



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:45 PM BST

PDB ID : 1WPI
Title : Solution NMR Structure of Protein YKR049C from *Saccharomyces cerevisiae*.
Ontario Centre for Structural Proteomics target YST0250_1_133; Northeast
Structural Genomics Consortium YTYst250
Authors : Jung, J.W.; Yee, A.; Arrowsmith, C.H.; Lee, W.; Northeast Structural Ge-
nomics Consortium (NESG)
Deposited on : 2004-09-03

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

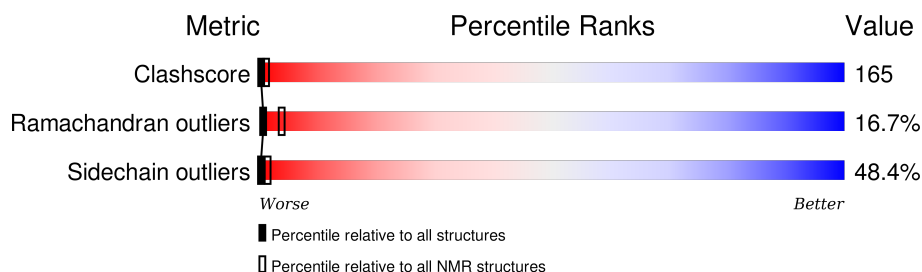
1 Overall quality at a glance

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	133	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:10-A:133 (124)	0.53	6

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

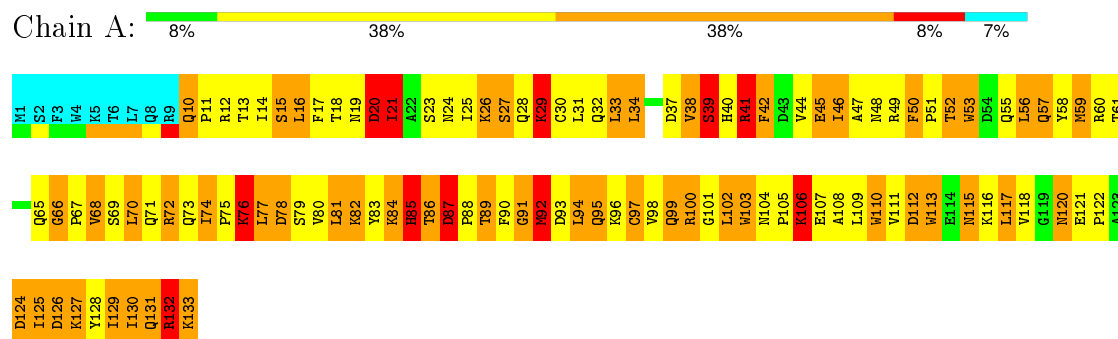
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2209 atoms, of which 1108 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	133	2209	702	1108	196	197	6	0

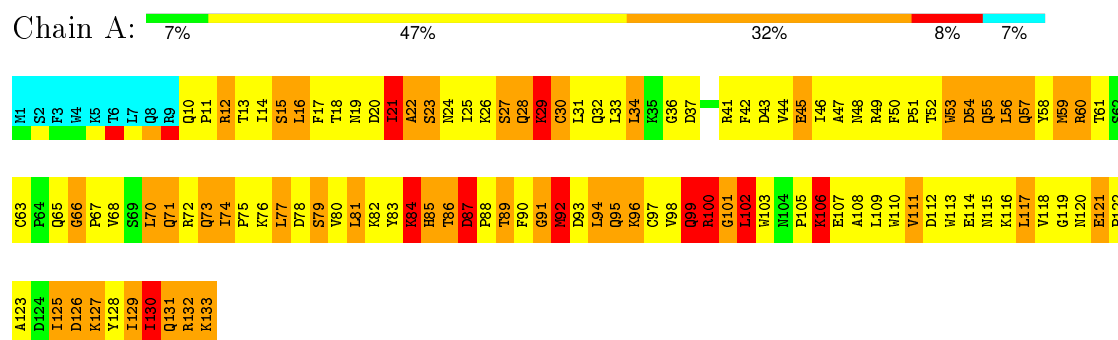
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



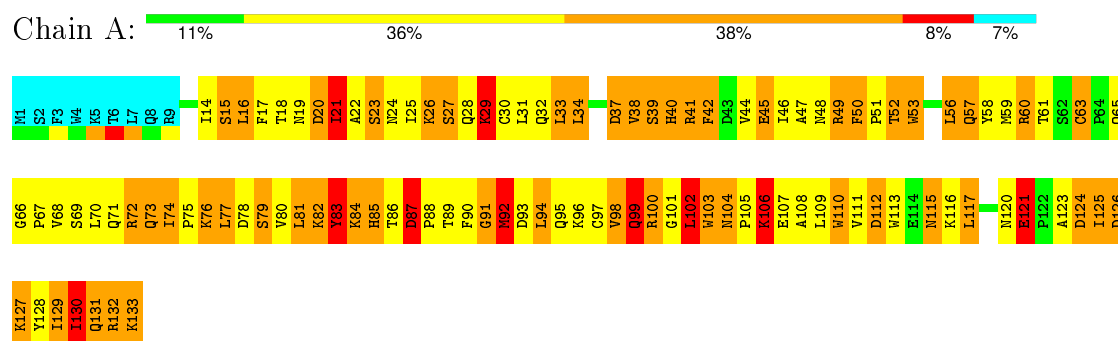
4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



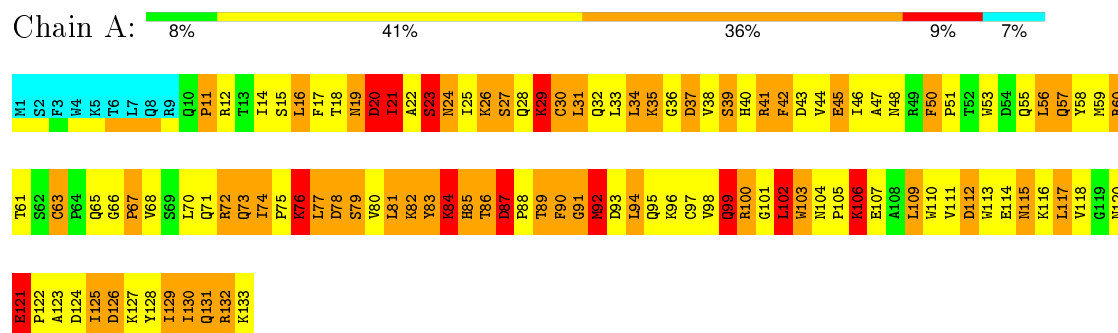
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



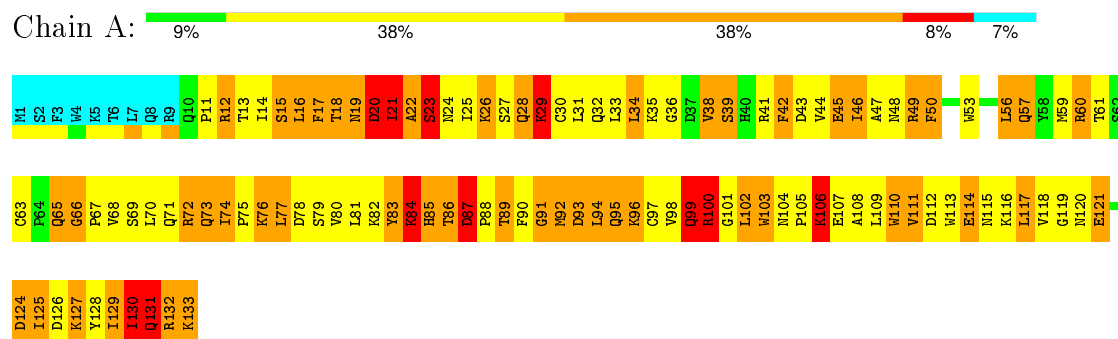
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



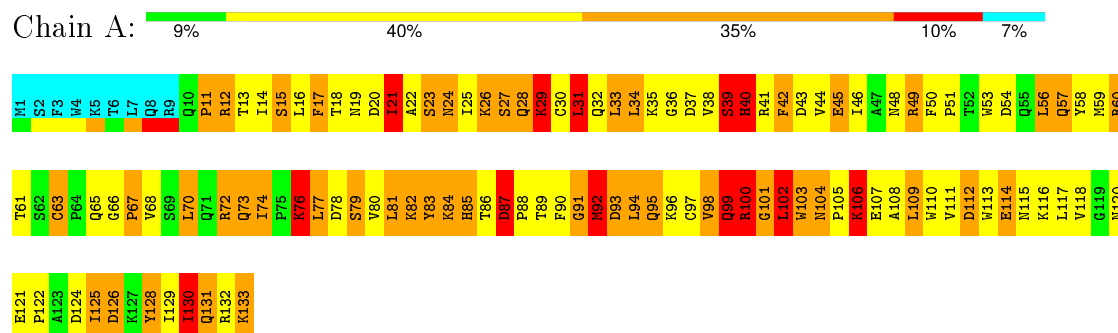
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



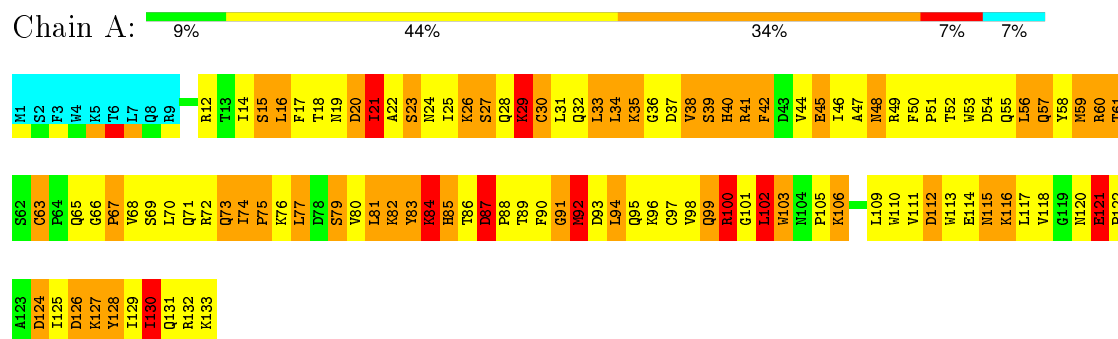
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



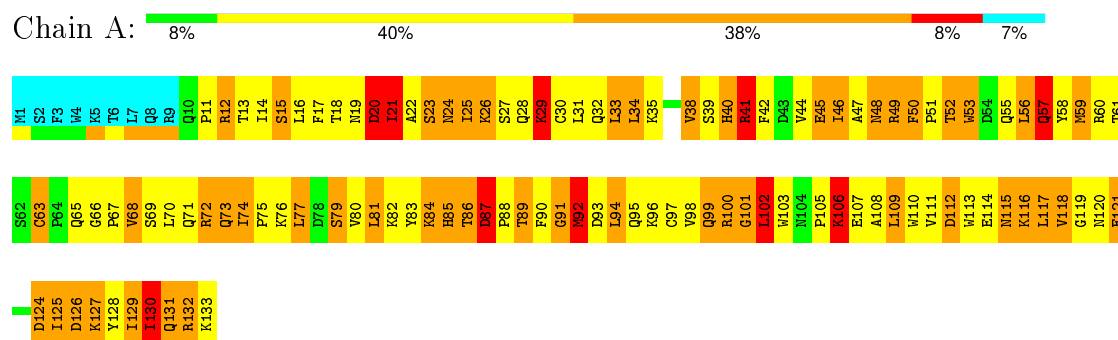
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



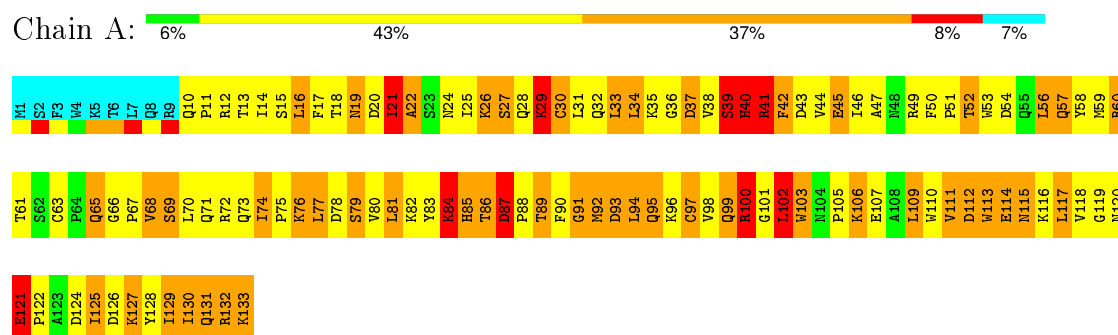
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



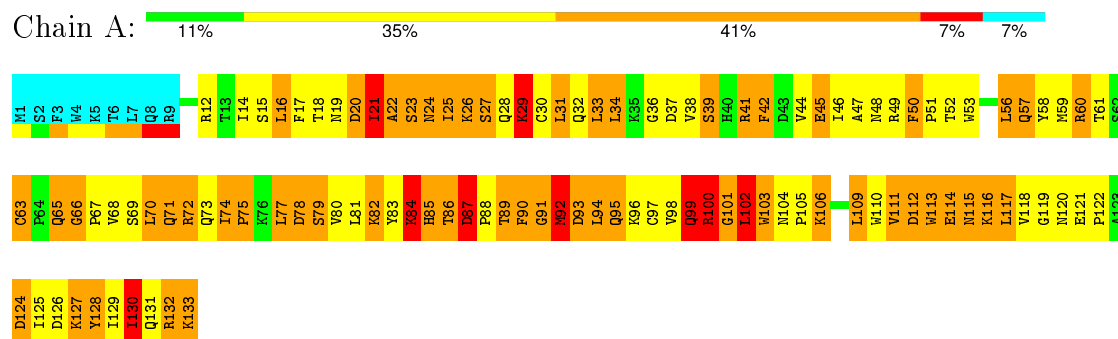
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



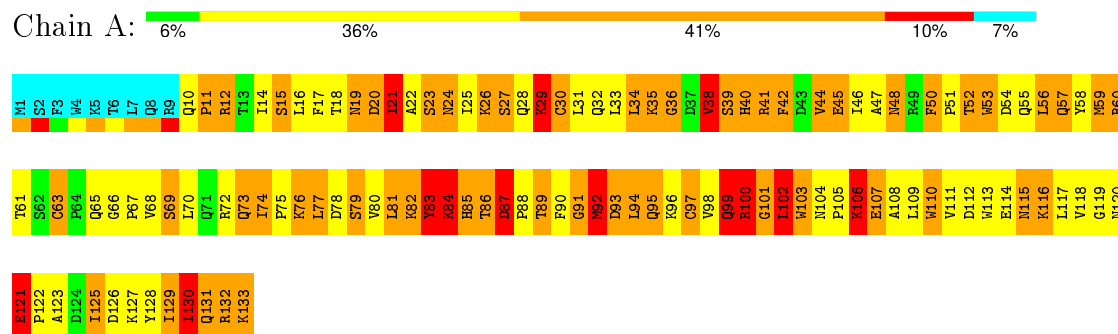
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



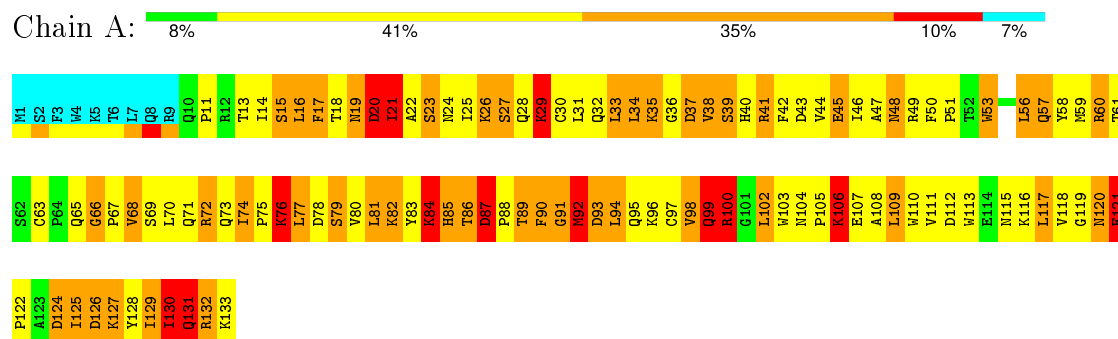
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



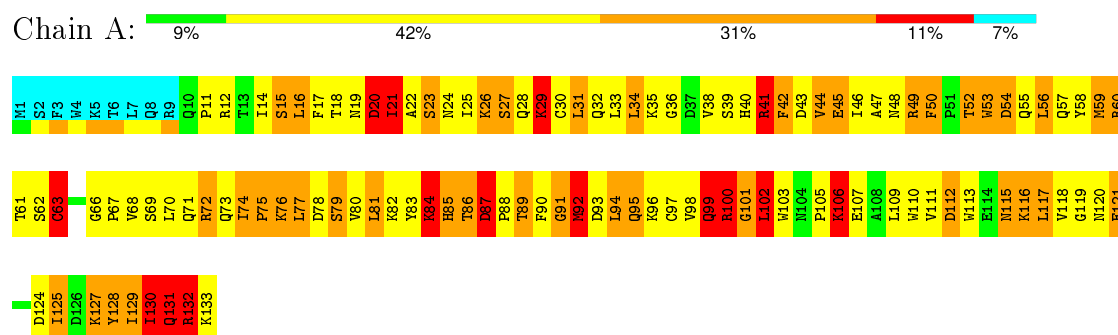
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



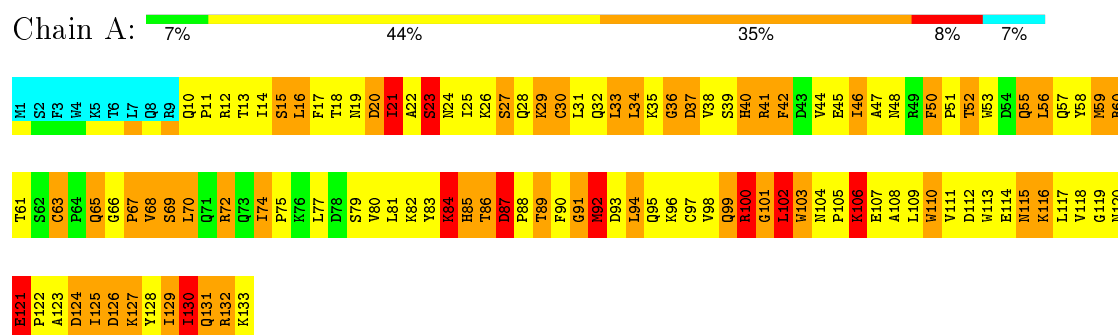
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



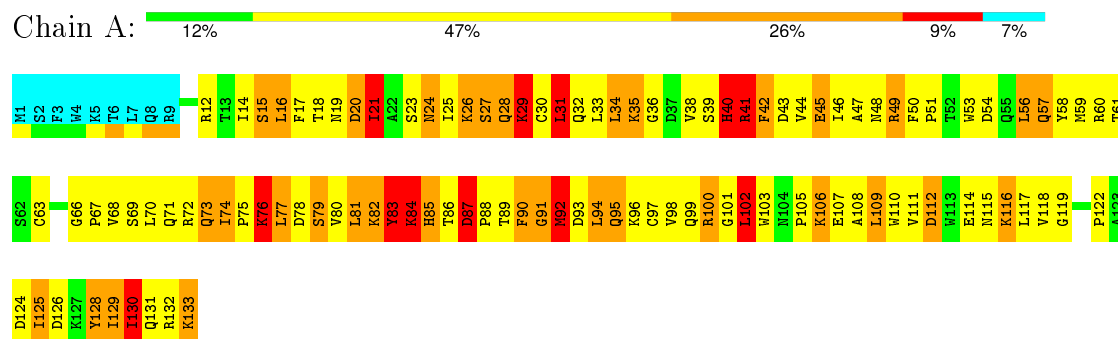
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



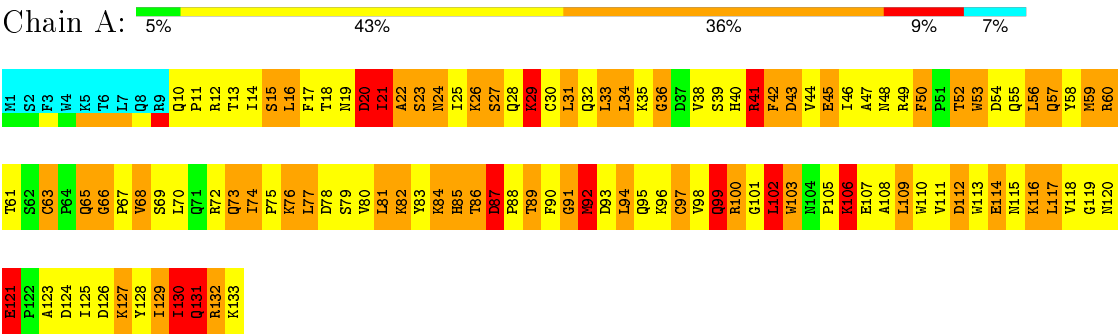
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Hypothetical 15.6 kDa protein in NAP1-TRK2 intergenic region



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics/CANDID method*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.6
CYANA	refinement	1.0.6

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.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1018	1023	1023	337±22
All	All	20360	20460	20460	6745

