221:VAL:HG22	1:A:262:VAL:HG21	0.89	1.42	1	4
1:A:194:ALA:HB1	1:A:195:PRO:HD2	0.88	1.45	16	13
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HG23	0.88	1.68	16	1
1:A:236:SER:O	1:A:240:ILE:HD12	0.88	1.69	6	3
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CE1	0.87	2.03	12	1
1:A:102:VAL:HG21	1:A:130:SER:OG	0.87	1.69	12	5
1:A:70:ILE:HG21	1:A:88:LEU:HD21	0.85	1.47	13	4
1:A:198:ASN:O	1:A:199:VAL:HG13	0.85	1.70	13	14
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:HG23	0.85	1.70	14	4
1:A:109:LEU:HD22	1:A:167:ASN:ND2	0.85	1.86	3	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:CB	0.85	2.01	2	3
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:CG2	0.84	2.02	13	3
1:A:118:HIS:ND1	1:A:119:VAL:HG23	0.84	1.87	18	3
1:A:120:ALA:HB3	1:A:147:VAL:HG13	0.84	1.49	9	1
1:A:210:SER:C	1:A:211:LEU:HD23	0.83	1.94	4	8
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:OD1	0.83	1.72	4	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:64:THR:HG22	0.83	1.72	12	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:91:VAL:HG12	0.82	2.09	8	7
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:OD1	0.82	1.74	12	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:HA	0.82	1.50	16	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:91:VAL:HG12	0.81	2.10	11	6
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:HG23	0.81	2.09	1	8
1:A:94:LEU:CD1	1:A:124:LEU:HD22	0.81	2.06	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:HD21	1:A:124:LEU:HD13	0.81	1.50	10	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:HG13	0.81	1.73	7	3
1:A:32:ASP:HA	1:A:94:LEU:HD11	0.81	1.53	3	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CZ	0.80	2.10	12	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:OD2	0.80	1.75	13	1
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:O	0.80	1.75	12	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD22	0.80	1.92	15	3
1:A:73:LEU:HD23	1:A:84:PRO:O	0.79	1.78	9	2
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:HB3	0.79	1.55	14	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:HD11	0.79	1.53	18	3
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:HG23	0.79	1.78	16	5
1:A:122:LEU:HD22	1:A:122:LEU:H	0.78	1.36	6	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:167:ASN:CG	0.78	1.99	3	1
1:A:251:LEU:HD22	1:A:257:TYR:CD2	0.78	2.14	16	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:HD12	0.78	1.54	15	4
1:A:21:LEU:CD1	1:A:268:THR:HG21	0.78	2.09	2	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:93:VAL:O	0.78	1.79	10	2
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:O	0.77	1.80	3	9
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD12	0.77	1.54	6	1
1:A:181:ALA:HB1	1:A:183:PHE:CE1	0.77	2.14	18	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:202:THR:HG21	0.77	1.56	7	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:190:LEU:HD13	0.76	1.53	13	1
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:HG22	0.76	1.80	13	1
1:A:122:LEU:H	1:A:122:LEU:HD22	0.76	1.38	15	2
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:N	0.76	1.96	7	2
1:A:162:PRO:O	1:A:164:ARG:N	0.76	2.19	17	18
1:A:194:ALA:HB1	1:A:195:PRO:CD	0.76	2.11	16	11
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:HB3	0.75	1.57	8	5
1:A:124:LEU:HD23	1:A:124:LEU:N	0.75	1.97	3	1
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD13	0.75	1.57	3	2
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD13	0.75	1.96	3	3
1:A:121:ASN:HD22	1:A:148:VAL:HG13	0.75	1.39	18	4
1:A:251:LEU:HD22	1:A:257:TYR:CE2	0.75	2.16	16	1
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:H	0.75	1.40	7	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:83:ALA:HB3	0.75	1.58	9	3
1:A:93:VAL:HG22	1:A:104:SER:O	0.74	1.82	16	2
1:A:8:ILE:HG22	1:A:9:SER:N	0.74	1.94	12	1
1:A:159:ILE:HG23	1:A:186:TYR:O	0.74	1.81	18	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HE2	0.74	1.82	3	3
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:CE1	0.74	2.17	9	5
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:N	0.74	1.97	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:HD22	1:A:122:LEU:N	0.74	1.98	7	1
1:A:207:THR:HG23	1:A:208:TYR:N	0.73	1.97	16	5
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:HD12	0.73	1.98	8	2
1:A:21:LEU:HD23	1:A:227:LEU:HD22	0.73	1.59	18	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:33:THR:O	0.73	1.83	17	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:95:GLY:CA	0.73	2.13	10	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PRO:HD2	0.73	1.61	5	5
1:A:30:VAL:HG11	1:A:35:ILE:HD11	0.73	1.61	6	3
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:ND2	0.73	1.99	14	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:HA3	0.73	1.61	4	4
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:CD1	0.73	2.12	18	1
1:A:105:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD11	0.73	1.59	12	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:HD12	0.73	1.99	10	5
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:N	0.72	1.99	7	1
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HG	0.72	2.01	8	1
1:A:94:LEU:HD13	1:A:124:LEU:HD22	0.72	1.60	16	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:104:SER:HB2	0.72	1.60	6	2
1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:HD12	0.71	2.05	12	9
1:A:192:ILE:HD11	1:A:262:VAL:HG22	0.71	1.61	15	3
1:A:13:ALA:N	1:A:14:PRO:CD	0.71	2.53	1	18
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:CG2	0.71	2.16	7	7
1:A:199:VAL:HG21	1:A:216:MET:HB3	0.71	1.62	4	1
1:A:248:ALA:HB1	1:A:261:LEU:O	0.71	1.86	3	3
1:A:69:THR:HG21	1:A:219:PRO:HG2	0.71	1.61	2	4
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:CG2	0.70	2.10	3	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:51:PRO:HD2	0.70	1.62	1	1
1:A:15:ALA:HB1	1:A:265:GLU:OE2	0.70	1.86	3	1
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:C	0.70	2.06	6	3
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:CG1	0.70	2.16	12	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:CD1	0.70	2.16	17	2
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:HG13	0.70	1.87	6	5
1:A:33:THR:HG23	1:A:95:GLY:HA2	0.70	1.63	10	1
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:CA	0.70	2.17	14	2
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:OE1	0.70	1.86	14	1
1:A:40:ASP:O	1:A:41:LEU:HD23	0.70	1.86	7	1
1:A:167:ASN:O	1:A:168:ALA:HB2	0.70	1.86	3	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:CG1	0.70	2.17	1	4
1:A:35:ILE:HD12	1:A:90:ALA:HB2	0.70	1.64	17	2
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:HD11	0.69	2.22	7	2
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:CG	0.69	2.08	14	3
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:HD13	0.69	2.02	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:CB	0.69	2.40	2	4
1:A:33:THR:HG21	1:A:59:GLY:O	0.69	1.86	14	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:211:LEU:HD21	0.69	2.03	13	1
1:A:199:VAL:HG13	1:A:212:ASN:ND2	0.69	2.03	14	2
1:A:93:VAL:HG11	1:A:105:ILE:HG23	0.69	1.64	8	2
1:A:190:LEU:HD23	1:A:257:TYR:O	0.69	1.88	6	2
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:HG13	0.69	1.87	13	3
1:A:3:SER:C	1:A:4:VAL:HG22	0.69	2.08	17	3
1:A:118:HIS:N	1:A:118:HIS:CD2	0.69	2.61	7	2
1:A:148:VAL:HG12	1:A:169:MET:O	0.69	1.87	8	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:167:ASN:OD1	0.69	1.87	3	1
1:A:165:TYR:O	1:A:166:ALA:HB3	0.68	1.88	1	4
1:A:21:LEU:HD23	1:A:231:LYS:HG3	0.68	1.64	11	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:CG2	0.68	2.77	10	11
1:A:29:ALA:HB1	1:A:91:VAL:CG2	0.67	2.19	16	9
1:A:26:VAL:HG13	1:A:118:HIS:NE2	0.67	2.04	12	2
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HG13	0.67	2.04	1	2
1:A:251:LEU:HD13	1:A:251:LEU:N	0.67	2.04	9	1
1:A:181:ALA:HB3	1:A:184:SER:CB	0.67	2.19	6	1
1:A:218:THR:N	1:A:219:PRO:CD	0.67	2.58	8	18
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:HB3	0.67	1.88	10	3
1:A:74:ASN:CG	1:A:80:LEU:HD22	0.67	2.10	17	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:93:VAL:O	0.67	1.88	18	2
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:CA	0.67	2.20	16	1
1:A:41:LEU:HD11	1:A:64:THR:HG23	0.67	1.67	9	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:N	0.67	2.05	15	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HE1	0.67	1.90	8	4
1:A:122:LEU:HD23	1:A:124:LEU:HD21	0.67	1.67	11	2
1:A:33:THR:HG21	1:A:60:ASN:HB2	0.67	1.65	3	2
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:CB	0.67	2.43	15	17
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:HG12	0.67	1.66	12	2
1:A:199:VAL:HG22	1:A:211:LEU:O	0.67	1.89	1	2
1:A:49:PHE:HE2	1:A:91:VAL:HG12	0.66	1.49	14	4
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:HG23	0.66	2.11	5	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:129:PRO:HA	0.66	1.66	14	1
1:A:181:ALA:HB3	1:A:184:SER:HB3	0.66	1.66	6	1
1:A:38:HIS:HB2	1:A:41:LEU:HD12	0.66	1.67	9	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD12	0.66	1.66	15	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:HG22	0.66	2.05	6	6
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:HB2	0.66	1.91	7	2
1:A:31:LEU:HD23	1:A:93:VAL:HG11	0.66	1.68	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ALA:N	1:A:14:PRO:HD2	0.66	2.06	10	18
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:HE3	0.66	2.06	11	3
1:A:178:ASN:C	1:A:251:LEU:HD23	0.66	2.11	8	1
1:A:187:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD13	0.66	2.21	13	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:H	0.66	1.49	1	6
1:A:186:TYR:CG	1:A:187:GLY:N	0.66	2.64	7	15
1:A:4:VAL:N	1:A:5:PRO:HD3	0.65	2.05	18	4
1:A:174:THR:CA	1:A:181:ALA:HB2	0.65	2.21	12	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CE	0.65	2.79	8	1
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:C	0.65	2.09	12	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CD	0.65	2.80	11	3
1:A:225:ALA:HB2	1:A:244:LEU:HD12	0.65	1.68	3	2
1:A:68:GLY:CA	1:A:72:ALA:HB2	0.65	2.22	3	7
1:A:10:ARG:HB3	1:A:261:LEU:HD21	0.65	1.67	8	2
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:HA3	0.65	1.67	8	14
1:A:41:LEU:O	1:A:73:LEU:HD12	0.65	1.92	6	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:HA	0.65	1.67	7	3
1:A:257:TYR:O	1:A:257:TYR:CG	0.65	2.50	8	1
1:A:60:ASN:HB2	1:A:96:ALA:HB1	0.65	1.69	18	1
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:O	0.65	2.15	17	14
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:HB3	0.65	1.92	13	4
1:A:122:LEU:CD1	1:A:147:VAL:HG12	0.65	2.22	12	2
1:A:79:VAL:HG21	1:A:201:SER:HA	0.65	1.69	1	2
1:A:186:TYR:CG	1:A:256:LEU:CD2	0.65	2.80	2	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:HD22	0.64	1.69	14	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:118:HIS:NE2	0.64	2.08	14	3
1:A:8:ILE:O	1:A:11:VAL:HG22	0.64	1.93	12	3
1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LEU:HD21	0.64	1.67	4	1
1:A:32:ASP:CA	1:A:94:LEU:HD11	0.64	2.21	3	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:HB2	0.64	1.92	15	5
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:CB	0.64	2.45	2	9
1:A:149:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HA	0.64	1.70	8	1
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:HD2	0.64	2.07	5	2
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:CD	0.64	2.13	14	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:CG2	0.64	2.42	18	1
1:A:49:PHE:HZ	1:A:91:VAL:HG12	0.64	1.52	5	2
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.81	6	3
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.23	4	3
1:A:27:LYS:O	1:A:118:HIS:CD2	0.63	2.51	18	2
1:A:116:GLY:CA	1:A:117:MET:HE3	0.63	2.24	2	2
1:A:123:SER:C	1:A:124:LEU:HD23	0.63	2.13	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:VAL:O	1:A:148:VAL:HG13	0.63	1.93	1	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:95:GLY:C	0.63	2.14	15	1
1:A:3:SER:HB2	1:A:80:LEU:N	0.63	2.09	6	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:CA	0.63	2.24	7	13
1:A:150:ALA:HB2	1:A:218:THR:OG1	0.63	1.94	17	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:88:LEU:HD21	0.63	2.23	13	3
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:O	0.63	1.93	5	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:256:LEU:CD2	0.63	2.81	6	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:86:ALA:HB2	0.63	1.71	17	8
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HE3	0.63	2.14	2	2
1:A:33:THR:HG23	1:A:60:ASN:ND2	0.62	2.09	1	1
1:A:162:PRO:CG	1:A:165:TYR:CZ	0.62	2.82	18	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:CA	0.62	2.24	10	4
1:A:69:THR:HG21	1:A:216:MET:O	0.62	1.94	1	1
1:A:8:ILE:HG22	1:A:8:ILE:O	0.62	1.94	13	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:CB	0.62	2.46	12	2
1:A:35:ILE:HG13	1:A:90:ALA:HB2	0.62	1.70	4	2
1:A:186:TYR:CD1	1:A:256:LEU:CD2	0.62	2.82	2	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:118:HIS:CE1	0.62	2.83	11	2
1:A:199:VAL:CG2	1:A:212:ASN:ND2	0.62	2.63	14	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:91:VAL:HG21	0.62	1.70	16	11
1:A:47:ALA:HB3	1:A:49:PHE:CZ	0.62	2.29	15	4
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:CG2	0.62	2.63	8	4
1:A:4:VAL:N	1:A:5:PRO:CD	0.62	2.62	10	4
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:CB	0.62	2.48	10	3
1:A:50:VAL:N	1:A:51:PRO:CD	0.62	2.62	2	3
1:A:149:ALA:HB2	1:A:162:PRO:HG2	0.62	1.71	7	5
1:A:154:SER:O	1:A:156:ALA:N	0.62	2.33	7	2
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HG12	0.62	1.95	3	1
1:A:218:THR:N	1:A:219:PRO:HD2	0.62	2.09	17	18