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 165.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:THR:O	1:A:87:ASP:O	1.16	1.63	7	20
1:A:87:ASP:HB3	1:A:88:PRO:CD	1.16	1.66	3	20
1:A:21:ILE:HD12	1:A:28:GLN:CG	1.12	1.74	9	1
1:A:87:ASP:CB	1:A:88:PRO:CD	1.11	2.27	15	20
1:A:87:ASP:HB3	1:A:88:PRO:HD2	1.11	1.15	7	15
1:A:21:ILE:HD11	1:A:25:ILE:O	1.10	1.46	12	19
1:A:117:LEU:HD23	1:A:128:TYR:CZ	1.10	1.81	8	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:94:LEU:HD12	1.09	1.81	8	10
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:CH2	1.08	1.83	5	5
1:A:90:PHE:CE1	1:A:98:VAL:HG23	1.07	1.83	17	8
1:A:85:HIS:CG	1:A:102:LEU:HD11	1.07	1.85	16	11
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG11	1.05	1.20	9	11
1:A:87:ASP:HB2	1:A:88:PRO:HD2	1.05	1.26	10	5
1:A:13:THR:HG21	1:A:113:TRP:CZ2	1.05	1.86	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:129:ILE:HD11	1.04	1.86	17	8
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CE1	1.04	1.88	14	5
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG21	1.04	1.22	18	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:44:VAL:HG22	1.04	1.86	1	10
1:A:56:LEU:HD22	1:A:70:LEU:HD12	1.02	1.22	19	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:102:LEU:HD11	1.02	1.88	17	8
1:A:70:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD22	1.01	1.32	5	2
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:CZ2	1.01	1.89	20	3
1:A:56:LEU:HD13	1:A:70:LEU:HD11	1.01	1.30	7	1
1:A:111:VAL:HG22	1:A:118:VAL:HG12	1.00	1.31	2	1
1:A:117:LEU:HD23	1:A:128:TYR:CE2	1.00	1.91	8	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:44:VAL:HG11	1.00	1.87	4	11
1:A:87:ASP:CG	1:A:88:PRO:HD3	0.99	1.77	3	15
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:GLN:N	0.99	1.72	16	1
1:A:56:LEU:O	1:A:56:LEU:HD22	0.98	1.57	17	2
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:N	0.98	1.72	8	4
1:A:16:LEU:HD21	1:A:125:ILE:HD11	0.98	1.35	11	3
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CZ	0.97	1.94	13	3
1:A:94:LEU:HD13	1:A:95:GLN:N	0.97	1.73	1	8
1:A:126:ASP:O	1:A:130:ILE:HG22	0.96	1.59	15	9
1:A:110:TRP:CH2	1:A:129:ILE:HD11	0.96	1.94	19	4
1:A:21:ILE:HD13	1:A:29:LYS:N	0.96	1.74	10	14
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:C	0.95	1.79	2	6
1:A:52:THR:O	1:A:56:LEU:HD22	0.95	1.61	11	2
1:A:29:LYS:NZ	1:A:46:ILE:HG23	0.95	1.76	14	4
1:A:110:TRP:CE2	1:A:129:ILE:HD11	0.94	1.97	7	7
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:CZ3	0.94	1.96	1	7
1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:HD23	0.94	1.76	15	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:HD11	0.94	1.97	2	2
1:A:87:ASP:HB2	1:A:88:PRO:CD	0.94	1.86	10	5
1:A:56:LEU:HD13	1:A:56:LEU:C	0.93	1.84	12	2
1:A:67:PRO:HA	1:A:70:LEU:HD12	0.93	1.41	5	8
1:A:56:LEU:HD22	1:A:56:LEU:O	0.93	1.63	5	6
1:A:80:VAL:HG23	1:A:86:THR:OG1	0.93	1.63	7	10
1:A:74:ILE:HG22	1:A:80:VAL:HG11	0.93	1.41	13	5
1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:HD13	0.93	1.78	12	3
1:A:50:PHE:CD1	1:A:94:LEU:HD13	0.93	1.97	8	1
1:A:129:ILE:O	1:A:130:ILE:O	0.93	1.87	7	17
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:O	0.92	1.64	19	6
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:HA	0.92	1.98	18	7
1:A:21:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HB3	0.92	1.40	14	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD22	0.91	1.86	17	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:18:THR:O	0.91	2.24	10	1
1:A:29:LYS:CE	1:A:108:ALA:HB2	0.91	1.95	12	4
1:A:42:PHE:CE2	1:A:44:VAL:HG22	0.91	2.01	6	7
1:A:30:CYS:SG	1:A:46:ILE:HG23	0.91	2.05	1	4
1:A:111:VAL:HG13	1:A:118:VAL:HG13	0.91	1.41	9	1
1:A:85:HIS:ND1	1:A:102:LEU:HD21	0.91	1.81	12	4
1:A:110:TRP:CD2	1:A:129:ILE:HD11	0.90	2.01	7	1
1:A:87:ASP:HB3	1:A:88:PRO:HD3	0.90	1.42	10	5
1:A:130:ILE:HD13	1:A:133:LYS:N	0.90	1.82	1	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:110:TRP:CD1	0.90	2.01	17	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:C	0.90	1.87	9	3
1:A:56:LEU:HD22	1:A:70:LEU:CD1	0.89	1.97	19	1
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:HD12	0.89	1.66	20	6
1:A:77:LEU:O	1:A:81:LEU:N	0.89	2.06	11	20
1:A:16:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD11	0.89	1.45	18	4
1:A:125:ILE:HG23	1:A:129:ILE:O	0.89	1.66	11	14
1:A:111:VAL:HG22	1:A:118:VAL:HG22	0.89	1.41	14	1
1:A:87:ASP:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.89	1.95	19	20
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:GLN:OE1	0.89	1.67	7	1
1:A:11:PRO:HB3	1:A:117:LEU:HD21	0.89	1.44	18	1
1:A:20:ASP:HA	1:A:25:ILE:HG23	0.89	1.41	20	16
1:A:21:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HB3	0.89	1.45	2	9
1:A:90:PHE:CE2	1:A:102:LEU:HD12	0.88	2.02	8	3
1:A:111:VAL:HG13	1:A:118:VAL:CG1	0.88	1.98	9	1
1:A:28:GLN:O	1:A:32:GLN:HB2	0.88	1.68	17	19
1:A:128:TYR:CD2	1:A:129:ILE:HG13	0.88	2.04	10	4
1:A:94:LEU:O	1:A:98:VAL:HG13	0.88	1.67	16	1
1:A:16:LEU:HD22	1:A:109:LEU:O	0.88	1.69	16	2
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:HD12	0.88	1.83	5	2
1:A:130:ILE:HG12	1:A:131:GLN:N	0.88	1.79	18	12
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:HG22	0.88	1.45	6	16
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CD1	0.88	2.04	6	3
1:A:29:LYS:CE	1:A:46:ILE:HG23	0.87	2.00	4	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:34:LEU:HD21	0.87	2.09	20	5
1:A:16:LEU:CD2	1:A:125:ILE:HD11	0.87	2.00	14	3
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:HD13	0.87	1.70	11	6
1:A:85:HIS:ND1	1:A:102:LEU:HD11	0.86	1.85	18	4
1:A:13:THR:HG21	1:A:113:TRP:CH2	0.86	2.05	9	1
1:A:72:ARG:CD	1:A:77:LEU:HD13	0.86	1.99	16	8
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:HD23	0.86	1.48	16	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:PRO:HB2	1:A:70:LEU:HD23	0.86	1.47	6	1
1:A:111:VAL:HG12	1:A:118:VAL:HG13	0.86	1.46	1	5
1:A:21:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HG3	0.86	1.45	9	1
1:A:28:GLN:O	1:A:32:GLN:CG	0.86	2.23	16	3
1:A:126:ASP:CA	1:A:130:ILE:HG22	0.86	2.01	6	12
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:CD2	0.85	2.00	14	1
1:A:16:LEU:HD22	1:A:110:TRP:CE3	0.85	2.06	5	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:109:LEU:O	0.85	1.69	14	3
1:A:56:LEU:HD12	1:A:70:LEU:CD1	0.85	2.01	4	1
1:A:88:PRO:C	1:A:92:MET:HE1	0.85	1.92	19	4
1:A:112:ASP:HB2	1:A:117:LEU:O	0.85	1.70	5	3
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD23	0.85	1.92	16	1
1:A:84:LYS:O	1:A:86:THR:N	0.85	2.10	18	20
1:A:21:ILE:HD13	1:A:28:GLN:CB	0.85	2.01	14	8
1:A:46:ILE:N	1:A:46:ILE:HD12	0.85	1.87	18	10
1:A:16:LEU:C	1:A:16:LEU:HD13	0.85	1.90	16	3
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:HD22	0.85	1.71	16	3
1:A:80:VAL:HA	1:A:86:THR:CB	0.85	2.01	19	20
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:CB	0.85	2.02	16	5
1:A:85:HIS:CD2	1:A:102:LEU:HD21	0.85	2.07	8	7
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:129:ILE:CD1	0.84	2.59	19	3
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:128:TYR:CE2	0.84	2.65	14	2
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HB3	0.84	1.47	15	2
1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:N	0.84	1.87	3	8
1:A:77:LEU:HD13	1:A:77:LEU:N	0.84	1.88	6	4
1:A:15:SER:O	1:A:111:VAL:HG22	0.84	1.73	8	6
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:117:LEU:HD11	0.84	2.07	6	2
1:A:72:ARG:HD2	1:A:77:LEU:HD13	0.84	1.48	5	6
1:A:103:TRP:O	1:A:105:PRO:HD3	0.84	1.73	19	18
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HB2	0.84	1.50	16	5
1:A:115:ASN:HD22	1:A:115:ASN:N	0.83	1.71	18	1
1:A:20:ASP:CA	1:A:25:ILE:HG23	0.83	2.03	14	15
1:A:14:ILE:HG22	1:A:16:LEU:CD2	0.83	2.02	9	4
1:A:16:LEU:HD21	1:A:30:CYS:SG	0.83	2.12	19	2
1:A:105:PRO:O	1:A:107:GLU:N	0.83	2.12	16	11
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:C	0.83	1.94	13	3
1:A:21:ILE:CD1	1:A:29:LYS:N	0.83	2.41	2	14
1:A:16:LEU:CG	1:A:125:ILE:HD11	0.83	2.03	14	1
1:A:85:HIS:CG	1:A:102:LEU:HD21	0.83	2.08	8	3
1:A:27:SER:O	1:A:31:LEU:HB2	0.83	1.74	13	20
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:N	0.83	1.88	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CD1	1:A:92:MET:O	0.82	2.32	19	8
1:A:29:LYS:NZ	1:A:108:ALA:HB2	0.82	1.89	5	3
1:A:128:TYR:CG	1:A:129:ILE:HG13	0.82	2.08	10	2
1:A:111:VAL:HG22	1:A:118:VAL:CG1	0.82	2.04	2	1
1:A:129:ILE:HD12	1:A:129:ILE:N	0.82	1.89	16	2
1:A:111:VAL:HG23	1:A:118:VAL:HG13	0.82	1.49	13	2
1:A:128:TYR:HB3	1:A:129:ILE:HD13	0.82	1.51	19	9
1:A:87:ASP:CG	1:A:88:PRO:CD	0.82	2.46	19	15
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:HD22	0.82	1.32	4	2
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CE2	0.82	2.68	12	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:109:LEU:HD21	0.82	2.10	10	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:HG13	0.82	1.51	1	3
1:A:58:TYR:CE2	1:A:113:TRP:CE2	0.82	2.68	12	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:112:ASP:CG	0.82	2.54	4	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:70:LEU:HD11	0.81	2.04	7	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:25:ILE:O	0.81	2.28	4	15
1:A:56:LEU:HD13	1:A:56:LEU:N	0.81	1.90	11	1
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CD1	0.81	2.33	18	5
1:A:17:PHE:CE1	1:A:49:ARG:O	0.81	2.33	10	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:108:ALA:HB2	0.81	1.52	12	1
1:A:19:ASN:O	1:A:20:ASP:O	0.81	1.97	20	16
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:HD23	0.81	1.53	14	1
1:A:18:THR:HG22	1:A:25:ILE:HG22	0.80	1.52	13	3
1:A:51:PRO:HB2	1:A:70:LEU:HD13	0.80	1.49	16	3
1:A:29:LYS:HE2	1:A:108:ALA:HB2	0.80	1.52	10	2
1:A:130:ILE:HD13	1:A:132:ARG:C	0.80	1.97	17	4
1:A:68:VAL:HG22	1:A:72:ARG:HD2	0.80	1.51	12	1
1:A:88:PRO:HA	1:A:92:MET:HE1	0.80	1.52	18	10
1:A:90:PHE:O	1:A:91:GLY:O	0.80	2.00	7	20
1:A:94:LEU:HD13	1:A:95:GLN:H	0.80	1.37	2	5
1:A:85:HIS:O	1:A:89:THR:HG22	0.80	1.77	12	14
1:A:129:ILE:HD12	1:A:129:ILE:H	0.80	1.34	16	4
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:O	0.79	2.35	2	4
1:A:56:LEU:CD1	1:A:70:LEU:HD23	0.79	2.07	13	3
1:A:88:PRO:C	1:A:92:MET:CE	0.79	2.51	13	16
1:A:21:ILE:HG22	1:A:22:ALA:N	0.79	1.93	13	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD22	0.79	1.55	8	6
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:HB2	0.79	1.55	12	6
1:A:21:ILE:HD11	1:A:25:ILE:C	0.78	1.98	10	12
1:A:50:PHE:CE1	1:A:94:LEU:HD13	0.78	2.13	8	1
1:A:128:TYR:CD2	1:A:129:ILE:CD1	0.78	2.66	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:THR:HG21	1:A:26:LYS:HA	0.78	1.52	19	7
1:A:16:LEU:HD21	1:A:125:ILE:CD1	0.78	2.08	11	3
1:A:106:LYS:O	1:A:106:LYS:HG2	0.78	1.78	2	3
1:A:116:LYS:CG	1:A:116:LYS:O	0.78	2.31	16	5
1:A:80:VAL:HG23	1:A:86:THR:CB	0.78	2.09	15	5
1:A:21:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HG2	0.78	1.56	9	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:25:ILE:HA	0.77	1.56	13	1
1:A:110:TRP:HZ2	1:A:129:ILE:HD11	0.77	1.34	16	4
1:A:91:GLY:O	1:A:93:ASP:N	0.77	2.17	10	15
1:A:99:GLN:O	1:A:100:ARG:CB	0.77	2.33	11	14
1:A:42:PHE:CE1	1:A:44:VAL:HG22	0.77	2.13	2	3
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:N	0.77	2.18	6	18
1:A:15:SER:HB3	1:A:111:VAL:HG12	0.77	1.57	16	3
1:A:106:LYS:HD3	1:A:106:LYS:N	0.77	1.93	18	2
1:A:16:LEU:HD11	1:A:110:TRP:CD1	0.77	2.15	17	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:125:ILE:HB	0.76	1.57	19	2
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD13	0.76	1.57	18	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:80:VAL:HG11	0.76	2.10	9	5
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:CB	0.76	2.33	6	16
1:A:102:LEU:CD1	1:A:103:TRP:CE2	0.76	2.67	8	1
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:HD3	0.76	2.00	9	9
1:A:88:PRO:O	1:A:92:MET:HE1	0.76	1.81	19	3
1:A:42:PHE:CZ	1:A:44:VAL:CG2	0.76	2.69	5	7
1:A:53:TRP:HA	1:A:56:LEU:HD12	0.76	1.57	20	4
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:HD12	0.76	2.00	20	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:42:PHE:CE1	0.76	2.68	15	1
1:A:14:ILE:HD11	1:A:133:LYS:HG2	0.76	1.54	8	1
1:A:123:ALA:HB1	1:A:127:LYS:HE3	0.76	1.55	8	1
1:A:106:LYS:HG2	1:A:106:LYS:O	0.76	1.79	15	3
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:HD12	0.76	1.40	7	1
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:CA	0.76	2.09	19	5
1:A:18:THR:CG2	1:A:25:ILE:HG22	0.76	2.11	11	8
1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CD1	0.76	2.49	12	1
1:A:124:ASP:O	1:A:128:TYR:CD2	0.76	2.39	11	2
1:A:129:ILE:HD13	1:A:129:ILE:N	0.76	1.96	2	5
1:A:125:ILE:HG23	1:A:130:ILE:O	0.76	1.81	7	3
1:A:117:LEU:HD21	1:A:129:ILE:CD1	0.76	2.11	5	1
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:HA	0.75	1.57	19	6
1:A:14:ILE:CG1	1:A:42:PHE:CE2	0.75	2.69	3	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HB3	0.75	1.58	13	1
1:A:17:PHE:CB	1:A:109:LEU:HD13	0.75	2.11	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:CYS:O	1:A:33:LEU:N	0.75	2.20	11	19
1:A:74:ILE:HD11	1:A:98:VAL:CG2	0.75	2.11	13	3
1:A:33:LEU:HD11	1:A:122:PRO:O	0.75	1.82	14	7
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CE2	0.75	2.17	4	3
1:A:34:LEU:CD2	1:A:34:LEU:N	0.75	2.50	15	1
1:A:16:LEU:HD22	1:A:30:CYS:SG	0.75	2.21	4	2
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:HG22	0.75	1.82	13	2
1:A:20:ASP:C	1:A:21:ILE:HG13	0.75	2.01	10	18
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:CE2	0.75	2.17	20	3
1:A:13:THR:O	1:A:115:ASN:ND2	0.75	2.19	12	3
1:A:11:PRO:HG2	1:A:129:ILE:HG21	0.75	1.58	17	4
1:A:112:ASP:OD2	1:A:117:LEU:N	0.75	2.19	17	3
1:A:51:PRO:C	1:A:56:LEU:HD21	0.75	2.02	2	2
1:A:21:ILE:HD13	1:A:28:GLN:C	0.74	2.02	15	10
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:N	0.74	2.20	11	15
1:A:70:LEU:HD13	1:A:70:LEU:N	0.74	1.97	18	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:125:ILE:CG1	0.74	2.70	19	4
1:A:94:LEU:CD2	1:A:98:VAL:CG2	0.74	2.65	1	6
1:A:126:ASP:O	1:A:130:ILE:CG2	0.74	2.34	15	6
1:A:90:PHE:CD2	1:A:94:LEU:HD12	0.74	2.18	20	1
1:A:22:ALA:C	1:A:28:GLN:OE1	0.74	2.25	9	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:44:VAL:HG21	0.74	2.08	18	5
1:A:59:MET:HB3	1:A:118:VAL:HG21	0.74	1.59	15	6
1:A:41:ARG:CG	1:A:132:ARG:O	0.74	2.36	12	2
1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASN:ND2	0.74	1.97	12	3
1:A:128:TYR:CE2	1:A:129:ILE:CG1	0.74	2.71	10	2
1:A:14:ILE:CG2	1:A:110:TRP:CH2	0.74	2.70	5	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:21:ILE:N	0.74	2.45	8	3
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:HB3	0.74	1.59	3	7
1:A:95:GLN:HA	1:A:98:VAL:HG22	0.74	1.58	5	2
1:A:27:SER:CA	1:A:31:LEU:HB2	0.73	2.13	19	20
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:CB	0.73	2.11	15	1
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:HB3	0.73	1.82	20	13
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD12	0.73	1.60	7	1
1:A:74:ILE:HG21	1:A:80:VAL:HG11	0.73	1.60	14	1
1:A:128:TYR:CD2	1:A:129:ILE:CG1	0.73	2.71	10	2
1:A:16:LEU:HD13	1:A:17:PHE:N	0.73	1.98	1	4
1:A:34:LEU:HD23	1:A:131:GLN:HA	0.73	1.60	3	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:PRO:HA	0.73	1.61	9	2
1:A:110:TRP:CH2	1:A:112:ASP:HB2	0.73	2.18	1	11
1:A:129:ILE:N	1:A:129:ILE:HD13	0.73	1.98	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:PHE:CD1	1:A:42:PHE:C	0.73	2.61	13	4
1:A:44:VAL:HG12	1:A:46:ILE:HD11	0.73	1.60	10	6
1:A:24:ASN:O	1:A:28:GLN:HB3	0.73	1.84	4	13
1:A:45:GLU:C	1:A:46:ILE:HD12	0.73	2.04	8	10
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:VAL:CG1	0.73	2.10	9	4
1:A:34:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG11	0.73	1.61	4	2
1:A:38:VAL:HG13	1:A:39:SER:N	0.73	1.98	9	1
1:A:27:SER:O	1:A:31:LEU:CB	0.72	2.37	4	4
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:PRO:HD2	0.72	1.59	6	4
1:A:130:ILE:CG1	1:A:131:GLN:N	0.72	2.51	3	9
1:A:74:ILE:HD11	1:A:90:PHE:CE1	0.72	2.19	9	3
1:A:21:ILE:HD11	1:A:29:LYS:HA	0.72	1.60	13	1
1:A:101:GLY:O	1:A:103:TRP:N	0.72	2.22	10	12
1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CD1	0.72	2.52	11	2
1:A:14:ILE:CG2	1:A:110:TRP:CZ3	0.72	2.72	6	6
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CG	0.72	2.78	15	4
1:A:74:ILE:O	1:A:77:LEU:HD23	0.72	1.83	14	8
1:A:128:TYR:CG	1:A:129:ILE:HD13	0.72	2.20	13	2
1:A:128:TYR:CB	1:A:129:ILE:HD13	0.72	2.15	2	7
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:C	0.72	2.28	18	13
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:71:GLN:NE2	0.72	2.58	12	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD22	0.72	1.98	4	1
1:A:90:PHE:HD1	1:A:94:LEU:HD12	0.72	1.44	7	4
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:HB2	0.72	1.84	17	1
1:A:128:TYR:CD1	1:A:129:ILE:HG13	0.72	2.19	14	2
1:A:30:CYS:HG	1:A:46:ILE:HG23	0.72	1.39	1	1
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:CG2	0.71	2.15	12	15
1:A:101:GLY:O	1:A:102:LEU:C	0.71	2.28	1	18
1:A:117:LEU:HD22	1:A:128:TYR:CE2	0.71	2.19	19	1
1:A:41:ARG:HB2	1:A:42:PHE:CD1	0.71	2.20	10	2
1:A:80:VAL:HG23	1:A:86:THR:HB	0.71	1.62	14	8
1:A:50:PHE:CD2	1:A:52:THR:CG2	0.71	2.74	18	10
1:A:33:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HB	0.71	1.61	16	3
1:A:130:ILE:C	1:A:132:ARG:H	0.71	1.88	17	5
1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:OD1	0.71	2.23	4	3
1:A:16:LEU:HD12	1:A:109:LEU:O	0.71	1.85	20	2
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:CA	0.71	2.73	10	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:42:PHE:CE1	0.71	2.73	10	2
1:A:90:PHE:CE1	1:A:94:LEU:HD12	0.71	2.20	11	4
1:A:106:LYS:O	1:A:106:LYS:CG	0.71	2.37	2	2
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:117:LEU:HD11	0.71	2.21	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HD23	1:A:109:LEU:CD2	0.71	2.13	5	1
1:A:29:LYS:HZ1	1:A:46:ILE:HG23	0.71	1.43	14	2
1:A:58:TYR:CE2	1:A:59:MET:SD	0.71	2.84	12	1
1:A:41:ARG:HG3	1:A:42:PHE:CE1	0.71	2.20	15	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:131:GLN:HG3	0.71	1.62	7	1
1:A:110:TRP:CD2	1:A:128:TYR:CD2	0.71	2.78	10	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:CB	0.71	2.16	9	9
1:A:90:PHE:CD1	1:A:97:CYS:HB3	0.71	2.20	7	8
1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:HD13	0.71	2.00	14	1
1:A:66:GLY:N	1:A:67:PRO:CD	0.70	2.54	18	9
1:A:132:ARG:CG	1:A:133:LYS:N	0.70	2.54	14	1
1:A:130:ILE:HD13	1:A:132:ARG:O	0.70	1.86	16	3
1:A:51:PRO:CB	1:A:70:LEU:HD23	0.70	2.16	6	1
1:A:24:ASN:HB3	1:A:27:SER:CB	0.70	2.16	6	17
1:A:130:ILE:O	1:A:132:ARG:N	0.70	2.24	17	6
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:HG3	0.70	2.05	19	5
1:A:21:ILE:CD1	1:A:28:GLN:HB3	0.70	2.16	15	6
1:A:117:LEU:HD23	1:A:128:TYR:CE1	0.70	2.20	8	1
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:C	0.70	2.07	5	1
1:A:37:ASP:O	1:A:38:VAL:HG23	0.70	1.85	14	2
1:A:98:VAL:HG13	1:A:105:PRO:HD2	0.70	1.63	4	1
1:A:59:MET:HG2	1:A:118:VAL:HG11	0.70	1.63	5	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:97:CYS:HB3	0.70	2.22	5	17
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD23	0.70	1.63	11	3
1:A:16:LEU:HD11	1:A:125:ILE:CD1	0.70	2.16	7	2
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:O	0.70	1.86	5	1
1:A:30:CYS:C	1:A:34:LEU:HD22	0.70	2.06	1	3
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:CB	0.70	2.16	5	9
1:A:19:ASN:OD1	1:A:109:LEU:HD21	0.70	1.87	20	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:131:GLN:CB	0.70	2.17	7	1
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:HG2	0.70	1.86	11	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:34:LEU:HD11	0.70	2.26	16	1
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:CB	0.70	2.39	2	11
1:A:14:ILE:HG23	1:A:112:ASP:OD1	0.70	1.87	14	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:97:CYS:SG	0.70	2.85	7	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:91:GLY:C	0.69	2.66	12	8
1:A:110:TRP:CH2	1:A:129:ILE:CD1	0.69	2.75	19	3
1:A:90:PHE:CE1	1:A:97:CYS:SG	0.69	2.85	12	3
1:A:42:PHE:CE2	1:A:44:VAL:CG2	0.69	2.75	6	1
1:A:14:ILE:HG22	1:A:16:LEU:HD21	0.69	1.63	9	2
1:A:27:SER:C	1:A:31:LEU:HB2	0.69	2.07	14	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ASP:CB	1:A:88:PRO:HD3	0.69	2.07	10	6
1:A:83:TYR:C	1:A:86:THR:CG2	0.69	2.60	8	9
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:HD12	0.69	1.64	2	5
1:A:42:PHE:CE1	1:A:131:GLN:O	0.69	2.45	17	3
1:A:88:PRO:O	1:A:92:MET:HE3	0.69	1.86	16	14
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:CB	0.69	2.16	8	7
1:A:80:VAL:HA	1:A:86:THR:HB	0.69	1.63	15	14
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:HB3	0.69	1.86	7	13
1:A:28:GLN:O	1:A:32:GLN:HG2	0.69	1.88	16	1
1:A:56:LEU:C	1:A:56:LEU:HD13	0.69	2.07	10	2
1:A:14:ILE:CG2	1:A:110:TRP:NE1	0.69	2.56	19	3
1:A:90:PHE:CE2	1:A:102:LEU:HD22	0.69	2.23	19	4
1:A:110:TRP:CH2	1:A:118:VAL:N	0.69	2.61	14	3
1:A:13:THR:O	1:A:112:ASP:OD1	0.69	2.10	5	4
1:A:50:PHE:CD2	1:A:92:MET:N	0.69	2.61	5	6
1:A:42:PHE:CD1	1:A:132:ARG:O	0.69	2.45	7	2
1:A:110:TRP:CE3	1:A:129:ILE:HD11	0.69	2.23	15	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:51:PRO:HD2	0.69	2.22	4	5
1:A:24:ASN:O	1:A:28:GLN:HG2	0.69	1.87	9	1
1:A:68:VAL:O	1:A:72:ARG:CG	0.69	2.40	8	18
1:A:16:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	0.69	1.64	18	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:90:PHE:CE2	0.69	2.76	14	9
1:A:117:LEU:CD2	1:A:128:TYR:CE2	0.69	2.73	8	1
1:A:106:LYS:CG	1:A:106:LYS:O	0.69	2.40	15	3
1:A:42:PHE:CE1	1:A:44:VAL:CG2	0.69	2.76	2	3
1:A:42:PHE:CZ	1:A:130:ILE:O	0.69	2.46	9	1
1:A:14:ILE:HD13	1:A:115:ASN:HD21	0.68	1.47	4	2
1:A:88:PRO:HA	1:A:92:MET:CE	0.68	2.18	12	11
1:A:14:ILE:O	1:A:45:GLU:HB2	0.68	1.88	16	17
1:A:76:LYS:HG3	1:A:103:TRP:CZ3	0.68	2.22	8	1
1:A:34:LEU:CD1	1:A:34:LEU:N	0.68	2.56	1	2
1:A:21:ILE:CD1	1:A:25:ILE:HA	0.68	2.18	16	5
1:A:59:MET:CG	1:A:118:VAL:HG11	0.68	2.18	5	2
1:A:125:ILE:O	1:A:129:ILE:N	0.68	2.26	1	18
1:A:21:ILE:HD13	1:A:28:GLN:CG	0.68	2.18	14	2
1:A:25:ILE:HG22	1:A:26:LYS:HD3	0.68	1.63	18	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:52:THR:OG1	0.68	2.42	12	7
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:C	0.68	2.08	7	3
1:A:130:ILE:HD12	1:A:132:ARG:H	0.68	1.49	5	5
1:A:42:PHE:CD2	1:A:133:LYS:O	0.68	2.47	19	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:94:LEU:HD12	0.68	2.19	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:HD11	1:A:110:TRP:HD1	0.68	1.44	17	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD13	0.68	1.66	10	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HA	0.68	1.66	5	4
1:A:110:TRP:CD1	1:A:124:ASP:HB3	0.68	2.24	14	6
1:A:20:ASP:C	1:A:21:ILE:CG1	0.68	2.62	11	16
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:CD2	0.68	2.62	17	7
1:A:90:PHE:CE2	1:A:94:LEU:HD12	0.68	2.24	20	1
1:A:96:LYS:O	1:A:99:GLN:CG	0.68	2.42	10	16
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:C	0.67	2.62	7	4
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:129:ILE:CG1	0.67	2.77	19	3
1:A:110:TRP:CE3	1:A:112:ASP:OD1	0.67	2.47	13	1
1:A:95:GLN:CB	1:A:99:GLN:HG3	0.67	2.19	13	1
1:A:110:TRP:CE2	1:A:128:TYR:CE2	0.67	2.82	12	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:30:CYS:SG	0.67	2.29	7	2
1:A:56:LEU:CD2	1:A:56:LEU:N	0.67	2.56	16	1
1:A:111:VAL:CG2	1:A:118:VAL:HG12	0.67	2.15	2	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:34:LEU:CD2	0.67	2.82	20	2
1:A:117:LEU:HD11	1:A:129:ILE:CD1	0.67	2.19	9	1
1:A:23:SER:C	1:A:28:GLN:OE1	0.67	2.32	9	1
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:CD1	0.67	2.52	16	3
1:A:110:TRP:CD1	1:A:125:ILE:HG12	0.67	2.24	19	4
1:A:68:VAL:HG22	1:A:72:ARG:CD	0.67	2.19	12	1
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:HD13	0.67	2.03	7	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CD2	0.67	2.23	5	1
1:A:91:GLY:O	1:A:92:MET:C	0.67	2.33	15	20
1:A:53:TRP:HA	1:A:56:LEU:HD22	0.67	1.66	6	6
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:HA	0.67	1.65	12	9
1:A:21:ILE:HD13	1:A:24:ASN:O	0.67	1.88	8	1
1:A:11:PRO:CB	1:A:115:ASN:ND2	0.67	2.58	17	3
1:A:116:LYS:O	1:A:116:LYS:CG	0.67	2.41	18	2
1:A:88:PRO:C	1:A:92:MET:HE3	0.67	2.09	13	6
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:HB2	0.67	2.24	8	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:O	0.67	1.89	11	2
1:A:94:LEU:CD2	1:A:94:LEU:C	0.67	2.57	2	1
1:A:21:ILE:HA	1:A:106:LYS:HA	0.67	1.66	14	8
1:A:112:ASP:CB	1:A:117:LEU:O	0.67	2.42	12	4
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:HD13	0.67	1.67	8	3
1:A:16:LEU:C	1:A:16:LEU:CD1	0.67	2.63	16	1
1:A:45:GLU:C	1:A:46:ILE:HD13	0.67	2.09	20	2
1:A:36:GLY:N	1:A:131:GLN:OE1	0.67	2.28	4	3
1:A:74:ILE:HD11	1:A:90:PHE:CZ	0.67	2.25	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ARG:C	1:A:94:LEU:HD12	0.67	2.10	17	8
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:MET:HE3	0.67	2.20	7	5
1:A:130:ILE:HG12	1:A:131:GLN:NE2	0.67	2.05	10	2
1:A:111:VAL:CG2	1:A:118:VAL:HG13	0.67	2.19	13	2
1:A:21:ILE:HD12	1:A:25:ILE:O	0.67	1.89	13	1
1:A:129:ILE:N	1:A:129:ILE:HD12	0.67	2.05	7	2
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:HG3	0.67	1.65	10	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:102:LEU:HD11	0.67	2.23	14	2
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:PRO:CD	0.67	2.20	6	3
1:A:102:LEU:HD13	1:A:103:TRP:CD2	0.67	2.24	8	1
1:A:14:ILE:HD13	1:A:115:ASN:ND2	0.67	2.05	5	2
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:O	0.66	1.90	14	6
1:A:83:TYR:C	1:A:86:THR:HG23	0.66	2.10	6	8
1:A:42:PHE:CE2	1:A:131:GLN:C	0.66	2.68	12	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:132:ARG:N	0.66	2.04	5	4
1:A:94:LEU:CD1	1:A:98:VAL:CG2	0.66	2.73	20	2
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:VAL:CG2	0.66	2.20	20	4
1:A:110:TRP:CE3	1:A:111:VAL:N	0.66	2.63	5	8
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:HE3	0.66	2.11	7	2
1:A:111:VAL:HB	1:A:118:VAL:HG22	0.66	1.66	1	2
1:A:115:ASN:ND2	1:A:115:ASN:N	0.66	2.42	18	2
1:A:90:PHE:CD2	1:A:94:LEU:CD1	0.66	2.78	20	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:112:ASP:CG	0.66	2.68	4	2
1:A:50:PHE:CD2	1:A:91:GLY:HA2	0.66	2.25	11	5
1:A:34:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG21	0.66	1.68	6	1
1:A:42:PHE:CD1	1:A:132:ARG:HA	0.66	2.26	18	4
1:A:130:ILE:HD13	1:A:132:ARG:NE	0.66	2.05	3	1
1:A:11:PRO:CB	1:A:115:ASN:OD1	0.66	2.44	13	2
1:A:85:HIS:O	1:A:89:THR:CG2	0.66	2.44	15	18
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:CD1	0.66	2.44	8	11
1:A:40:HIS:O	1:A:41:ARG:C	0.66	2.34	19	2
1:A:20:ASP:CB	1:A:105:PRO:HD2	0.66	2.21	11	4
1:A:41:ARG:HB3	1:A:42:PHE:CE1	0.66	2.26	10	2
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:HD13	0.66	2.11	12	4
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:N	0.66	2.06	16	1
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:HD23	0.66	1.68	4	2
1:A:124:ASP:O	1:A:128:TYR:CE2	0.66	2.49	11	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:GLN:CG	0.66	2.21	4	12
1:A:74:ILE:CD1	1:A:90:PHE:CZ	0.66	2.79	5	14
1:A:21:ILE:CG2	1:A:22:ALA:N	0.66	2.58	13	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:C	0.66	2.12	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ASP:C	1:A:130:ILE:HG22	0.66	2.11	15	6
1:A:24:ASN:O	1:A:28:GLN:N	0.66	2.29	19	17
1:A:117:LEU:CD1	1:A:128:TYR:CZ	0.66	2.75	13	3
1:A:111:VAL:HG22	1:A:118:VAL:CG2	0.66	2.21	14	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:97:CYS:CB	0.66	2.79	8	8
1:A:29:LYS:HZ3	1:A:46:ILE:HG23	0.66	1.49	8	2
1:A:111:VAL:CG1	1:A:118:VAL:HG13	0.66	2.21	9	3
1:A:16:LEU:CD2	1:A:110:TRP:CE3	0.66	2.79	5	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:29:LYS:CA	0.65	2.20	13	1
1:A:83:TYR:CA	1:A:86:THR:CG2	0.65	2.74	1	9
1:A:72:ARG:CD	1:A:77:LEU:HD21	0.65	2.21	15	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:103:TRP:CE2	0.65	2.26	8	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:70:LEU:CD2	0.65	2.21	6	3
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:HD13	0.65	1.67	11	1
1:A:52:THR:C	1:A:56:LEU:HD22	0.65	2.11	11	2
1:A:85:HIS:CD2	1:A:102:LEU:CD2	0.65	2.79	8	2
1:A:16:LEU:HD21	1:A:30:CYS:HB2	0.65	1.69	20	2
1:A:20:ASP:HA	1:A:25:ILE:HD12	0.65	1.67	11	1
1:A:71:GLN:HG3	1:A:81:LEU:HD23	0.65	1.68	1	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:92:MET:O	0.65	2.49	9	2
1:A:44:VAL:HG12	1:A:46:ILE:CD1	0.65	2.21	14	4
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:CG	0.65	2.44	10	13
1:A:50:PHE:HB2	1:A:90:PHE:O	0.65	1.91	8	5
1:A:30:CYS:SG	1:A:46:ILE:HD12	0.65	2.31	15	1
1:A:42:PHE:CD2	1:A:133:LYS:C	0.65	2.70	11	2
1:A:56:LEU:HB2	1:A:70:LEU:HD11	0.65	1.68	19	1
1:A:106:LYS:N	1:A:106:LYS:HD3	0.65	2.05	10	5
1:A:16:LEU:HD21	1:A:29:LYS:HE2	0.65	1.68	3	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:56:LEU:C	0.65	2.60	12	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:81:LEU:HD22	0.65	2.22	18	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:52:THR:OG1	0.65	2.49	12	9
1:A:14:ILE:CG1	1:A:42:PHE:CD1	0.65	2.79	12	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HD12	0.65	2.26	8	3
1:A:38:VAL:CG2	1:A:130:ILE:HD13	0.65	2.22	7	1
1:A:16:LEU:CD1	1:A:44:VAL:HG23	0.65	2.22	18	1
1:A:84:LYS:C	1:A:86:THR:N	0.65	2.49	5	20
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:CB	0.65	2.45	13	14
1:A:46:ILE:N	1:A:46:ILE:CD1	0.65	2.59	19	8
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:CB	0.65	2.21	14	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:102:LEU:HD21	0.65	2.26	12	4
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HD3	0.65	1.69	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:HD13	1:A:125:ILE:HG21	0.65	1.67	13	4
1:A:22:ALA:O	1:A:23:SER:C	0.65	2.35	12	14
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:N	0.65	2.29	12	1
1:A:29:LYS:HD2	1:A:108:ALA:HB2	0.65	1.68	6	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:128:TYR:CG	0.65	2.27	6	1
1:A:124:ASP:HB3	1:A:128:TYR:CE2	0.65	2.27	20	1
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:HB2	0.65	1.67	8	17
1:A:16:LEU:HG	1:A:125:ILE:HD11	0.65	1.69	14	1
1:A:110:TRP:CE3	1:A:128:TYR:CD2	0.65	2.85	10	2
1:A:16:LEU:CD1	1:A:16:LEU:C	0.65	2.65	3	2
1:A:99:GLN:O	1:A:100:ARG:HB2	0.64	1.92	5	12
1:A:90:PHE:O	1:A:94:LEU:CB	0.64	2.45	13	4
1:A:117:LEU:CD1	1:A:128:TYR:CE1	0.64	2.76	14	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:124:ASP:OD2	0.64	2.50	13	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:70:LEU:CD2	0.64	2.75	1	3
1:A:56:LEU:CD2	1:A:56:LEU:C	0.64	2.64	9	2
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:C	0.64	2.71	10	1
1:A:13:THR:N	1:A:115:ASN:HD21	0.64	1.90	18	1
1:A:66:GLY:O	1:A:70:LEU:CD2	0.64	2.45	8	5
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:128:TYR:CD2	0.64	2.85	14	2
1:A:85:HIS:CE1	1:A:90:PHE:CD2	0.64	2.86	5	1
1:A:77:LEU:C	1:A:81:LEU:HB3	0.64	2.13	7	12
1:A:94:LEU:CD2	1:A:98:VAL:HG21	0.64	2.22	1	4
1:A:59:MET:SD	1:A:118:VAL:HG11	0.64	2.31	12	2
1:A:94:LEU:HD23	1:A:98:VAL:CG2	0.64	2.23	4	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:118:VAL:C	0.64	2.71	12	3
1:A:17:PHE:CZ	1:A:111:VAL:HG21	0.64	2.27	6	3
1:A:109:LEU:HD12	1:A:120:ASN:ND2	0.64	2.06	4	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:109:LEU:CD2	0.64	2.23	18	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:119:GLY:O	0.64	2.50	15	6
1:A:42:PHE:CD1	1:A:42:PHE:N	0.64	2.65	10	2
1:A:70:LEU:CD1	1:A:109:LEU:HD12	0.64	2.23	9	1
1:A:88:PRO:O	1:A:92:MET:CE	0.64	2.45	19	16
1:A:42:PHE:CG	1:A:133:LYS:C	0.64	2.71	11	2
1:A:13:THR:CG2	1:A:113:TRP:CZ2	0.64	2.81	9	2
1:A:94:LEU:O	1:A:94:LEU:HD22	0.64	1.92	2	1
1:A:18:THR:CG2	1:A:25:ILE:O	0.64	2.46	2	5
1:A:21:ILE:CD1	1:A:28:GLN:HG3	0.64	2.22	9	1
1:A:70:LEU:CD2	1:A:109:LEU:HD13	0.64	2.23	10	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:C	0.64	2.71	19	3
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HG3	0.64	1.69	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:HIS:CE1	1:A:90:PHE:CE2	0.64	2.86	5	1
1:A:112:ASP:N	1:A:117:LEU:O	0.63	2.31	12	14
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:HE2	0.63	2.13	2	1
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:HG12	0.63	2.22	9	1
1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASN:CG	0.63	2.14	12	3
1:A:34:LEU:CA	1:A:131:GLN:HB3	0.63	2.24	15	6
1:A:124:ASP:OD1	1:A:128:TYR:CD1	0.63	2.51	19	1
1:A:130:ILE:HD13	1:A:133:LYS:H	0.63	1.53	14	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:109:LEU:N	0.63	2.62	3	2
1:A:11:PRO:HG3	1:A:128:TYR:CZ	0.63	2.29	4	3
1:A:112:ASP:OD1	1:A:115:ASN:CG	0.63	2.36	17	1
1:A:65:GLN:O	1:A:66:GLY:C	0.63	2.36	14	10
1:A:63:CYS:SG	1:A:118:VAL:HG12	0.63	2.34	3	1
1:A:46:ILE:CD1	1:A:46:ILE:N	0.63	2.61	10	10
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:CG	0.63	2.51	1	6
1:A:50:PHE:CE2	1:A:52:THR:HG21	0.63	2.28	20	6
1:A:106:LYS:CD	1:A:106:LYS:N	0.63	2.61	3	5
1:A:38:VAL:O	1:A:39:SER:CB	0.63	2.46	4	6
1:A:22:ALA:HB3	1:A:28:GLN:HG2	0.63	1.71	15	4
1:A:113:TRP:CE3	1:A:114:GLU:OE1	0.63	2.51	20	1
1:A:24:ASN:CB	1:A:27:SER:CB	0.63	2.77	3	18
1:A:14:ILE:HG22	1:A:16:LEU:HD23	0.63	1.70	9	4
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:HG3	0.63	2.23	3	2
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:CG	0.63	2.24	15	2
1:A:23:SER:N	1:A:28:GLN:OE1	0.63	2.32	9	1
1:A:110:TRP:C	1:A:110:TRP:CE3	0.63	2.72	18	4
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:HD12	0.63	1.93	18	16
1:A:130:ILE:C	1:A:132:ARG:N	0.63	2.52	17	8
1:A:90:PHE:HE2	1:A:102:LEU:HD22	0.63	1.51	19	3
1:A:17:PHE:CD1	1:A:49:ARG:CB	0.63	2.82	14	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:CG	0.63	2.23	10	11
1:A:58:TYR:CG	1:A:59:MET:N	0.63	2.67	12	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HB2	0.63	1.68	8	1
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:CD1	0.63	2.62	6	2
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:CB	0.63	2.46	1	5
1:A:74:ILE:O	1:A:77:LEU:CD1	0.63	2.47	13	5
1:A:42:PHE:CE2	1:A:43:ASP:O	0.63	2.52	3	1
1:A:19:ASN:N	1:A:29:LYS:HZ1	0.63	1.92	1	2
1:A:38:VAL:HG23	1:A:130:ILE:HD13	0.63	1.70	7	1
1:A:111:VAL:HG23	1:A:118:VAL:CG1	0.63	2.24	13	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:111:VAL:O	0.63	2.52	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:LEU:HD13	1:A:70:LEU:CD1	0.62	2.18	7	1
1:A:77:LEU:O	1:A:81:LEU:HB3	0.62	1.94	18	17
1:A:74:ILE:HD11	1:A:98:VAL:HG23	0.62	1.71	2	2
1:A:59:MET:HE2	1:A:112:ASP:O	0.62	1.93	2	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:115:ASN:ND2	0.62	2.53	5	2
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:OD1	0.62	2.33	9	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CD2	0.62	2.87	18	4
1:A:94:LEU:HD13	1:A:94:LEU:C	0.62	2.14	1	2
1:A:73:GLN:OE1	1:A:109:LEU:HD23	0.62	1.94	20	2
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:HG2	0.62	2.24	15	1
1:A:78:ASP:O	1:A:82:LYS:CG	0.62	2.48	14	1
1:A:27:SER:O	1:A:32:GLN:N	0.62	2.32	8	2
1:A:130:ILE:HD13	1:A:133:LYS:CA	0.62	2.24	1	1
1:A:15:SER:CB	1:A:111:VAL:O	0.62	2.47	17	6
1:A:31:LEU:CD2	1:A:46:ILE:HG21	0.62	2.24	15	3
1:A:42:PHE:CD1	1:A:132:ARG:C	0.62	2.73	7	2
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:129:ILE:HG12	0.62	2.29	8	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:24:ASN:O	0.62	2.47	15	3
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:HA	0.62	2.29	10	3
1:A:17:PHE:HD2	1:A:109:LEU:HD11	0.62	1.54	10	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:131:GLN:O	0.62	2.53	18	5
1:A:16:LEU:CD2	1:A:30:CYS:SG	0.62	2.88	15	4
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:118:VAL:O	0.62	2.53	12	2
1:A:125:ILE:O	1:A:129:ILE:C	0.62	2.38	8	10
1:A:50:PHE:CG	1:A:50:PHE:O	0.62	2.53	15	4
1:A:21:ILE:HD13	1:A:29:LYS:CA	0.62	2.24	2	7
1:A:102:LEU:CD1	1:A:103:TRP:CZ2	0.62	2.82	8	1
1:A:42:PHE:CG	1:A:133:LYS:HG3	0.62	2.30	8	1
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:HG23	0.62	2.25	6	2
1:A:41:ARG:HG2	1:A:42:PHE:CE1	0.62	2.28	15	1
1:A:75:PRO:CG	1:A:103:TRP:HB3	0.62	2.25	12	6
1:A:59:MET:SD	1:A:59:MET:N	0.62	2.71	17	5
1:A:112:ASP:OD2	1:A:116:LYS:N	0.62	2.33	8	3
1:A:111:VAL:HG12	1:A:118:VAL:HB	0.62	1.72	11	1
1:A:128:TYR:HB2	1:A:129:ILE:HD13	0.62	1.72	20	2
1:A:130:ILE:HG12	1:A:131:GLN:HG2	0.62	1.71	15	3
1:A:125:ILE:CG2	1:A:130:ILE:O	0.62	2.47	7	1
1:A:25:ILE:HG21	1:A:99:GLN:CB	0.62	2.24	19	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:102:LEU:HD13	0.62	2.30	13	3
1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLN:N	0.62	2.10	12	2
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:HG	0.62	2.30	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:MET:HG2	1:A:93:ASP:H	0.62	1.55	16	16
1:A:115:ASN:O	1:A:116:LYS:CG	0.62	2.47	9	16
1:A:117:LEU:CB	1:A:128:TYR:CE2	0.62	2.83	8	3
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:HD12	0.62	1.94	6	2
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CG	0.62	2.51	7	3
1:A:50:PHE:CB	1:A:94:LEU:HB3	0.62	2.24	13	10
1:A:110:TRP:CE2	1:A:117:LEU:HD11	0.62	2.30	6	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:119:GLY:CA	0.62	2.83	9	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:124:ASP:CG	0.62	2.73	4	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:81:LEU:HD13	0.61	1.70	18	1
1:A:83:TYR:O	1:A:84:LYS:O	0.61	2.18	5	16
1:A:128:TYR:CD2	1:A:129:ILE:HD13	0.61	2.30	13	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:44:VAL:HB	0.61	2.30	13	1
1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	0.61	1.54	9	5
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:HB3	0.61	2.24	8	2
1:A:90:PHE:CE2	1:A:94:LEU:CD1	0.61	2.82	20	1
1:A:29:LYS:HG3	1:A:30:CYS:N	0.61	2.10	18	3
1:A:112:ASP:OD1	1:A:114:GLU:N	0.61	2.31	8	3
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:VAL:HG22	0.61	1.70	5	5
1:A:50:PHE:CG	1:A:90:PHE:O	0.61	2.53	11	5
1:A:106:LYS:N	1:A:106:LYS:CD	0.61	2.63	1	4
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:112:ASP:HB2	0.61	2.31	9	4
1:A:30:CYS:C	1:A:34:LEU:HD12	0.61	2.15	3	11
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG3	0.61	2.15	13	1
1:A:90:PHE:CD1	1:A:97:CYS:HB2	0.61	2.30	3	5
1:A:73:GLN:HG3	1:A:109:LEU:HD22	0.61	1.72	12	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HD22	0.61	2.31	18	5
1:A:50:PHE:N	1:A:94:LEU:HD12	0.61	2.09	4	6
1:A:129:ILE:CD1	1:A:129:ILE:O	0.61	2.49	11	2
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:O	0.61	2.49	17	4
1:A:116:LYS:HG2	1:A:116:LYS:O	0.61	1.94	16	4
1:A:51:PRO:O	1:A:70:LEU:HD13	0.61	1.95	7	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:70:LEU:HD11	0.61	2.25	10	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:CE	0.61	2.48	16	7
1:A:24:ASN:CB	1:A:27:SER:HB3	0.61	2.26	11	13
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:112:ASP:HB2	0.61	2.30	1	3
1:A:70:LEU:HD23	1:A:120:ASN:OD1	0.61	1.95	20	1
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:CD	0.61	2.48	17	2
1:A:80:VAL:CG2	1:A:86:THR:OG1	0.61	2.47	11	8
1:A:21:ILE:HD12	1:A:28:GLN:CB	0.61	2.25	2	7
1:A:32:GLN:CD	1:A:33:LEU:N	0.61	2.54	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:O	0.61	1.95	9	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:81:LEU:HD22	0.61	1.73	18	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:112:ASP:CB	0.61	2.84	7	8
1:A:113:TRP:O	1:A:113:TRP:CE3	0.61	2.54	6	4
1:A:85:HIS:CD2	1:A:102:LEU:CD1	0.61	2.82	16	2
1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CE3	0.61	2.69	15	3
1:A:94:LEU:HD22	1:A:98:VAL:HB	0.61	1.70	1	4
1:A:50:PHE:CD1	1:A:94:LEU:HB3	0.61	2.31	4	2
1:A:98:VAL:O	1:A:100:ARG:N	0.61	2.34	7	17
1:A:58:TYR:CE2	1:A:113:TRP:CZ2	0.61	2.89	12	1
1:A:129:ILE:O	1:A:129:ILE:CD1	0.61	2.49	8	2
1:A:65:GLN:CA	1:A:68:VAL:HG22	0.61	2.26	4	4
1:A:86:THR:C	1:A:87:ASP:O	0.60	2.40	5	19
1:A:128:TYR:CE2	1:A:129:ILE:HG13	0.60	2.28	10	2
1:A:96:LYS:O	1:A:99:GLN:CD	0.60	2.40	12	2
1:A:130:ILE:CD1	1:A:133:LYS:HB2	0.60	2.25	10	3
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HG3	0.60	1.72	15	2
1:A:56:LEU:HD13	1:A:60:ARG:HB3	0.60	1.72	15	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:117:LEU:O	0.60	2.53	7	1
1:A:11:PRO:HA	1:A:115:ASN:CB	0.60	2.25	18	5
1:A:80:VAL:HA	1:A:86:THR:OG1	0.60	1.94	19	7
1:A:21:ILE:HG22	1:A:22:ALA:H	0.60	1.56	13	1
1:A:34:LEU:O	1:A:131:GLN:NE2	0.60	2.33	7	2
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:N	0.60	2.34	6	5
1:A:117:LEU:HD22	1:A:128:TYR:CD2	0.60	2.30	19	2
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:129:ILE:HG13	0.60	2.31	19	2
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:HG13	0.60	2.27	13	2
1:A:59:MET:HE1	1:A:111:VAL:HG13	0.60	1.74	13	2
1:A:115:ASN:H	1:A:115:ASN:ND2	0.60	1.94	12	1
1:A:110:TRP:NE1	1:A:128:TYR:CD2	0.60	2.69	2	3
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:HG3	0.60	1.95	10	1
1:A:59:MET:CG	1:A:118:VAL:HG21	0.60	2.26	13	3
1:A:129:ILE:HD13	1:A:129:ILE:H	0.60	1.54	9	1
1:A:74:ILE:HG21	1:A:80:VAL:CG1	0.60	2.26	14	1
1:A:132:ARG:O	1:A:133:LYS:C	0.60	2.40	17	5
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:112:ASP:OD1	0.60	2.54	4	1
1:A:99:GLN:O	1:A:100:ARG:HB3	0.60	1.97	14	4
1:A:100:ARG:CG	1:A:100:ARG:O	0.60	2.49	16	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:50:PHE:O	0.60	2.55	13	1
1:A:59:MET:HE3	1:A:112:ASP:O	0.60	1.96	17	2
1:A:42:PHE:CD2	1:A:43:ASP:O	0.60	2.55	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:CA	0.60	2.49	7	5
1:A:19:ASN:C	1:A:98:VAL:HG11	0.60	2.16	4	2
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:HA	0.60	2.32	15	1
1:A:56:LEU:C	1:A:56:LEU:CD2	0.60	2.64	4	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:O	0.60	2.55	7	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:109:LEU:CD2	0.60	2.70	9	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:42:PHE:CD1	0.60	2.84	10	1
1:A:17:PHE:HA	1:A:47:ALA:O	0.60	1.96	14	18
1:A:18:THR:HB	1:A:48:ASN:CB	0.60	2.26	1	9
1:A:29:LYS:HE3	1:A:46:ILE:HG23	0.60	1.74	4	1
1:A:17:PHE:CZ	1:A:94:LEU:HD22	0.60	2.32	10	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:52:THR:HG23	0.60	2.32	5	5
1:A:33:LEU:HD22	1:A:122:PRO:CB	0.60	2.27	19	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD21	0.60	1.95	17	3
1:A:50:PHE:CB	1:A:91:GLY:O	0.60	2.49	13	7
1:A:50:PHE:CG	1:A:91:GLY:O	0.60	2.54	13	3
1:A:92:MET:N	1:A:92:MET:SD	0.60	2.75	8	12
1:A:15:SER:CB	1:A:111:VAL:HG12	0.60	2.26	16	4
1:A:21:ILE:HG21	1:A:29:LYS:NZ	0.60	2.12	12	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:92:MET:O	0.60	2.55	20	4
1:A:11:PRO:CA	1:A:115:ASN:OD1	0.60	2.49	13	2
1:A:14:ILE:HG13	1:A:42:PHE:CD2	0.60	2.31	11	9
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:HD2	0.60	1.74	11	3
1:A:51:PRO:C	1:A:56:LEU:CD2	0.60	2.70	11	1
1:A:123:ALA:HB1	1:A:127:LYS:HE2	0.60	1.74	20	1
1:A:74:ILE:HG22	1:A:80:VAL:CG1	0.60	2.22	15	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HG	0.60	2.32	2	2
1:A:29:LYS:CE	1:A:108:ALA:HB1	0.60	2.26	18	2
1:A:80:VAL:CG2	1:A:86:THR:HB	0.60	2.27	12	9
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:VAL:HG12	0.60	1.73	7	2
1:A:28:GLN:HA	1:A:32:GLN:CG	0.59	2.27	1	19
1:A:113:TRP:O	1:A:116:LYS:N	0.59	2.24	12	2
1:A:68:VAL:O	1:A:72:ARG:HB2	0.59	1.97	4	6
1:A:117:LEU:CD2	1:A:128:TYR:CZ	0.59	2.74	8	1
1:A:65:GLN:CA	1:A:68:VAL:HG12	0.59	2.27	7	2
1:A:14:ILE:CG2	1:A:110:TRP:CE2	0.59	2.84	20	3
1:A:130:ILE:HD12	1:A:131:GLN:H	0.59	1.55	7	2
1:A:85:HIS:HB2	1:A:102:LEU:HD11	0.59	1.72	5	1
1:A:88:PRO:HA	1:A:92:MET:HE3	0.59	1.74	12	1
1:A:129:ILE:HD12	1:A:129:ILE:O	0.59	1.96	11	2
1:A:79:SER:CB	1:A:85:HIS:CD2	0.59	2.84	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:CD1	0.59	2.26	8	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:29:LYS:NZ	0.59	2.11	10	1
1:A:125:ILE:HG22	1:A:130:ILE:HA	0.59	1.74	14	2
1:A:17:PHE:CD1	1:A:49:ARG:HB2	0.59	2.32	14	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ASN:HB3	0.59	1.74	17	1
1:A:11:PRO:CB	1:A:117:LEU:HD21	0.59	2.24	18	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:29:LYS:CA	0.59	2.81	13	3
1:A:92:MET:HG2	1:A:93:ASP:N	0.59	2.13	13	6
1:A:11:PRO:HA	1:A:115:ASN:HB3	0.59	1.75	17	6
1:A:46:ILE:H	1:A:46:ILE:HD12	0.59	1.52	18	1
1:A:51:PRO:HG3	1:A:109:LEU:HD23	0.59	1.74	13	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:128:TYR:CE2	0.59	2.76	20	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:93:ASP:O	0.59	2.20	2	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:115:ASN:ND2	0.59	2.35	5	2
1:A:110:TRP:CD2	1:A:128:TYR:HD2	0.59	2.14	10	1
1:A:51:PRO:HG3	1:A:109:LEU:HD11	0.59	1.75	19	1
1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:N	0.59	2.12	13	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:94:LEU:CD1	0.59	2.83	8	1
1:A:110:TRP:CD1	1:A:128:TYR:CD2	0.59	2.90	11	1
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:CG	0.59	2.49	10	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:128:TYR:CG	0.59	2.56	19	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:C	0.59	2.70	6	3
1:A:76:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CZ	0.59	2.32	20	1
1:A:84:LYS:O	1:A:87:ASP:N	0.59	2.28	17	11
1:A:42:PHE:CG	1:A:133:LYS:O	0.59	2.56	19	2
1:A:42:PHE:C	1:A:42:PHE:CD1	0.59	2.74	9	4
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:ND2	0.59	2.51	15	1
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:CG	0.59	2.26	10	2