1:A:224:ALA:HA	1:A:227:LEU:HD12	0.62	1.72	10	1
1:A:192:ILE:CD1	1:A:262:VAL:HG22	0.61	2.25	15	3
1:A:190:LEU:HD21	1:A:192:ILE:O	0.61	1.94	4	1
1:A:183:PHE:CD1	1:A:183:PHE:N	0.61	2.65	3	3
1:A:68:GLY:HA2	1:A:72:ALA:HB2	0.61	1.70	3	3
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD12	0.61	2.25	12	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:30:VAL:O	0.61	1.95	9	4
1:A:6:TRP:CE2	1:A:197:VAL:O	0.61	2.53	12	1
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:HG22	0.61	1.94	15	2
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CE1	0.61	2.83	18	1
1:A:179:ASN:ND2	1:A:257:TYR:CD1	0.61	2.69	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:CA	1:A:116:GLY:CA	0.61	2.78	4	4
1:A:124:LEU:HD12	1:A:124:LEU:C	0.61	2.15	1	1
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:CD	0.61	2.62	5	4
1:A:229:LYS:HE3	1:A:240:ILE:HD11	0.61	1.71	16	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:88:LEU:HD12	0.61	2.25	16	2
1:A:64:THR:HG22	1:A:202:THR:OG1	0.61	1.94	14	2
1:A:111:TRP:CE2	1:A:115:ASN:O	0.61	2.54	11	1
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:CD2	0.61	2.24	9	2
1:A:256:LEU:HD13	1:A:257:TYR:CA	0.61	2.25	12	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:79:VAL:HG12	0.61	2.25	12	1
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HG12	0.61	2.10	12	4
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:HG21	0.61	1.72	6	5
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:HD12	0.60	1.96	14	3
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:CA	0.60	2.25	7	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:88:LEU:HD22	0.60	2.26	15	3
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD22	0.60	2.26	17	1
1:A:93:VAL:HG22	1:A:105:ILE:HA	0.60	1.71	5	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:HB2	0.60	1.94	7	2
1:A:159:ILE:HD11	1:A:188:ALA:O	0.60	1.96	9	1
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:HG22	0.60	1.71	12	3
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:CG	0.60	2.17	12	1
1:A:111:TRP:CE3	1:A:116:GLY:HA3	0.60	2.32	7	3
1:A:256:LEU:O	1:A:258:GLY:N	0.60	2.34	8	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:124:LEU:HD11	0.60	2.25	18	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:CB	0.60	2.25	7	2
1:A:148:VAL:O	1:A:148:VAL:HG12	0.60	1.95	17	4
1:A:64:THR:O	1:A:67:ALA:HB3	0.60	1.96	14	3
1:A:126:SER:CB	1:A:127:PRO:CD	0.60	2.79	5	3
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CZ3	0.60	2.68	13	1
1:A:6:TRP:CG	1:A:198:ASN:O	0.60	2.55	18	3
1:A:192:ILE:HD13	1:A:262:VAL:HG13	0.60	1.72	17	2
1:A:117:MET:H	1:A:117:MET:HE3	0.60	1.56	7	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:259:SER:OG	0.60	1.96	11	1
1:A:27:LYS:HE3	1:A:89:TYR:CD1	0.60	2.30	16	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CB	0.60	2.49	6	8
1:A:192:ILE:HD11	1:A:261:LEU:O	0.60	1.97	2	2
1:A:245:LYS:HG3	1:A:246:ASN:N	0.60	2.12	3	2
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:HG3	0.60	1.73	11	1
1:A:89:TYR:CG	1:A:117:MET:SD	0.60	2.95	7	3
1:A:65:HIS:CD2	1:A:211:LEU:CD1	0.60	2.84	7	1
1:A:33:THR:HG23	1:A:60:ASN:CG	0.60	2.17	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD22	0.60	1.73	11	1
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:CB	0.60	2.50	16	3
1:A:82:VAL:HG12	1:A:227:LEU:HD11	0.60	1.74	4	7
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:HD22	0.60	1.74	17	1
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:HA2	0.60	2.30	6	4
1:A:148:VAL:HG11	1:A:222:ALA:HB2	0.60	1.74	1	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:HB2	0.60	1.97	17	2
1:A:153:ASN:O	1:A:154:SER:CB	0.59	2.49	4	6
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.59	2.50	9	3
1:A:178:ASN:OD1	1:A:251:LEU:HD23	0.59	1.96	11	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:CB	0.59	2.50	15	7
1:A:178:ASN:O	1:A:251:LEU:HD23	0.59	1.97	8	1
1:A:12:GLN:NE2	1:A:16:ALA:N	0.59	2.50	13	1
1:A:71:ALA:O	1:A:72:ALA:C	0.59	2.40	17	17
1:A:50:VAL:HG21	1:A:94:LEU:O	0.59	1.96	8	2
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:N	0.59	2.65	15	1
1:A:183:PHE:N	1:A:183:PHE:CD1	0.59	2.70	14	1
1:A:203:TYR:CG	1:A:204:PRO:HD2	0.59	2.33	10	18
1:A:70:ILE:HB	1:A:88:LEU:HD11	0.59	1.72	16	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:257:TYR:CZ	0.59	2.84	12	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:CB	0.59	2.27	7	3
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:CG2	0.59	2.50	13	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:79:VAL:CG1	0.59	2.81	12	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:118:HIS:NE2	0.59	2.66	18	4
1:A:112:ALA:O	1:A:145:VAL:HG21	0.59	1.97	15	1
1:A:38:HIS:CE1	1:A:203:TYR:O	0.59	2.55	4	2
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:O	0.59	1.97	7	2
1:A:257:TYR:CD1	1:A:257:TYR:N	0.59	2.68	15	1
1:A:199:VAL:HG22	1:A:212:ASN:CB	0.59	2.28	5	1
1:A:165:TYR:O	1:A:166:ALA:CB	0.59	2.50	3	4
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:CA	0.59	2.86	2	2
1:A:137:VAL:HG21	1:A:165:TYR:CZ	0.59	2.33	18	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:21:LEU:N	0.59	2.66	13	2
1:A:117:MET:HE3	1:A:117:MET:H	0.59	1.56	11	1
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:CB	0.59	2.81	2	3
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:CB	0.59	2.51	15	3
1:A:8:ILE:CG2	1:A:8:ILE:O	0.59	2.51	5	2
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CG	0.59	2.56	9	1
1:A:27:LYS:HZ3	1:A:117:MET:HG3	0.59	1.57	16	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CG1	0.59	2.51	11	12
1:A:118:HIS:NE2	1:A:229:LYS:CD	0.58	2.66	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:TRP:O	1:A:111:TRP:CE3	0.58	2.56	12	2
1:A:245:LYS:CG	1:A:246:ASN:N	0.58	2.66	3	2
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CZ	0.58	2.86	18	1
1:A:178:ASN:CG	1:A:251:LEU:HD23	0.58	2.18	11	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:OE1	0.58	2.55	1	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:HB2	0.58	2.13	5	2
1:A:199:VAL:CG1	1:A:212:ASN:ND2	0.58	2.67	14	2
1:A:105:ILE:HD13	1:A:124:LEU:HD11	0.58	1.75	10	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:ILE:HD11	0.58	1.72	6	3
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:OE1	0.58	2.56	1	1
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CD2	0.58	2.33	11	2
1:A:117:MET:SD	1:A:117:MET:N	0.58	2.76	9	3
1:A:186:TYR:CD2	1:A:187:GLY:N	0.58	2.71	4	6
1:A:87:GLU:OE1	1:A:87:GLU:O	0.58	2.20	14	1
1:A:79:VAL:HG11	1:A:201:SER:HA	0.58	1.75	2	1
1:A:173:ALA:HB3	1:A:184:SER:HB2	0.58	1.76	17	2
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:HG23	0.58	1.97	5	2
1:A:35:ILE:CD1	1:A:67:ALA:HB2	0.58	2.29	2	2
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:HB3	0.58	2.14	13	1
1:A:162:PRO:O	1:A:163:ALA:C	0.58	2.42	10	16
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CE1	0.58	2.57	1	3
1:A:42:ASN:OD1	1:A:73:LEU:HD11	0.58	1.98	14	2
1:A:186:TYR:CD1	1:A:187:GLY:N	0.58	2.72	15	6
1:A:161:TYR:N	1:A:161:TYR:CD1	0.58	2.70	15	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CD1	0.58	2.67	10	1
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CE3	0.58	2.70	9	1
1:A:171:VAL:CG1	1:A:172:GLY:N	0.58	2.67	7	18
1:A:183:PHE:C	1:A:183:PHE:CD1	0.58	2.77	5	3
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:HB2	0.58	1.99	14	1
1:A:89:TYR:CD2	1:A:117:MET:SD	0.58	2.97	11	3
1:A:146:LEU:HD12	1:A:237:ASN:OD1	0.58	1.97	5	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:244:LEU:HD23	0.58	1.75	13	2
1:A:35:ILE:HG22	1:A:35:ILE:O	0.58	1.99	3	3
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:CD1	0.58	2.87	14	1
1:A:128:SER:N	1:A:129:PRO:HD3	0.58	2.14	18	2
1:A:173:ALA:HB2	1:A:214:THR:HG23	0.58	1.74	3	1
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:HB3	0.57	1.98	9	9
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:HB2	0.57	1.75	16	2
1:A:38:HIS:CG	1:A:39:PRO:HD2	0.57	2.34	12	10
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:CB	0.57	2.86	9	5
1:A:203:TYR:N	1:A:207:THR:O	0.57	2.37	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:GLU:CG	1:A:165:TYR:CE2	0.57	2.87	12	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:94:LEU:N	0.57	2.14	3	1
1:A:198:ASN:O	1:A:199:VAL:CG1	0.57	2.52	16	14
1:A:119:VAL:HG12	1:A:120:ALA:N	0.57	2.14	1	6
1:A:258:GLY:O	1:A:259:SER:CB	0.57	2.52	3	3
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:OE1	0.57	2.23	14	1
1:A:196:GLY:O	1:A:197:VAL:C	0.57	2.42	10	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CE2	0.57	2.34	2	1
1:A:74:ASN:HD22	1:A:80:LEU:HD11	0.57	1.57	5	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:OD1	0.57	1.98	12	1
1:A:94:LEU:CD2	1:A:94:LEU:N	0.57	2.67	12	2
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:ND2	0.57	2.52	17	2
1:A:66:VAL:HG22	1:A:219:PRO:HG3	0.57	1.75	8	2
1:A:192:ILE:HD12	1:A:259:SER:HB2	0.57	1.75	8	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:HB2	0.57	1.99	11	2
1:A:40:ASP:HB3	1:A:77:ILE:HD11	0.57	1.74	12	1
1:A:8:ILE:CD1	1:A:220:HIS:NE2	0.57	2.67	3	3
1:A:64:THR:CG2	1:A:65:HIS:N	0.57	2.68	11	4
1:A:49:PHE:CZ	1:A:108:GLY:HA2	0.57	2.35	5	2
1:A:151:SER:CB	1:A:171:VAL:O	0.57	2.53	3	9
1:A:102:VAL:HG11	1:A:130:SER:CB	0.57	2.29	1	2
1:A:17:HIS:N	1:A:17:HIS:CD2	0.57	2.73	9	3
1:A:215:SER:O	1:A:219:PRO:CD	0.57	2.52	1	2
1:A:8:ILE:CG1	1:A:220:HIS:NE2	0.57	2.68	17	1
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:HA	0.57	1.77	15	1
1:A:137:VAL:HG23	1:A:167:ASN:CA	0.57	2.23	3	1
1:A:223:GLY:O	1:A:226:ALA:HB3	0.57	2.00	5	3
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HE3	0.57	2.33	8	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HD3	0.57	2.34	18	5
1:A:221:VAL:HG22	1:A:262:VAL:HG11	0.57	1.75	11	2
1:A:76:SER:O	1:A:77:ILE:C	0.57	2.42	11	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:256:LEU:O	0.57	2.00	16	2
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:SD	0.57	2.78	2	4
1:A:159:ILE:HD11	1:A:190:LEU:N	0.57	2.15	8	1
1:A:109:LEU:HB3	1:A:136:ALA:HB1	0.57	1.77	10	1
1:A:232:ASN:CG	1:A:232:ASN:O	0.57	2.42	9	1
1:A:7:GLY:O	1:A:9:SER:N	0.57	2.38	18	3
1:A:161:TYR:CE1	1:A:164:ARG:CB	0.57	2.88	6	2
1:A:48:SER:HG	1:A:56:THR:HG23	0.57	1.60	16	1
1:A:27:LYS:CA	1:A:27:LYS:HE2	0.57	2.30	16	1
1:A:124:LEU:HD12	1:A:125:GLY:N	0.57	2.14	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:OG	0.57	2.58	8	2
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:HB3	0.57	2.00	8	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:188:ALA:HB2	0.57	2.35	11	1
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:HB3	0.56	2.30	6	9
1:A:183:PHE:O	1:A:183:PHE:CG	0.56	2.58	17	2
1:A:125:GLY:CA	1:A:161:TYR:O	0.56	2.53	10	1
1:A:5:PRO:HD2	1:A:8:ILE:HB	0.56	1.75	18	1
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:N	0.56	2.37	15	2
1:A:17:HIS:ND1	1:A:80:LEU:HD21	0.56	2.15	1	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:94:LEU:H	0.56	1.58	3	1
1:A:8:ILE:CG2	1:A:9:SER:N	0.56	2.68	15	2
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:CB	0.56	2.83	7	2
1:A:23:GLY:O	1:A:25:GLY:N	0.56	2.39	17	3
1:A:61:GLY:O	1:A:62:HIS:C	0.56	2.43	14	1
1:A:161:TYR:CD1	1:A:161:TYR:C	0.56	2.78	18	1
1:A:102:VAL:CG2	1:A:130:SER:OG	0.56	2.54	18	1
1:A:44:ARG:O	1:A:89:TYR:CE1	0.56	2.57	4	1
1:A:257:TYR:O	1:A:257:TYR:CD1	0.56	2.59	8	2
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:CG2	0.56	2.54	14	2
1:A:35:ILE:CG1	1:A:90:ALA:HB2	0.56	2.30	2	2
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HB2	0.56	2.35	7	12
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:O	0.56	2.39	1	2
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:HB2	0.56	1.78	12	1
1:A:154:SER:O	1:A:155:GLY:C	0.56	2.43	7	2
1:A:186:TYR:CE2	1:A:256:LEU:HD22	0.56	2.35	6	1
1:A:89:TYR:CE1	1:A:117:MET:SD	0.56	2.99	13	3
1:A:27:LYS:HD2	1:A:89:TYR:CE1	0.56	2.36	16	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:43:ILE:O	0.56	1.99	12	2
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CG	0.56	2.35	17	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:93:VAL:HG21	0.56	2.19	3	3
1:A:251:LEU:CD1	1:A:251:LEU:N	0.56	2.67	8	1
1:A:112:ALA:CA	1:A:116:GLY:HA3	0.56	2.30	1	10
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:CG1	0.56	2.31	1	2
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:CG	0.56	2.53	17	6
1:A:122:LEU:HD23	1:A:149:ALA:HB2	0.56	1.78	15	1
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CD2	0.56	2.59	7	6
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:O	0.56	2.24	4	3
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:CA	0.56	2.84	4	3
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:CG	0.56	2.54	9	2
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:HB2	0.56	2.36	6	4
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:VAL:HG22	0.56	2.36	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:C	0.56	2.44	11	4
1:A:49:PHE:CD1	1:A:49:PHE:N	0.56	2.74	7	2
1:A:229:LYS:O	1:A:233:PRO:N	0.55	2.39	6	5
1:A:33:THR:CG2	1:A:59:GLY:O	0.55	2.55	14	1
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD12	0.55	2.16	10	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:67:ALA:HB2	0.55	1.78	2	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:268:THR:HG21	0.55	2.32	16	1
1:A:162:PRO:HG3	1:A:165:TYR:CZ	0.55	2.37	18	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:9:SER:OG	0.55	2.02	6	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:183:PHE:CD2	0.55	2.59	6	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:CB	0.55	2.53	3	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LYS:N	0.55	2.16	6	15
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:HB	0.55	2.16	8	6
1:A:8:ILE:HG23	1:A:8:ILE:O	0.55	2.01	14	2
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:CG1	0.55	2.54	13	4
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:SD	0.55	2.42	12	2
1:A:148:VAL:O	1:A:148:VAL:CG1	0.55	2.54	5	2
1:A:125:GLY:O	1:A:126:SER:CB	0.55	2.54	10	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:HD23	0.55	2.36	18	1
1:A:8:ILE:N	1:A:8:ILE:HD13	0.55	2.16	4	1
1:A:64:THR:HG23	1:A:65:HIS:H	0.55	1.61	12	1
1:A:91:VAL:O	1:A:93:VAL:N	0.55	2.39	1	6
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:HA3	0.55	2.30	1	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:193:VAL:HG23	0.55	2.31	8	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:104:SER:HB3	0.55	2.30	14	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:7:GLY:N	0.55	2.75	16	3
1:A:203:TYR:CB	1:A:207:THR:O	0.55	2.55	17	10
1:A:21:LEU:HD21	1:A:268:THR:HG21	0.55	1.79	16	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:257:TYR:OH	0.55	2.55	12	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:SER:CB	0.55	2.55	11	5
1:A:263:ASN:N	1:A:263:ASN:OD1	0.55	2.38	9	3
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:N	0.55	2.15	2	1
1:A:12:GLN:HE21	1:A:15:ALA:HB3	0.55	1.61	13	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:CE	0.55	2.55	16	7
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:HA2	0.55	1.79	14	1
1:A:225:ALA:HB2	1:A:244:LEU:CD1	0.55	2.32	3	2
1:A:37:THR:O	1:A:37:THR:HG23	0.55	2.01	9	1
1:A:43:ILE:CG2	1:A:44:ARG:N	0.55	2.70	18	2
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:CB	0.55	2.54	1	1
1:A:3:SER:C	1:A:4:VAL:CG2	0.55	2.75	6	2
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASN:CB	0.55	2.53	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:CG	0.55	2.90	3	1
1:A:194:ALA:CB	1:A:195:PRO:CD	0.55	2.81	16	10
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:CB	0.55	2.55	10	3
1:A:102:VAL:HG13	1:A:133:LEU:HD12	0.55	1.78	13	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:147:VAL:CG1	0.55	2.84	1	1
1:A:199:VAL:HG23	1:A:199:VAL:O	0.55	2.01	9	3
1:A:187:GLY:O	1:A:190:LEU:N	0.54	2.40	13	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:120:ALA:N	0.54	2.70	18	4
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:CG	0.54	2.55	13	2
1:A:249:THR:OG1	1:A:263:ASN:ND2	0.54	2.40	9	3
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:CG	0.54	2.56	7	5
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:HB3	0.54	2.02	5	2
1:A:129:PRO:HB2	1:A:161:TYR:CE1	0.54	2.37	18	1
1:A:251:LEU:H	1:A:251:LEU:HD22	0.54	1.61	9	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:HB3	0.54	2.37	6	9
1:A:191:ASP:OD1	1:A:245:LYS:CE	0.54	2.55	7	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:119:VAL:HB	0.54	1.78	2	3
1:A:62:HIS:CE1	1:A:215:SER:OG	0.54	2.61	11	1
1:A:159:ILE:HD12	1:A:170:ALA:CB	0.54	2.31	3	1
1:A:203:TYR:CD1	1:A:209:ALA:HB3	0.54	2.37	9	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:OD1	0.54	2.40	12	1
1:A:207:THR:OG1	1:A:208:TYR:N	0.54	2.41	7	3
1:A:35:ILE:HG23	1:A:35:ILE:O	0.54	2.02	1	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:51:PRO:HD3	0.54	2.33	14	3
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:O	0.54	2.25	1	4
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CB	0.54	2.56	15	1
1:A:203:TYR:CB	1:A:204:PRO:HD2	0.54	2.33	10	1
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:CG1	0.54	2.55	6	2
1:A:112:ALA:CB	1:A:116:GLY:O	0.54	2.55	11	2
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:CG2	0.54	2.56	6	4
1:A:71:ALA:HB2	1:A:88:LEU:HD11	0.54	1.78	17	1
1:A:257:TYR:CE2	1:A:260:GLY:HA2	0.54	2.38	8	1
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:CD	0.54	2.55	11	1
1:A:38:HIS:CD2	1:A:39:PRO:HD2	0.54	2.38	3	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:104:SER:CB	0.54	2.85	14	3
1:A:79:VAL:CG2	1:A:208:TYR:CE2	0.54	2.91	14	1
1:A:118:HIS:HD1	1:A:119:VAL:HG23	0.54	1.62	18	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:89:TYR:O	0.54	2.03	3	1
1:A:36:SER:O	1:A:38:HIS:N	0.54	2.41	9	1
1:A:187:GLY:O	1:A:189:GLY:N	0.54	2.41	13	4
1:A:200:GLN:CG	1:A:210:SER:OG	0.54	2.55	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:O	1:A:95:GLY:O	0.54	2.25	18	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:89:TYR:O	0.54	2.56	3	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:C	0.54	2.46	14	3
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CG	0.54	2.90	17	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:HA	0.54	2.33	15	1
1:A:107:GLN:OE1	1:A:107:GLN:CA	0.54	2.54	14	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:218:THR:HG23	0.54	1.78	14	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:83:ALA:O	0.54	2.56	4	3
1:A:251:LEU:HD22	1:A:260:GLY:HA2	0.54	1.79	9	1
1:A:248:ALA:HB3	1:A:259:SER:CB	0.54	2.33	14	1
1:A:150:ALA:CB	1:A:218:THR:OG1	0.54	2.55	17	3
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD12	0.54	1.79	12	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:222:ALA:CB	0.54	2.56	15	5
1:A:192:ILE:CB	1:A:259:SER:OG	0.54	2.56	11	1
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:HB3	0.54	2.33	6	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:32:ASP:OD2	0.53	2.56	8	3
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:OH	0.53	2.02	12	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:CG1	0.53	2.55	17	3
1:A:236:SER:O	1:A:237:ASN:C	0.53	2.47	7	2
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:NE2	0.53	2.55	1	1
1:A:87:GLU:O	1:A:87:GLU:CG	0.53	2.56	8	2
1:A:70:ILE:O	1:A:83:ALA:HB3	0.53	2.03	15	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:147:VAL:HG11	0.53	1.79	18	2
1:A:105:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD12	0.53	1.79	14	1
1:A:63:GLY:O	1:A:65:HIS:N	0.53	2.41	9	1
1:A:41:LEU:O	1:A:43:ILE:CD1	0.53	2.56	12	1
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:N	0.53	2.41	4	2
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:197:VAL:HB	0.53	2.37	11	2
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:CG	0.53	2.56	14	4
1:A:58:ASP:OD2	1:A:61:GLY:CA	0.53	2.56	12	1
1:A:17:HIS:NE2	1:A:82:VAL:O	0.53	2.39	1	7
1:A:126:SER:CB	1:A:127:PRO:HD2	0.53	2.33	5	3
1:A:8:ILE:H	1:A:8:ILE:HD12	0.53	1.64	11	1
1:A:6:TRP:CB	1:A:198:ASN:O	0.53	2.56	4	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:ASN:CB	0.53	2.57	13	1
1:A:197:VAL:N	1:A:212:ASN:OD1	0.53	2.42	12	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:CG	0.53	2.56	1	2
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:GLY:N	0.53	2.18	6	18
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:ND2	0.53	2.72	12	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:THR:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:CB	0.53	2.56	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:CB	0.53	2.57	10	1
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:176:GLN:O	0.53	2.61	2	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:CB	0.53	2.72	5	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:N	0.53	2.18	7	2
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:CB	0.53	2.34	2	3
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:C	0.53	2.80	8	2
1:A:269:ARG:OXT	1:A:269:ARG:CG	0.53	2.56	9	1
1:A:93:VAL:CG1	1:A:93:VAL:O	0.53	2.56	18	2
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:CA	0.53	2.56	14	3
1:A:172:GLY:HA3	1:A:193:VAL:HG12	0.53	1.80	16	3
1:A:179:ASN:OD1	1:A:257:TYR:CE1	0.53	2.61	12	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:95:GLY:C	0.53	2.77	15	1
1:A:192:ILE:HD12	1:A:248:ALA:HB1	0.53	1.80	2	1
1:A:137:VAL:HG13	1:A:167:ASN:CG	0.53	2.23	9	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:HB2	0.53	2.03	12	1
1:A:180:ARG:O	1:A:180:ARG:CG	0.53	2.56	8	1
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:CD1	0.53	2.57	11	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CD1	0.53	2.62	4	1
1:A:38:HIS:NE2	1:A:203:TYR:O	0.53	2.42	12	2
1:A:160:SER:O	1:A:163:ALA:CB	0.53	2.55	15	4
1:A:24:SER:OG	1:A:85:ASN:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CZ2	0.53	2.62	17	1
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CD1	0.53	2.39	4	3
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:CG	0.53	2.24	4	1
1:A:248:ALA:CB	1:A:261:LEU:O	0.53	2.55	3	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:237:ASN:OD1	0.53	2.57	5	1
1:A:197:VAL:O	1:A:198:ASN:HB2	0.53	2.04	6	7
1:A:249:THR:HG22	1:A:250:SER:N	0.53	2.19	11	4
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:HG22	0.53	2.04	14	1
1:A:20:GLY:C	1:A:21:LEU:HD23	0.53	2.25	2	1
1:A:48:SER:HB2	1:A:92:LYS:CE	0.53	2.34	11	1
1:A:124:LEU:CD2	1:A:124:LEU:N	0.53	2.69	3	1
1:A:8:ILE:O	1:A:8:ILE:CG2	0.52	2.57	14	2
1:A:45:GLY:HA3	1:A:89:TYR:CE2	0.52	2.39	8	7
1:A:27:LYS:CE	1:A:89:TYR:CD1	0.52	2.91	16	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:238:VAL:HG23	0.52	2.03	8	1
1:A:183:PHE:O	1:A:184:SER:O	0.52	2.28	13	1
1:A:228:VAL:CG2	1:A:244:LEU:HD23	0.52	2.33	13	1
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:CB	0.52	2.57	4	5
1:A:42:ASN:O	1:A:44:ARG:N	0.52	2.42	16	1
1:A:3:SER:O	1:A:4:VAL:C	0.52	2.47	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:249:THR:CG2	1:A:250:SER:N	0.52	2.72	17	4
1:A:180:ARG:CD	1:A:257:TYR:HB2	0.52	2.34	8	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:CD1	0.52	2.57	4	3
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:HA3	0.52	2.40	5	2
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG12	0.52	2.04	10	3
1:A:71:ALA:CB	1:A:83:ALA:HB3	0.52	2.34	1	3
1:A:3:SER:CB	1:A:80:LEU:N	0.52	2.72	6	2
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:CB	0.52	2.57	17	4
1:A:122:LEU:CB	1:A:124:LEU:HD21	0.52	2.34	15	1
1:A:125:GLY:O	1:A:129:PRO:CD	0.52	2.57	5	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:HG21	0.52	2.34	7	4
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:CA	0.52	2.34	15	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:178:ASN:N	0.52	2.42	2	2
1:A:199:VAL:HG21	1:A:216:MET:CB	0.52	2.34	11	2
1:A:154:SER:N	1:A:185:GLN:OE1	0.52	2.43	18	2
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD1	0.52	2.68	7	1
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLY:N	0.52	2.42	7	1
1:A:201:SER:O	1:A:208:TYR:CD2	0.52	2.63	8	1
1:A:27:LYS:HG3	1:A:87:GLU:OE2	0.52	2.05	14	1
1:A:61:GLY:O	1:A:63:GLY:N	0.52	2.43	14	1
1:A:127:PRO:C	1:A:129:PRO:HD3	0.52	2.24	3	2
1:A:170:ALA:HB3	1:A:190:LEU:HA	0.52	1.79	11	1
1:A:186:TYR:HE2	1:A:188:ALA:HB2	0.52	1.64	11	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:104:SER:O	0.52	2.57	16	2
1:A:237:ASN:ND2	1:A:237:ASN:N	0.52	2.56	16	1
1:A:38:HIS:CB	1:A:39:PRO:CD	0.52	2.88	17	3
1:A:122:LEU:CD2	1:A:122:LEU:N	0.52	2.66	6	2
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:NZ	0.52	2.42	11	1
1:A:161:TYR:CE1	1:A:164:ARG:HB3	0.52	2.40	6	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:CG1	0.52	2.57	3	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:6:TRP:C	0.52	2.82	13	1
1:A:207:THR:CG2	1:A:208:TYR:N	0.52	2.67	9	3
1:A:32:ASP:OD1	1:A:33:THR:N	0.52	2.43	17	1
1:A:50:VAL:N	1:A:51:PRO:HD2	0.52	2.19	6	3
1:A:183:PHE:CE2	1:A:214:THR:OG1	0.52	2.63	2	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:CB	0.52	2.58	18	1
1:A:187:GLY:HA3	1:A:190:LEU:HD22	0.52	1.82	13	1
1:A:152:GLY:O	1:A:154:SER:N	0.52	2.43	16	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HG12	0.52	1.80	12	1
1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:OE1	0.52	2.43	12	1
1:A:41:LEU:O	1:A:42:ASN:C	0.52	2.48	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:CD	0.52	2.58	2	4
1:A:121:ASN:OD1	1:A:218:THR:CG2	0.52	2.58	10	2
1:A:119:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HB3	0.52	1.82	18	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:216:MET:CE	0.52	2.35	18	1
1:A:194:ALA:CB	1:A:217:ALA:HB1	0.52	2.25	7	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HG2	0.52	2.05	8	3
1:A:13:ALA:O	1:A:17:HIS:CG	0.52	2.63	8	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HB	0.52	1.81	14	1
1:A:151:SER:CB	1:A:214:THR:HG21	0.52	2.34	14	1
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:HG2	0.52	2.19	10	1
1:A:71:ALA:O	1:A:73:LEU:N	0.52	2.43	18	2
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:HB2	0.52	2.35	2	4
1:A:75:ASN:O	1:A:77:ILE:N	0.52	2.43	16	2
1:A:35:ILE:HG12	1:A:67:ALA:HB2	0.52	1.79	14	1
1:A:55:SER:O	1:A:57:GLN:N	0.52	2.43	14	1
1:A:93:VAL:HG13	1:A:105:ILE:HA	0.52	1.82	9	2
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:HB2	0.52	2.03	4	2
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:HB2	0.52	2.40	4	2
1:A:199:VAL:O	1:A:199:VAL:HG23	0.51	2.04	5	5
1:A:40:ASP:OD1	1:A:202:THR:HG21	0.51	2.04	9	2
1:A:35:ILE:HG12	1:A:90:ALA:CB	0.51	2.35	2	1
1:A:33:THR:OG1	1:A:96:ALA:N	0.51	2.43	13	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:91:VAL:HB	0.51	1.81	1	1
1:A:56:THR:O	1:A:56:THR:CG2	0.51	2.58	6	2
1:A:185:GLN:OE1	1:A:185:GLN:N	0.51	2.43	10	1
1:A:204:PRO:O	1:A:206:SER:N	0.51	2.42	10	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:ND2	0.51	2.56	10	1
1:A:4:VAL:HG23	1:A:4:VAL:O	0.51	2.04	18	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:211:LEU:O	0.51	2.05	11	1
1:A:148:VAL:CG2	1:A:169:MET:SD	0.51	2.99	12	1
1:A:213:GLY:N	1:A:216:MET:SD	0.51	2.83	1	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HG12	0.51	2.04	4	4
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:CD1	0.51	2.73	15	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:OD1	0.51	2.43	18	2
1:A:148:VAL:CG1	1:A:149:ALA:N	0.51	2.72	4	3