1:A:94:LEU:HD21	1:A:98:VAL:HG21	0.58	1.75	14	3
1:A:59:MET:CB	1:A:118:VAL:HG21	0.58	2.28	13	4
1:A:56:LEU:HD13	1:A:56:LEU:H	0.58	1.57	14	2
1:A:130:ILE:O	1:A:133:LYS:HB3	0.58	1.98	15	1
1:A:12:ARG:N	1:A:115:ASN:OD1	0.58	2.36	13	4
1:A:17:PHE:CD2	1:A:109:LEU:HD12	0.58	2.33	19	2
1:A:45:GLU:CD	1:A:45:GLU:C	0.58	2.62	19	1
1:A:17:PHE:N	1:A:17:PHE:CD1	0.58	2.70	3	4
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:CG1	0.58	2.51	3	1
1:A:58:TYR:CE2	1:A:113:TRP:CD2	0.58	2.91	12	1
1:A:84:LYS:C	1:A:86:THR:H	0.58	2.02	5	13
1:A:65:GLN:O	1:A:69:SER:CB	0.58	2.51	5	3
1:A:126:ASP:O	1:A:130:ILE:HG23	0.58	1.98	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ILE:O	1:A:45:GLU:CB	0.58	2.52	9	5
1:A:91:GLY:O	1:A:92:MET:O	0.58	2.21	4	3
1:A:14:ILE:HG22	1:A:16:LEU:HD12	0.58	1.75	11	1
1:A:124:ASP:CB	1:A:128:TYR:CE2	0.58	2.86	20	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:HD2	0.58	1.98	7	3
1:A:16:LEU:HD23	1:A:109:LEU:O	0.58	1.98	2	2
1:A:84:LYS:O	1:A:85:HIS:C	0.58	2.42	17	20
1:A:14:ILE:O	1:A:45:GLU:HB3	0.58	1.98	6	2
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD1	0.58	2.69	13	3
1:A:45:GLU:CG	1:A:45:GLU:O	0.58	2.51	20	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:73:GLN:OE1	0.58	2.34	9	2
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:117:LEU:HG	0.58	2.34	9	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:68:VAL:HG11	0.58	2.28	10	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:117:LEU:O	0.58	2.42	12	3
1:A:71:GLN:OE1	1:A:71:GLN:CA	0.58	2.51	14	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:125:ILE:N	0.58	2.37	11	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:81:LEU:CB	0.58	2.29	18	1
1:A:20:ASP:O	1:A:21:ILE:HG13	0.58	1.99	13	2
1:A:37:ASP:CB	1:A:131:GLN:NE2	0.58	2.65	8	1
1:A:31:LEU:O	1:A:35:LYS:HB2	0.58	1.99	4	4
1:A:130:ILE:HD12	1:A:133:LYS:N	0.58	2.13	2	1
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:67:PRO:HB2	0.58	2.34	5	1
1:A:59:MET:HE1	1:A:113:TRP:CG	0.58	2.34	14	1
1:A:41:ARG:HG3	1:A:42:PHE:CD1	0.58	2.34	15	1
1:A:80:VAL:HB	1:A:85:HIS:CE1	0.58	2.33	5	1
1:A:37:ASP:H	1:A:131:GLN:NE2	0.58	1.97	18	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:90:PHE:CE1	0.58	2.87	13	2
1:A:132:ARG:O	1:A:133:LYS:O	0.58	2.21	7	2
1:A:11:PRO:HB3	1:A:115:ASN:ND2	0.58	2.13	17	2
1:A:41:ARG:HB2	1:A:42:PHE:CE1	0.58	2.34	10	1
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD13	0.58	1.58	13	2
1:A:128:TYR:CG	1:A:129:ILE:CD1	0.58	2.87	1	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HD13	0.58	2.34	4	2
1:A:17:PHE:CE1	1:A:49:ARG:CB	0.58	2.87	14	1
1:A:18:THR:HA	1:A:29:LYS:HG3	0.58	1.75	5	4
1:A:68:VAL:HG12	1:A:72:ARG:HD3	0.58	1.76	14	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:128:TYR:CE2	0.58	2.57	4	1
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:CB	0.57	2.29	9	8
1:A:94:LEU:HD13	1:A:95:GLN:HG3	0.57	1.73	19	2
1:A:75:PRO:HB2	1:A:103:TRP:CE3	0.57	2.33	11	2
1:A:94:LEU:CD2	1:A:98:VAL:HB	0.57	2.29	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:HZ3	0.57	1.59	9	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:HB2	0.57	2.34	10	1
1:A:83:TYR:C	1:A:86:THR:HG22	0.57	2.20	11	5
1:A:15:SER:O	1:A:111:VAL:O	0.57	2.23	20	9
1:A:33:LEU:HD13	1:A:125:ILE:CG2	0.57	2.28	13	2
1:A:40:HIS:O	1:A:41:ARG:CB	0.57	2.52	16	3
1:A:75:PRO:CG	1:A:103:TRP:CB	0.57	2.82	13	5
1:A:14:ILE:HG13	1:A:42:PHE:CE2	0.57	2.33	3	6
1:A:112:ASP:CB	1:A:128:TYR:OH	0.57	2.53	14	2
1:A:129:ILE:O	1:A:130:ILE:C	0.57	2.43	7	3
1:A:90:PHE:CD1	1:A:94:LEU:CD1	0.57	2.84	11	2
1:A:44:VAL:HG23	1:A:132:ARG:HH21	0.57	1.59	9	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:131:GLN:OE1	0.57	2.53	9	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:112:ASP:OD1	0.57	2.57	13	1
1:A:17:PHE:HB3	1:A:109:LEU:HD13	0.57	1.76	1	2
1:A:19:ASN:ND2	1:A:109:LEU:CD2	0.57	2.67	9	1
1:A:65:GLN:HG2	1:A:68:VAL:HG11	0.57	1.75	10	1
1:A:42:PHE:CD1	1:A:42:PHE:O	0.57	2.58	5	4
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:CE	0.57	2.73	7	5
1:A:24:ASN:CB	1:A:27:SER:HB2	0.57	2.29	20	13
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:CD1	0.57	2.30	20	2
1:A:117:LEU:HD21	1:A:129:ILE:HD12	0.57	1.76	5	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:GLN:HG3	0.57	1.77	14	9
1:A:24:ASN:O	1:A:28:GLN:CB	0.57	2.53	16	8
1:A:24:ASN:CB	1:A:27:SER:OG	0.57	2.52	14	9
1:A:90:PHE:HE2	1:A:102:LEU:HD12	0.57	1.60	11	2
1:A:11:PRO:CB	1:A:115:ASN:CG	0.57	2.73	17	2
1:A:29:LYS:HZ2	1:A:108:ALA:HB2	0.57	1.59	19	2
1:A:77:LEU:CA	1:A:81:LEU:HB3	0.57	2.30	7	7
1:A:50:PHE:CB	1:A:90:PHE:O	0.57	2.52	8	2
1:A:19:ASN:H	1:A:29:LYS:CE	0.57	2.13	6	1
1:A:24:ASN:N	1:A:28:GLN:OE1	0.57	2.37	9	1
1:A:110:TRP:CE2	1:A:128:TYR:CD2	0.57	2.92	10	2
1:A:96:LYS:O	1:A:99:GLN:HG2	0.57	1.99	7	11
1:A:106:LYS:C	1:A:106:LYS:HE2	0.57	2.20	20	3
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CD1	0.57	2.92	15	1
1:A:36:GLY:CA	1:A:131:GLN:OE1	0.57	2.53	4	1
1:A:70:LEU:CD1	1:A:109:LEU:CD1	0.57	2.82	9	1
1:A:51:PRO:HD3	1:A:94:LEU:HD22	0.57	1.76	7	5
1:A:70:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HD13	0.57	1.76	20	2
1:A:74:ILE:HD13	1:A:90:PHE:CE2	0.57	2.35	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LYS:HG2	1:A:27:SER:N	0.57	2.14	16	1
1:A:18:THR:CG2	1:A:25:ILE:CG2	0.57	2.83	6	2
1:A:14:ILE:HD12	1:A:110:TRP:CH2	0.57	2.34	1	1
1:A:111:VAL:CB	1:A:118:VAL:HG22	0.57	2.30	1	1
1:A:76:LYS:O	1:A:79:SER:CB	0.57	2.53	3	4
1:A:45:GLU:O	1:A:46:ILE:HD13	0.57	2.00	15	1
1:A:41:ARG:CD	1:A:41:ARG:O	0.57	2.53	17	1
1:A:11:PRO:HB2	1:A:115:ASN:OD1	0.56	2.00	18	1
1:A:17:PHE:O	1:A:29:LYS:NZ	0.56	2.37	18	3
1:A:110:TRP:NE1	1:A:124:ASP:CB	0.56	2.68	13	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:109:LEU:HD22	0.56	2.00	13	1
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:CD1	0.56	2.66	13	2
1:A:25:ILE:O	1:A:29:LYS:HB2	0.56	2.00	8	2
1:A:45:GLU:OE1	1:A:46:ILE:N	0.56	2.38	6	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:NE	0.56	2.15	2	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:118:VAL:CA	0.56	2.88	18	2
1:A:50:PHE:CE1	1:A:90:PHE:HB3	0.56	2.35	16	4
1:A:76:LYS:CD	1:A:85:HIS:CD2	0.56	2.88	16	1
1:A:77:LEU:CG	1:A:81:LEU:HD22	0.56	2.30	18	1
1:A:18:THR:HB	1:A:48:ASN:CA	0.56	2.30	16	7
1:A:30:CYS:C	1:A:34:LEU:CD1	0.56	2.74	7	16
1:A:28:GLN:O	1:A:32:GLN:HG3	0.56	1.99	19	3
1:A:18:THR:HG22	1:A:25:ILE:CG2	0.56	2.27	13	1
1:A:84:LYS:N	1:A:86:THR:HG22	0.56	2.15	15	9
1:A:11:PRO:HB3	1:A:115:ASN:HB3	0.56	1.76	4	3
1:A:14:ILE:HG13	1:A:42:PHE:CD1	0.56	2.35	12	1
1:A:105:PRO:C	1:A:107:GLU:N	0.56	2.58	15	8
1:A:72:ARG:CA	1:A:77:LEU:HD22	0.56	2.29	8	2
1:A:11:PRO:HG3	1:A:128:TYR:CE2	0.56	2.36	8	1
1:A:94:LEU:HD22	1:A:95:GLN:N	0.56	2.14	4	2
1:A:115:ASN:N	1:A:115:ASN:OD1	0.56	2.39	4	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:97:CYS:SG	0.56	2.93	7	1
1:A:111:VAL:CG1	1:A:118:VAL:CG1	0.56	2.78	9	1
1:A:92:MET:SD	1:A:92:MET:N	0.56	2.78	18	3
1:A:24:ASN:CG	1:A:27:SER:OG	0.56	2.44	20	4
1:A:18:THR:HG23	1:A:25:ILE:O	0.56	2.00	11	7
1:A:34:LEU:HD12	1:A:131:GLN:NE2	0.56	2.15	12	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:115:ASN:N	0.56	2.33	17	1
1:A:106:LYS:O	1:A:106:LYS:CE	0.56	2.53	10	1
1:A:96:LYS:C	1:A:99:GLN:HG2	0.56	2.21	1	10
1:A:50:PHE:HB2	1:A:94:LEU:CB	0.56	2.30	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:PRO:O	1:A:71:GLN:N	0.56	2.33	16	4
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ASN:CB	0.56	2.31	17	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:CD2	0.56	2.58	18	2
1:A:11:PRO:O	1:A:133:LYS:CE	0.56	2.54	8	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:C	0.56	2.74	9	3
1:A:29:LYS:HG3	1:A:30:CYS:SG	0.56	2.41	1	1
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:VAL:HG23	0.56	1.78	10	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HD21	0.56	1.78	6	2
1:A:16:LEU:HD23	1:A:46:ILE:HD12	0.56	1.75	20	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:110:TRP:CB	0.56	2.83	18	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:103:TRP:HE1	0.56	1.61	8	1
1:A:28:GLN:O	1:A:29:LYS:O	0.56	2.24	8	2
1:A:84:LYS:CE	1:A:85:HIS:CE1	0.56	2.88	6	3
1:A:110:TRP:O	1:A:119:GLY:O	0.56	2.24	12	10
1:A:113:TRP:C	1:A:115:ASN:H	0.56	2.03	13	4
1:A:50:PHE:CE2	1:A:52:THR:CG2	0.56	2.89	20	5
1:A:75:PRO:CB	1:A:103:TRP:HB3	0.56	2.31	2	3
1:A:24:ASN:HB3	1:A:27:SER:HB3	0.56	1.77	14	7
1:A:73:GLN:HG2	1:A:109:LEU:HD11	0.56	1.78	6	1
1:A:115:ASN:O	1:A:116:LYS:CD	0.56	2.54	11	2
1:A:33:LEU:CD1	1:A:33:LEU:C	0.56	2.75	20	1
1:A:59:MET:CE	1:A:118:VAL:CG1	0.56	2.83	2	1
1:A:66:GLY:O	1:A:70:LEU:HD22	0.56	2.01	15	3
1:A:84:LYS:CE	1:A:85:HIS:CD2	0.56	2.89	1	2
1:A:20:ASP:OD1	1:A:21:ILE:N	0.56	2.36	13	9
1:A:110:TRP:CD1	1:A:124:ASP:CB	0.56	2.89	14	3
1:A:68:VAL:O	1:A:72:ARG:CB	0.56	2.53	4	8
1:A:29:LYS:CE	1:A:29:LYS:HA	0.56	2.22	12	2
1:A:130:ILE:CD1	1:A:133:LYS:N	0.56	2.69	2	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:CB	0.56	2.54	17	1
1:A:106:LYS:C	1:A:106:LYS:CE	0.56	2.74	10	1
1:A:66:GLY:N	1:A:67:PRO:HD2	0.55	2.15	18	5
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:MET:HE1	0.55	2.30	18	5
1:A:129:ILE:HB	1:A:133:LYS:C	0.55	2.21	14	3
1:A:100:ARG:CD	1:A:100:ARG:O	0.55	2.54	16	1
1:A:32:GLN:C	1:A:32:GLN:CD	0.55	2.65	16	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:125:ILE:HG13	0.55	1.76	5	2
1:A:110:TRP:CD2	1:A:110:TRP:O	0.55	2.59	18	1
1:A:20:ASP:HA	1:A:25:ILE:CG2	0.55	2.28	18	9
1:A:112:ASP:CB	1:A:115:ASN:HB2	0.55	2.30	12	4
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:CA	0.55	2.85	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ILE:HG12	1:A:42:PHE:CD1	0.55	2.36	12	1
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:CB	0.55	2.31	9	4
1:A:59:MET:CE	1:A:112:ASP:O	0.55	2.54	2	5
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:HE3	0.55	2.01	16	1
1:A:29:LYS:HD3	1:A:29:LYS:C	0.55	2.22	16	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD12	0.55	2.22	6	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:CD	0.55	2.32	1	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:72:ARG:HG3	0.55	1.77	1	2
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:N	0.55	2.16	19	1
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:CD	0.55	2.30	11	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:92:MET:N	0.55	2.75	5	3
1:A:34:LEU:HD13	1:A:34:LEU:H	0.55	1.57	16	1
1:A:112:ASP:H	1:A:118:VAL:HG12	0.55	1.62	5	1
1:A:68:VAL:HA	1:A:71:GLN:CG	0.55	2.32	7	6
1:A:80:VAL:CA	1:A:86:THR:HB	0.55	2.32	8	12
1:A:42:PHE:O	1:A:42:PHE:CD1	0.55	2.59	20	3
1:A:79:SER:O	1:A:84:LYS:HB2	0.55	2.01	14	4
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:VAL:CG2	0.55	2.31	16	2
1:A:132:ARG:CD	1:A:132:ARG:O	0.55	2.54	20	2
1:A:24:ASN:HB2	1:A:27:SER:CB	0.55	2.31	11	3
1:A:72:ARG:HD3	1:A:77:LEU:HD13	0.55	1.78	1	1
1:A:34:LEU:C	1:A:36:GLY:H	0.55	2.04	1	8
1:A:25:ILE:HG21	1:A:99:GLN:HG2	0.55	1.78	19	1
1:A:110:TRP:CE3	1:A:128:TYR:CE2	0.55	2.94	10	2
1:A:44:VAL:CG2	1:A:132:ARG:O	0.55	2.55	8	1
1:A:18:THR:HG21	1:A:25:ILE:HG22	0.55	1.78	6	3
1:A:110:TRP:NE1	1:A:128:TYR:CE2	0.55	2.75	2	1
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:HG3	0.55	2.00	9	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:133:LYS:HA	0.55	2.35	10	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:72:ARG:CD	0.55	2.31	14	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:94:LEU:HB3	0.55	1.78	10	6
1:A:125:ILE:CD1	1:A:133:LYS:HE2	0.55	2.32	15	1
1:A:20:ASP:O	1:A:106:LYS:HA	0.55	2.01	18	8
1:A:110:TRP:CH2	1:A:118:VAL:C	0.55	2.80	12	2
1:A:83:TYR:HA	1:A:86:THR:CG2	0.55	2.32	11	15
1:A:34:LEU:HB3	1:A:131:GLN:HB3	0.55	1.77	3	5
1:A:16:LEU:HD12	1:A:30:CYS:SG	0.55	2.42	1	3
1:A:16:LEU:CD2	1:A:110:TRP:CD1	0.55	2.84	17	1
1:A:48:ASN:CB	1:A:95:GLN:OE1	0.55	2.55	17	1
1:A:79:SER:HB3	1:A:85:HIS:CD2	0.55	2.37	5	1
1:A:125:ILE:HG22	1:A:126:ASP:N	0.55	2.17	1	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:GLN:O	1:A:58:TYR:CD2	0.55	2.60	5	4
1:A:19:ASN:C	1:A:98:VAL:CG1	0.55	2.75	13	2
1:A:50:PHE:HD2	1:A:52:THR:HG23	0.55	1.62	13	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD21	0.55	1.76	3	1
1:A:106:LYS:HE3	1:A:106:LYS:C	0.55	2.22	12	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:117:LEU:CD1	0.55	2.90	9	2
1:A:79:SER:CA	1:A:84:LYS:HB3	0.55	2.31	2	7
1:A:116:LYS:O	1:A:116:LYS:HG2	0.55	2.01	19	3
1:A:90:PHE:CD2	1:A:94:LEU:HB2	0.55	2.37	16	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:28:GLN:CB	0.55	2.84	15	2
1:A:17:PHE:CE1	1:A:94:LEU:CD2	0.55	2.90	10	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:112:ASP:OD2	0.55	2.54	9	4
1:A:16:LEU:HD12	1:A:109:LEU:C	0.55	2.21	20	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:128:TYR:CD2	0.55	2.89	5	1
1:A:72:ARG:CA	1:A:77:LEU:HD13	0.54	2.31	18	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:81:LEU:HB2	0.54	2.31	18	1
1:A:98:VAL:C	1:A:100:ARG:N	0.54	2.60	11	17
1:A:29:LYS:CD	1:A:46:ILE:HG23	0.54	2.31	13	4
1:A:30:CYS:SG	1:A:125:ILE:HD12	0.54	2.42	8	1
1:A:17:PHE:O	1:A:29:LYS:HE3	0.54	2.02	20	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:52:THR:HG21	0.54	2.37	18	3
1:A:41:ARG:HG3	1:A:42:PHE:N	0.54	2.17	1	2
1:A:77:LEU:O	1:A:81:LEU:CB	0.54	2.55	18	12
1:A:130:ILE:CD1	1:A:131:GLN:N	0.54	2.70	13	2
1:A:42:PHE:CD1	1:A:132:ARG:HB3	0.54	2.38	13	1
1:A:21:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HG2	0.54	1.79	13	1
1:A:29:LYS:HD3	1:A:46:ILE:HG23	0.54	1.79	13	1
1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:CYS:N	0.54	2.18	14	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:95:GLN:N	0.54	2.68	2	4
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:HG12	0.54	2.02	3	1
1:A:76:LYS:HB3	1:A:103:TRP:CZ2	0.54	2.38	8	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:131:GLN:HB3	0.54	1.78	16	1
1:A:124:ASP:O	1:A:128:TYR:N	0.54	2.36	17	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:129:ILE:HG12	0.54	2.37	7	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:131:GLN:CA	0.54	2.32	7	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:HD11	0.54	1.80	10	1
1:A:11:PRO:HG3	1:A:128:TYR:CE1	0.54	2.36	13	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:70:LEU:HD23	0.54	1.80	8	3
1:A:129:ILE:N	1:A:129:ILE:CD1	0.54	2.67	2	8
1:A:90:PHE:CE1	1:A:97:CYS:HB2	0.54	2.37	8	4
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:HB3	0.54	1.79	15	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LYS:HB3	1:A:103:TRP:CH2	0.54	2.37	8	1
1:A:59:MET:HE2	1:A:111:VAL:HG23	0.54	1.78	6	2
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:ND2	0.54	2.41	5	1
1:A:133:LYS:O	1:A:133:LYS:CD	0.54	2.56	13	1
1:A:80:VAL:HA	1:A:86:THR:CG2	0.54	2.32	15	3
1:A:51:PRO:HB2	1:A:70:LEU:HD22	0.54	1.80	12	2
1:A:67:PRO:HA	1:A:70:LEU:CD1	0.54	2.32	17	4
1:A:42:PHE:CE1	1:A:130:ILE:O	0.54	2.60	1	2
1:A:21:ILE:HD11	1:A:24:ASN:O	0.54	2.02	15	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:44:VAL:CG1	0.54	2.78	5	1
1:A:130:ILE:CG1	1:A:131:GLN:H	0.54	2.16	3	2
1:A:92:MET:CG	1:A:93:ASP:H	0.54	2.15	4	7
1:A:25:ILE:HG21	1:A:99:GLN:CG	0.54	2.32	19	1
1:A:19:ASN:CB	1:A:107:GLU:O	0.54	2.56	5	5
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:CG	0.54	2.55	13	4
1:A:113:TRP:N	1:A:113:TRP:CD1	0.54	2.75	14	2
1:A:14:ILE:HG12	1:A:42:PHE:CD2	0.54	2.37	3	2
1:A:24:ASN:CG	1:A:27:SER:HB3	0.54	2.23	8	1
1:A:10:GLN:CB	1:A:133:LYS:NZ	0.54	2.71	2	1
1:A:129:ILE:CD1	1:A:129:ILE:N	0.54	2.69	17	1
1:A:50:PHE:CA	1:A:94:LEU:HB3	0.54	2.33	20	10
1:A:115:ASN:O	1:A:116:LYS:HG2	0.54	2.03	19	6
1:A:17:PHE:O	1:A:29:LYS:CE	0.54	2.55	14	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:C	0.54	2.23	12	1
1:A:15:SER:O	1:A:111:VAL:CG2	0.54	2.52	8	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:94:LEU:HB2	0.54	2.38	8	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:108:ALA:HB2	0.54	2.33	19	1
1:A:50:PHE:HB3	1:A:91:GLY:O	0.54	2.02	4	3
1:A:75:PRO:O	1:A:76:LYS:C	0.54	2.46	3	2
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:N	0.54	2.40	7	4
1:A:18:THR:OG1	1:A:29:LYS:HD2	0.54	2.03	11	3
1:A:14:ILE:HG12	1:A:43:ASP:O	0.54	2.02	20	1
1:A:16:LEU:HD11	1:A:108:ALA:HB1	0.54	1.79	20	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:115:ASN:H	0.54	2.07	8	4
1:A:44:VAL:CG1	1:A:46:ILE:HD11	0.54	2.32	14	4
1:A:131:GLN:NE2	1:A:131:GLN:N	0.54	2.56	12	1
1:A:11:PRO:HG2	1:A:14:ILE:HD12	0.54	1.78	16	1
1:A:51:PRO:O	1:A:53:TRP:CZ3	0.54	2.61	16	1
1:A:62:SER:O	1:A:63:CYS:CB	0.54	2.55	17	1
1:A:20:ASP:N	1:A:98:VAL:HG12	0.53	2.18	13	1
1:A:79:SER:O	1:A:84:LYS:CB	0.53	2.55	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:CYS:N	0.53	2.18	4	3
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:117:LEU:C	0.53	2.82	14	2
1:A:16:LEU:CB	1:A:45:GLU:O	0.53	2.55	5	3
1:A:74:ILE:CG2	1:A:75:PRO:HD2	0.53	2.32	6	2
1:A:59:MET:HE2	1:A:111:VAL:CG2	0.53	2.33	6	1
1:A:110:TRP:CE3	1:A:110:TRP:C	0.53	2.82	10	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:49:ARG:HB2	0.53	2.38	14	1
1:A:128:TYR:CD2	1:A:129:ILE:HD11	0.53	2.39	10	2
1:A:29:LYS:CD	1:A:108:ALA:CB	0.53	2.86	3	1
1:A:18:THR:HA	1:A:29:LYS:CG	0.53	2.33	12	1
1:A:18:THR:N	1:A:47:ALA:O	0.53	2.40	16	2
1:A:13:THR:C	1:A:14:ILE:HD13	0.53	2.24	9	2
1:A:14:ILE:CG2	1:A:16:LEU:HD21	0.53	2.31	9	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:GLN:CB	0.53	2.70	18	7
1:A:94:LEU:O	1:A:97:CYS:N	0.53	2.38	10	5
1:A:65:GLN:CG	1:A:65:GLN:O	0.53	2.55	18	1
1:A:20:ASP:O	1:A:21:ILE:CG1	0.53	2.56	10	7
1:A:24:ASN:HB2	1:A:27:SER:OG	0.53	2.03	11	6
1:A:75:PRO:O	1:A:76:LYS:CB	0.53	2.56	8	3
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:C	0.53	2.47	17	3
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:N	0.53	2.61	6	2
1:A:37:ASP:OD1	1:A:130:ILE:HG21	0.53	2.04	7	1
1:A:40:HIS:O	1:A:41:ARG:CD	0.53	2.56	7	1
1:A:77:LEU:O	1:A:79:SER:N	0.53	2.41	8	17
1:A:30:CYS:O	1:A:32:GLN:N	0.53	2.41	10	6
1:A:18:THR:HA	1:A:29:LYS:HG2	0.53	1.81	16	3
1:A:27:SER:OG	1:A:28:GLN:N	0.53	2.41	13	6
1:A:94:LEU:HD21	1:A:98:VAL:CG2	0.53	2.33	14	1
1:A:42:PHE:N	1:A:42:PHE:CD1	0.53	2.76	7	3
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:CB	0.53	2.91	8	1
1:A:112:ASP:HB3	1:A:117:LEU:O	0.53	2.03	11	4
1:A:76:LYS:HD2	1:A:102:LEU:HD21	0.53	1.80	7	1
1:A:91:GLY:N	1:A:92:MET:CE	0.53	2.72	13	7
1:A:84:LYS:HE3	1:A:85:HIS:CD2	0.53	2.39	1	2
1:A:22:ALA:O	1:A:25:ILE:CD1	0.53	2.57	9	3
1:A:84:LYS:HE3	1:A:85:HIS:CE1	0.53	2.38	6	3
1:A:85:HIS:HB3	1:A:90:PHE:CE2	0.53	2.38	12	3
1:A:76:LYS:CE	1:A:90:PHE:CE1	0.53	2.92	20	1
1:A:56:LEU:HG	1:A:70:LEU:HD21	0.53	1.79	15	1
1:A:106:LYS:C	1:A:106:LYS:HD2	0.53	2.23	2	3
1:A:20:ASP:N	1:A:25:ILE:HG23	0.53	2.18	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:LYS:N	1:A:86:THR:CG2	0.53	2.71	8	6
1:A:30:CYS:C	1:A:34:LEU:CD2	0.53	2.76	16	3
1:A:74:ILE:HG23	1:A:76:LYS:H	0.53	1.63	6	2
1:A:69:SER:O	1:A:73:GLN:CB	0.53	2.56	7	3
1:A:130:ILE:HD12	1:A:133:LYS:HB2	0.53	1.80	10	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:MET:CE	0.53	2.86	3	10
1:A:87:ASP:CG	1:A:88:PRO:HD2	0.53	2.23	2	11
1:A:110:TRP:O	1:A:111:VAL:CG1	0.53	2.57	3	4
1:A:21:ILE:O	1:A:22:ALA:HB2	0.53	2.04	13	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:107:GLU:O	0.53	2.42	9	2
1:A:58:TYR:HB3	1:A:113:TRP:CD1	0.53	2.39	18	3
1:A:16:LEU:HB3	1:A:45:GLU:O	0.53	2.03	3	1
1:A:19:ASN:HA	1:A:98:VAL:HG11	0.53	1.81	1	2
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:NZ	0.53	2.19	6	1
1:A:93:ASP:CA	1:A:95:GLN:OE1	0.53	2.57	1	1
1:A:34:LEU:HB3	1:A:131:GLN:HB2	0.53	1.80	17	2
1:A:115:ASN:CB	1:A:117:LEU:HG	0.53	2.34	18	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:110:TRP:CB	0.53	2.34	18	1
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:CD	0.53	2.76	9	9
1:A:76:LYS:O	1:A:79:SER:N	0.53	2.41	3	5
1:A:69:SER:CB	1:A:120:ASN:OD1	0.53	2.57	17	2
1:A:74:ILE:HD11	1:A:90:PHE:CE2	0.53	2.38	12	3
1:A:20:ASP:CB	1:A:105:PRO:CD	0.53	2.87	11	2
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:CG	0.53	2.57	6	3
1:A:90:PHE:O	1:A:94:LEU:CA	0.53	2.57	19	5
1:A:128:TYR:HB3	1:A:129:ILE:CD1	0.53	2.34	2	4
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:O	0.53	2.57	17	2
1:A:115:ASN:OD1	1:A:115:ASN:N	0.53	2.41	5	1
1:A:112:ASP:HB2	1:A:117:LEU:HD12	0.52	1.81	18	1
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:VAL:CG2	0.52	2.15	18	1
1:A:118:VAL:HG12	1:A:119:GLY:N	0.52	2.19	9	4
1:A:11:PRO:CB	1:A:112:ASP:OD2	0.52	2.57	6	1
1:A:11:PRO:HB3	1:A:115:ASN:CB	0.52	2.34	17	2
1:A:45:GLU:O	1:A:45:GLU:HG3	0.52	2.04	19	1
1:A:80:VAL:CA	1:A:86:THR:CB	0.52	2.84	19	3
1:A:41:ARG:CG	1:A:133:LYS:C	0.52	2.78	13	1
1:A:22:ALA:O	1:A:24:ASN:N	0.52	2.42	12	1
1:A:110:TRP:CB	1:A:125:ILE:HG12	0.52	2.35	15	1
1:A:40:HIS:O	1:A:42:PHE:N	0.52	2.39	10	1
1:A:111:VAL:HA	1:A:118:VAL:HG12	0.52	1.81	8	2
1:A:20:ASP:HB3	1:A:98:VAL:HG13	0.52	1.80	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:CD1	1:A:109:LEU:O	0.52	2.56	15	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:O	0.52	2.03	9	3
1:A:56:LEU:O	1:A:59:MET:N	0.52	2.43	12	8
1:A:29:LYS:HE2	1:A:108:ALA:CB	0.52	2.30	10	2
1:A:88:PRO:CB	1:A:92:MET:HE3	0.52	2.34	7	2
1:A:39:SER:O	1:A:132:ARG:CG	0.52	2.58	4	2
1:A:17:PHE:CD1	1:A:18:THR:N	0.52	2.77	10	1
1:A:113:TRP:C	1:A:115:ASN:N	0.52	2.63	12	5
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:CG	0.52	2.35	14	11
1:A:29:LYS:CE	1:A:108:ALA:CB	0.52	2.81	12	2
1:A:80:VAL:C	1:A:82:LYS:H	0.52	2.08	14	10
1:A:59:MET:SD	1:A:118:VAL:HG21	0.52	2.44	1	3
1:A:50:PHE:CG	1:A:52:THR:OG1	0.52	2.62	20	2
1:A:80:VAL:HG23	1:A:86:THR:HA	0.52	1.81	6	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:CG	0.52	2.92	2	3
1:A:34:LEU:C	1:A:131:GLN:OE1	0.52	2.48	1	2
1:A:121:GLU:CB	1:A:124:ASP:OD2	0.52	2.57	1	1
1:A:121:GLU:OE1	1:A:123:ALA:HB3	0.52	2.04	15	3
1:A:11:PRO:HA	1:A:115:ASN:CG	0.52	2.24	5	3
1:A:56:LEU:CD2	1:A:70:LEU:CD1	0.52	2.83	19	1
1:A:56:LEU:O	1:A:58:TYR:N	0.52	2.43	2	9
1:A:11:PRO:HB2	1:A:14:ILE:HD11	0.52	1.82	13	1
1:A:18:THR:CB	1:A:48:ASN:HB3	0.52	2.34	9	5
1:A:51:PRO:HG3	1:A:70:LEU:HD12	0.52	1.80	8	1
1:A:11:PRO:O	1:A:14:ILE:HD11	0.52	2.03	16	1
1:A:108:ALA:HB3	1:A:122:PRO:HB3	0.52	1.82	6	2
1:A:73:GLN:HG3	1:A:74:ILE:N	0.52	2.18	10	3
1:A:53:TRP:HA	1:A:56:LEU:CD1	0.52	2.34	2	1
1:A:28:GLN:O	1:A:32:GLN:CB	0.52	2.57	19	3
1:A:39:SER:HA	1:A:132:ARG:CA	0.52	2.34	19	1
1:A:45:GLU:O	1:A:45:GLU:CG	0.52	2.57	19	1
1:A:59:MET:SD	1:A:111:VAL:HG22	0.52	2.45	13	1
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:HD22	0.52	2.04	15	3
1:A:59:MET:HE3	1:A:112:ASP:N	0.52	2.20	12	1
1:A:116:LYS:CD	1:A:116:LYS:O	0.52	2.58	20	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HE	0.52	1.64	2	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:41:ARG:O	0.52	2.42	17	1