1:A:36:SER:O	1:A:37:THR:C	0.51	2.47	9	1
1:A:256:LEU:CD1	1:A:257:TYR:N	0.51	2.64	12	2
1:A:203:TYR:CG	1:A:209:ALA:HB2	0.51	2.40	6	2
1:A:45:GLY:O	1:A:89:TYR:CD2	0.51	2.63	12	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:67:ALA:HB2	0.51	2.35	1	1
1:A:37:THR:HG23	1:A:37:THR:O	0.51	2.04	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:VAL:HG13	1:A:148:VAL:O	0.51	2.06	13	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:93:VAL:O	0.51	2.58	7	2
1:A:79:VAL:HG22	1:A:208:TYR:CE2	0.51	2.40	14	1
1:A:171:VAL:CG2	1:A:221:VAL:HG21	0.51	2.36	10	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:CG2	0.51	2.87	7	2
1:A:8:ILE:HG13	1:A:220:HIS:NE2	0.51	2.20	17	1
1:A:212:ASN:N	1:A:212:ASN:OD1	0.51	2.43	17	2
1:A:257:TYR:C	1:A:257:TYR:CD1	0.51	2.83	8	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HD13	0.51	2.06	4	3
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:CA	0.51	2.89	15	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:N	0.51	2.44	2	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:168:ALA:HB3	0.51	1.82	18	1
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:N	0.51	2.43	11	1
1:A:151:SER:OG	1:A:152:GLY:N	0.51	2.43	1	3
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HD2	0.51	2.41	13	2
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:CE1	0.51	2.94	14	3
1:A:74:ASN:O	1:A:74:ASN:ND2	0.51	2.44	10	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HG2	0.51	2.06	4	2
1:A:27:LYS:HG2	1:A:89:TYR:CZ	0.51	2.41	4	1
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:N	0.51	2.44	6	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:OG1	0.51	2.28	3	1
1:A:134:GLU:OE1	1:A:165:TYR:CE1	0.51	2.64	5	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:260:GLY:O	0.51	2.59	5	4
1:A:199:VAL:CG2	1:A:212:ASN:CG	0.51	2.79	14	2
1:A:180:ARG:N	1:A:257:TYR:OH	0.51	2.44	9	2
1:A:38:HIS:NE2	1:A:204:PRO:O	0.51	2.43	10	1
1:A:256:LEU:C	1:A:256:LEU:HD13	0.51	2.26	18	2
1:A:179:ASN:HB3	1:A:257:TYR:CE1	0.51	2.40	4	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:O	0.51	2.29	5	1
1:A:174:THR:HA	1:A:181:ALA:HB2	0.51	1.81	12	1
1:A:162:PRO:O	1:A:165:TYR:N	0.51	2.44	8	5
1:A:41:LEU:O	1:A:43:ILE:HD12	0.51	2.06	12	1
1:A:125:GLY:CA	1:A:160:SER:HB3	0.51	2.35	4	3
1:A:38:HIS:CB	1:A:39:PRO:HD2	0.51	2.36	17	2
1:A:232:ASN:HB3	1:A:235:TRP:CD2	0.51	2.40	5	2
1:A:208:TYR:N	1:A:208:TYR:CD1	0.51	2.73	10	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:165:TYR:CE1	0.51	2.41	18	1
1:A:193:VAL:HG22	1:A:260:GLY:C	0.51	2.26	3	1
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:CG1	0.51	2.36	12	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:CE	0.51	2.79	8	4
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:HB2	0.51	1.83	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:SER:O	1:A:107:GLN:NE2	0.51	2.44	1	2
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HG23	0.51	2.35	8	2
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:CD1	0.51	2.59	14	1
1:A:171:VAL:HG22	1:A:221:VAL:HG21	0.51	1.82	10	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:CG2	0.51	2.57	18	1
1:A:179:ASN:CG	1:A:257:TYR:CD1	0.51	2.84	4	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:124:LEU:HD21	0.50	1.82	12	2
1:A:167:ASN:ND2	1:A:167:ASN:C	0.50	2.65	14	1
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:CB	0.50	2.59	5	1
1:A:185:GLN:O	1:A:186:TYR:O	0.50	2.29	11	2
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASN:HB2	0.50	2.06	14	4
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:C	0.50	2.49	7	7
1:A:192:ILE:HG13	1:A:262:VAL:HG22	0.50	1.82	10	1
1:A:162:PRO:CA	1:A:165:TYR:CD1	0.50	2.95	17	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:122:LEU:N	0.50	2.66	3	2
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:OE2	0.50	2.29	14	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:87:GLU:OE1	0.50	2.59	2	1
1:A:79:VAL:HG23	1:A:80:LEU:N	0.50	2.21	18	4
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:O	0.50	2.30	9	8
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CZ	0.50	2.41	17	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HE1	0.50	2.27	8	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:N	0.50	2.20	15	1
1:A:76:SER:O	1:A:78:GLY:N	0.50	2.44	11	1
1:A:48:SER:OG	1:A:51:PRO:CG	0.50	2.59	6	1
1:A:247:THR:O	1:A:248:ALA:C	0.50	2.50	16	7
1:A:192:ILE:CG1	1:A:193:VAL:N	0.50	2.75	11	3
1:A:215:SER:O	1:A:219:PRO:HD3	0.50	2.07	1	7
1:A:151:SER:O	1:A:160:SER:OG	0.50	2.29	17	4
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CE2	0.50	2.42	17	1
1:A:192:ILE:CD1	1:A:248:ALA:HB1	0.50	2.36	2	1
1:A:127:PRO:C	1:A:129:PRO:CD	0.50	2.80	3	2
1:A:34:GLY:O	1:A:64:THR:N	0.50	2.45	18	1
1:A:27:LYS:CE	1:A:87:GLU:HG3	0.50	2.37	6	1
1:A:174:THR:CG2	1:A:179:ASN:OD1	0.50	2.59	12	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:CB	0.50	2.60	12	1
1:A:63:GLY:O	1:A:64:THR:C	0.50	2.50	12	9
1:A:261:LEU:HG	1:A:262:VAL:N	0.50	2.22	12	4
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:ND2	0.50	2.21	11	2
1:A:257:TYR:O	1:A:258:GLY:C	0.50	2.49	11	3
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:HA3	0.50	2.06	1	3
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:HB	0.50	1.83	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:248:ALA:CA	1:A:261:LEU:O	0.50	2.59	3	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:NE2	0.50	2.20	5	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:HB2	0.50	2.42	8	3
1:A:21:LEU:CD1	1:A:268:THR:CG2	0.50	2.86	2	1
1:A:49:PHE:O	1:A:51:PRO:HD3	0.50	2.06	11	1
1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CE	0.50	2.74	11	2
1:A:48:SER:OG	1:A:51:PRO:CD	0.50	2.60	6	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:197:VAL:O	0.50	2.65	12	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:C	0.50	2.51	7	1
1:A:154:SER:O	1:A:185:GLN:HG2	0.50	2.07	7	1
1:A:49:PHE:HB3	1:A:107:GLN:NE2	0.50	2.22	2	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:N	0.50	2.45	2	2
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:HD12	0.50	2.07	11	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:CG	0.49	2.81	13	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:179:ASN:CG	0.49	2.80	12	1
1:A:193:VAL:CG1	1:A:257:TYR:O	0.49	2.60	12	1
1:A:111:TRP:CE3	1:A:111:TRP:O	0.49	2.65	9	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HD11	0.49	2.37	12	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:96:ALA:C	0.49	2.27	7	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HB	0.49	2.08	6	4
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:PRO:HD2	0.49	2.36	1	1
1:A:162:PRO:CB	1:A:165:TYR:CD1	0.49	2.95	17	1
1:A:116:GLY:HA2	1:A:117:MET:HE3	0.49	1.84	2	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HB2	0.49	1.84	4	1
1:A:74:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.49	2.45	6	1
1:A:126:SER:OG	1:A:127:PRO:CD	0.49	2.60	5	1
1:A:161:TYR:CD1	1:A:161:TYR:N	0.49	2.80	5	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:ALA:C	0.49	2.50	13	3
1:A:22:THR:C	1:A:24:SER:N	0.49	2.65	5	7
1:A:35:ILE:HG22	1:A:36:SER:N	0.49	2.22	13	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:204:PRO:CB	0.49	2.61	16	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:LEU:C	0.49	2.51	12	5
1:A:83:ALA:CB	1:A:86:ALA:HB2	0.49	2.38	10	2
1:A:8:ILE:HG23	1:A:9:SER:N	0.49	2.22	15	1
1:A:101:SER:CB	1:A:104:SER:OG	0.49	2.60	14	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:CB	0.49	2.59	18	1
1:A:104:SER:OG	1:A:105:ILE:N	0.49	2.44	4	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:HA	0.49	1.84	4	2
1:A:243:HIS:O	1:A:246:ASN:ND2	0.49	2.45	3	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:NE2	0.49	2.45	9	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:GLN:O	0.49	2.30	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ILE:HG23	1:A:64:THR:HA	0.49	1.83	13	2
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:HG3	0.49	2.07	6	5
1:A:256:LEU:C	1:A:256:LEU:HD12	0.49	2.28	8	1
1:A:7:GLY:O	1:A:220:HIS:NE2	0.49	2.46	14	1
1:A:224:ALA:HB1	1:A:264:ALA:HB2	0.49	1.83	14	1
1:A:203:TYR:CB	1:A:204:PRO:CD	0.49	2.90	10	1
1:A:173:ALA:HA	1:A:194:ALA:O	0.49	2.07	18	2
1:A:145:VAL:O	1:A:147:VAL:CG2	0.49	2.61	18	1
1:A:22:THR:O	1:A:24:SER:N	0.49	2.46	5	5
1:A:47:ALA:HB3	1:A:49:PHE:CE1	0.49	2.42	7	2
1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:OE1	0.49	2.60	12	1
1:A:241:ARG:O	1:A:243:HIS:N	0.49	2.45	12	3
1:A:72:ALA:O	1:A:80:LEU:HD12	0.49	2.07	17	2
1:A:49:PHE:CG	1:A:107:GLN:HG2	0.49	2.42	2	2
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:HE3	0.49	2.37	2	1
1:A:211:LEU:CD1	1:A:216:MET:SD	0.49	3.00	11	1
1:A:43:ILE:N	1:A:43:ILE:CD1	0.49	2.76	12	1
1:A:4:VAL:HG11	1:A:8:ILE:HG21	0.49	1.84	9	2
1:A:6:TRP:CD1	1:A:198:ASN:O	0.49	2.65	18	3
1:A:23:GLY:O	1:A:24:SER:C	0.49	2.51	17	2
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CA	0.49	2.60	15	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:HB2	0.49	2.23	6	4
1:A:32:ASP:C	1:A:94:LEU:CD1	0.49	2.81	3	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:219:PRO:CG	0.49	2.91	13	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:93:VAL:HG23	0.49	2.42	16	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:118:HIS:CE1	0.49	2.42	11	4
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:CB	0.49	2.36	7	1
1:A:193:VAL:O	1:A:260:GLY:O	0.49	2.31	1	2
1:A:159:ILE:CD1	1:A:190:LEU:N	0.49	2.75	8	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CB	0.49	2.61	9	1
1:A:244:LEU:HA	1:A:247:THR:OG1	0.49	2.08	9	7
1:A:38:HIS:CG	1:A:39:PRO:CD	0.49	2.95	12	2
1:A:94:LEU:HD21	1:A:124:LEU:HD22	0.49	1.83	12	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:79:VAL:HG11	0.49	1.82	12	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:13:ALA:HB2	0.49	1.84	1	2
1:A:65:HIS:CD2	1:A:201:SER:CB	0.49	2.96	6	4
1:A:12:GLN:OE1	1:A:15:ALA:HB3	0.49	2.08	8	1
1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:VAL:N	0.49	2.23	11	2
1:A:62:HIS:NE2	1:A:216:MET:CE	0.49	2.76	2	1
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CD1	0.49	2.42	18	1
1:A:212:ASN:ND2	1:A:212:ASN:O	0.49	2.46	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:VAL:HG22	1:A:192:ILE:HG23	0.49	1.84	13	1
1:A:241:ARG:CB	1:A:241:ARG:CZ	0.49	2.90	13	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:CB	0.49	2.38	4	2
1:A:4:VAL:HG12	1:A:5:PRO:HD2	0.49	1.84	1	1
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:HG2	0.49	2.08	15	4
1:A:78:GLY:C	1:A:79:VAL:CG2	0.49	2.80	14	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:90:ALA:CB	0.49	2.91	4	1
1:A:173:ALA:O	1:A:174:THR:HG23	0.49	2.08	3	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:C	0.49	2.28	17	2
1:A:190:LEU:CD2	1:A:257:TYR:HA	0.49	2.38	8	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:108:GLY:HA2	0.49	2.43	14	2
1:A:21:LEU:HD11	1:A:268:THR:HG21	0.49	1.82	2	1
1:A:28:VAL:HG13	1:A:119:VAL:HG12	0.49	1.85	18	1
1:A:74:ASN:CB	1:A:80:LEU:HD13	0.49	2.38	11	1
1:A:179:ASN:HD21	1:A:193:VAL:HG21	0.49	1.58	4	1
1:A:3:SER:OG	1:A:80:LEU:HB3	0.49	2.07	6	1
1:A:204:PRO:O	1:A:205:GLY:C	0.48	2.50	16	4
1:A:111:TRP:CD2	1:A:111:TRP:O	0.48	2.66	10	2
1:A:148:VAL:HG12	1:A:148:VAL:O	0.48	2.08	14	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:HD2	0.48	2.23	18	3
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:O	0.48	2.30	14	6
1:A:192:ILE:CG2	1:A:259:SER:OG	0.48	2.60	11	1
1:A:170:ALA:HB3	1:A:189:GLY:O	0.48	2.08	3	1
1:A:232:ASN:HB3	1:A:235:TRP:CG	0.48	2.43	5	1
1:A:251:LEU:HD11	1:A:261:LEU:CB	0.48	2.38	9	1
1:A:151:SER:HB2	1:A:171:VAL:O	0.48	2.09	1	6
1:A:251:LEU:CD2	1:A:257:TYR:CE2	0.48	2.95	16	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:OD1	0.48	2.31	16	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:83:ALA:O	0.48	2.08	3	2
1:A:6:TRP:CH2	1:A:195:PRO:HB3	0.48	2.42	7	2
1:A:191:ASP:C	1:A:192:ILE:CG2	0.48	2.82	7	3
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:OG	0.48	2.43	8	1
1:A:150:ALA:HB1	1:A:215:SER:HA	0.48	1.84	8	1
1:A:49:PHE:CE1	1:A:108:GLY:HA2	0.48	2.42	4	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:220:HIS:HB3	0.48	1.84	13	1
1:A:5:PRO:O	1:A:6:TRP:C	0.48	2.50	12	5
1:A:133:LEU:O	1:A:136:ALA:HB3	0.48	2.07	14	4
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:ARG:N	0.48	2.22	7	2
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:OD1	0.48	2.31	1	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ASN:OD1	0.48	2.31	17	1
1:A:126:SER:OG	1:A:127:PRO:HD2	0.48	2.07	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ASN:O	1:A:86:ALA:O	0.48	2.31	18	3
1:A:118:HIS:CB	1:A:229:LYS:CD	0.48	2.91	5	1
1:A:91:VAL:O	1:A:92:LYS:C	0.48	2.51	13	15
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:HB2	0.48	2.08	15	9
1:A:118:HIS:CE1	1:A:229:LYS:HE2	0.48	2.43	8	1
1:A:251:LEU:HD13	1:A:260:GLY:HA2	0.48	1.86	3	1
1:A:127:PRO:O	1:A:129:PRO:HD3	0.48	2.08	11	6
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:HB2	0.48	2.08	9	4
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:SD	0.48	2.91	11	3
1:A:43:ILE:HD13	1:A:43:ILE:N	0.48	2.22	1	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:HD11	0.48	2.43	14	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:268:THR:HG21	0.48	1.84	3	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:108:GLY:CA	0.48	2.96	5	1
1:A:183:PHE:CG	1:A:183:PHE:O	0.48	2.66	5	1
1:A:256:LEU:CD1	1:A:256:LEU:C	0.48	2.80	12	2
1:A:251:LEU:HD12	1:A:251:LEU:N	0.48	2.24	11	2
1:A:155:GLY:O	1:A:185:GLN:OE1	0.48	2.32	7	1
1:A:8:ILE:HA	1:A:11:VAL:HG22	0.48	1.84	10	1
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:HE3	0.48	2.39	11	1