1:A:112:ASP:HB2	1:A:117:LEU:HG	0.52	1.82	5	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:81:LEU:HD22	0.52	1.82	18	1
1:A:24:ASN:HB3	1:A:27:SER:HB2	0.52	1.82	3	6
1:A:80:VAL:C	1:A:82:LYS:N	0.52	2.63	15	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:LEU:HB3	1:A:128:TYR:CE2	0.52	2.40	13	3
1:A:39:SER:O	1:A:132:ARG:NE	0.52	2.43	13	1
1:A:78:ASP:HA	1:A:81:LEU:HG	0.52	1.81	17	3
1:A:79:SER:CB	1:A:84:LYS:HB3	0.52	2.35	14	8
1:A:93:ASP:CG	1:A:93:ASP:O	0.52	2.48	2	2
1:A:96:LYS:C	1:A:99:GLN:CG	0.52	2.78	10	14
1:A:125:ILE:O	1:A:130:ILE:N	0.52	2.43	17	2
1:A:56:LEU:O	1:A:56:LEU:HD13	0.52	2.04	10	2
1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:HD22	0.52	2.20	1	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:49:ARG:O	0.52	2.62	9	1
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:67:PRO:CB	0.52	2.93	18	2
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:HB2	0.52	2.03	13	6
1:A:25:ILE:HG21	1:A:99:GLN:HB3	0.52	1.81	19	1
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:CD2	0.52	2.31	16	4
1:A:19:ASN:C	1:A:98:VAL:HG12	0.52	2.26	13	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:C	0.52	2.83	14	2
1:A:14:ILE:HD13	1:A:112:ASP:OD2	0.52	2.04	14	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:91:GLY:O	0.52	2.63	1	4
1:A:16:LEU:HD11	1:A:29:LYS:CE	0.52	2.35	3	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:29:LYS:O	0.52	2.41	3	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:92:MET:HA	0.52	2.40	12	5
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:CE	0.52	2.35	6	1
1:A:60:ARG:C	1:A:60:ARG:CD	0.52	2.78	1	5
1:A:73:GLN:NE2	1:A:109:LEU:CD2	0.52	2.73	2	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:49:ARG:O	0.52	2.63	9	1
1:A:41:ARG:CD	1:A:133:LYS:C	0.52	2.78	13	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:114:GLU:HG2	0.52	2.35	14	4
1:A:37:ASP:N	1:A:131:GLN:OE1	0.52	2.42	14	3
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:PRO:N	0.52	2.20	6	3
1:A:20:ASP:O	1:A:21:ILE:HG12	0.52	2.05	17	6
1:A:37:ASP:HB2	1:A:131:GLN:NE2	0.52	2.19	8	4
1:A:130:ILE:HD13	1:A:130:ILE:C	0.52	2.26	11	1
1:A:38:VAL:O	1:A:132:ARG:CG	0.52	2.58	1	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:110:TRP:NE1	0.52	2.18	17	1
1:A:17:PHE:CZ	1:A:94:LEU:CD2	0.52	2.92	10	1
1:A:19:ASN:O	1:A:105:PRO:HG2	0.51	2.04	16	5
1:A:50:PHE:HB3	1:A:94:LEU:HB3	0.51	1.81	9	3
1:A:110:TRP:CH2	1:A:112:ASP:HB3	0.51	2.40	17	3
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:CE	0.51	2.36	14	1
1:A:34:LEU:HB3	1:A:131:GLN:CB	0.51	2.35	7	6
1:A:63:CYS:SG	1:A:118:VAL:CG1	0.51	2.97	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ILE:CD1	1:A:90:PHE:CD2	0.51	2.93	15	2
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:118:VAL:HA	0.51	2.39	18	1
1:A:59:MET:SD	1:A:118:VAL:CG1	0.51	2.99	12	2
1:A:72:ARG:CA	1:A:77:LEU:HD23	0.51	2.36	11	3
1:A:130:ILE:O	1:A:133:LYS:CB	0.51	2.58	15	1
1:A:129:ILE:O	1:A:133:LYS:CD	0.51	2.58	15	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:109:LEU:HD22	0.51	2.20	9	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:LEU:CD2	0.51	2.57	14	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:98:VAL:HG23	0.51	2.35	20	4
1:A:58:TYR:CD2	1:A:113:TRP:CZ3	0.51	2.98	12	1
1:A:110:TRP:CE2	1:A:119:GLY:HA3	0.51	2.41	12	1
1:A:15:SER:N	1:A:111:VAL:O	0.51	2.43	16	4
1:A:30:CYS:O	1:A:31:LEU:C	0.51	2.49	13	19
1:A:25:ILE:HG21	1:A:99:GLN:CD	0.51	2.26	13	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:HD11	0.51	1.82	3	2
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:CA	0.51	2.35	9	4
1:A:123:ALA:O	1:A:127:LYS:CD	0.51	2.58	8	2
1:A:29:LYS:NZ	1:A:107:GLU:O	0.51	2.42	1	3
1:A:19:ASN:N	1:A:29:LYS:HZ3	0.51	2.03	6	1
1:A:20:ASP:N	1:A:98:VAL:CG1	0.51	2.74	11	2
1:A:49:ARG:CA	1:A:95:GLN:OE1	0.51	2.59	7	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:103:TRP:CE3	0.51	2.41	5	1
1:A:34:LEU:O	1:A:131:GLN:HG2	0.51	2.05	18	1
1:A:123:ALA:O	1:A:127:LYS:CE	0.51	2.58	2	4
1:A:129:ILE:C	1:A:130:ILE:O	0.51	2.48	17	9
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:N	0.51	2.79	5	3
1:A:110:TRP:NE1	1:A:119:GLY:HA3	0.51	2.20	12	2
1:A:72:ARG:CG	1:A:77:LEU:HD21	0.51	2.35	3	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:39:SER:N	0.51	2.73	8	2
1:A:56:LEU:HD12	1:A:70:LEU:HD23	0.51	1.82	6	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:57:GLN:N	0.51	2.19	4	2
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:HD21	0.51	2.40	20	1
1:A:16:LEU:CG	1:A:29:LYS:HE2	0.51	2.36	20	1
1:A:79:SER:OG	1:A:85:HIS:CG	0.51	2.64	20	1
1:A:41:ARG:HB3	1:A:132:ARG:O	0.51	2.04	15	1
1:A:21:ILE:HD13	1:A:29:LYS:H	0.51	1.64	4	1
1:A:59:MET:N	1:A:59:MET:SD	0.51	2.82	18	2
1:A:12:ARG:CB	1:A:114:GLU:HG3	0.51	2.35	9	5
1:A:21:ILE:CB	1:A:25:ILE:HA	0.51	2.31	13	1
1:A:19:ASN:H	1:A:29:LYS:HZ3	0.51	1.46	6	1
1:A:38:VAL:HG23	1:A:131:GLN:O	0.51	2.06	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:SER:O	1:A:132:ARG:CD	0.51	2.58	9	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:29:LYS:HZ1	0.51	1.66	10	1
1:A:79:SER:O	1:A:84:LYS:N	0.51	2.44	12	10
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HG2	0.51	1.81	12	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:131:GLN:C	0.51	2.84	17	2
1:A:112:ASP:OD2	1:A:128:TYR:CD2	0.51	2.64	4	1
1:A:67:PRO:O	1:A:70:LEU:N	0.51	2.44	5	16
1:A:28:GLN:OE1	1:A:32:GLN:CB	0.51	2.58	12	2
1:A:77:LEU:HD13	1:A:77:LEU:H	0.51	1.65	12	1
1:A:93:ASP:HB3	1:A:96:LYS:CG	0.51	2.35	12	3
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:CA	0.51	2.94	8	1
1:A:21:ILE:CG1	1:A:25:ILE:O	0.51	2.59	15	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:47:ALA:N	0.51	2.59	4	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:HG23	0.51	2.36	7	1
1:A:11:PRO:CG	1:A:129:ILE:CG2	0.51	2.88	18	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HD22	0.51	1.82	8	2
1:A:70:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HG	0.51	1.81	13	1
1:A:22:ALA:O	1:A:25:ILE:HD11	0.51	2.05	13	2
1:A:88:PRO:HA	1:A:92:MET:SD	0.51	2.46	13	3
1:A:110:TRP:NE1	1:A:117:LEU:HD11	0.51	2.20	5	2
1:A:16:LEU:CD1	1:A:125:ILE:HD11	0.51	2.33	7	3
1:A:28:GLN:CD	1:A:32:GLN:HG3	0.51	2.26	10	10
1:A:77:LEU:C	1:A:79:SER:N	0.51	2.63	20	20
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CD2	0.51	2.64	19	1
1:A:78:ASP:O	1:A:82:LYS:CD	0.51	2.59	8	2
1:A:20:ASP:CG	1:A:25:ILE:HD12	0.51	2.27	20	2
1:A:60:ARG:CD	1:A:60:ARG:C	0.50	2.79	6	4
1:A:39:SER:HA	1:A:132:ARG:HA	0.50	1.82	19	1
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD22	0.50	1.65	12	4
1:A:19:ASN:HB2	1:A:109:LEU:HD21	0.50	1.83	3	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:CG	0.50	2.36	6	3
1:A:41:ARG:CZ	1:A:41:ARG:HB2	0.50	2.36	20	1
1:A:17:PHE:CB	1:A:109:LEU:HB2	0.50	2.36	9	2
1:A:110:TRP:NE1	1:A:124:ASP:OD2	0.50	2.44	13	2
1:A:128:TYR:CE1	1:A:129:ILE:HG13	0.50	2.41	14	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:42:PHE:CD2	0.50	2.41	14	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:HB3	0.50	2.41	2	3
1:A:14:ILE:HG12	1:A:42:PHE:CE2	0.50	2.41	3	1
1:A:73:GLN:HG3	1:A:107:GLU:CB	0.50	2.35	3	1
1:A:34:LEU:CB	1:A:131:GLN:HB3	0.50	2.37	1	8
1:A:21:ILE:HG21	1:A:29:LYS:HZ2	0.50	1.65	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:LYS:HE3	1:A:107:GLU:HG2	0.50	1.84	16	1
1:A:41:ARG:HB2	1:A:132:ARG:CD	0.50	2.36	4	1
1:A:57:GLN:NE2	1:A:58:TYR:CE1	0.50	2.79	4	1
1:A:38:VAL:CG2	1:A:39:SER:N	0.50	2.74	5	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:29:LYS:HG2	0.50	2.06	16	2
1:A:42:PHE:CE2	1:A:129:ILE:HB	0.50	2.41	19	2
1:A:97:CYS:O	1:A:101:GLY:CA	0.50	2.60	13	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:52:THR:HG23	0.50	1.81	14	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:105:PRO:O	0.50	2.30	20	5
1:A:50:PHE:CE2	1:A:92:MET:CA	0.50	2.94	5	2
1:A:112:ASP:CB	1:A:115:ASN:ND2	0.50	2.73	12	1
1:A:75:PRO:O	1:A:103:TRP:CE3	0.50	2.65	16	1
1:A:19:ASN:O	1:A:105:PRO:HB2	0.50	2.06	10	1
1:A:79:SER:HA	1:A:84:LYS:CB	0.50	2.36	18	10
1:A:14:ILE:CG2	1:A:110:TRP:HE1	0.50	2.18	19	2
1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CD	0.50	2.63	12	2
1:A:16:LEU:HD22	1:A:110:TRP:HA	0.50	1.83	14	4
1:A:33:LEU:HD21	1:A:122:PRO:O	0.50	2.06	15	3
1:A:113:TRP:N	1:A:115:ASN:HD22	0.50	2.03	12	1
1:A:13:THR:N	1:A:115:ASN:OD1	0.50	2.45	12	1
1:A:42:PHE:CE2	1:A:133:LYS:HD2	0.50	2.41	8	1
1:A:19:ASN:H	1:A:29:LYS:HE2	0.50	1.66	6	1
1:A:19:ASN:H	1:A:29:LYS:NZ	0.50	2.02	6	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:91:GLY:HA2	0.50	2.42	1	2
1:A:19:ASN:OD1	1:A:109:LEU:CD2	0.50	2.59	20	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:34:LEU:CG	0.50	2.99	20	1
1:A:98:VAL:HG13	1:A:105:PRO:CD	0.50	2.35	4	1
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:CG1	0.50	2.89	9	1
1:A:29:LYS:CG	1:A:30:CYS:N	0.50	2.74	18	7
1:A:56:LEU:C	1:A:56:LEU:HD22	0.50	2.24	17	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ARG:HB2	0.50	2.36	19	2
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:O	0.50	2.65	14	2
1:A:15:SER:HB3	1:A:111:VAL:O	0.50	2.06	14	1
1:A:29:LYS:HE2	1:A:108:ALA:CA	0.50	2.37	12	1
1:A:29:LYS:CE	1:A:107:GLU:O	0.50	2.59	6	2
1:A:124:ASP:CG	1:A:128:TYR:CZ	0.50	2.84	20	1
1:A:67:PRO:HA	1:A:70:LEU:HD23	0.50	1.82	15	1
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:CG	0.50	2.60	10	2
1:A:105:PRO:O	1:A:107:GLU:CG	0.50	2.60	9	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:98:VAL:CG2	0.50	2.59	10	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:103:TRP:CB	0.50	2.89	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:SER:HG	1:A:85:HIS:CG	0.50	2.24	20	1
1:A:111:VAL:HG12	1:A:118:VAL:CG1	0.50	2.29	1	1
1:A:59:MET:HE1	1:A:111:VAL:HG22	0.50	1.83	2	1
1:A:89:THR:HG21	1:A:102:LEU:CD1	0.50	2.36	5	3
1:A:88:PRO:O	1:A:92:MET:SD	0.50	2.70	13	4
1:A:78:ASP:HA	1:A:81:LEU:CD2	0.50	2.37	13	3
1:A:106:LYS:HB2	1:A:106:LYS:NZ	0.50	2.21	12	3
1:A:28:GLN:O	1:A:29:LYS:C	0.50	2.50	4	2
1:A:21:ILE:N	1:A:25:ILE:HD12	0.50	2.21	11	2
1:A:129:ILE:O	1:A:133:LYS:HD3	0.50	2.07	15	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:HB2	0.50	2.37	1	2
1:A:11:PRO:HB3	1:A:128:TYR:OH	0.50	2.06	13	1
1:A:25:ILE:O	1:A:29:LYS:CB	0.50	2.59	13	1
1:A:77:LEU:O	1:A:81:LEU:HG	0.50	2.06	17	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:90:PHE:HB3	0.50	2.42	8	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:90:PHE:HB3	0.50	2.42	8	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:HD13	0.50	1.82	16	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:LEU:HD11	0.50	2.07	6	1
1:A:27:SER:CA	1:A:31:LEU:HD23	0.50	2.37	19	1
1:A:19:ASN:C	1:A:20:ASP:O	0.50	2.51	20	6
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:CA	0.50	2.59	2	4
1:A:11:PRO:CB	1:A:115:ASN:HB3	0.50	2.37	12	2
1:A:29:LYS:O	1:A:29:LYS:NZ	0.50	2.45	15	2
1:A:130:ILE:HD12	1:A:133:LYS:H	0.50	1.65	2	1
1:A:59:MET:HE3	1:A:111:VAL:HG12	0.50	1.84	9	1
1:A:92:MET:N	1:A:92:MET:HE2	0.50	2.21	9	1
1:A:34:LEU:C	1:A:36:GLY:N	0.49	2.65	6	12
1:A:49:ARG:O	1:A:94:LEU:HD12	0.49	2.06	17	3
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:VAL:HG21	0.49	1.84	20	5
1:A:14:ILE:CG1	1:A:42:PHE:CD2	0.49	2.95	9	3
1:A:104:ASN:O	1:A:106:LYS:CD	0.49	2.60	16	3
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:C	0.49	2.27	16	2
1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:N	0.49	2.20	20	1
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:N	0.49	2.37	15	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:133:LYS:C	0.49	2.28	15	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:117:LEU:HB3	0.49	2.42	2	1
1:A:39:SER:N	1:A:132:ARG:HG2	0.49	2.21	4	1
1:A:75:PRO:CG	1:A:103:TRP:HB2	0.49	2.38	13	1
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:VAL:CG1	0.49	2.36	10	3
1:A:14:ILE:HG13	1:A:42:PHE:CE1	0.49	2.42	12	1
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.49	2.06	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:HB3	1:A:28:GLN:OE1	0.49	2.07	6	1
1:A:57:GLN:CD	1:A:57:GLN:O	0.49	2.50	7	1
1:A:29:LYS:HZ1	1:A:108:ALA:HB2	0.49	1.66	5	1
1:A:91:GLY:N	1:A:92:MET:HE1	0.49	2.23	13	3
1:A:19:ASN:OD1	1:A:109:LEU:HD11	0.49	2.06	14	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:CG	0.49	2.90	3	1
1:A:11:PRO:CB	1:A:114:GLU:HB3	0.49	2.37	8	3
1:A:116:LYS:HG3	1:A:116:LYS:O	0.49	2.07	20	7
1:A:132:ARG:HD3	1:A:132:ARG:O	0.49	2.06	16	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:105:PRO:CB	0.49	2.76	16	1
1:A:56:LEU:O	1:A:60:ARG:N	0.49	2.43	9	2
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:HB3	0.49	1.83	9	1
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:CD2	0.49	2.61	5	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:28:GLN:HG2	0.49	2.37	13	1
1:A:91:GLY:C	1:A:92:MET:HE2	0.49	2.27	14	1
1:A:16:LEU:HD22	1:A:110:TRP:HE3	0.49	1.58	5	1
1:A:60:ARG:CD	1:A:60:ARG:O	0.49	2.61	10	6
1:A:48:ASN:CG	1:A:99:GLN:NE2	0.49	2.65	19	1
1:A:132:ARG:HG3	1:A:133:LYS:N	0.49	2.17	14	2
1:A:31:LEU:HD23	1:A:46:ILE:HG21	0.49	1.85	14	2
1:A:21:ILE:HB	1:A:28:GLN:HG2	0.49	1.84	17	2
1:A:70:LEU:CD2	1:A:120:ASN:OD1	0.49	2.60	20	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:HG13	0.49	2.32	1	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:128:TYR:CE2	0.49	2.94	4	1
1:A:51:PRO:HG3	1:A:109:LEU:HD13	0.49	1.84	7	1
1:A:21:ILE:H	1:A:21:ILE:HD12	0.49	1.57	8	4
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ARG:HB2	0.49	1.82	12	2
1:A:31:LEU:O	1:A:35:LYS:CB	0.49	2.60	4	2
1:A:110:TRP:C	1:A:111:VAL:CG1	0.49	2.81	17	5
1:A:71:GLN:OE1	1:A:71:GLN:N	0.49	2.45	5	2
1:A:90:PHE:HA	1:A:94:LEU:HA	0.49	1.85	7	2
1:A:65:GLN:HB3	1:A:68:VAL:HG12	0.49	1.83	12	1
1:A:20:ASP:HB3	1:A:105:PRO:O	0.49	2.07	11	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:O	0.49	2.54	11	2
1:A:128:TYR:O	1:A:133:LYS:CE	0.49	2.60	20	1
1:A:12:ARG:N	1:A:115:ASN:CG	0.49	2.66	18	1
1:A:59:MET:HG2	1:A:118:VAL:HG21	0.49	1.83	13	1
1:A:40:HIS:C	1:A:41:ARG:HG2	0.49	2.27	13	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:CG1	0.49	2.38	2	4
1:A:16:LEU:CD1	1:A:30:CYS:SG	0.49	3.01	8	2
1:A:20:ASP:C	1:A:20:ASP:OD1	0.49	2.51	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:CD1	1:A:110:TRP:CD1	0.49	2.95	17	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:117:LEU:CD2	0.49	2.81	9	1
1:A:65:GLN:O	1:A:69:SER:HB3	0.49	2.08	5	1
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:67:PRO:HB3	0.49	2.42	16	2
1:A:118:VAL:CG1	1:A:119:GLY:N	0.49	2.74	4	4
1:A:89:THR:CG2	1:A:102:LEU:CD1	0.49	2.91	19	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:125:ILE:CB	0.49	2.35	19	1
1:A:83:TYR:O	1:A:87:ASP:OD2	0.49	2.31	13	1
1:A:113:TRP:O	1:A:115:ASN:N	0.49	2.46	12	2
1:A:117:LEU:CD1	1:A:117:LEU:O	0.49	2.58	5	1
1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:CE	0.49	2.37	5	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:O	0.49	2.08	1	4
1:A:56:LEU:HD21	1:A:67:PRO:HB3	0.49	1.84	19	1
1:A:41:ARG:CD	1:A:133:LYS:O	0.49	2.61	13	1
1:A:31:LEU:CA	1:A:34:LEU:HD12	0.49	2.38	13	9
1:A:59:MET:CE	1:A:113:TRP:CD2	0.49	2.96	14	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:59:MET:HB2	0.49	2.38	3	3
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:71:GLN:CD	0.49	2.86	12	1
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:HD13	0.49	1.85	8	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:107:GLU:O	0.49	2.08	16	1
1:A:73:GLN:CD	1:A:73:GLN:C	0.49	2.72	9	3
1:A:21:ILE:H	1:A:25:ILE:HD12	0.49	1.67	11	2
1:A:109:LEU:CD2	1:A:109:LEU:H	0.49	2.12	4	1
1:A:94:LEU:O	1:A:98:VAL:CG1	0.49	2.61	7	1
1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASN:HB2	0.49	1.83	18	2
1:A:105:PRO:O	1:A:107:GLU:HG2	0.49	2.08	9	6
1:A:51:PRO:CG	1:A:70:LEU:HB3	0.49	2.38	6	4
1:A:56:LEU:C	1:A:56:LEU:CD1	0.49	2.81	10	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:133:LYS:C	0.48	2.86	19	1
1:A:27:SER:O	1:A:29:LYS:N	0.48	2.46	10	3
1:A:20:ASP:O	1:A:25:ILE:HG23	0.48	2.07	13	1
1:A:99:GLN:OE1	1:A:101:GLY:N	0.48	2.46	7	4
1:A:49:ARG:O	1:A:94:LEU:HD22	0.48	2.08	3	2
1:A:115:ASN:O	1:A:116:LYS:HG3	0.48	2.07	20	6
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:HD2	0.48	1.84	12	1
1:A:41:ARG:HG2	1:A:132:ARG:O	0.48	2.07	12	2
1:A:111:VAL:CA	1:A:118:VAL:HG12	0.48	2.38	8	1
1:A:110:TRP:CE2	1:A:129:ILE:CD1	0.48	2.93	17	1
1:A:33:LEU:O	1:A:131:GLN:NE2	0.48	2.45	4	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:HG12	0.48	1.85	15	3
1:A:110:TRP:NE1	1:A:119:GLY:CA	0.48	2.75	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:CD2	1:A:122:PRO:O	0.48	2.61	3	1
1:A:70:LEU:H	1:A:70:LEU:HD22	0.48	1.67	3	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:121:GLU:N	0.48	2.66	12	1
1:A:123:ALA:HB1	1:A:127:LYS:CE	0.48	2.35	8	1
1:A:76:LYS:HD3	1:A:85:HIS:CD2	0.48	2.43	16	1
1:A:96:LYS:C	1:A:99:GLN:HG3	0.48	2.28	5	2
1:A:74:ILE:HD12	1:A:90:PHE:CE2	0.48	2.43	20	2
1:A:42:PHE:HD1	1:A:133:LYS:C	0.48	2.11	15	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:108:ALA:HA	0.48	2.23	1	3
1:A:99:GLN:HE21	1:A:100:ARG:N	0.48	2.05	1	1
1:A:72:ARG:O	1:A:77:LEU:HD23	0.48	2.09	17	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:112:ASP:OD2	0.48	2.66	4	2
1:A:41:ARG:NE	1:A:132:ARG:NH1	0.48	2.60	7	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:HB3	0.48	1.85	9	1
1:A:20:ASP:O	1:A:29:LYS:NZ	0.48	2.44	10	1
1:A:16:LEU:HB2	1:A:45:GLU:O	0.48	2.08	18	6
1:A:14:ILE:HD12	1:A:112:ASP:OD2	0.48	2.08	2	2
1:A:28:GLN:HA	1:A:32:GLN:HG2	0.48	1.86	19	1
1:A:89:THR:CG2	1:A:90:PHE:N	0.48	2.75	7	7
1:A:17:PHE:CD1	1:A:49:ARG:HB3	0.48	2.43	14	1
1:A:113:TRP:N	1:A:115:ASN:ND2	0.48	2.61	12	1
1:A:59:MET:HG3	1:A:118:VAL:HG11	0.48	1.84	12	1
1:A:51:PRO:CD	1:A:94:LEU:HD22	0.48	2.38	15	3
1:A:105:PRO:C	1:A:106:LYS:CG	0.48	2.81	11	3
1:A:52:THR:O	1:A:56:LEU:HG	0.48	2.09	2	1
1:A:78:ASP:O	1:A:82:LYS:HB2	0.48	2.07	7	1
1:A:42:PHE:CD1	1:A:132:ARG:CA	0.48	2.96	13	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:92:MET:SD	0.48	3.01	13	2
1:A:37:ASP:O	1:A:131:GLN:NE2	0.48	2.47	14	2
1:A:50:PHE:CA	1:A:94:LEU:CB	0.48	2.91	14	1
1:A:126:ASP:HA	1:A:130:ILE:HB	0.48	1.84	16	3
1:A:40:HIS:N	1:A:132:ARG:HB2	0.48	2.24	12	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:132:ARG:O	0.48	2.61	12	2
1:A:41:ARG:HB2	1:A:132:ARG:O	0.48	2.09	12	1
1:A:129:ILE:HB	1:A:133:LYS:CB	0.48	2.38	15	1
1:A:51:PRO:O	1:A:56:LEU:HD21	0.48	2.07	2	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:73:GLN:NE2	0.48	2.46	4	1
1:A:133:LYS:CD	1:A:133:LYS:C	0.48	2.81	9	1
1:A:20:ASP:OD2	1:A:25:ILE:CD1	0.48	2.62	19	2
1:A:59:MET:SD	1:A:118:VAL:CG2	0.48	3.02	19	3
1:A:69:SER:O	1:A:73:GLN:CG	0.48	2.62	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HD3	0.48	1.84	12	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:HD3	0.48	2.09	5	2
1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:HD13	0.48	2.21	16	1
1:A:93:ASP:HA	1:A:95:GLN:OE1	0.48	2.08	1	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:117:LEU:HB2	0.48	2.07	17	1
1:A:18:THR:CG2	1:A:29:LYS:HD3	0.48	2.38	4	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:109:LEU:HD23	0.48	2.29	9	1
1:A:104:ASN:O	1:A:106:LYS:HD3	0.48	2.08	18	5
1:A:95:GLN:O	1:A:98:VAL:N	0.48	2.46	18	2
1:A:98:VAL:C	1:A:100:ARG:H	0.48	2.11	11	2
1:A:30:CYS:HB2	1:A:46:ILE:CG1	0.48	2.38	19	2
1:A:112:ASP:OD1	1:A:117:LEU:N	0.48	2.46	10	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:119:GLY:C	0.48	2.87	13	2
1:A:98:VAL:O	1:A:99:GLN:C	0.48	2.52	17	10
1:A:108:ALA:HB3	1:A:122:PRO:CB	0.48	2.38	5	2
1:A:124:ASP:O	1:A:127:LYS:HB2	0.48	2.09	11	1
1:A:58:TYR:O	1:A:61:THR:OG1	0.48	2.32	2	4
1:A:76:LYS:O	1:A:79:SER:HB2	0.48	2.09	4	3
1:A:78:ASP:N	1:A:81:LEU:HD23	0.48	2.23	2	1
1:A:127:LYS:N	1:A:127:LYS:HD3	0.48	2.24	1	6
1:A:116:LYS:O	1:A:116:LYS:HG3	0.48	2.09	17	3
1:A:60:ARG:O	1:A:63:CYS:O	0.48	2.32	2	13
1:A:133:LYS:HD2	1:A:133:LYS:C	0.48	2.28	19	1
1:A:111:VAL:HB	1:A:118:VAL:HG12	0.48	1.85	8	1
1:A:90:PHE:CE2	1:A:102:LEU:CD1	0.48	2.87	8	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:91:GLY:CA	0.48	2.96	1	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:125:ILE:HD12	0.48	1.84	7	1
1:A:16:LEU:CB	1:A:30:CYS:SG	0.48	3.02	9	1
1:A:42:PHE:O	1:A:132:ARG:CZ	0.48	2.61	9	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:115:ASN:HB2	0.48	2.27	5	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:H	0.48	1.68	14	2
1:A:18:THR:CG2	1:A:26:LYS:HA	0.48	2.39	14	5
1:A:12:ARG:N	1:A:114:GLU:HG2	0.48	2.24	8	3
1:A:91:GLY:HA3	1:A:92:MET:HE1	0.48	1.85	12	3
1:A:117:LEU:HD23	1:A:128:TYR:CD2	0.48	2.38	8	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:C	0.48	2.51	4	3
1:A:119:GLY:C	1:A:124:ASP:OD2	0.48	2.52	20	2
1:A:16:LEU:CD1	1:A:17:PHE:O	0.48	2.61	1	1
1:A:25:ILE:N	1:A:25:ILE:HD13	0.48	2.22	9	2
1:A:69:SER:O	1:A:73:GLN:HB2	0.48	2.09	5	1
1:A:74:ILE:HG12	1:A:75:PRO:CD	0.48	2.39	14	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:ASN:HB3	1:A:27:SER:OG	0.48	2.09	13	5
1:A:96:LYS:O	1:A:100:ARG:O	0.48	2.32	19	2
1:A:127:LYS:HD3	1:A:127:LYS:N	0.48	2.24	20	7
1:A:70:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HG	0.48	1.85	12	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:92:MET:HA	0.48	2.44	12	3
1:A:121:GLU:O	1:A:124:ASP:OD1	0.48	2.31	11	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:H	0.48	1.57	15	1
1:A:104:ASN:OD1	1:A:104:ASN:N	0.48	2.47	7	3
1:A:37:ASP:C	1:A:38:VAL:CG2	0.48	2.82	7	1
1:A:20:ASP:HB3	1:A:98:VAL:CG1	0.48	2.38	17	4
1:A:42:PHE:CE2	1:A:133:LYS:C	0.48	2.87	19	1
1:A:18:THR:CB	1:A:48:ASN:CB	0.48	2.91	9	3
1:A:59:MET:HE1	1:A:118:VAL:HG12	0.48	1.85	2	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:98:VAL:HG23	0.48	2.40	17	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:117:LEU:HD23	0.48	2.30	9	1
1:A:18:THR:CA	1:A:29:LYS:HG3	0.48	2.37	5	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:HG3	0.48	2.38	10	1
1:A:18:THR:CG2	1:A:48:ASN:HB3	0.47	2.40	7	5
1:A:74:ILE:HD13	1:A:90:PHE:CZ	0.47	2.44	13	3
1:A:78:ASP:CA	1:A:81:LEU:HG	0.47	2.39	17	3
1:A:53:TRP:CE3	1:A:67:PRO:HB3	0.47	2.43	7	2
1:A:40:HIS:N	1:A:132:ARG:HB3	0.47	2.24	1	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:97:CYS:HB3	0.47	2.45	10	1
1:A:18:THR:HB	1:A:48:ASN:HB3	0.47	1.86	7	5
1:A:60:ARG:NE	1:A:60:ARG:O	0.47	2.48	10	4
1:A:110:TRP:C	1:A:111:VAL:HG13	0.47	2.30	19	4
1:A:27:SER:O	1:A:31:LEU:N	0.47	2.47	19	6
1:A:20:ASP:OD2	1:A:98:VAL:O	0.47	2.32	13	1
1:A:58:TYR:CZ	1:A:113:TRP:CZ2	0.47	3.03	12	1
1:A:24:ASN:O	1:A:27:SER:N	0.47	2.47	9	1
1:A:110:TRP:CD2	1:A:110:TRP:C	0.47	2.88	18	1
1:A:39:SER:HA	1:A:132:ARG:HB3	0.47	1.85	18	1
1:A:110:TRP:NE1	1:A:124:ASP:CG	0.47	2.68	13	1
1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:H	0.47	1.69	13	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:CG	0.47	2.39	15	2
1:A:110:TRP:CE2	1:A:119:GLY:CA	0.47	2.98	12	1
1:A:63:CYS:HB2	1:A:118:VAL:HG22	0.47	1.84	12	1
1:A:51:PRO:CB	1:A:70:LEU:HD22	0.47	2.39	12	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:CD	0.47	2.62	2	5
1:A:129:ILE:O	1:A:129:ILE:HD13	0.47	2.09	8	1
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:HD22	0.47	2.10	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASP:HB2	1:A:105:PRO:HD2	0.47	1.86	11	1
1:A:20:ASP:N	1:A:98:VAL:HG11	0.47	2.23	11	1
1:A:22:ALA:O	1:A:23:SER:O	0.47	2.32	20	2
1:A:17:PHE:CZ	1:A:49:ARG:O	0.47	2.66	10	1
1:A:105:PRO:O	1:A:107:GLU:CB	0.47	2.63	18	2
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:H	0.47	2.22	4	6
1:A:105:PRO:O	1:A:107:GLU:HG3	0.47	2.10	12	2
1:A:85:HIS:CD2	1:A:102:LEU:CG	0.47	2.98	16	1
1:A:98:VAL:HB	1:A:105:PRO:CG	0.47	2.39	5	2
1:A:14:ILE:HD13	1:A:14:ILE:N	0.47	2.24	9	2
1:A:101:GLY:O	1:A:102:LEU:O	0.47	2.32	15	2
1:A:126:ASP:OD1	1:A:126:ASP:C	0.47	2.51	15	2
1:A:18:THR:HA	1:A:29:LYS:HD3	0.47	1.86	4	1
1:A:24:ASN:O	1:A:28:GLN:CG	0.47	2.59	9	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:HB2	0.47	2.09	1	2
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:CD1	0.47	2.63	14	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:PRO:HB3	0.47	1.84	4	2
1:A:129:ILE:HA	1:A:133:LYS:HB3	0.47	1.85	19	2
1:A:19:ASN:HB2	1:A:107:GLU:O	0.47	2.09	20	3
1:A:95:GLN:HB2	1:A:99:GLN:HG3	0.47	1.85	13	1
1:A:51:PRO:CB	1:A:70:LEU:HB3	0.47	2.39	14	1
1:A:69:SER:O	1:A:120:ASN:OD1	0.47	2.32	3	2
1:A:131:GLN:HE21	1:A:131:GLN:CA	0.47	2.23	12	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:131:GLN:N	0.47	2.24	8	1
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HE3	0.47	1.86	8	1
1:A:20:ASP:HA	1:A:25:ILE:CG1	0.47	2.39	7	4
1:A:29:LYS:NZ	1:A:29:LYS:HB3	0.47	2.25	7	1
1:A:34:LEU:CB	1:A:131:GLN:HB2	0.47	2.40	9	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:109:LEU:HD11	0.47	2.41	10	1
1:A:120:ASN:O	1:A:124:ASP:HB2	0.47	2.10	18	2
1:A:89:THR:O	1:A:97:CYS:SG	0.47	2.68	19	3
1:A:27:SER:C	1:A:29:LYS:N	0.47	2.67	10	3
1:A:121:GLU:HB2	1:A:124:ASP:OD2	0.47	2.10	13	2
1:A:41:ARG:HG3	1:A:133:LYS:C	0.47	2.30	13	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:44:VAL:HB	0.47	2.45	13	1
1:A:120:ASN:O	1:A:124:ASP:CG	0.47	2.52	14	2
1:A:70:LEU:HD22	1:A:70:LEU:N	0.47	2.24	3	1
1:A:73:GLN:C	1:A:73:GLN:CD	0.47	2.74	12	2
1:A:18:THR:CB	1:A:48:ASN:HA	0.47	2.40	8	4
1:A:41:ARG:HB2	1:A:42:PHE:CZ	0.47	2.45	8	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:85:HIS:CD2	0.47	2.45	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:HB3	1:A:29:LYS:CE	0.47	2.40	11	2
1:A:14:ILE:HG23	1:A:110:TRP:HZ2	0.47	1.58	20	1
1:A:130:ILE:O	1:A:133:LYS:HD3	0.47	2.09	15	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:42:PHE:CD1	0.47	2.97	15	1
1:A:74:ILE:HD11	1:A:90:PHE:CD1	0.47	2.44	15	1
1:A:129:ILE:HA	1:A:133:LYS:HA	0.47	1.85	1	1
1:A:32:GLN:HA	1:A:35:LYS:HB3	0.47	1.86	4	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HD2	0.47	1.85	5	1
1:A:130:ILE:HG12	1:A:131:GLN:H	0.47	1.68	10	1
1:A:115:ASN:N	1:A:115:ASN:ND2	0.47	2.62	12	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:94:LEU:CB	0.47	2.96	1	3
1:A:90:PHE:CE1	1:A:102:LEU:HD22	0.47	2.44	16	1
1:A:29:LYS:HD2	1:A:108:ALA:CB	0.47	2.36	6	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:29:LYS:HB2	0.47	1.87	4	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:129:ILE:CG1	0.47	2.97	7	1
1:A:49:ARG:N	1:A:95:GLN:OE1	0.47	2.47	7	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:PRO:HG3	0.47	1.86	5	1
1:A:112:ASP:HB2	1:A:128:TYR:OH	0.47	2.09	10	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:73:GLN:NE2	0.47	2.83	10	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:CB	0.47	2.98	19	1
1:A:111:VAL:CG2	1:A:118:VAL:CG1	0.47	2.92	13	2
1:A:21:ILE:CD1	1:A:25:ILE:C	0.47	2.81	15	2
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:HB3	0.47	2.09	17	3
1:A:39:SER:HB2	1:A:132:ARG:CG	0.47	2.39	2	2
1:A:73:GLN:HA	1:A:73:GLN:NE2	0.47	2.24	5	1
1:A:17:PHE:HB2	1:A:109:LEU:HD12	0.47	1.86	19	1
1:A:30:CYS:C	1:A:32:GLN:N	0.47	2.68	19	5
1:A:48:ASN:OD1	1:A:99:GLN:NE2	0.47	2.48	19	1
1:A:34:LEU:O	1:A:131:GLN:OE1	0.47	2.33	14	3
1:A:80:VAL:HG23	1:A:86:THR:CA	0.47	2.40	6	2
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:NE2	0.47	2.48	11	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:117:LEU:CD1	0.47	2.96	20	1
1:A:67:PRO:HA	1:A:70:LEU:CD2	0.47	2.40	15	1
1:A:71:GLN:NE2	1:A:81:LEU:CD1	0.47	2.78	2	1
1:A:11:PRO:HB2	1:A:115:ASN:ND2	0.47	2.25	17	2
1:A:21:ILE:CG2	1:A:28:GLN:HG3	0.47	2.40	4	1
1:A:40:HIS:O	1:A:41:ARG:HB3	0.46	2.11	3	2
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:LYS:CG	0.46	2.84	12	2
1:A:90:PHE:O	1:A:94:LEU:HB2	0.46	2.10	15	3
1:A:56:LEU:HD22	1:A:56:LEU:C	0.46	2.30	5	2
1:A:110:TRP:HH2	1:A:117:LEU:HD22	0.46	1.68	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:TRP:N	0.46	2.48	17	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:70:LEU:HD13	0.46	1.79	4	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:132:ARG:HD2	0.46	2.39	7	1
1:A:38:VAL:HG13	1:A:39:SER:H	0.46	1.64	9	1
1:A:37:ASP:OD2	1:A:131:GLN:NE2	0.46	2.48	5	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:80:VAL:HG21	0.46	2.45	10	1
1:A:90:PHE:HZ	1:A:102:LEU:HD22	0.46	1.69	12	2
1:A:94:LEU:HG	1:A:98:VAL:CG2	0.46	2.40	20	4
1:A:39:SER:OG	1:A:40:HIS:N	0.46	2.48	8	1
1:A:112:ASP:CB	1:A:117:LEU:HG	0.46	2.40	6	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:112:ASP:OD1	0.46	2.69	20	2
1:A:38:VAL:HG22	1:A:39:SER:H	0.46	1.70	2	2
1:A:56:LEU:HG	1:A:70:LEU:CD1	0.46	2.40	10	2
1:A:76:LYS:HD2	1:A:85:HIS:CE1	0.46	2.45	9	1
1:A:79:SER:HA	1:A:84:LYS:HB3	0.46	1.87	20	4
1:A:110:TRP:NE1	1:A:119:GLY:C	0.46	2.68	13	1
1:A:60:ARG:HA	1:A:66:GLY:CA	0.46	2.39	3	2
1:A:65:GLN:HB3	1:A:69:SER:CB	0.46	2.40	3	2
1:A:25:ILE:HD13	1:A:25:ILE:N	0.46	2.26	12	2
1:A:17:PHE:CZ	1:A:111:VAL:CG2	0.46	2.97	6	1
1:A:37:ASP:O	1:A:131:GLN:CB	0.46	2.64	11	1
1:A:60:ARG:O	1:A:60:ARG:NE	0.46	2.48	4	2
1:A:71:GLN:NE2	1:A:81:LEU:HD13	0.46	2.25	4	2
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:HD23	0.46	2.26	9	1
1:A:117:LEU:HD21	1:A:129:ILE:HD11	0.46	1.83	5	1
1:A:39:SER:CB	1:A:131:GLN:O	0.46	2.63	18	2
1:A:15:SER:O	1:A:111:VAL:HG12	0.46	2.11	13	2
1:A:50:PHE:CZ	1:A:52:THR:OG1	0.46	2.65	20	2
1:A:102:LEU:HD12	1:A:103:TRP:CE2	0.46	2.45	8	1
1:A:130:ILE:CG1	1:A:131:GLN:NE2	0.46	2.79	6	1
1:A:20:ASP:CA	1:A:25:ILE:HD12	0.46	2.39	11	1
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:O	0.46	2.10	20	1
1:A:72:ARG:O	1:A:77:LEU:CD2	0.46	2.63	17	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:98:VAL:CG1	0.46	2.41	7	1
1:A:83:TYR:HA	1:A:86:THR:HG21	0.46	1.87	5	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:HD2	0.46	2.40	18	1
1:A:71:GLN:OE1	1:A:71:GLN:HA	0.46	2.11	14	1
1:A:31:LEU:CA	1:A:34:LEU:CD1	0.46	2.93	8	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:H	0.46	1.69	16	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ASN:CG	0.46	2.31	17	1
1:A:11:PRO:HG2	1:A:129:ILE:CG2	0.46	2.38	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:TRP:CB	1:A:125:ILE:HG13	0.46	2.41	3	2
1:A:31:LEU:O	1:A:35:LYS:HB3	0.46	2.09	19	2
1:A:74:ILE:CG2	1:A:80:VAL:CG1	0.46	2.91	14	2
1:A:120:ASN:OD1	1:A:121:GLU:N	0.46	2.48	12	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:90:PHE:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:79:SER:OG	1:A:85:HIS:ND1	0.46	2.47	20	1
1:A:11:PRO:HG3	1:A:128:TYR:OH	0.46	2.10	10	2
1:A:76:LYS:HD3	1:A:103:TRP:CH2	0.46	2.45	2	1
1:A:106:LYS:HE3	1:A:106:LYS:N	0.46	2.24	7	1
1:A:110:TRP:C	1:A:111:VAL:HG22	0.46	2.30	9	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:73:GLN:C	0.46	2.54	9	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:128:TYR:CE2	0.46	2.69	5	1
1:A:73:GLN:CD	1:A:109:LEU:CD2	0.46	2.84	10	1
1:A:106:LYS:HE2	1:A:106:LYS:C	0.46	2.31	19	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:HB3	0.46	2.46	13	1
1:A:84:LYS:O	1:A:87:ASP:OD1	0.46	2.32	13	1
1:A:41:ARG:HB2	1:A:42:PHE:CE2	0.46	2.46	8	1
1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CD2	0.46	2.84	16	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:74:ILE:N	0.46	2.49	11	1
1:A:75:PRO:O	1:A:77:LEU:CD1	0.46	2.64	11	2
1:A:66:GLY:O	1:A:70:LEU:HD23	0.46	2.10	1	1
1:A:94:LEU:HD22	1:A:98:VAL:CB	0.46	2.41	1	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:CD1	0.46	2.88	2	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:CD1	0.46	2.40	2	1
1:A:110:TRP:CD1	1:A:125:ILE:HG13	0.46	2.46	17	1
1:A:112:ASP:CA	1:A:117:LEU:O	0.46	2.64	4	1
1:A:89:THR:HG21	1:A:102:LEU:HD13	0.46	1.87	18	1
1:A:56:LEU:CB	1:A:70:LEU:HD11	0.46	2.40	19	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:95:GLN:HG3	0.46	2.40	1	2
1:A:20:ASP:O	1:A:21:ILE:CB	0.46	2.64	13	1
1:A:110:TRP:CG	1:A:125:ILE:HG13	0.46	2.45	1	3
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LYS:CG	0.46	2.64	11	2
1:A:20:ASP:HB3	1:A:105:PRO:HD2	0.46	1.87	7	1
1:A:53:TRP:CE3	1:A:57:GLN:HB2	0.46	2.46	3	1
1:A:126:ASP:CA	1:A:130:ILE:CG2	0.46	2.92	12	2
1:A:20:ASP:CG	1:A:98:VAL:O	0.46	2.54	12	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:125:ILE:HB	0.46	2.38	16	1
1:A:110:TRP:CD1	1:A:119:GLY:HA3	0.46	2.46	9	2
1:A:73:GLN:OE1	1:A:109:LEU:HD11	0.46	2.11	4	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:94:LEU:HD22	0.46	2.46	10	1
1:A:73:GLN:O	1:A:107:GLU:CD	0.46	2.55	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PHE:CB	1:A:109:LEU:CD1	0.46	2.94	14	1
1:A:79:SER:OG	1:A:80:VAL:N	0.46	2.49	9	3
1:A:50:PHE:N	1:A:50:PHE:CD1	0.46	2.83	20	2
1:A:21:ILE:HG13	1:A:25:ILE:HA	0.46	1.88	12	2
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:CD2	0.46	2.56	16	1
1:A:21:ILE:HG12	1:A:29:LYS:NZ	0.46	2.26	6	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:29:LYS:HE2	0.46	1.87	20	1
1:A:11:PRO:HB3	1:A:115:ASN:CG	0.46	2.32	17	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:117:LEU:HB3	0.46	2.11	4	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:109:LEU:HD12	0.46	1.88	9	1
1:A:97:CYS:O	1:A:101:GLY:N	0.45	2.49	13	3
1:A:21:ILE:HG23	1:A:106:LYS:HA	0.45	1.87	17	3
1:A:131:GLN:O	1:A:132:ARG:C	0.45	2.54	8	1
1:A:79:SER:OG	1:A:84:LYS:CD	0.45	2.64	8	1
1:A:51:PRO:O	1:A:56:LEU:CD2	0.45	2.63	11	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:108:ALA:HA	0.45	2.42	7	3
1:A:28:GLN:NE2	1:A:28:GLN:O	0.45	2.48	7	1
1:A:16:LEU:O	1:A:45:GLU:O	0.45	2.34	18	4
1:A:98:VAL:HG13	1:A:105:PRO:HG2	0.45	1.89	19	1
1:A:58:TYR:CD2	1:A:113:TRP:CE3	0.45	3.04	12	1
1:A:11:PRO:CD	1:A:133:LYS:HE3	0.45	2.41	8	1
1:A:51:PRO:CG	1:A:70:LEU:HG	0.45	2.42	8	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:29:LYS:NZ	0.45	2.48	20	2
1:A:53:TRP:CD2	1:A:53:TRP:N	0.45	2.84	15	1
1:A:41:ARG:HB3	1:A:133:LYS:C	0.45	2.32	9	1
1:A:112:ASP:N	1:A:118:VAL:HG12	0.45	2.26	5	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:HIS:ND1	0.45	2.49	10	2
1:A:56:LEU:C	1:A:58:TYR:N	0.45	2.69	14	12
1:A:69:SER:HG	1:A:120:ASN:N	0.45	2.10	13	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:98:VAL:CG2	0.45	2.91	13	1
1:A:11:PRO:HG2	1:A:14:ILE:HD11	0.45	1.88	3	1
1:A:40:HIS:CG	1:A:41:ARG:N	0.45	2.83	3	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:125:ILE:CB	0.45	2.39	16	1
1:A:111:VAL:CB	1:A:118:VAL:HG13	0.45	2.41	6	1
1:A:52:THR:C	1:A:54:ASP:N	0.45	2.69	6	2
1:A:33:LEU:HG	1:A:34:LEU:CD2	0.45	2.41	15	1
1:A:110:TRP:O	1:A:111:VAL:HG12	0.45	2.12	7	2
1:A:17:PHE:CD1	1:A:18:THR:O	0.45	2.67	10	1
1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASN:CB	0.45	2.42	18	2
1:A:51:PRO:HB3	1:A:109:LEU:CD1	0.45	2.41	19	1
1:A:18:THR:C	1:A:99:GLN:NE2	0.45	2.69	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LYS:O	1:A:80:VAL:HG12	0.45	2.11	20	3
1:A:14:ILE:HD11	1:A:133:LYS:O	0.45	2.11	3	1
1:A:29:LYS:C	1:A:29:LYS:CD	0.45	2.83	3	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:105:PRO:HB2	0.45	2.27	16	2
1:A:110:TRP:HE1	1:A:129:ILE:CD1	0.45	2.24	16	1
1:A:60:ARG:O	1:A:60:ARG:CD	0.45	2.65	20	2
1:A:16:LEU:HA	1:A:109:LEU:O	0.45	2.11	15	2
1:A:112:ASP:CG	1:A:115:ASN:CB	0.45	2.85	17	1
1:A:11:PRO:CD	1:A:128:TYR:OH	0.45	2.64	4	1
1:A:37:ASP:OD1	1:A:130:ILE:CG2	0.45	2.64	7	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:115:ASN:ND2	0.45	2.79	5	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:128:TYR:CZ	0.45	2.69	5	1
1:A:131:GLN:NE2	1:A:131:GLN:H	0.45	2.09	5	1
1:A:128:TYR:CZ	1:A:129:ILE:CG1	0.45	2.99	10	1
1:A:17:PHE:CD1	1:A:17:PHE:C	0.45	2.89	10	1
1:A:125:ILE:CG2	1:A:126:ASP:N	0.45	2.79	1	3
1:A:34:LEU:O	1:A:37:ASP:O	0.45	2.35	16	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:CD2	0.45	2.84	11	2
1:A:92:MET:SD	1:A:93:ASP:OD1	0.45	2.74	2	1
1:A:48:ASN:O	1:A:48:ASN:OD1	0.45	2.35	4	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:109:LEU:HD21	0.45	2.47	10	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:133:LYS:CB	0.45	2.95	10	1
1:A:14:ILE:HG21	1:A:110:TRP:HE1	0.45	1.71	19	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:30:CYS:CB	0.45	2.41	15	3
1:A:19:ASN:CA	1:A:98:VAL:HG11	0.45	2.42	4	3
1:A:33:LEU:HD21	1:A:125:ILE:CG2	0.45	2.41	12	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:29:LYS:HD2	0.45	2.40	12	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:94:LEU:HD22	0.45	1.88	7	2
1:A:59:MET:SD	1:A:112:ASP:O	0.45	2.74	11	1
1:A:100:ARG:O	1:A:100:ARG:NE	0.45	2.49	1	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:25:ILE:HG13	0.45	2.41	18	2
1:A:21:ILE:CD1	1:A:25:ILE:CA	0.45	2.93	5	4
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:CB	0.45	2.65	15	2
1:A:90:PHE:CZ	1:A:98:VAL:HG12	0.45	2.46	16	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:132:ARG:CD	0.45	2.94	11	1
1:A:96:LYS:O	1:A:99:GLN:HG3	0.45	2.12	11	1
1:A:106:LYS:C	1:A:106:LYS:CD	0.45	2.84	2	2
1:A:11:PRO:CG	1:A:128:TYR:CZ	0.45	2.99	4	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:94:LEU:HD21	0.45	2.27	4	1
1:A:68:VAL:HG22	1:A:72:ARG:HG3	0.45	1.88	7	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:47:ALA:O	0.45	2.35	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLN:O	1:A:66:GLY:O	0.45	2.35	16	2
1:A:18:THR:O	1:A:95:GLN:NE2	0.45	2.50	12	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:102:LEU:HD21	0.45	2.27	8	1
1:A:45:GLU:HG3	1:A:45:GLU:O	0.45	2.12	6	1
1:A:129:ILE:HB	1:A:133:LYS:HB2	0.45	1.87	15	1
1:A:29:LYS:CE	1:A:108:ALA:HA	0.45	2.42	9	1
1:A:110:TRP:CG	1:A:119:GLY:O	0.45	2.69	18	2
1:A:48:ASN:CB	1:A:95:GLN:HG3	0.45	2.42	14	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ASP:C	0.45	2.55	8	5
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:O	0.45	2.12	15	2
1:A:11:PRO:CA	1:A:115:ASN:HB3	0.45	2.42	12	3
1:A:79:SER:C	1:A:84:LYS:HB3	0.45	2.33	9	2
1:A:34:LEU:HB3	1:A:131:GLN:HA	0.45	1.89	20	2
1:A:41:ARG:O	1:A:41:ARG:NE	0.45	2.50	1	2
1:A:131:GLN:C	1:A:133:LYS:N	0.45	2.71	15	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:NZ	0.45	2.49	7	1
1:A:11:PRO:CG	1:A:129:ILE:HG21	0.45	2.42	18	2
1:A:110:TRP:CD1	1:A:124:ASP:HB2	0.45	2.46	13	1
1:A:25:ILE:CD1	1:A:25:ILE:N	0.45	2.80	13	1
1:A:120:ASN:C	1:A:121:GLU:CG	0.45	2.84	12	2
1:A:75:PRO:HG2	1:A:103:TRP:CB	0.45	2.41	12	2
1:A:76:LYS:HZ2	1:A:80:VAL:HB	0.45	1.72	20	1
1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:CE	0.45	2.41	2	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:28:GLN:CG	0.45	2.69	9	1
1:A:79:SER:HB2	1:A:85:HIS:CD2	0.45	2.47	5	1
1:A:129:ILE:HG12	1:A:129:ILE:O	0.44	2.11	13	1
1:A:83:TYR:CA	1:A:86:THR:HG23	0.44	2.42	14	6
1:A:106:LYS:O	1:A:106:LYS:HE2	0.44	2.11	10	4
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:CG2	0.44	2.95	6	1
1:A:18:THR:HG23	1:A:29:LYS:HZ3	0.44	1.70	6	1
1:A:42:PHE:N	1:A:42:PHE:HD1	0.44	2.09	11	1
1:A:79:SER:OG	1:A:84:LYS:HB3	0.44	2.12	15	2
1:A:106:LYS:N	1:A:106:LYS:HE3	0.44	2.26	15	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:117:LEU:C	0.44	2.80	5	1
1:A:11:PRO:CG	1:A:128:TYR:OH	0.44	2.65	10	1
1:A:38:VAL:O	1:A:131:GLN:OE1	0.44	2.35	18	1
1:A:106:LYS:HE2	1:A:106:LYS:CA	0.44	2.42	19	1
1:A:111:VAL:CG2	1:A:118:VAL:HG22	0.44	2.28	14	1
1:A:72:ARG:CD	1:A:77:LEU:CD2	0.44	2.94	3	2
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LYS:CB	0.44	2.65	16	2
1:A:114:GLU:OE1	1:A:114:GLU:CA	0.44	2.64	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:MET:HG3	1:A:118:VAL:CG2	0.44	2.42	17	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:N	0.44	2.66	17	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:79:SER:OG	0.44	2.12	4	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:LEU:N	0.44	2.27	4	1
1:A:94:LEU:O	1:A:98:VAL:HG23	0.44	2.13	18	1
1:A:57:GLN:O	1:A:57:GLN:CD	0.44	2.55	19	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:HD21	0.44	1.86	14	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:30:CYS:CA	0.44	2.42	3	1
1:A:131:GLN:CD	1:A:131:GLN:N	0.44	2.70	12	1
1:A:58:TYR:OH	1:A:59:MET:HE2	0.44	2.13	12	1
1:A:34:LEU:H	1:A:34:LEU:HD13	0.44	1.67	1	2
1:A:120:ASN:O	1:A:124:ASP:OD2	0.44	2.36	5	5
1:A:130:ILE:N	1:A:133:LYS:HB3	0.44	2.27	20	2
1:A:16:LEU:HG	1:A:29:LYS:CE	0.44	2.43	20	1
1:A:129:ILE:CD1	1:A:129:ILE:H	0.44	2.22	4	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:102:LEU:HD11	0.44	2.42	5	1
1:A:68:VAL:HG23	1:A:72:ARG:NH1	0.44	2.27	10	1
1:A:17:PHE:CG	1:A:109:LEU:HD12	0.44	2.48	19	1
1:A:41:ARG:CD	1:A:132:ARG:HD3	0.44	2.42	19	1
1:A:78:ASP:O	1:A:82:LYS:HG2	0.44	2.12	14	1
1:A:132:ARG:CD	1:A:133:LYS:HB2	0.44	2.42	3	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:99:GLN:O	0.44	2.35	12	1
1:A:123:ALA:O	1:A:127:LYS:HD3	0.44	2.12	6	2
1:A:15:SER:CA	1:A:111:VAL:O	0.44	2.65	16	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:O	0.44	2.35	10	1
1:A:95:GLN:CB	1:A:99:GLN:CD	0.44	2.86	19	1
1:A:84:LYS:O	1:A:87:ASP:CG	0.44	2.55	13	1
1:A:83:TYR:CA	1:A:86:THR:HG21	0.44	2.43	14	4
1:A:27:SER:HA	1:A:31:LEU:CD1	0.44	2.42	8	1
1:A:60:ARG:CZ	1:A:60:ARG:O	0.44	2.65	6	3
1:A:41:ARG:HG3	1:A:132:ARG:CD	0.44	2.43	11	1
1:A:72:ARG:C	1:A:77:LEU:HD23	0.44	2.33	17	1
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:HD3	0.44	2.12	5	2
1:A:34:LEU:CA	1:A:131:GLN:CB	0.44	2.94	9	2
1:A:110:TRP:C	1:A:111:VAL:CG2	0.44	2.85	9	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:117:LEU:CG	0.44	3.00	9	1
1:A:72:ARG:NH1	1:A:81:LEU:HD13	0.44	2.28	10	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:117:LEU:HD12	0.44	2.48	18	1
1:A:106:LYS:CE	1:A:106:LYS:N	0.44	2.81	20	2
1:A:74:ILE:CG1	1:A:75:PRO:HD2	0.44	2.43	20	8
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:CD2	0.44	2.42	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ASN:HB2	1:A:95:GLN:CG	0.44	2.43	15	5
1:A:21:ILE:H	1:A:25:ILE:CD1	0.44	2.26	11	1
1:A:20:ASP:OD2	1:A:104:ASN:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:65:GLN:O	1:A:69:SER:OG	0.44	2.35	5	1
1:A:53:TRP:CH2	1:A:67:PRO:HB2	0.44	2.48	18	1
1:A:106:LYS:HE2	1:A:106:LYS:N	0.44	2.27	19	1
1:A:78:ASP:HA	1:A:81:LEU:CG	0.44	2.43	17	3
1:A:59:MET:HE2	1:A:113:TRP:CE2	0.44	2.48	14	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:130:ILE:C	0.44	2.33	8	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:CD	0.44	2.33	16	1
1:A:76:LYS:HE2	1:A:102:LEU:CD1	0.44	2.43	20	1
1:A:80:VAL:O	1:A:82:LYS:N	0.44	2.50	20	3
1:A:37:ASP:C	1:A:131:GLN:HG3	0.44	2.33	1	1
1:A:79:SER:OG	1:A:84:LYS:HG3	0.44	2.13	1	1
1:A:24:ASN:HB2	1:A:27:SER:HB3	0.44	1.90	2	1
1:A:62:SER:O	1:A:63:CYS:SG	0.44	2.75	17	1
1:A:119:GLY:CA	1:A:124:ASP:OD2	0.44	2.65	4	1
1:A:38:VAL:HG12	1:A:39:SER:H	0.44	1.73	7	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:117:LEU:HD23	0.44	2.12	9	1
1:A:89:THR:CG2	1:A:102:LEU:HD13	0.44	2.43	18	1
1:A:110:TRP:CE3	1:A:110:TRP:O	0.44	2.71	18	1
1:A:133:LYS:CG	1:A:133:LYS:O	0.44	2.66	13	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:PRO:HA	0.44	2.43	3	1
1:A:51:PRO:HB2	1:A:70:LEU:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:72:ARG:HD3	1:A:77:LEU:CD2	0.44	2.43	3	1
1:A:125:ILE:HA	1:A:129:ILE:CD1	0.44	2.43	8	1
1:A:18:THR:HG23	1:A:26:LYS:HA	0.44	1.89	8	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:107:GLU:C	0.44	2.71	16	1
1:A:106:LYS:CD	1:A:106:LYS:C	0.44	2.85	15	1
1:A:110:TRP:HB3	1:A:125:ILE:CG1	0.44	2.42	15	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:41:ARG:HA	0.44	2.28	15	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:30:CYS:SG	0.44	2.53	1	1
1:A:57:GLN:O	1:A:61:THR:OG1	0.44	2.35	2	1
1:A:76:LYS:CD	1:A:79:SER:OG	0.44	2.65	4	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:122:PRO:HB3	0.44	2.42	5	1
1:A:35:LYS:CD	1:A:35:LYS:O	0.44	2.66	19	1
1:A:69:SER:O	1:A:120:ASN:CG	0.44	2.56	13	1
1:A:25:ILE:CG2	1:A:99:GLN:NE2	0.44	2.81	13	1
1:A:34:LEU:CG	1:A:131:GLN:HB3	0.44	2.43	12	1
1:A:76:LYS:CB	1:A:103:TRP:CZ2	0.44	3.01	8	1
1:A:53:TRP:CH2	1:A:57:GLN:NE2	0.44	2.85	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LYS:HB3	1:A:79:SER:CB	0.44	2.43	15	1
1:A:36:GLY:O	1:A:37:ASP:CG	0.44	2.57	2	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:48:ASN:CA	0.44	2.65	9	1
1:A:29:LYS:C	1:A:29:LYS:CE	0.43	2.86	3	1
1:A:93:ASP:OD2	1:A:96:LYS:HB2	0.43	2.13	2	1
1:A:22:ALA:HB3	1:A:28:GLN:CD	0.43	2.33	17	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:98:VAL:HG21	0.43	1.88	4	1
1:A:17:PHE:CB	1:A:109:LEU:CB	0.43	2.96	9	1
1:A:82:LYS:O	1:A:83:TYR:CG	0.43	2.71	10	1
1:A:42:PHE:CG	1:A:133:LYS:N	0.43	2.87	18	1
1:A:24:ASN:CB	1:A:28:GLN:H	0.43	2.26	19	1
1:A:95:GLN:O	1:A:99:GLN:HG3	0.43	2.13	19	1
1:A:53:TRP:O	1:A:57:GLN:HB2	0.43	2.12	14	3
1:A:52:THR:O	1:A:56:LEU:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:98:VAL:HG23	0.43	1.88	20	3
1:A:21:ILE:CG1	1:A:29:LYS:HD2	0.43	2.42	12	1
1:A:91:GLY:HA3	1:A:92:MET:CE	0.43	2.43	15	2
1:A:41:ARG:CD	1:A:41:ARG:C	0.43	2.86	1	2
1:A:41:ARG:CD	1:A:133:LYS:HB3	0.43	2.44	17	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:70:LEU:CD1	0.43	2.88	4	1
1:A:132:ARG:C	1:A:133:LYS:O	0.43	2.56	7	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:90:PHE:CD2	0.43	2.48	7	1
1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HZ3	0.43	1.73	5	1
1:A:76:LYS:HB3	1:A:85:HIS:NE2	0.43	2.29	5	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:133:LYS:HD2	0.43	2.48	10	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HB2	0.43	1.89	18	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:110:TRP:HB2	0.43	1.90	10	2
1:A:56:LEU:O	1:A:57:GLN:C	0.43	2.56	2	6
1:A:132:ARG:C	1:A:132:ARG:HD2	0.43	2.33	3	1
1:A:59:MET:HB3	1:A:118:VAL:CG2	0.43	2.43	3	1
1:A:72:ARG:O	1:A:77:LEU:HD11	0.43	2.12	3	1