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:HB3	0.48	2.09	9	2
1:A:249:THR:N	1:A:261:LEU:O	0.48	2.46	3	2
1:A:247:THR:OG1	1:A:248:ALA:N	0.48	2.47	16	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:263:ASN:CB	0.48	2.62	16	1
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:116:GLY:HA3	0.48	2.44	6	2
1:A:162:PRO:HA	1:A:165:TYR:CD1	0.48	2.44	17	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:VAL:N	0.48	2.81	18	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:CG	0.48	2.62	11	1
1:A:174:THR:HG23	1:A:193:VAL:HB	0.48	1.85	4	1
1:A:186:TYR:HD2	1:A:190:LEU:HD22	0.48	1.55	5	1
1:A:192:ILE:HG12	1:A:193:VAL:N	0.48	2.23	10	2
1:A:74:ASN:OD1	1:A:80:LEU:HD11	0.48	2.08	16	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:68:GLY:HA2	0.48	1.84	16	2
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:HB3	0.48	1.85	7	2
1:A:107:GLN:OE1	1:A:107:GLN:C	0.48	2.52	1	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:THR:HG23	0.48	2.08	8	2
1:A:125:GLY:HA2	1:A:160:SER:CB	0.48	2.38	4	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:167:ASN:CG	0.48	2.79	3	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:O	0.48	2.67	3	1
1:A:120:ALA:CB	1:A:147:VAL:HG13	0.48	2.32	9	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:219:PRO:HG2	0.48	2.38	5	6
1:A:35:ILE:CG2	1:A:43:ILE:HD11	0.48	2.39	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:LEU:HD21	1:A:67:ALA:C	0.48	2.29	17	1
1:A:155:GLY:N	1:A:185:GLN:OE1	0.48	2.47	8	2
1:A:55:SER:O	1:A:56:THR:OG1	0.48	2.29	5	1
1:A:10:ARG:HB3	1:A:261:LEU:CD2	0.48	2.39	5	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:179:ASN:ND2	0.48	2.23	12	1
1:A:192:ILE:HD11	1:A:248:ALA:CB	0.48	2.39	12	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:245:LYS:HE2	0.48	2.09	7	1
1:A:212:ASN:CG	1:A:213:GLY:N	0.48	2.68	7	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:167:ASN:CB	0.48	2.92	7	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:C	0.48	2.52	4	2
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:N	0.48	2.46	6	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:CB	0.47	2.61	17	1
1:A:59:GLY:C	1:A:60:ASN:ND2	0.47	2.68	2	2
1:A:70:ILE:CG1	1:A:219:PRO:CB	0.47	2.92	17	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:15:ALA:CB	0.47	2.62	8	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:ILE:O	0.47	2.32	15	3
1:A:148:VAL:HG22	1:A:169:MET:CG	0.47	2.37	11	1
1:A:150:ALA:N	1:A:218:THR:HG21	0.47	2.24	11	2
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:152:GLY:CA	1:A:185:GLN:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:176:GLN:HG2	1:A:177:ASN:ND2	0.47	2.24	3	1
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:HG3	0.47	2.09	4	3
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:CG	0.47	2.52	15	2
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:OH	0.47	2.09	12	1
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:NZ	0.47	2.77	12	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:93:VAL:O	0.47	2.09	7	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:116:GLY:O	0.47	2.09	11	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ILE:HG12	0.47	2.24	17	1
1:A:180:ARG:HD3	1:A:257:TYR:HB2	0.47	1.86	8	1
1:A:32:ASP:O	1:A:92:LYS:HA	0.47	2.09	15	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:27:LYS:N	0.47	2.24	14	1
1:A:134:GLU:HG3	1:A:165:TYR:CZ	0.47	2.44	14	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:CB	0.47	2.62	10	1
1:A:33:THR:HG21	1:A:96:ALA:HB3	0.47	1.84	18	1
1:A:111:TRP:O	1:A:115:ASN:C	0.47	2.52	11	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:HG11	0.47	2.08	3	1
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:CB	0.47	2.58	13	3
1:A:28:VAL:HG12	1:A:29:ALA:N	0.47	2.24	7	1
1:A:93:VAL:HG23	1:A:104:SER:O	0.47	2.09	1	1
1:A:35:ILE:CG2	1:A:35:ILE:O	0.47	2.62	15	2
1:A:200:GLN:O	1:A:200:GLN:OE1	0.47	2.32	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:PRO:O	1:A:207:THR:OG1	0.47	2.32	3	3
1:A:153:ASN:OD1	1:A:214:THR:CG2	0.47	2.61	14	1
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:OG	0.47	2.33	18	1
1:A:193:VAL:O	1:A:262:VAL:HG23	0.47	2.09	11	1
1:A:6:TRP:HB2	1:A:198:ASN:O	0.47	2.09	4	2
1:A:71:ALA:HB3	1:A:88:LEU:HD11	0.47	1.85	11	1
1:A:147:VAL:O	1:A:169:MET:CG	0.47	2.62	3	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:HD2	0.47	2.40	12	1
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:O	0.47	2.33	17	2
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:CG2	0.47	2.98	8	2
1:A:200:GLN:HG2	1:A:210:SER:OG	0.47	2.10	10	1
1:A:186:TYR:CE1	1:A:187:GLY:O	0.47	2.67	2	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:192:ILE:HG23	0.47	2.09	11	1
1:A:159:ILE:HG23	1:A:186:TYR:HA	0.47	1.86	5	1
1:A:178:ASN:O	1:A:179:ASN:O	0.47	2.32	5	1
1:A:59:GLY:O	1:A:96:ALA:HB2	0.47	2.09	5	2
1:A:241:ARG:O	1:A:242:ASN:C	0.47	2.53	14	6
1:A:38:HIS:NE2	1:A:206:SER:HA	0.47	2.25	1	2
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:HD3	0.47	2.24	5	2
1:A:180:ARG:HD3	1:A:257:TYR:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:256:LEU:O	1:A:257:TYR:C	0.47	2.53	8	2
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD2	0.47	2.64	15	1
1:A:212:ASN:OD1	1:A:216:MET:HB3	0.47	2.09	5	2
1:A:211:LEU:HD12	1:A:216:MET:SD	0.47	2.48	10	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:ARG:HB3	0.47	2.10	18	2
1:A:111:TRP:O	1:A:115:ASN:O	0.47	2.32	11	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:OD1	0.47	2.32	3	1
1:A:147:VAL:O	1:A:169:MET:HG3	0.47	2.09	3	1
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:HD12	0.47	1.68	5	1
1:A:118:HIS:O	1:A:118:HIS:CD2	0.47	2.67	9	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:LEU:HD13	0.47	1.86	9	1
1:A:147:VAL:O	1:A:168:ALA:HA	0.47	2.09	13	5
1:A:118:HIS:O	1:A:145:VAL:HA	0.47	2.10	12	4
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:SD	0.47	2.73	17	4
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:CD	0.47	2.62	15	2
1:A:257:TYR:O	1:A:258:GLY:O	0.47	2.33	14	2
1:A:3:SER:OG	1:A:78:GLY:O	0.47	2.32	17	1
1:A:229:LYS:NZ	1:A:240:ILE:HD11	0.47	2.25	17	1
1:A:134:GLU:HA	1:A:165:TYR:OH	0.47	2.09	8	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:87:GLU:HB2	0.47	2.40	8	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:51:PRO:HD3	0.47	1.85	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:149:ALA:CB	1:A:162:PRO:HG2	0.47	2.40	5	3
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:NZ	0.47	2.25	16	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:229:LYS:HD3	0.47	2.24	10	2
1:A:27:LYS:CD	1:A:89:TYR:CE1	0.47	2.97	16	1
1:A:27:LYS:HE3	1:A:87:GLU:O	0.47	2.09	16	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:ALA:O	0.47	2.33	16	3
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:HB	0.47	2.09	12	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:80:LEU:C	0.47	2.29	7	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:LEU:O	0.47	2.33	7	5
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:CB	0.47	2.63	7	1
1:A:102:VAL:HG11	1:A:130:SER:HB3	0.47	1.85	1	1
1:A:174:THR:CG2	1:A:193:VAL:CG2	0.47	2.92	8	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:133:LEU:CD1	0.47	2.40	15	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:83:ALA:O	0.47	2.10	4	2
1:A:261:LEU:HD13	1:A:262:VAL:N	0.47	2.25	10	1
1:A:111:TRP:CH2	1:A:116:GLY:HA2	0.47	2.45	6	1
1:A:125:GLY:O	1:A:129:PRO:HD3	0.47	2.09	5	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:N	0.47	2.25	5	1
1:A:251:LEU:CD2	1:A:260:GLY:HA2	0.47	2.39	9	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:CE	0.47	2.40	12	2
1:A:193:VAL:HG21	1:A:257:TYR:CD2	0.47	2.45	16	1
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:O	0.47	2.33	12	1
1:A:236:SER:O	1:A:238:VAL:N	0.47	2.47	7	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:251:LEU:HD21	0.47	2.25	7	1
1:A:248:ALA:O	1:A:249:THR:O	0.47	2.31	9	3
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:HG3	0.47	2.10	9	2
1:A:150:ALA:CA	1:A:218:THR:OG1	0.47	2.63	17	1
1:A:45:GLY:CA	1:A:89:TYR:CD1	0.47	2.98	14	1
1:A:144:GLY:O	1:A:237:ASN:CB	0.47	2.63	14	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:O	0.47	2.33	5	2
1:A:256:LEU:HD12	1:A:257:TYR:CD1	0.47	2.44	5	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:32:ASP:CG	0.47	2.28	13	2
1:A:7:GLY:O	1:A:8:ILE:C	0.47	2.51	18	4
1:A:183:PHE:O	1:A:184:SER:C	0.47	2.53	13	4
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:OE1	0.47	2.33	3	3
1:A:153:ASN:ND2	1:A:183:PHE:CE2	0.47	2.83	12	1
1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:OD1	0.47	2.48	7	3
1:A:155:GLY:CA	1:A:185:GLN:NE2	0.47	2.78	7	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:195:PRO:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:THR:HB	0.47	2.10	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:SER:OG	1:A:104:SER:OG	0.47	2.33	14	1
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:HG3	0.47	1.87	14	1
1:A:143:ARG:HA	1:A:143:ARG:NE	0.47	2.25	14	1
1:A:176:GLN:O	1:A:177:ASN:CG	0.47	2.53	10	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:229:LYS:CE	0.47	2.92	2	1
1:A:162:PRO:CG	1:A:165:TYR:CE2	0.47	2.98	18	1
1:A:180:ARG:HG2	1:A:256:LEU:CD1	0.47	2.40	5	1
1:A:203:TYR:HB2	1:A:207:THR:O	0.47	2.10	13	4
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:C	0.47	2.53	12	6
1:A:238:VAL:O	1:A:240:ILE:N	0.47	2.49	7	1
1:A:243:HIS:O	1:A:247:THR:OG1	0.47	2.30	3	3
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:CG	0.47	2.40	2	1
1:A:162:PRO:HB3	1:A:165:TYR:CE1	0.47	2.44	18	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:ALA:HB3	0.47	2.09	18	1
1:A:27:LYS:CB	1:A:117:MET:CB	0.47	2.93	6	1
1:A:60:ASN:CG	1:A:61:GLY:N	0.47	2.68	6	1
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLY:O	0.46	2.33	10	2
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:H	0.46	2.28	12	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:HG13	0.46	2.09	1	2
1:A:31:LEU:HG	1:A:93:VAL:CG1	0.46	2.40	1	1
1:A:21:LEU:C	1:A:22:THR:HG22	0.46	2.30	17	1
1:A:89:TYR:CZ	1:A:117:MET:HE1	0.46	2.45	6	2
1:A:89:TYR:N	1:A:89:TYR:CD1	0.46	2.81	4	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:CB	0.46	2.40	6	2
1:A:137:VAL:CG2	1:A:167:ASN:HA	0.46	2.28	3	1
1:A:35:ILE:O	1:A:64:THR:OG1	0.46	2.32	13	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:92:LYS:HE3	0.46	1.87	12	1
1:A:250:SER:HA	1:A:260:GLY:CA	0.46	2.40	12	1
1:A:33:THR:CB	1:A:95:GLY:O	0.46	2.63	17	1
1:A:249:THR:OG1	1:A:263:ASN:OD1	0.46	2.33	10	1
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLU:OE1	0.46	2.33	11	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:40:ASP:N	0.46	2.48	3	1
1:A:66:VAL:HA	1:A:69:THR:CG2	0.46	2.41	13	1
1:A:101:SER:O	1:A:104:SER:OG	0.46	2.33	8	2
1:A:179:ASN:OD1	1:A:257:TYR:OH	0.46	2.31	7	1
1:A:148:VAL:HG23	1:A:169:MET:SD	0.46	2.50	7	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:N	0.46	2.61	7	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.46	2.49	17	1
1:A:180:ARG:HG2	1:A:180:ARG:O	0.46	2.10	8	1
1:A:165:TYR:CD2	1:A:166:ALA:N	0.46	2.84	10	1
1:A:208:TYR:O	1:A:209:ALA:HB2	0.46	2.10	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:SER:CB	1:A:92:LYS:CE	0.46	2.94	11	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:C	0.46	2.52	11	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:116:GLY:HA2	0.46	1.87	4	1
1:A:66:VAL:CG1	1:A:70:ILE:HD11	0.46	2.39	3	2
1:A:5:PRO:O	1:A:7:GLY:N	0.46	2.48	6	1
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:HB2	0.46	2.10	9	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HA	0.46	2.09	17	2
1:A:35:ILE:HG12	1:A:67:ALA:CB	0.46	2.41	15	1
1:A:151:SER:OG	1:A:171:VAL:O	0.46	2.31	4	3
1:A:178:ASN:OD1	1:A:178:ASN:O	0.46	2.33	11	1
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASP:O	0.46	2.32	3	1
1:A:27:LYS:CG	1:A:87:GLU:OE1	0.46	2.64	13	1
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:O	0.46	2.33	1	1
1:A:200:GLN:HG3	1:A:200:GLN:O	0.46	2.11	8	1
1:A:125:GLY:O	1:A:126:SER:HB2	0.46	2.10	10	1
1:A:45:GLY:C	1:A:89:TYR:CD2	0.46	2.89	13	1
1:A:48:SER:HG	1:A:56:THR:CG2	0.46	2.24	16	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:LEU:CD1	0.46	2.40	16	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:166:ALA:CB	0.46	2.40	16	1
1:A:27:LYS:HE2	1:A:28:VAL:N	0.46	2.25	16	1
1:A:190:LEU:CD2	1:A:256:LEU:O	0.46	2.64	16	1
1:A:116:GLY:O	1:A:117:MET:HB2	0.46	2.10	7	2
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:ALA:HB1	0.46	1.87	1	1
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:CG2	0.46	2.84	14	2
1:A:265:GLU:OE2	1:A:265:GLU:O	0.46	2.34	5	2
1:A:49:PHE:CD2	1:A:92:LYS:O	0.46	2.69	11	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:167:ASN:CG	0.46	2.31	11	1
1:A:74:ASN:CG	1:A:75:ASN:N	0.46	2.69	6	1
1:A:251:LEU:HD11	1:A:261:LEU:HB2	0.46	1.88	5	1
1:A:93:VAL:HG11	1:A:105:ILE:HA	0.46	1.88	16	2
1:A:154:SER:C	1:A:185:GLN:HG2	0.46	2.31	7	1
1:A:62:HIS:CE1	1:A:215:SER:HB3	0.46	2.46	1	1
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:CG	0.46	2.54	17	1
1:A:158:SER:O	1:A:186:TYR:O	0.46	2.33	17	1
1:A:56:THR:CG2	1:A:56:THR:O	0.46	2.63	8	1
1:A:5:PRO:HB3	1:A:200:GLN:NE2	0.46	2.26	14	1
1:A:44:ARG:CB	1:A:87:GLU:HB2	0.46	2.40	14	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:CG	0.46	2.54	3	3
1:A:12:GLN:OE1	1:A:264:ALA:C	0.46	2.54	13	1
1:A:262:VAL:O	1:A:263:ASN:OD1	0.46	2.32	13	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:ARG:C	0.46	2.55	18	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:268:THR:O	1:A:269:ARG:OXT	0.46	2.33	16	1
1:A:199:VAL:HG23	1:A:211:LEU:O	0.46	2.11	12	1
1:A:66:VAL:O	1:A:69:THR:HG22	0.46	2.10	17	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:44:ARG:NE	0.46	2.26	17	1
1:A:159:ILE:HD11	1:A:189:GLY:C	0.46	2.30	8	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PRO:CD	0.46	2.40	2	2
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLN:N	0.46	2.69	14	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:178:ASN:CA	0.46	2.64	2	1
1:A:225:ALA:O	1:A:229:LYS:HG3	0.46	2.11	6	1
1:A:186:TYR:CE1	1:A:256:LEU:HD22	0.46	2.45	5	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:VAL:HG23	0.46	2.24	1	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:33:THR:O	0.46	2.55	17	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:OD1	0.46	2.33	17	2
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:CB	0.46	2.64	15	1
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:CD	0.46	2.54	14	1
1:A:5:PRO:CD	1:A:8:ILE:HB	0.46	2.40	18	1
1:A:38:HIS:CD2	1:A:39:PRO:CD	0.46	2.99	3	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:8:ILE:HG21	0.46	1.87	5	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:229:LYS:HD3	0.46	2.46	5	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HB3	0.46	1.88	1	5
1:A:194:ALA:CB	1:A:195:PRO:HD2	0.46	2.30	16	1
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:CG	0.46	2.54	12	3
1:A:74:ASN:OD1	1:A:80:LEU:CD1	0.46	2.64	16	1
1:A:156:ALA:O	1:A:185:GLN:CD	0.46	2.55	16	1
1:A:174:THR:OG1	1:A:194:ALA:C	0.46	2.55	12	2
1:A:115:ASN:O	1:A:117:MET:SD	0.46	2.74	1	1
1:A:33:THR:O	1:A:33:THR:OG1	0.46	2.34	1	1
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:HB2	0.46	2.11	8	2
1:A:33:THR:CG2	1:A:96:ALA:HB3	0.46	2.40	14	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:259:SER:CB	0.46	2.41	10	1
1:A:198:ASN:HA	1:A:212:ASN:OD1	0.46	2.11	11	1
1:A:152:GLY:O	1:A:185:GLN:HG3	0.46	2.10	11	1
1:A:110:GLU:HG2	1:A:139:SER:OG	0.46	2.11	11	1
1:A:154:SER:OG	1:A:155:GLY:N	0.46	2.48	9	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:88:LEU:HD22	0.45	1.88	13	1
1:A:234:SER:O	1:A:235:TRP:O	0.45	2.34	17	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PRO:N	0.45	2.26	6	3
1:A:126:SER:O	1:A:129:PRO:HD2	0.45	2.11	14	2
1:A:173:ALA:O	1:A:174:THR:CG2	0.45	2.64	3	1
1:A:150:ALA:HA	1:A:218:THR:OG1	0.45	2.11	5	11
1:A:32:ASP:O	1:A:33:THR:C	0.45	2.55	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:HIS:CD2	1:A:229:LYS:CD	0.45	2.99	16	1
1:A:62:HIS:O	1:A:63:GLY:C	0.45	2.54	1	4
1:A:248:ALA:O	1:A:249:THR:C	0.45	2.55	3	4
1:A:121:ASN:O	1:A:122:LEU:HD13	0.45	2.10	15	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:218:THR:HG23	0.45	2.41	14	2
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:OD2	0.45	2.35	5	2
1:A:159:ILE:HD13	1:A:190:LEU:CD1	0.45	2.41	18	1
1:A:55:SER:OG	1:A:56:THR:N	0.45	2.50	11	1
1:A:111:TRP:CD2	1:A:115:ASN:O	0.45	2.69	11	1
1:A:152:GLY:N	1:A:185:GLN:HB2	0.45	2.27	4	1
1:A:3:SER:HB2	1:A:80:LEU:HB3	0.45	1.86	6	1
1:A:149:ALA:HB2	1:A:168:ALA:CB	0.45	2.40	3	1
1:A:69:THR:HG21	1:A:219:PRO:CG	0.45	2.41	13	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:HD2	0.45	2.10	6	6
1:A:153:ASN:O	1:A:154:SER:HB2	0.45	2.11	1	3
1:A:57:GLN:O	1:A:58:ASP:HB3	0.45	2.11	1	5
1:A:121:ASN:OD1	1:A:222:ALA:HB1	0.45	2.11	3	2
1:A:87:GLU:OE2	1:A:117:MET:SD	0.45	2.74	8	1
1:A:48:SER:OG	1:A:55:SER:O	0.45	2.31	10	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:HB	0.45	2.12	10	1
1:A:78:GLY:HA3	1:A:208:TYR:OH	0.45	2.12	9	1
1:A:122:LEU:N	1:A:148:VAL:O	0.45	2.50	16	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:CB	0.45	2.79	16	4
1:A:232:ASN:OD1	1:A:232:ASN:O	0.45	2.34	16	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:178:ASN:O	0.45	2.49	16	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:147:VAL:HG12	0.45	1.89	7	1
1:A:241:ARG:O	1:A:241:ARG:HG2	0.45	2.10	7	1
1:A:174:THR:HA	1:A:179:ASN:O	0.45	2.11	8	2
1:A:200:GLN:O	1:A:200:GLN:CG	0.45	2.64	8	1
1:A:66:VAL:HG13	1:A:219:PRO:CB	0.45	2.41	15	2
1:A:113:GLY:O	1:A:143:ARG:HG2	0.45	2.11	6	3
1:A:134:GLU:O	1:A:136:ALA:N	0.45	2.49	2	2
1:A:21:LEU:HD11	1:A:268:THR:CG2	0.45	2.42	2	1
1:A:189:GLY:O	1:A:190:LEU:C	0.45	2.54	18	2
1:A:162:PRO:HB2	1:A:165:TYR:CE1	0.45	2.47	18	1
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:HB3	0.45	2.12	18	1
1:A:263:ASN:N	1:A:263:ASN:ND2	0.45	2.63	11	2
1:A:173:ALA:HB2	1:A:214:THR:HA	0.45	1.88	6	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:PRO:HD2	0.45	2.37	5	2
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:OD1	0.45	2.34	13	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:81:GLY:N	0.45	2.64	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HA	1:A:83:ALA:O	0.45	2.11	15	5
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:HA3	0.45	2.12	8	1
1:A:157:GLY:HA2	1:A:186:TYR:CE1	0.45	2.46	8	1
1:A:23:GLY:CA	1:A:230:GLN:HG3	0.45	2.42	14	1
1:A:203:TYR:CD2	1:A:204:PRO:HD2	0.45	2.47	4	2
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:ILE:CD1	0.45	2.41	6	2
1:A:192:ILE:HD12	1:A:262:VAL:HG13	0.45	1.89	9	1
1:A:198:ASN:C	1:A:199:VAL:HG22	0.45	2.31	13	1
1:A:49:PHE:O	1:A:50:VAL:C	0.45	2.55	17	11
1:A:14:PRO:O	1:A:15:ALA:C	0.45	2.55	4	15
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:HG3	0.45	1.88	7	1
1:A:216:MET:O	1:A:219:PRO:HD2	0.45	2.11	1	3
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:HA2	0.45	2.12	8	2
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:OG	0.45	2.34	2	3
1:A:87:GLU:N	1:A:87:GLU:OE1	0.45	2.49	14	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:198:ASN:HB3	0.45	2.47	18	2
1:A:48:SER:CB	1:A:55:SER:O	0.45	2.64	10	1
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:ALA:HB1	0.45	2.41	10	1
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HG12	0.45	2.41	4	2
1:A:119:VAL:HG23	1:A:229:LYS:HE3	0.45	1.88	2	1
1:A:107:GLN:O	1:A:111:TRP:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:256:LEU:CD1	1:A:257:TYR:CD1	0.45	2.99	6	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HD2	0.45	2.11	3	1
1:A:74:ASN:CG	1:A:74:ASN:O	0.45	2.54	9	1
1:A:238:VAL:O	1:A:239:GLN:C	0.45	2.55	5	14
1:A:11:VAL:O	1:A:12:GLN:C	0.45	2.54	1	5
1:A:170:ALA:N	1:A:191:ASP:HB2	0.45	2.26	16	2
1:A:74:ASN:ND2	1:A:78:GLY:O	0.45	2.50	12	1
1:A:192:ILE:CD1	1:A:262:VAL:HG13	0.45	2.40	15	3
1:A:229:LYS:O	1:A:232:ASN:C	0.45	2.55	1	3
1:A:78:GLY:O	1:A:79:VAL:CG2	0.45	2.65	14	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:O	0.45	2.35	10	1
1:A:45:GLY:O	1:A:89:TYR:HA	0.45	2.12	2	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:149:ALA:N	0.45	2.26	11	1
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:N	0.45	2.49	11	1
1:A:183:PHE:CD1	1:A:183:PHE:C	0.45	2.90	4	1
1:A:167:ASN:O	1:A:168:ALA:CB	0.45	2.54	3	1
1:A:12:GLN:O	1:A:264:ALA:HB3	0.45	2.12	9	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:N	0.45	2.50	13	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:HD21	0.45	2.47	13	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:195:PRO:CB	0.45	2.99	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:OG1	0.45	2.54	16	2
1:A:15:ALA:HB1	1:A:265:GLU:HG3	0.45	1.88	16	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:HB2	0.45	2.11	16	2
1:A:205:GLY:O	1:A:206:SER:HB3	0.45	2.12	14	3
1:A:120:ALA:O	1:A:147:VAL:HA	0.45	2.12	1	4
1:A:40:ASP:OD1	1:A:77:ILE:HD11	0.45	2.12	17	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:267:ALA:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:NE2	0.45	2.80	8	1
1:A:123:SER:OG	1:A:123:SER:O	0.45	2.34	2	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:96:ALA:CA	0.45	2.64	2	1
1:A:157:GLY:C	1:A:186:TYR:O	0.45	2.55	5	1
1:A:232:ASN:O	1:A:232:ASN:OD1	0.45	2.34	9	1
1:A:207:THR:HG23	1:A:208:TYR:H	0.45	1.72	16	3
1:A:62:HIS:NE2	1:A:215:SER:HB3	0.45	2.26	1	1
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:CG	0.45	2.55	11	3
1:A:21:LEU:CD2	1:A:227:LEU:HD22	0.45	2.36	18	1
1:A:118:HIS:CB	1:A:229:LYS:HD2	0.45	2.42	4	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:27:LYS:N	0.45	2.79	4	4
1:A:110:GLU:HG3	1:A:110:GLU:O	0.45	2.10	7	1
1:A:229:LYS:CG	1:A:240:ILE:HD11	0.45	2.42	1	1
1:A:35:ILE:HG13	1:A:90:ALA:CB	0.45	2.41	4	2
1:A:243:HIS:HA	1:A:246:ASN:OD1	0.45	2.12	2	1
1:A:159:ILE:HG12	1:A:187:GLY:CA	0.45	2.42	18	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:231:LYS:HE3	0.45	1.88	18	1
1:A:200:GLN:HA	1:A:210:SER:HA	0.45	1.88	18	2
1:A:178:ASN:CB	1:A:251:LEU:HD21	0.45	2.42	18	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:8:ILE:CG2	0.45	2.42	4	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:HA	0.45	1.87	6	1
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLU:CD	0.45	2.55	6	1
1:A:191:ASP:O	1:A:259:SER:HB2	0.44	2.12	13	2
1:A:112:ALA:C	1:A:116:GLY:HA3	0.44	2.33	16	3
1:A:24:SER:CB	1:A:85:ASN:HB3	0.44	2.42	16	1
1:A:8:ILE:HG22	1:A:9:SER:H	0.44	1.65	12	1
1:A:65:HIS:CG	1:A:211:LEU:HD11	0.44	2.47	1	1
1:A:58:ASP:CG	1:A:59:GLY:N	0.44	2.70	6	3
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:HB2	0.44	1.88	6	1
1:A:256:LEU:HD12	1:A:257:TYR:CE1	0.44	2.47	5	1
1:A:62:HIS:C	1:A:62:HIS:CD2	0.44	2.91	12	2
1:A:232:ASN:OD1	1:A:235:TRP:CH2	0.44	2.70	17	1
1:A:77:ILE:HG23	1:A:78:GLY:N	0.44	2.27	10	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:90:ALA:HB2	0.44	2.42	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:ASP:OD2	1:A:177:ASN:OD1	0.44	2.35	3	1
1:A:103:SER:O	1:A:107:GLN:CB	0.44	2.65	16	1
1:A:27:LYS:CD	1:A:118:HIS:HE2	0.44	2.25	7	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:VAL:N	0.44	2.50	17	1
1:A:14:PRO:O	1:A:17:HIS:N	0.44	2.50	10	3
1:A:8:ILE:HG12	1:A:220:HIS:CD2	0.44	2.48	17	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:32:ASP:N	0.44	2.50	8	1
1:A:111:TRP:O	1:A:111:TRP:CD2	0.44	2.71	9	2
1:A:138:ASN:O	1:A:142:SER:HB2	0.44	2.12	11	1
1:A:152:GLY:HA3	1:A:185:GLN:NE2	0.44	2.26	4	1
1:A:66:VAL:HA	1:A:69:THR:HG22	0.44	1.88	13	1
1:A:175:ASP:O	1:A:176:GLN:C	0.44	2.54	1	2
1:A:200:GLN:CD	1:A:200:GLN:O	0.44	2.55	14	1
1:A:89:TYR:CE2	1:A:117:MET:HE1	0.44	2.47	10	1
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLY:C	0.44	2.56	10	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:229:LYS:CD	0.44	2.80	18	1
1:A:165:TYR:CB	1:A:168:ALA:HB3	0.44	2.42	18	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:CG	0.44	2.56	3	1
1:A:109:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HD21	0.44	1.88	5	1
1:A:228:VAL:O	1:A:229:LYS:C	0.44	2.56	1	10
1:A:200:GLN:HA	1:A:209:ALA:O	0.44	2.13	14	4
1:A:201:SER:O	1:A:208:TYR:HB3	0.44	2.13	7	1
1:A:213:GLY:O	1:A:216:MET:HG2	0.44	2.13	1	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HG13	0.44	2.13	14	5
1:A:166:ALA:O	1:A:168:ALA:N	0.44	2.50	14	2
1:A:121:ASN:ND2	1:A:218:THR:HG23	0.44	2.28	10	2
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:HB3	0.44	1.89	10	2
1:A:178:ASN:ND2	1:A:251:LEU:HD11	0.44	2.28	18	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:220:HIS:CD2	0.44	2.47	5	1
1:A:249:THR:HG23	1:A:263:ASN:ND2	0.44	2.28	9	1
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:C	0.44	2.71	13	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD1	0.44	2.67	7	2
1:A:162:PRO:HA	1:A:165:TYR:CE1	0.44	2.47	17	1
1:A:134:GLU:O	1:A:135:GLN:C	0.44	2.53	2	3
1:A:196:GLY:O	1:A:198:ASN:O	0.44	2.35	10	1
1:A:8:ILE:HG12	1:A:220:HIS:NE2	0.44	2.28	18	1
1:A:232:ASN:HB2	1:A:235:TRP:CD2	0.44	2.47	11	1
1:A:89:TYR:CZ	1:A:117:MET:CE	0.44	3.00	6	1
1:A:27:LYS:HG3	1:A:117:MET:HB3	0.44	1.90	3	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:63:GLY:HA3	0.44	2.13	16	2
1:A:44:ARG:NE	1:A:44:ARG:HA	0.44	2.28	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:ASN:ND2	1:A:148:VAL:CG1	0.44	2.80	12	1
1:A:134:GLU:HG2	1:A:165:TYR:CE2	0.44	2.47	12	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HG2	0.44	2.32	1	1
1:A:158:SER:C	1:A:186:TYR:O	0.44	2.56	17	3
1:A:74:ASN:OD1	1:A:74:ASN:O	0.44	2.36	8	1
1:A:246:ASN:O	1:A:246:ASN:ND2	0.44	2.50	14	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HB3	0.44	2.13	10	1
1:A:190:LEU:O	1:A:191:ASP:C	0.44	2.56	2	1
1:A:22:THR:HA	1:A:84:PRO:CG	0.44	2.43	18	1
1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HD12	0.44	1.70	3	2
1:A:3:SER:OG	1:A:80:LEU:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:78:GLY:CA	1:A:208:TYR:OH	0.44	2.66	9	1
1:A:22:THR:O	1:A:84:PRO:HG2	0.44	2.12	1	3
1:A:34:GLY:HA3	1:A:59:GLY:N	0.44	2.28	13	1
1:A:218:THR:HB	1:A:219:PRO:HD3	0.44	1.89	1	3
1:A:32:ASP:C	1:A:32:ASP:OD1	0.44	2.56	17	2
1:A:29:ALA:HB3	1:A:120:ALA:HA	0.44	1.89	11	4
1:A:69:THR:HG21	1:A:220:HIS:CE1	0.44	2.48	8	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:CG	0.44	2.66	15	1
1:A:79:VAL:HG11	1:A:201:SER:CA	0.44	2.43	2	1
1:A:187:GLY:CA	1:A:190:LEU:HD22	0.44	2.42	11	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:149:ALA:HB2	0.44	2.43	3	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:94:LEU:N	0.44	2.76	3	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:183:PHE:CG	0.44	2.71	3	1
1:A:192:ILE:CG1	1:A:259:SER:HB3	0.44	2.43	16	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:C	0.44	2.56	16	1
1:A:125:GLY:HA3	1:A:160:SER:HB3	0.44	1.90	8	3
1:A:180:ARG:HB2	1:A:257:TYR:CE2	0.44	2.48	17	1
1:A:21:LEU:HG	1:A:268:THR:HG21	0.44	1.90	15	1
1:A:151:SER:HB3	1:A:171:VAL:O	0.44	2.13	3	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:237:ASN:C	0.44	2.56	5	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:GLN:C	0.43	2.57	17	2
1:A:134:GLU:OE2	1:A:165:TYR:CD1	0.43	2.71	5	2
1:A:262:VAL:C	1:A:263:ASN:OD1	0.43	2.56	7	3
1:A:240:ILE:O	1:A:241:ARG:C	0.43	2.56	17	2
1:A:183:PHE:CD1	1:A:184:SER:N	0.43	2.87	6	2
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:C	0.43	2.54	5	4