1:A:82:LYS:CG	1:A:83:TYR:N	0.43	2.81	3	1
1:A:126:ASP:CB	1:A:130:ILE:HG22	0.43	2.43	12	1
1:A:65:GLN:HB3	1:A:68:VAL:CG1	0.43	2.43	12	1
1:A:30:CYS:HA	1:A:33:LEU:HB3	0.43	1.90	8	2
1:A:50:PHE:CB	1:A:94:LEU:CB	0.43	2.96	8	1
1:A:84:LYS:HD2	1:A:85:HIS:N	0.43	2.29	16	2
1:A:121:GLU:CG	1:A:122:PRO:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:29:LYS:HE2	0.43	2.44	20	1
1:A:125:ILE:CD1	1:A:133:LYS:CE	0.43	2.96	15	1
1:A:22:ALA:O	1:A:25:ILE:HD12	0.43	2.13	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASP:OD2	1:A:99:GLN:O	0.43	2.36	2	2
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:HB3	0.43	2.14	4	1
1:A:98:VAL:CG2	1:A:105:PRO:CG	0.43	2.97	7	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:109:LEU:CD1	0.43	2.44	9	1
1:A:65:GLN:O	1:A:65:GLN:HG3	0.43	2.13	18	1
1:A:79:SER:HA	1:A:84:LYS:HB2	0.43	1.90	13	3
1:A:67:PRO:C	1:A:69:SER:N	0.43	2.70	3	2
1:A:129:ILE:HG22	1:A:133:LYS:HD3	0.43	1.89	8	1
1:A:80:VAL:O	1:A:86:THR:OG1	0.43	2.32	16	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:33:LEU:C	0.43	2.86	1	2
1:A:13:THR:O	1:A:112:ASP:CG	0.43	2.57	20	1
1:A:11:PRO:HB3	1:A:112:ASP:OD2	0.43	2.13	1	1
1:A:73:GLN:NE2	1:A:109:LEU:HD22	0.43	2.28	2	1
1:A:79:SER:C	1:A:84:LYS:CB	0.43	2.87	9	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:115:ASN:OD1	0.43	2.67	18	1
1:A:50:PHE:HB3	1:A:90:PHE:O	0.43	2.14	18	1
1:A:59:MET:HE3	1:A:118:VAL:CG2	0.43	2.44	14	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:120:ASN:CG	0.43	2.57	3	1
1:A:68:VAL:O	1:A:72:ARG:HG2	0.43	2.13	16	4
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:CG1	0.43	2.96	15	1
1:A:36:GLY:O	1:A:37:ASP:O	0.43	2.35	1	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:NE	0.43	2.81	2	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:109:LEU:CD2	0.43	2.94	10	1
1:A:20:ASP:C	1:A:21:ILE:HD12	0.43	2.32	18	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:81:LEU:HB2	0.43	1.90	18	1
1:A:42:PHE:CE2	1:A:132:ARG:N	0.43	2.87	12	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:98:VAL:O	0.43	2.36	12	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:HG3	0.43	2.14	11	1
1:A:34:LEU:O	1:A:131:GLN:HB3	0.43	2.14	1	2
1:A:11:PRO:CA	1:A:115:ASN:CG	0.43	2.87	17	2
1:A:21:ILE:CB	1:A:28:GLN:HG3	0.43	2.44	4	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:73:GLN:O	0.43	2.37	9	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:108:ALA:HB1	0.43	1.91	18	1
1:A:14:ILE:HD13	1:A:115:ASN:OD1	0.43	2.13	12	2
1:A:129:ILE:CB	1:A:133:LYS:C	0.43	2.87	19	1
1:A:42:PHE:O	1:A:42:PHE:HD1	0.43	1.95	13	1
1:A:29:LYS:HD3	1:A:108:ALA:CB	0.43	2.43	3	1
1:A:16:LEU:HD11	1:A:29:LYS:HE2	0.43	1.91	3	1
1:A:73:GLN:HG3	1:A:120:ASN:CB	0.43	2.43	8	1
1:A:92:MET:CG	1:A:93:ASP:N	0.43	2.80	4	3
1:A:110:TRP:HH2	1:A:117:LEU:HD21	0.43	1.72	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:CG	1:A:98:VAL:CG2	0.43	2.97	20	1
1:A:85:HIS:O	1:A:89:THR:HG21	0.43	2.12	7	1
1:A:56:LEU:HD21	1:A:66:GLY:HA3	0.43	1.89	5	1
1:A:106:LYS:O	1:A:106:LYS:HE3	0.43	2.14	18	3
1:A:73:GLN:HG2	1:A:109:LEU:HD23	0.43	1.91	19	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:117:LEU:HB3	0.43	2.48	14	1
1:A:120:ASN:O	1:A:124:ASP:OD1	0.43	2.37	14	1
1:A:130:ILE:O	1:A:131:GLN:C	0.43	2.57	14	1
1:A:132:ARG:O	1:A:133:LYS:HB3	0.43	2.14	12	1
1:A:75:PRO:HG3	1:A:104:ASN:O	0.43	2.14	16	2
1:A:41:ARG:HG3	1:A:132:ARG:HD2	0.43	1.89	11	1
1:A:100:ARG:O	1:A:101:GLY:O	0.43	2.37	1	1
1:A:39:SER:HA	1:A:131:GLN:O	0.43	2.13	1	1
1:A:90:PHE:O	1:A:91:GLY:C	0.43	2.57	4	2
1:A:96:LYS:CE	1:A:96:LYS:HA	0.43	2.43	17	2
1:A:59:MET:SD	1:A:113:TRP:CD1	0.43	3.12	4	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:132:ARG:HH11	0.43	2.12	7	1
1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:OE1	0.43	2.52	9	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:132:ARG:HA	0.43	2.45	18	1
1:A:80:VAL:CA	1:A:86:THR:OG1	0.43	2.67	19	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:CE	0.43	2.96	14	1
1:A:104:ASN:CG	1:A:104:ASN:O	0.43	2.58	3	3
1:A:84:LYS:HE2	1:A:85:HIS:CG	0.43	2.48	8	1
1:A:29:LYS:O	1:A:32:GLN:HG3	0.43	2.13	16	1
1:A:18:THR:CG2	1:A:29:LYS:HG3	0.43	2.42	15	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:49:ARG:HB3	0.43	2.48	2	1
1:A:12:ARG:H	1:A:115:ASN:CG	0.43	2.18	18	1
1:A:56:LEU:CB	1:A:70:LEU:CD1	0.43	2.97	19	1
1:A:115:ASN:HB3	1:A:128:TYR:OH	0.43	2.14	13	1
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:HD13	0.43	1.73	13	1
1:A:127:LYS:HD2	1:A:127:LYS:N	0.43	2.29	14	3
1:A:37:ASP:O	1:A:131:GLN:OE1	0.43	2.37	3	1
1:A:65:GLN:O	1:A:69:SER:N	0.43	2.49	3	1
1:A:52:THR:O	1:A:56:LEU:HB3	0.43	2.14	17	3
1:A:110:TRP:HZ2	1:A:117:LEU:HD11	0.43	1.61	6	1
1:A:96:LYS:CA	1:A:99:GLN:HG2	0.43	2.44	1	1
1:A:119:GLY:O	1:A:124:ASP:OD2	0.43	2.37	1	1
1:A:24:ASN:C	1:A:28:GLN:CD	0.43	2.78	9	1
1:A:130:ILE:C	1:A:130:ILE:HD13	0.43	2.33	10	1
1:A:50:PHE:HE1	1:A:80:VAL:HG21	0.43	1.74	10	1
1:A:111:VAL:HG23	1:A:111:VAL:O	0.43	2.14	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:HIS:C	1:A:87:ASP:N	0.42	2.73	19	3
1:A:95:GLN:HB2	1:A:99:GLN:OE1	0.42	2.14	19	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:LEU:HD12	0.42	2.13	13	1
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LYS:HB3	0.42	2.14	4	3
1:A:65:GLN:CG	1:A:68:VAL:CG2	0.42	2.97	13	1
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:N	0.42	2.50	9	4
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:N	0.42	2.82	8	1
1:A:50:PHE:HD1	1:A:94:LEU:HD13	0.42	1.64	8	1
1:A:130:ILE:HD11	1:A:132:ARG:HG2	0.42	1.90	15	2
1:A:73:GLN:OE1	1:A:109:LEU:CD2	0.42	2.65	20	1
1:A:110:TRP:CZ3	1:A:111:VAL:C	0.42	2.93	1	2
1:A:106:LYS:CD	1:A:106:LYS:O	0.42	2.66	2	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:90:PHE:CD1	0.42	3.01	2	1
1:A:18:THR:CB	1:A:29:LYS:HD3	0.42	2.44	4	1
1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:NZ	0.42	2.29	5	1
1:A:110:TRP:NE1	1:A:124:ASP:HB3	0.42	2.28	10	1
1:A:26:LYS:HD3	1:A:26:LYS:N	0.42	2.30	18	1
1:A:59:MET:CE	1:A:111:VAL:HB	0.42	2.44	12	2
1:A:20:ASP:OD1	1:A:99:GLN:C	0.42	2.57	12	1
1:A:113:TRP:CE3	1:A:113:TRP:O	0.42	2.72	16	1
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:N	0.42	2.87	6	1
1:A:75:PRO:O	1:A:77:LEU:N	0.42	2.49	11	2
1:A:59:MET:CE	1:A:118:VAL:HG12	0.42	2.44	2	1
1:A:112:ASP:O	1:A:117:LEU:O	0.42	2.37	4	1
1:A:71:GLN:CG	1:A:72:ARG:N	0.42	2.81	4	1
1:A:73:GLN:CG	1:A:109:LEU:HD21	0.42	2.45	9	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:29:LYS:HA	0.42	2.28	9	1
1:A:59:MET:HG2	1:A:118:VAL:CG2	0.42	2.44	13	1
1:A:79:SER:CA	1:A:84:LYS:CB	0.42	2.97	9	2
1:A:22:ALA:O	1:A:25:ILE:HD13	0.42	2.14	2	2
1:A:74:ILE:HG12	1:A:75:PRO:HD3	0.42	1.91	12	2
1:A:75:PRO:O	1:A:76:LYS:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:51:PRO:O	1:A:53:TRP:CE3	0.42	2.72	16	1
1:A:94:LEU:CD2	1:A:95:GLN:N	0.42	2.63	16	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:128:TYR:OH	0.42	2.58	20	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:125:ILE:CD1	0.42	3.08	20	1
1:A:79:SER:OG	1:A:85:HIS:CB	0.42	2.66	20	1
1:A:48:ASN:H	1:A:48:ASN:ND2	0.42	2.12	15	1
1:A:17:PHE:C	1:A:29:LYS:HZ2	0.42	2.18	7	1
1:A:16:LEU:HD11	1:A:125:ILE:HD12	0.42	1.90	9	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:20:ASP:C	0.42	2.58	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ASN:HB3	1:A:107:GLU:O	0.42	2.14	5	2
1:A:17:PHE:CD1	1:A:49:ARG:O	0.42	2.72	10	1
1:A:11:PRO:C	1:A:115:ASN:OD1	0.42	2.58	18	1
1:A:25:ILE:H	1:A:25:ILE:CD1	0.42	2.27	13	1
1:A:65:GLN:HG3	1:A:68:VAL:CG2	0.42	2.45	13	1
1:A:83:TYR:HA	1:A:86:THR:HG23	0.42	1.91	1	3
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CZ	0.42	3.05	12	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:HB2	0.42	2.42	8	1
1:A:16:LEU:HD21	1:A:30:CYS:HB3	0.42	1.91	15	1
1:A:130:ILE:HG12	1:A:132:ARG:H	0.42	1.74	1	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:OE1	0.42	2.14	1	1
1:A:33:LEU:O	1:A:131:GLN:OE1	0.42	2.38	9	1
1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:O	0.42	2.15	5	1
1:A:50:PHE:HD1	1:A:50:PHE:N	0.42	2.11	5	1
1:A:29:LYS:HZ1	1:A:106:LYS:C	0.42	2.18	10	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:131:GLN:HE21	0.42	1.72	12	1
1:A:73:GLN:HG3	1:A:109:LEU:CD2	0.42	2.41	12	1
1:A:117:LEU:CG	1:A:128:TYR:CE2	0.42	3.02	8	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:LYS:HG2	0.42	2.14	8	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:29:LYS:CE	0.42	2.67	20	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:95:GLN:NE2	0.42	2.53	18	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:109:LEU:HD22	0.42	2.34	13	1
1:A:38:VAL:O	1:A:39:SER:OG	0.42	2.36	3	3
1:A:130:ILE:CD1	1:A:132:ARG:HD3	0.42	2.44	12	1
1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:CYS:HB2	0.42	1.91	8	1
1:A:30:CYS:C	1:A:34:LEU:HD11	0.42	2.35	8	1
1:A:41:ARG:HG2	1:A:132:ARG:CD	0.42	2.45	8	1
1:A:90:PHE:C	1:A:91:GLY:O	0.42	2.58	8	4
1:A:73:GLN:HG2	1:A:109:LEU:HD22	0.42	1.90	16	1
1:A:45:GLU:OE1	1:A:46:ILE:C	0.42	2.57	6	1
1:A:65:GLN:CB	1:A:68:VAL:HG22	0.42	2.45	20	1
1:A:18:THR:CA	1:A:29:LYS:HD3	0.42	2.44	4	1
1:A:59:MET:CE	1:A:113:TRP:CD1	0.42	3.02	4	1
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:O	0.42	2.73	10	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:118:VAL:HA	0.42	2.50	18	1
1:A:73:GLN:HG2	1:A:109:LEU:CD2	0.42	2.45	19	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:125:ILE:CD1	0.42	2.44	14	1
1:A:30:CYS:HB3	1:A:46:ILE:CG1	0.42	2.45	14	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:108:ALA:CB	0.42	2.83	3	1
1:A:106:LYS:CA	1:A:106:LYS:HE3	0.42	2.44	11	2
1:A:11:PRO:HD3	1:A:128:TYR:OH	0.42	2.14	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASP:CG	1:A:21:ILE:N	0.42	2.73	8	1
1:A:15:SER:HB3	1:A:111:VAL:CG2	0.42	2.45	6	1
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:HG23	0.42	2.14	6	1
1:A:11:PRO:HG3	1:A:117:LEU:CD2	0.42	2.44	20	2
1:A:32:GLN:HA	1:A:35:LYS:HB2	0.42	1.92	20	1
1:A:92:MET:CE	1:A:92:MET:N	0.42	2.83	9	1
1:A:37:ASP:CG	1:A:38:VAL:N	0.42	2.70	18	1
1:A:80:VAL:CB	1:A:86:THR:OG1	0.42	2.68	19	1
1:A:73:GLN:HG2	1:A:109:LEU:CD1	0.42	2.45	13	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:132:ARG:CB	0.42	3.03	13	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:26:LYS:HA	0.42	2.15	14	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:90:PHE:CE2	0.42	3.02	12	1
1:A:76:LYS:CB	1:A:103:TRP:CH2	0.42	3.03	8	1
1:A:117:LEU:O	1:A:118:VAL:CG1	0.42	2.68	16	1
1:A:108:ALA:HB3	1:A:122:PRO:CA	0.42	2.44	2	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:48:ASN:O	0.42	2.58	17	1
1:A:16:LEU:CG	1:A:30:CYS:SG	0.42	3.08	9	1
1:A:56:LEU:HB2	1:A:70:LEU:CD1	0.42	2.43	19	1
1:A:128:TYR:CD1	1:A:129:ILE:HG23	0.42	2.49	13	1
1:A:67:PRO:O	1:A:71:GLN:HG2	0.42	2.14	13	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:30:CYS:N	0.42	2.30	3	1
1:A:39:SER:N	1:A:132:ARG:NE	0.42	2.68	8	1
1:A:15:SER:O	1:A:111:VAL:N	0.42	2.51	7	2
1:A:106:LYS:HD2	1:A:106:LYS:O	0.42	2.15	2	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:131:GLN:OE1	0.42	2.13	9	1
1:A:110:TRP:CH2	1:A:128:TYR:CD2	0.42	3.08	18	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:115:ASN:OD1	0.42	2.38	18	1
1:A:84:LYS:HE3	1:A:85:HIS:CG	0.42	2.50	18	2
1:A:89:THR:HG21	1:A:102:LEU:HD11	0.42	1.90	19	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:111:VAL:O	0.42	2.14	13	1
1:A:128:TYR:CD1	1:A:128:TYR:C	0.42	2.92	14	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:108:ALA:HB1	0.42	2.44	3	1
1:A:131:GLN:NE2	1:A:131:GLN:CA	0.42	2.82	12	1
1:A:129:ILE:CB	1:A:133:LYS:HB3	0.42	2.45	8	1
1:A:76:LYS:HE3	1:A:90:PHE:CE1	0.42	2.50	20	1
1:A:129:ILE:HB	1:A:133:LYS:O	0.42	2.14	7	1
1:A:89:THR:CG2	1:A:90:PHE:CD2	0.42	3.02	7	1
1:A:111:VAL:HG13	1:A:118:VAL:HG11	0.42	1.85	9	1
1:A:112:ASP:HB2	1:A:117:LEU:CD1	0.41	2.45	18	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HB2	0.41	2.50	19	1
1:A:91:GLY:N	1:A:92:MET:HE3	0.41	2.30	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:LEU:CG	1:A:128:TYR:CD2	0.41	3.03	8	1
1:A:85:HIS:HD2	1:A:102:LEU:HD21	0.41	1.71	16	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:HD22	0.41	2.36	11	1
1:A:25:ILE:HG21	1:A:95:GLN:CD	0.41	2.35	15	1
1:A:94:LEU:HD22	1:A:98:VAL:CG2	0.41	2.45	1	1
1:A:14:ILE:HD11	1:A:42:PHE:HD2	0.41	1.75	4	1
1:A:51:PRO:HG3	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.45	5	1
1:A:110:TRP:CZ2	1:A:128:TYR:CB	0.41	3.02	10	1
1:A:42:PHE:CB	1:A:133:LYS:C	0.41	2.89	18	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:95:GLN:NE2	0.41	2.68	18	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:34:LEU:HD11	0.41	2.45	19	1
1:A:95:GLN:C	1:A:97:CYS:N	0.41	2.72	13	2
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CD2	0.41	2.83	9	2
1:A:18:THR:HB	1:A:48:ASN:HA	0.41	1.91	16	3
1:A:12:ARG:C	1:A:115:ASN:OD1	0.41	2.58	12	1
1:A:117:LEU:HA	1:A:117:LEU:HD13	0.41	1.75	12	1
1:A:93:ASP:CB	1:A:96:LYS:HG2	0.41	2.45	4	2
1:A:77:LEU:CB	1:A:81:LEU:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:95:GLN:OE1	1:A:95:GLN:O	0.41	2.39	16	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:70:LEU:CD1	0.41	2.42	11	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:131:GLN:H	0.41	2.28	7	1
1:A:37:ASP:HB3	1:A:131:GLN:NE2	0.41	2.30	13	1
1:A:59:MET:CE	1:A:113:TRP:CG	0.41	3.02	14	1
1:A:58:TYR:CE2	1:A:59:MET:CE	0.41	3.03	12	1
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:HB2	0.41	2.16	8	1
1:A:59:MET:HE2	1:A:111:VAL:HG13	0.41	1.91	16	1
1:A:79:SER:C	1:A:86:THR:HB	0.41	2.36	11	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:PRO:HD2	0.41	1.91	20	1
1:A:90:PHE:HE1	1:A:98:VAL:HG23	0.41	1.61	17	1
1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASN:HB2	0.41	1.92	4	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:131:GLN:NE2	0.41	2.31	7	1
1:A:80:VAL:O	1:A:86:THR:HB	0.41	2.16	9	1
1:A:73:GLN:NE2	1:A:120:ASN:HB2	0.41	2.29	5	1
1:A:96:LYS:HA	1:A:99:GLN:HG2	0.41	1.92	5	1
1:A:41:ARG:CZ	1:A:41:ARG:HB3	0.41	2.45	5	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:105:PRO:HG2	0.41	2.46	10	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:81:LEU:CD2	0.41	2.45	18	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:122:PRO:CA	0.41	2.45	19	1
1:A:49:ARG:O	1:A:94:LEU:CD2	0.41	2.69	3	2
1:A:42:PHE:CD1	1:A:133:LYS:HG3	0.41	2.50	8	1
1:A:17:PHE:O	1:A:29:LYS:HD2	0.41	2.15	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:VAL:O	1:A:131:GLN:CG	0.41	2.68	12	2
1:A:14:ILE:O	1:A:45:GLU:OE1	0.41	2.39	16	1
1:A:14:ILE:CG2	1:A:133:LYS:NZ	0.41	2.84	15	1
1:A:76:LYS:HD3	1:A:85:HIS:CE1	0.41	2.50	1	1
1:A:38:VAL:O	1:A:39:SER:HB3	0.41	2.16	4	1
1:A:18:THR:HA	1:A:29:LYS:HE3	0.41	1.93	14	1
1:A:72:ARG:HA	1:A:77:LEU:CD1	0.41	2.46	3	2
1:A:11:PRO:O	1:A:133:LYS:NZ	0.41	2.52	8	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:94:LEU:HB2	0.41	2.51	8	1
1:A:117:LEU:C	1:A:118:VAL:HG13	0.41	2.36	16	1
1:A:115:ASN:C	1:A:116:LYS:CD	0.41	2.89	11	1
1:A:24:ASN:HB2	1:A:27:SER:HB2	0.41	1.92	20	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:46:ILE:CG2	0.41	2.99	20	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:70:LEU:CD2	0.41	2.45	2	1
1:A:41:ARG:O	1:A:41:ARG:HD3	0.41	2.16	17	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG3	0.41	1.91	4	1
1:A:94:LEU:O	1:A:98:VAL:HG12	0.41	2.16	7	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:68:VAL:CG1	0.41	2.98	10	1
1:A:87:ASP:C	1:A:89:THR:H	0.41	2.19	19	4
1:A:73:GLN:O	1:A:73:GLN:OE1	0.41	2.39	13	1
1:A:55:GLN:C	1:A:57:GLN:N	0.41	2.73	12	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:LYS:HG2	0.41	2.36	12	1
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:108:ALA:O	0.41	2.39	16	1
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LYS:HG2	0.41	2.16	11	1
1:A:106:LYS:CE	1:A:107:GLU:HG3	0.41	2.46	20	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:94:LEU:HB3	0.41	2.50	1	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:31:LEU:H	0.41	2.29	17	1
1:A:63:CYS:SG	1:A:64:PRO:HD2	0.41	2.55	4	1
1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:ND1	0.41	2.74	7	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:N	0.41	2.89	7	1
1:A:110:TRP:HZ2	1:A:117:LEU:CD1	0.41	2.28	9	1
1:A:65:GLN:CA	1:A:68:VAL:CG1	0.41	2.98	10	1
1:A:13:THR:CB	1:A:114:GLU:OE1	0.41	2.69	10	1
1:A:73:GLN:CG	1:A:120:ASN:HB2	0.41	2.45	14	1
1:A:39:SER:N	1:A:131:GLN:NE2	0.41	2.69	3	1
1:A:111:VAL:CB	1:A:118:VAL:HG12	0.41	2.45	8	1
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:CD	0.41	2.59	8	1
1:A:32:GLN:CG	1:A:33:LEU:N	0.41	2.83	16	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:133:LYS:HD2	0.41	2.45	11	1
1:A:65:GLN:O	1:A:68:VAL:HG13	0.41	2.15	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:LEU:O	1:A:56:LEU:CD2	0.41	2.54	15	1
1:A:121:GLU:N	1:A:124:ASP:OD2	0.41	2.53	1	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:GLN:HG3	0.41	2.31	2	1
1:A:57:GLN:CG	1:A:58:TYR:N	0.41	2.84	17	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:77:LEU:H	0.41	1.74	7	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:97:CYS:SG	0.41	2.56	7	1
1:A:129:ILE:HA	1:A:133:LYS:HG3	0.41	1.92	10	1
1:A:24:ASN:O	1:A:25:ILE:C	0.41	2.59	19	1
1:A:95:GLN:HB3	1:A:99:GLN:CD	0.41	2.36	19	1
1:A:29:LYS:HD3	1:A:107:GLU:O	0.41	2.15	19	1
1:A:14:ILE:HD12	1:A:129:ILE:HG13	0.41	1.92	3	1
1:A:42:PHE:CD2	1:A:132:ARG:C	0.41	2.94	12	1
1:A:68:VAL:O	1:A:72:ARG:CD	0.41	2.69	12	1
1:A:16:LEU:HD11	1:A:29:LYS:HD3	0.41	1.93	8	1
1:A:125:ILE:HA	1:A:129:ILE:HD12	0.41	1.92	8	1
1:A:123:ALA:O	1:A:127:LYS:HD2	0.41	2.16	8	1
1:A:66:GLY:O	1:A:70:LEU:HG	0.41	2.16	11	1
1:A:27:SER:O	1:A:28:GLN:C	0.41	2.59	20	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:120:ASN:CG	0.41	2.36	20	1
1:A:18:THR:O	1:A:19:ASN:OD1	0.41	2.38	1	1
1:A:40:HIS:O	1:A:132:ARG:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:100:ARG:CD	1:A:100:ARG:C	0.41	2.89	17	1
1:A:27:SER:O	1:A:31:LEU:HB3	0.41	2.14	4	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:30:CYS:HB2	0.41	2.46	4	1
1:A:49:ARG:C	1:A:94:LEU:CD1	0.41	2.89	4	1
1:A:73:GLN:NE2	1:A:105:PRO:CB	0.41	2.83	4	1
1:A:99:GLN:OE1	1:A:100:ARG:N	0.41	2.53	4	1
1:A:98:VAL:CG2	1:A:105:PRO:HG2	0.41	2.46	7	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:HG23	0.41	1.93	7	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:107:GLU:CD	0.41	2.59	5	1
1:A:10:GLN:OE1	1:A:133:LYS:NZ	0.41	2.54	5	1
1:A:125:ILE:CG2	1:A:130:ILE:HA	0.41	2.46	3	2
1:A:27:SER:HB3	1:A:31:LEU:CG	0.41	2.45	19	1
1:A:95:GLN:C	1:A:99:GLN:HG3	0.41	2.36	19	1
1:A:49:ARG:O	1:A:51:PRO:HD3	0.41	2.16	12	1
1:A:74:ILE:CG1	1:A:75:PRO:CD	0.41	2.99	12	2
1:A:110:TRP:HD1	1:A:125:ILE:CD1	0.41	2.28	20	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:114:GLU:CG	0.41	2.46	20	1
1:A:76:LYS:CG	1:A:79:SER:HB2	0.41	2.46	15	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:CG2	0.41	2.99	7	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:98:VAL:CG2	0.41	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:THR:HG22	1:A:25:ILE:O	0.41	2.14	9	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:LYS:HE2	0.41	2.15	5	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:98:VAL:HG12	0.40	2.46	18	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:GLN:HB3	0.40	2.31	18	1
1:A:75:PRO:CD	1:A:105:PRO:HB3	0.40	2.46	19	1
1:A:60:ARG:CG	1:A:67:PRO:HD3	0.40	2.46	14	1
1:A:42:PHE:CD2	1:A:43:ASP:N	0.40	2.89	3	1
1:A:77:LEU:HB2	1:A:81:LEU:CD2	0.40	2.46	16	2
1:A:85:HIS:CG	1:A:102:LEU:CD1	0.40	2.85	6	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:PRO:CB	0.40	2.45	4	1
1:A:37:ASP:O	1:A:38:VAL:HG22	0.40	2.16	7	1
1:A:73:GLN:CG	1:A:74:ILE:N	0.40	2.85	9	1
1:A:50:PHE:N	1:A:94:LEU:HB3	0.40	2.31	10	1
1:A:98:VAL:HG22	1:A:105:PRO:CG	0.40	2.46	10	1
1:A:39:SER:HB3	1:A:131:GLN:C	0.40	2.37	18	1
1:A:42:PHE:HE1	1:A:131:GLN:O	0.40	1.99	19	1
1:A:76:LYS:CD	1:A:79:SER:HB3	0.40	2.47	19	1
1:A:73:GLN:OE1	1:A:120:ASN:OD1	0.40	2.39	3	1
1:A:67:PRO:O	1:A:69:SER:N	0.40	2.55	3	1
1:A:58:TYR:CE1	1:A:59:MET:HB2	0.40	2.52	12	1
1:A:39:SER:HB3	1:A:132:ARG:CG	0.40	2.47	8	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:122:PRO:O	0.40	2.69	16	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:103:TRP:CE3	0.40	3.04	11	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:95:GLN:OE1	0.40	2.39	20	1
1:A:40:HIS:ND1	1:A:40:HIS:O	0.40	2.54	15	1
1:A:95:GLN:N	1:A:95:GLN:CD	0.40	2.73	7	1
1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:HD12	0.40	1.91	9	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:133:LYS:C	0.40	2.89	9	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:80:VAL:CG2	0.40	3.04	10	1
1:A:110:TRP:O	1:A:111:VAL:HG13	0.40	2.16	19	1
1:A:25:ILE:CG2	1:A:99:GLN:HG2	0.40	2.46	19	1
1:A:19:ASN:CB	1:A:98:VAL:HG11	0.40	2.46	13	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:29:LYS:N	0.40	2.25	3	2
1:A:51:PRO:CB	1:A:70:LEU:HD12	0.40	2.47	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:57:GLN:OE1	0.40	2.38	17	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:73:GLN:CD	0.40	2.60	4	1
1:A:28:GLN:HA	1:A:32:GLN:HG3	0.40	1.93	10	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:46:ILE:HG13	0.40	2.46	19	1
1:A:30:CYS:O	1:A:34:LEU:HG	0.40	2.17	8	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:133:LYS:CB	0.40	3.02	8	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:24:ASN:O	0.40	2.16	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:THR:O	1:A:56:LEU:N	0.40	2.53	6	1
1:A:22:ALA:CB	1:A:28:GLN:HG2	0.40	2.44	15	1
1:A:39:SER:CB	1:A:132:ARG:HG2	0.40	2.47	2	1
1:A:90:PHE:CZ	1:A:102:LEU:CD1	0.40	3.05	17	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:73:GLN:OE1	0.40	2.39	4	1
1:A:27:SER:CA	1:A:31:LEU:CB	0.40	2.97	4	1
1:A:39:SER:HB2	1:A:132:ARG:CD	0.40	2.47	5	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:95:GLN:CG	0.40	2.70	18	1
1:A:100:ARG:O	1:A:100:ARG:CG	0.40	2.69	3	1
1:A:129:ILE:O	1:A:129:ILE:HD12	0.40	2.17	8	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:29:LYS:HE3	0.40	2.17	8	1
1:A:20:ASP:CB	1:A:105:PRO:O	0.40	2.70	11	1
1:A:14:ILE:O	1:A:45:GLU:CG	0.40	2.69	20	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:52:THR:OG1	0.40	2.75	20	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:68:VAL:HB	0.40	2.47	15	1
1:A:41:ARG:HG3	1:A:132:ARG:O	0.40	2.17	2	1
1:A:24:ASN:C	1:A:26:LYS:N	0.40	2.74	9	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:48:ASN:HB3	0.40	2.16	9	1
1:A:56:LEU:HD21	1:A:66:GLY:CA	0.40	2.47	5	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	123/133 (92%)	79±4 (64±3%)	24±4 (19±3%)	21±2 (17±2%)	0	4
All	All	2460/2660 (92%)	1576 (64%)	474 (19%)	410 (17%)	0	4