1:A:100:GLY:C	1:A:101:SER:OG	0.43	2.56	14	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:51:PRO:CD	0.43	2.96	6	2
1:A:77:ILE:HB	1:A:208:TYR:OH	0.43	2.13	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:HG2	0.43	2.13	10	1
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:HD23	0.43	2.28	18	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:35:ILE:HD11	0.43	2.39	6	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:265:GLU:HA	0.43	2.13	13	2
1:A:223:GLY:O	1:A:224:ALA:C	0.43	2.55	13	4
1:A:262:VAL:O	1:A:263:ASN:ND2	0.43	2.51	2	2
1:A:176:GLN:O	1:A:177:ASN:CB	0.43	2.65	10	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LYS:H	0.43	1.74	2	1
1:A:105:ILE:CG2	1:A:133:LEU:CD1	0.43	2.96	18	1
1:A:6:TRP:O	1:A:7:GLY:C	0.43	2.57	11	1
1:A:125:GLY:HA3	1:A:161:TYR:O	0.43	2.12	5	1
1:A:258:GLY:C	1:A:259:SER:OG	0.43	2.55	5	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:200:GLN:HB2	1:A:209:ALA:O	0.43	2.13	4	2
1:A:23:GLY:HA2	1:A:230:GLN:CB	0.43	2.43	12	2
1:A:162:PRO:HB2	1:A:166:ALA:HB3	0.43	1.89	1	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:148:VAL:O	0.43	2.64	1	1
1:A:74:ASN:O	1:A:74:ASN:OD1	0.43	2.36	15	2
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:C	0.43	2.56	8	2
1:A:200:GLN:O	1:A:201:SER:OG	0.43	2.34	11	2
1:A:186:TYR:CG	1:A:256:LEU:HD23	0.43	2.47	2	1
1:A:129:PRO:CB	1:A:161:TYR:CD1	0.43	3.01	18	1
1:A:70:ILE:O	1:A:83:ALA:O	0.43	2.37	4	1
1:A:153:ASN:HB2	1:A:214:THR:HG22	0.43	1.89	6	1
1:A:133:LEU:O	1:A:167:ASN:OD1	0.43	2.37	3	1
1:A:30:VAL:O	1:A:30:VAL:CG1	0.43	2.66	9	1
1:A:204:PRO:O	1:A:206:SER:OG	0.43	2.30	13	1
1:A:166:ALA:O	1:A:167:ASN:C	0.43	2.56	4	4
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:HG13	0.43	1.90	12	1
1:A:150:ALA:CA	1:A:218:THR:HG21	0.43	2.43	2	1
1:A:192:ILE:HG13	1:A:260:GLY:O	0.43	2.13	2	1
1:A:242:ASN:O	1:A:246:ASN:OD1	0.43	2.35	2	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HD3	0.43	2.13	11	1
1:A:191:ASP:CG	1:A:192:ILE:HG23	0.43	2.34	11	1
1:A:228:VAL:O	1:A:231:LYS:HG2	0.43	2.13	9	1
1:A:175:ASP:HB2	1:A:179:ASN:HB3	0.43	1.91	16	1
1:A:221:VAL:O	1:A:222:ALA:C	0.43	2.56	9	3
1:A:33:THR:O	1:A:60:ASN:ND2	0.43	2.51	17	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:200:GLN:C	0.43	2.57	17	1
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ASN:OD1	0.43	2.14	8	1
1:A:154:SER:HA	1:A:185:GLN:NE2	0.43	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:239:GLN:HA	1:A:239:GLN:OE1	0.43	2.14	15	2
1:A:21:LEU:HD22	1:A:268:THR:HG21	0.43	1.91	18	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:32:ASP:OD1	0.43	2.65	11	1
1:A:190:LEU:HG	1:A:191:ASP:N	0.43	2.29	4	1
1:A:93:VAL:HG21	1:A:105:ILE:HA	0.43	1.89	6	1
1:A:178:ASN:HB2	1:A:251:LEU:CD2	0.43	2.42	6	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:218:THR:HG22	0.43	2.44	9	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:ASN:HB2	0.43	2.13	13	2
1:A:166:ALA:C	1:A:168:ALA:N	0.43	2.72	16	2
1:A:178:ASN:CG	1:A:178:ASN:O	0.43	2.57	16	2
1:A:174:THR:N	1:A:181:ALA:HB2	0.43	2.28	12	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:105:ILE:HA	0.43	2.43	6	2
1:A:175:ASP:CG	1:A:177:ASN:OD1	0.43	2.57	8	1
1:A:248:ALA:HB1	1:A:259:SER:O	0.43	2.13	14	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:123:SER:OG	0.43	2.36	2	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:80:LEU:HD13	0.43	2.27	18	1
1:A:31:LEU:C	1:A:32:ASP:OD1	0.43	2.57	11	1
1:A:192:ILE:HA	1:A:259:SER:OG	0.43	2.12	11	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:32:ASP:C	0.43	2.56	4	1
1:A:183:PHE:CE2	1:A:213:GLY:HA2	0.43	2.49	6	1
1:A:123:SER:OG	1:A:215:SER:CB	0.43	2.67	9	1
1:A:196:GLY:C	1:A:212:ASN:OD1	0.43	2.56	12	1
1:A:5:PRO:CG	1:A:8:ILE:HG13	0.43	2.44	12	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:HG23	0.43	2.48	12	2
1:A:118:HIS:CD2	1:A:119:VAL:HG22	0.43	2.48	3	2
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ARG:HB2	0.43	2.14	8	1
1:A:175:ASP:CA	1:A:181:ALA:HA	0.43	2.44	15	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD11	0.43	1.91	14	1
1:A:249:THR:HB	1:A:261:LEU:HB3	0.43	1.90	14	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:214:THR:OG1	0.43	2.57	14	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:123:SER:OG	0.43	2.34	2	1
1:A:22:THR:HA	1:A:84:PRO:HG3	0.43	1.90	18	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:77:ILE:CD1	1:A:77:ILE:O	0.43	2.66	5	1
1:A:94:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HB3	0.43	1.90	12	1
1:A:31:LEU:CG	1:A:93:VAL:HG11	0.43	2.43	1	1
1:A:127:PRO:O	1:A:128:SER:C	0.43	2.55	15	1
1:A:153:ASN:N	1:A:185:GLN:HG2	0.43	2.28	14	1
1:A:153:ASN:C	1:A:154:SER:OG	0.43	2.57	10	1
1:A:169:MET:HB3	1:A:191:ASP:OD2	0.43	2.14	18	1
1:A:49:PHE:CD1	1:A:107:GLN:OE1	0.43	2.71	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:251:LEU:CD1	1:A:261:LEU:N	0.43	2.82	11	1
1:A:36:SER:CB	1:A:204:PRO:HB3	0.43	2.43	4	1
1:A:89:TYR:CD1	1:A:117:MET:SD	0.43	3.11	6	1
1:A:200:GLN:HG2	1:A:210:SER:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:12:GLN:HG3	1:A:265:GLU:N	0.43	2.29	13	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:HE2	0.43	2.33	12	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:229:LYS:HD2	0.43	1.91	12	1
1:A:250:SER:CB	1:A:260:GLY:HA3	0.43	2.42	12	1
1:A:191:ASP:O	1:A:258:GLY:CA	0.43	2.67	8	1
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ALA:C	0.43	2.57	10	1
1:A:203:TYR:CG	1:A:204:PRO:CD	0.43	3.01	10	1
1:A:204:PRO:C	1:A:206:SER:N	0.43	2.72	10	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:HB	0.43	2.13	10	1
1:A:170:ALA:HB3	1:A:190:LEU:CA	0.43	2.44	11	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:229:LYS:HD3	0.43	2.49	16	1
1:A:74:ASN:O	1:A:75:ASN:HB2	0.43	2.13	16	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:268:THR:CG2	0.43	2.42	16	1
1:A:156:ALA:O	1:A:185:GLN:OE1	0.43	2.37	16	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:35:ILE:HD11	0.43	1.89	12	1
1:A:42:ASN:CB	1:A:84:PRO:O	0.43	2.67	7	1
1:A:258:GLY:O	1:A:259:SER:C	0.43	2.58	17	2
1:A:191:ASP:OD2	1:A:192:ILE:HG22	0.43	2.14	15	1
1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:HG22	0.43	2.34	14	1
1:A:144:GLY:O	1:A:237:ASN:HB2	0.43	2.14	14	1
1:A:33:THR:HG21	1:A:60:ASN:CB	0.43	2.44	2	2
1:A:149:ALA:C	1:A:218:THR:HG21	0.43	2.34	11	1
1:A:7:GLY:HA3	1:A:199:VAL:CG1	0.42	2.44	13	1
1:A:186:TYR:CZ	1:A:256:LEU:CD2	0.42	3.02	13	1
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:NE2	0.42	2.52	16	1
1:A:170:ALA:O	1:A:191:ASP:HB3	0.42	2.14	2	4
1:A:10:ARG:HG2	1:A:10:ARG:O	0.42	2.13	1	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:67:ALA:O	0.42	2.13	17	1
1:A:22:THR:O	1:A:23:GLY:C	0.42	2.56	8	2
1:A:6:TRP:NE1	1:A:198:ASN:HB3	0.42	2.29	18	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:133:LEU:HD11	0.42	1.90	18	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:230:GLN:HB2	0.42	2.44	11	1
1:A:250:SER:HA	1:A:259:SER:O	0.42	2.14	11	1
1:A:180:ARG:HA	1:A:257:TYR:OH	0.42	2.14	11	1
1:A:36:SER:CB	1:A:58:ASP:HB2	0.42	2.43	11	1
1:A:200:GLN:CB	1:A:209:ALA:O	0.42	2.67	4	1
1:A:199:VAL:CG2	1:A:216:MET:HG2	0.42	2.44	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:218:THR:HG22	1:A:219:PRO:N	0.42	2.29	4	1
1:A:31:LEU:O	1:A:32:ASP:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:VAL:HG23	0.42	2.49	3	1
1:A:34:GLY:O	1:A:35:ILE:HD12	0.42	2.14	9	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:THR:OG1	0.42	2.34	9	1
1:A:23:GLY:HA2	1:A:230:GLN:NE2	0.42	2.29	7	1
1:A:262:VAL:C	1:A:263:ASN:CG	0.42	2.78	11	2
1:A:125:GLY:HA2	1:A:160:SER:HB3	0.42	1.91	4	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:89:TYR:O	0.42	2.67	3	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:CD	0.42	2.66	3	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:260:GLY:O	0.42	2.14	5	1
1:A:229:LYS:O	1:A:232:ASN:O	0.42	2.38	9	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:238:VAL:N	0.42	2.52	13	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:249:THR:O	0.42	2.14	12	1
1:A:191:ASP:O	1:A:192:ILE:HG22	0.42	2.14	10	2
1:A:36:SER:HB3	1:A:64:THR:OG1	0.42	2.14	1	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:ALA:N	0.42	2.53	17	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:76:SER:N	0.42	2.52	8	1
1:A:64:THR:CG2	1:A:202:THR:OG1	0.42	2.66	14	1
1:A:224:ALA:O	1:A:228:VAL:HG23	0.42	2.13	14	1
1:A:206:SER:O	1:A:207:THR:HB	0.42	2.14	10	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:ARG:H	0.42	1.73	2	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:123:SER:O	0.42	2.68	18	1
1:A:22:THR:HG23	1:A:24:SER:HB3	0.42	1.91	4	1
1:A:184:SER:OG	1:A:214:THR:CG2	0.42	2.66	5	1
1:A:27:LYS:HD2	1:A:118:HIS:NE2	0.42	2.28	7	1
1:A:104:SER:HA	1:A:107:GLN:CG	0.42	2.44	1	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:HA	0.42	2.13	10	1
1:A:101:SER:OG	1:A:102:VAL:N	0.42	2.52	18	2
1:A:21:LEU:HD23	1:A:231:LYS:CG	0.42	2.41	11	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:201:SER:N	0.42	2.68	13	1
1:A:27:LYS:HB3	1:A:117:MET:SD	0.42	2.55	14	2
1:A:35:ILE:O	1:A:58:ASP:HA	0.42	2.13	13	1
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:HE2	0.42	2.15	13	1
1:A:174:THR:HA	1:A:181:ALA:N	0.42	2.30	12	1
1:A:198:ASN:H	1:A:212:ASN:CB	0.42	2.28	12	2
1:A:47:ALA:CB	1:A:49:PHE:CE1	0.42	3.02	12	1
1:A:250:SER:OG	1:A:260:GLY:CA	0.42	2.66	12	1
1:A:159:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB1	0.42	1.91	7	1
1:A:269:ARG:OXT	1:A:269:ARG:HG3	0.42	2.15	17	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:81:GLY:HA3	0.42	1.91	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ASN:HB3	1:A:80:LEU:HD13	0.42	1.89	11	2
1:A:74:ASN:C	1:A:75:ASN:OD1	0.42	2.57	18	1
1:A:154:SER:OG	1:A:185:GLN:HG2	0.42	2.15	18	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:133:LEU:CD1	0.42	2.45	18	1
1:A:16:ALA:HB1	1:A:227:LEU:HD13	0.42	1.91	6	1
1:A:30:VAL:HB	1:A:89:TYR:O	0.42	2.14	3	1
1:A:118:HIS:H	1:A:118:HIS:CD2	0.42	2.30	7	1
1:A:245:LYS:N	1:A:245:LYS:HD2	0.42	2.28	7	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:93:VAL:HG11	0.42	1.92	1	1
1:A:36:SER:HB3	1:A:64:THR:CB	0.42	2.45	1	1
1:A:12:GLN:CD	1:A:265:GLU:OE1	0.42	2.58	8	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:88:LEU:CD1	0.42	2.44	14	3
1:A:182:SER:OG	1:A:182:SER:O	0.42	2.36	3	2
1:A:44:ARG:CB	1:A:87:GLU:HG3	0.42	2.44	10	2
1:A:149:ALA:CB	1:A:163:ALA:HA	0.42	2.44	18	1
1:A:68:GLY:C	1:A:70:ILE:N	0.42	2.73	4	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:108:GLY:HA3	0.42	2.44	9	1
1:A:67:ALA:O	1:A:88:LEU:CD1	0.42	2.67	16	1
1:A:42:ASN:O	1:A:43:ILE:C	0.42	2.56	14	2
1:A:50:VAL:O	1:A:92:LYS:HE3	0.42	2.14	12	1
1:A:169:MET:HB3	1:A:191:ASP:CB	0.42	2.45	15	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:179:ASN:O	0.42	2.58	15	1
1:A:196:GLY:HA2	1:A:212:ASN:CG	0.42	2.35	14	1
1:A:57:GLN:HA	1:A:57:GLN:OE1	0.42	2.13	14	1
1:A:74:ASN:CA	1:A:80:LEU:HD13	0.42	2.45	11	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ASN:N	0.42	2.30	3	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:HB2	0.42	2.15	13	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:153:ASN:O	0.42	2.58	8	2
1:A:48:SER:HB2	1:A:92:LYS:NZ	0.42	2.30	12	1
1:A:181:ALA:O	1:A:183:PHE:CD2	0.42	2.72	7	1
1:A:6:TRP:HA	1:A:9:SER:OG	0.42	2.15	1	1
1:A:40:ASP:O	1:A:73:LEU:HG	0.42	2.15	17	3
1:A:149:ALA:HB3	1:A:163:ALA:CA	0.42	2.42	8	1
1:A:56:THR:O	1:A:56:THR:HG22	0.42	2.14	15	1
1:A:196:GLY:HA2	1:A:212:ASN:ND2	0.42	2.30	14	1
1:A:64:THR:HG23	1:A:65:HIS:N	0.42	2.29	11	1
1:A:27:LYS:HD3	1:A:117:MET:SD	0.42	2.55	16	1
1:A:231:LYS:C	1:A:232:ASN:CG	0.42	2.79	7	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:OE1	0.42	2.37	1	1
1:A:145:VAL:O	1:A:147:VAL:HG22	0.42	2.14	18	1
1:A:33:THR:HB	1:A:95:GLY:O	0.42	2.14	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:CD1	0.42	2.83	4	1
1:A:218:THR:CB	1:A:219:PRO:HD3	0.42	2.44	4	1
1:A:212:ASN:O	1:A:212:ASN:OD1	0.42	2.38	4	1
1:A:118:HIS:HB3	1:A:229:LYS:NZ	0.42	2.30	5	1
1:A:32:ASP:CB	1:A:63:GLY:HA3	0.42	2.45	13	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:ASN:HB2	0.42	2.14	13	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:258:GLY:O	0.42	2.15	7	1
1:A:112:ALA:O	1:A:116:GLY:CA	0.42	2.68	4	2
1:A:107:GLN:HA	1:A:107:GLN:OE1	0.42	2.15	5	2
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CZ2	0.42	2.88	10	1
1:A:196:GLY:O	1:A:198:ASN:N	0.42	2.52	10	1
1:A:232:ASN:CB	1:A:235:TRP:CD2	0.42	3.03	11	1
1:A:74:ASN:C	1:A:75:ASN:CG	0.42	2.79	6	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:138:ASN:N	0.42	2.82	3	1
1:A:113:GLY:HA3	1:A:143:ARG:NH1	0.41	2.30	16	1
1:A:224:ALA:O	1:A:225:ALA:C	0.41	2.57	16	3
1:A:3:SER:O	1:A:5:PRO:HD3	0.41	2.14	11	3
1:A:229:LYS:O	1:A:233:PRO:CD	0.41	2.68	12	1
1:A:261:LEU:CG	1:A:262:VAL:N	0.41	2.83	12	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:230:GLN:OE1	0.41	2.15	7	1
1:A:12:GLN:CG	1:A:265:GLU:HB2	0.41	2.45	17	1
1:A:8:ILE:O	1:A:9:SER:HB3	0.41	2.14	8	1
1:A:134:GLU:C	1:A:136:ALA:N	0.41	2.73	14	2
1:A:249:THR:O	1:A:259:SER:HA	0.41	2.15	14	1
1:A:49:PHE:HB3	1:A:107:GLN:OE1	0.41	2.14	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:70:ILE:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:73:LEU:O	1:A:79:VAL:O	0.41	2.38	11	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:68:GLY:CA	0.41	2.44	3	1
1:A:123:SER:OG	1:A:215:SER:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:42:ASN:N	1:A:73:LEU:HG	0.41	2.29	7	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:94:LEU:C	0.41	2.35	7	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:91:VAL:HB	0.41	2.45	7	1