All 38 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	100	ARG	20
1	A	21	ILE	20
1	A	87	ASP	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	85	HIS	20
1	A	29	LYS	20
1	A	84	LYS	20
1	A	130	ILE	20
1	A	91	GLY	20
1	A	23	SER	18
1	A	102	LEU	18
1	A	92	MET	18
1	A	99	GLN	17
1	A	20	ASP	16
1	A	106	LYS	14
1	A	121	GLU	14
1	A	39	SER	14
1	A	66	GLY	10
1	A	101	GLY	10
1	A	41	ARG	10
1	A	40	HIS	9
1	A	78	ASP	9
1	A	76	LYS	8
1	A	36	GLY	7
1	A	57	GLN	6
1	A	83	TYR	6
1	A	131	GLN	6
1	A	38	VAL	5
1	A	22	ALA	5
1	A	31	LEU	5
1	A	67	PRO	4
1	A	37	ASP	4
1	A	128	TYR	4
1	A	11	PRO	3
1	A	75	PRO	3
1	A	114	GLU	2
1	A	28	GLN	2
1	A	132	ARG	2
1	A	63	CYS	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	115/124 (93%)	59±4 (52±4%)	56±4 (48±4%)	0	1
All	All	2300/2480 (93%)	1187 (52%)	1113 (48%)	0	1

All 102 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	ILE	20
1	A	106	LYS	20
1	A	34	LEU	20
1	A	94	LEU	20
1	A	74	ILE	20
1	A	56	LEU	20
1	A	92	MET	20
1	A	102	LEU	19
1	A	87	ASP	19
1	A	77	LEU	19
1	A	61	THR	19
1	A	29	LYS	18
1	A	26	LYS	18
1	A	27	SER	18
1	A	45	GLU	18
1	A	60	ARG	18
1	A	16	LEU	17
1	A	129	ILE	17
1	A	81	LEU	17
1	A	125	ILE	17
1	A	82	LYS	17
1	A	132	ARG	16
1	A	63	CYS	16
1	A	127	LYS	16
1	A	99	GLN	16
1	A	42	PHE	16
1	A	130	ILE	15
1	A	103	TRP	15
1	A	89	THR	15
1	A	121	GLU	15
1	A	73	GLN	15
1	A	86	THR	15
1	A	15	SER	15
1	A	117	LEU	15