1:A:49:PHE:HB2	1:A:107:GLN:NE2	0.41	2.29	1	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:262:VAL:CG1	0.41	2.45	8	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:80:LEU:CD2	0.41	2.44	14	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:256:LEU:HD13	0.41	2.50	14	1
1:A:55:SER:HA	1:A:92:LYS:HE3	0.41	1.92	10	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:256:LEU:HD22	0.41	2.49	2	1
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:HG23	0.41	2.15	4	1
1:A:56:THR:O	1:A:57:GLN:CD	0.41	2.59	16	1
1:A:150:ALA:O	1:A:151:SER:C	0.41	2.58	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:ASP:OD2	1:A:245:LYS:HE2	0.41	2.15	7	1
1:A:242:ASN:OD1	1:A:243:HIS:N	0.41	2.53	7	1
1:A:74:ASN:HB2	1:A:80:LEU:CD1	0.41	2.42	17	1
1:A:248:ALA:HB3	1:A:259:SER:OG	0.41	2.15	14	1
1:A:91:VAL:O	1:A:93:VAL:HG23	0.41	2.15	4	2
1:A:33:THR:HB	1:A:60:ASN:CG	0.41	2.36	2	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:73:LEU:HB2	0.41	2.15	18	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:MET:CG	0.41	2.88	6	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:177:ASN:OD1	0.41	2.53	9	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:64:THR:CG2	0.41	2.57	12	1
1:A:191:ASP:OD2	1:A:245:LYS:CE	0.41	2.68	7	1
1:A:105:ILE:HG22	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.46	15	1
1:A:89:TYR:CE2	1:A:117:MET:CE	0.41	3.04	10	1
1:A:192:ILE:CG1	1:A:262:VAL:HG22	0.41	2.46	10	1
1:A:12:GLN:HB3	1:A:265:GLU:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:5:PRO:HD2	1:A:8:ILE:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:140:ALA:O	1:A:145:VAL:HB	0.41	2.16	11	1
1:A:24:SER:O	1:A:24:SER:OG	0.41	2.36	11	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:218:THR:HG21	0.41	2.16	4	1
1:A:164:ARG:O	1:A:165:TYR:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.41	1.93	3	1
1:A:192:ILE:HA	1:A:258:GLY:O	0.41	2.15	3	1
1:A:237:ASN:OD1	1:A:237:ASN:O	0.41	2.38	5	1
1:A:92:LYS:HD3	1:A:92:LYS:O	0.41	2.15	13	1
1:A:179:ASN:C	1:A:257:TYR:OH	0.41	2.59	16	1
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ILE:N	0.41	2.73	16	1
1:A:64:THR:O	1:A:65:HIS:C	0.41	2.57	12	1
1:A:126:SER:O	1:A:161:TYR:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:258:GLY:N	0.41	2.30	8	1
1:A:150:ALA:CB	1:A:215:SER:OG	0.41	2.69	8	1
1:A:131:ALA:O	1:A:135:GLN:HB2	0.41	2.15	15	1
1:A:31:LEU:O	1:A:32:ASP:CG	0.41	2.59	2	1
1:A:198:ASN:N	1:A:212:ASN:HB3	0.41	2.30	18	1
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HG22	0.41	2.15	11	1
1:A:200:GLN:CA	1:A:209:ALA:O	0.41	2.68	4	1
1:A:123:SER:O	1:A:124:LEU:HB3	0.41	2.15	5	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:210:SER:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:229:LYS:HD2	0.41	1.92	7	1
1:A:242:ASN:O	1:A:245:LYS:HG2	0.41	2.16	17	1
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:ASN:HA	0.41	1.92	15	1
1:A:202:THR:HA	1:A:208:TYR:CD1	0.41	2.51	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:SER:OG	1:A:56:THR:HB	0.41	2.16	14	1
1:A:190:LEU:HB3	1:A:256:LEU:O	0.41	2.16	18	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HB2	0.41	2.16	11	1
1:A:195:PRO:HD3	1:A:261:LEU:CD1	0.41	2.46	11	1
1:A:24:SER:N	1:A:230:GLN:HG3	0.41	2.29	4	1
1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:OE1	0.41	2.16	4	1
1:A:70:ILE:O	1:A:71:ALA:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:17:HIS:CD2	1:A:17:HIS:N	0.41	2.85	13	1
1:A:107:GLN:O	1:A:110:GLU:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:200:GLN:HG3	1:A:201:SER:N	0.41	2.29	12	1
1:A:49:PHE:HB2	1:A:107:GLN:CD	0.41	2.36	1	1
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:OD1	0.41	2.54	1	1
1:A:3:SER:C	1:A:5:PRO:HD3	0.41	2.34	18	1
1:A:200:GLN:CG	1:A:210:SER:HB3	0.41	2.45	11	1
1:A:174:THR:HB	1:A:178:ASN:O	0.41	2.15	4	1
1:A:180:ARG:NH2	1:A:193:VAL:HG11	0.41	2.30	6	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:12:GLN:HA	0.41	2.15	3	1
1:A:226:ALA:O	1:A:227:LEU:C	0.41	2.58	5	1
1:A:93:VAL:CG1	1:A:105:ILE:HA	0.41	2.46	9	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:179:ASN:HB3	0.41	2.15	13	1
1:A:12:GLN:HG2	1:A:265:GLU:CB	0.41	2.46	6	2
1:A:5:PRO:O	1:A:9:SER:OG	0.41	2.38	1	1
1:A:48:SER:OG	1:A:92:LYS:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:128:SER:O	1:A:161:TYR:CE1	0.41	2.74	2	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:124:LEU:HD11	0.41	2.45	18	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:59:GLY:N	0.41	2.54	18	1
1:A:121:ASN:HD21	1:A:218:THR:HG23	0.41	1.76	4	1
1:A:7:GLY:HA3	1:A:220:HIS:NE2	0.41	2.30	4	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:GLN:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:163:ALA:O	1:A:170:ALA:HB2	0.41	2.15	13	1
1:A:12:GLN:OE1	1:A:263:ASN:HB3	0.41	2.16	16	1
1:A:27:LYS:NZ	1:A:117:MET:HG3	0.41	2.30	16	1
1:A:199:VAL:CG2	1:A:211:LEU:O	0.41	2.69	12	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:229:LYS:CD	0.41	2.46	12	1
1:A:104:SER:O	1:A:107:GLN:HG3	0.41	2.15	1	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:90:ALA:CB	0.41	2.40	17	1
1:A:241:ARG:O	1:A:245:LYS:HB3	0.41	2.16	17	1
1:A:27:LYS:HA	1:A:87:GLU:HG2	0.41	1.92	8	1
1:A:198:ASN:C	1:A:199:VAL:HG13	0.41	2.35	8	1
1:A:247:THR:HG22	1:A:266:ALA:O	0.41	2.16	8	1
1:A:261:LEU:HD13	1:A:262:VAL:H	0.41	1.76	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:GLU:OE2	1:A:269:ARG:CD	0.41	2.69	10	1
1:A:49:PHE:CD2	1:A:107:GLN:HG3	0.41	2.51	10	1
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:195:PRO:HB2	0.41	2.51	11	1
1:A:62:HIS:NE2	1:A:123:SER:CB	0.41	2.84	6	1
1:A:3:SER:OG	1:A:79:VAL:CG1	0.41	2.67	3	1
1:A:27:LYS:HB2	1:A:117:MET:HB2	0.41	1.93	5	1
1:A:41:LEU:CD1	1:A:64:THR:HG23	0.41	2.43	9	1
1:A:232:ASN:CG	1:A:235:TRP:CD2	0.41	2.94	9	1
1:A:42:ASN:O	1:A:88:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:42:ASN:OD1	1:A:73:LEU:CD1	0.41	2.69	16	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:HB2	0.41	2.16	12	1
1:A:42:ASN:HB3	1:A:84:PRO:O	0.41	2.15	7	1
1:A:235:TRP:N	1:A:235:TRP:CD1	0.41	2.86	17	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:111:TRP:O	0.41	2.74	10	1
1:A:68:GLY:HA3	1:A:202:THR:HG22	0.41	1.93	10	1
1:A:198:ASN:CA	1:A:212:ASN:OD1	0.41	2.69	11	1
1:A:65:HIS:CE1	1:A:201:SER:HB3	0.41	2.51	9	1
1:A:16:ALA:O	1:A:21:LEU:HB2	0.40	2.16	13	1
1:A:12:GLN:HG3	1:A:265:GLU:HB2	0.40	1.91	13	1
1:A:8:ILE:HD12	1:A:220:HIS:NE2	0.40	2.32	13	1
1:A:33:THR:O	1:A:92:LYS:HG3	0.40	2.16	16	1
1:A:34:GLY:O	1:A:58:ASP:OD1	0.40	2.39	12	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:SER:HB3	0.40	2.17	12	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:179:ASN:HB2	0.40	2.37	2	1
1:A:3:SER:HB3	1:A:79:VAL:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:183:PHE:CD2	0.40	2.89	3	1
1:A:172:GLY:N	1:A:192:ILE:O	0.40	2.54	3	1
1:A:159:ILE:HD11	1:A:189:GLY:HA3	0.40	1.93	3	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:93:VAL:C	0.40	2.37	9	1
1:A:124:LEU:C	1:A:124:LEU:CD1	0.40	2.85	1	1
1:A:158:SER:O	1:A:185:GLN:HG2	0.40	2.16	1	1
1:A:3:SER:CB	1:A:79:VAL:C	0.40	2.90	17	1
1:A:147:VAL:O	1:A:168:ALA:HB1	0.40	2.15	8	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:SER:HB2	0.40	2.15	15	1
1:A:21:LEU:HB3	1:A:227:LEU:HD22	0.40	1.92	15	1
1:A:129:PRO:O	1:A:130:SER:OG	0.40	2.33	15	1
1:A:196:GLY:O	1:A:212:ASN:HB3	0.40	2.16	14	1
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ASN:ND2	0.40	2.54	18	1
1:A:73:LEU:HG	1:A:84:PRO:O	0.40	2.15	18	1
1:A:104:SER:O	1:A:105:ILE:C	0.40	2.58	3	1
1:A:26:VAL:O	1:A:87:GLU:HB2	0.40	2.17	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:GLN:NE2	1:A:15:ALA:CB	0.40	2.84	13	1
1:A:155:GLY:HA2	1:A:185:GLN:NE2	0.40	2.31	7	1
1:A:134:GLU:C	1:A:134:GLU:OE1	0.40	2.59	7	1
1:A:231:LYS:HG3	1:A:232:ASN:N	0.40	2.30	1	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HA	0.40	1.75	1	1
1:A:77:ILE:HG13	1:A:208:TYR:OH	0.40	2.17	14	1
1:A:172:GLY:O	1:A:193:VAL:CA	0.40	2.70	10	1
1:A:77:ILE:CG2	1:A:78:GLY:N	0.40	2.84	10	1
1:A:162:PRO:HG3	1:A:165:TYR:OH	0.40	2.16	18	1
1:A:55:SER:O	1:A:92:LYS:HE2	0.40	2.16	11	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:220:HIS:ND1	0.40	2.84	9	1
1:A:200:GLN:CA	1:A:210:SER:HB3	0.40	2.47	9	1
1:A:149:ALA:O	1:A:170:ALA:HA	0.40	2.16	12	1
1:A:238:VAL:C	1:A:240:ILE:N	0.40	2.75	7	1
1:A:24:SER:HA	1:A:85:ASN:CB	0.40	2.47	8	1
1:A:65:HIS:NE2	1:A:211:LEU:HG	0.40	2.32	15	1
1:A:5:PRO:HG2	1:A:8:ILE:HB	0.40	1.91	18	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:HG13	0.40	2.16	11	1
1:A:219:PRO:HA	1:A:222:ALA:HB3	0.40	1.92	4	1
1:A:112:ALA:O	1:A:117:MET:O	0.40	2.40	6	1
1:A:178:ASN:C	1:A:178:ASN:OD1	0.40	2.60	6	1
1:A:232:ASN:ND2	1:A:235:TRP:CH2	0.40	2.89	5	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:86:ALA:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:118:HIS:C	1:A:145:VAL:HG13	0.40	2.37	12	1
1:A:8:ILE:HD11	1:A:220:HIS:NE2	0.40	2.31	1	1
1:A:59:GLY:C	1:A:60:ASN:CG	0.40	2.80	17	1
1:A:259:SER:O	1:A:260:GLY:C	0.40	2.60	14	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD2	0.40	2.51	2	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:244:LEU:CD2	0.40	2.46	2	1
1:A:60:ASN:CB	1:A:96:ALA:HB1	0.40	2.45	18	1
1:A:49:PHE:N	1:A:49:PHE:CD1	0.40	2.88	4	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:THR:C	0.40	2.59	4	1
1:A:117:MET:HE3	1:A:117:MET:CA	0.40	2.45	6	1
1:A:227:LEU:HD23	1:A:227:LEU:HA	0.40	1.79	6	1
1:A:156:ALA:N	1:A:185:GLN:HG2	0.40	2.32	5	1
1:A:138:ASN:O	1:A:142:SER:OG	0.40	2.38	5	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	256/269 (95%)	181±6 (71±2%)	51±4 (20±2%)	24±4 (9±2%)	2	11
All	All	4608/4842 (95%)	3249 (71%)	923 (20%)	436 (9%)	2	11

All 98 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	84	PRO	18
1	A	163	ALA	18
1	A	198	ASN	17
1	A	79	VAL	15
1	A	14	PRO	15
1	A	35	ILE	14
1	A	165	TYR	14
1	A	199	VAL	13
1	A	181	ALA	12
1	A	75	ASN	10
1	A	58	ASP	10
1	A	155	GLY	10
1	A	60	ASN	9
1	A	55	SER	8
1	A	72	ALA	8
1	A	92	LYS	8
1	A	154	SER	8
1	A	206	SER	7
1	A	9	SER	7
1	A	8	ILE	7
1	A	188	ALA	7
1	A	73	LEU	6
1	A	178	ASN	6
1	A	71	ALA	6
1	A	156	ALA	6
1	A	59	GLY	6
1	A	192	ILE	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	6	TRP	5
1	A	259	SER	5
1	A	159	ILE	5
1	A	158	SER	5
1	A	36	SER	5
1	A	125	GLY	5
1	A	76	SER	5
1	A	153	ASN	5
1	A	51	PRO	4
1	A	32	ASP	4
1	A	24	SER	4
1	A	162	PRO	4
1	A	151	SER	4
1	A	249	THR	4
1	A	115	ASN	3
1	A	175	ASP	3
1	A	189	GLY	3
1	A	100	GLY	3
1	A	152	GLY	3
1	A	117	MET	3
1	A	180	ARG	3
1	A	20	GLY	3
1	A	179	ASN	3
1	A	207	THR	3
1	A	4	VAL	3
1	A	96	ALA	3
1	A	86	ALA	3
1	A	78	GLY	3
1	A	7	GLY	3
1	A	258	GLY	3
1	A	37	THR	2
1	A	185	GLN	2
1	A	205	GLY	2
1	A	77	ILE	2
1	A	33	THR	2
1	A	166	ALA	2
1	A	235	TRP	2
1	A	63	GLY	2
1	A	22	THR	2
1	A	184	SER	2
1	A	80	LEU	2
1	A	186	TYR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	43	ILE	2
1	A	116	GLY	1
1	A	168	ALA	1
1	A	204	PRO	1
1	A	242	ASN	1
1	A	64	THR	1
1	A	56	THR	1
1	A	3	SER	1
1	A	232	ASN	1
1	A	62	HIS	1
1	A	257	TYR	1
1	A	183	PHE	1
1	A	187	GLY	1
1	A	237	ASN	1
1	A	241	ARG	1
1	A	164	ARG	1
1	A	145	VAL	1
1	A	197	VAL	1
1	A	61	GLY	1
1	A	177	ASN	1
1	A	23	GLY	1
1	A	126	SER	1
1	A	47	ALA	1
1	A	50	VAL	1
1	A	191	ASP	1
1	A	130	SER	1
1	A	87	GLU	1
1	A	95	GLY	1
1	A	167	ASN	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	186/194 (96%)	126±5 (68±3%)	60±5 (32±3%)	1	13
All	All	3348/3492 (96%)	2261 (68%)	1087 (32%)	1	13

All 150 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	263	ASN	18
1	A	91	VAL	18
1	A	38	HIS	17
1	A	143	ARG	17
1	A	203	TYR	17
1	A	160	SER	16
1	A	244	LEU	16
1	A	236	SER	16
1	A	186	TYR	16
1	A	22	THR	15
1	A	151	SER	15
1	A	216	MET	14
1	A	6	TRP	14
1	A	147	VAL	14
1	A	207	THR	13
1	A	101	SER	13
1	A	211	LEU	13
1	A	126	SER	13
1	A	19	ARG	13
1	A	210	SER	12
1	A	159	ILE	12
1	A	234	SER	12
1	A	118	HIS	12
1	A	124	LEU	12
1	A	133	LEU	12
1	A	245	LYS	11
1	A	164	ARG	11
1	A	169	MET	11
1	A	154	SER	11
1	A	262	VAL	10
1	A	42	ASN	10
1	A	139	SER	10
1	A	201	SER	10
1	A	229	LYS	10
1	A	239	GLN	10
1	A	191	ASP	10
1	A	27	LYS	9
1	A	103	SER	9
1	A	56	THR	9
1	A	230	GLN	9
1	A	232	ASN	9
1	A	9	SER	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	180	ARG	9
1	A	183	PHE	9
1	A	269	ARG	9
1	A	175	ASP	9
1	A	241	ARG	9
1	A	21	LEU	9
1	A	158	SER	9
1	A	231	LYS	9
1	A	10	ARG	9
1	A	165	TYR	8
1	A	206	SER	8
1	A	37	THR	8
1	A	117	MET	8
1	A	142	SER	8
1	A	200	GLN	8
1	A	107	GLN	8
1	A	44	ARG	8
1	A	36	SER	8
1	A	4	VAL	8
1	A	76	SER	8
1	A	123	SER	8
1	A	8	ILE	8
1	A	215	SER	8
1	A	134	GLU	8
1	A	182	SER	7
1	A	202	THR	7
1	A	208	TYR	7
1	A	185	GLN	7
1	A	32	ASP	7
1	A	214	THR	7
1	A	93	VAL	7
1	A	33	THR	7
1	A	177	ASN	7
1	A	49	PHE	7
1	A	60	ASN	7
1	A	137	VAL	6
1	A	104	SER	6
1	A	55	SER	6
1	A	75	ASN	6
1	A	259	SER	6
1	A	58	ASP	6
1	A	92	LYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	VAL	6
1	A	122	LEU	6
1	A	35	ILE	6
1	A	114	ASN	6
1	A	179	ASN	6
1	A	198	ASN	6
1	A	130	SER	6
1	A	141	THR	6
1	A	256	LEU	6
1	A	167	ASN	6
1	A	178	ASN	5
1	A	176	GLN	5
1	A	115	ASN	5
1	A	192	ILE	5
1	A	94	LEU	5
1	A	18	ASN	5
1	A	64	THR	5
1	A	128	SER	5
1	A	40	ASP	5
1	A	161	TYR	5
1	A	250	SER	5
1	A	3	SER	4
1	A	246	ASN	4
1	A	82	VAL	4
1	A	174	THR	4
1	A	243	HIS	4
1	A	110	GLU	4
1	A	268	THR	4
1	A	135	GLN	4
1	A	48	SER	4
1	A	261	LEU	4
1	A	24	SER	4
1	A	85	ASN	4
1	A	249	THR	4
1	A	12	GLN	4
1	A	212	ASN	4
1	A	138	ASN	3
1	A	62	HIS	3
1	A	218	THR	3
1	A	237	ASN	3
1	A	265	GLU	3
1	A	77	ILE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	HIS	3
1	A	153	ASN	3
1	A	87	GLU	3
1	A	184	SER	3
1	A	50	VAL	3
1	A	74	ASN	3
1	A	43	ILE	3
1	A	57	GLN	2
1	A	242	ASN	2
1	A	257	TYR	2
1	A	41	LEU	2
1	A	80	LEU	2
1	A	220	HIS	2
1	A	146	LEU	2
1	A	190	LEU	2
1	A	73	LEU	1
1	A	105	ILE	1
1	A	247	THR	1
1	A	199	VAL	1
1	A	102	VAL	1
1	A	17	HIS	1
1	A	31	LEU	1
1	A	79	VAL	1
1	A	251	LEU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided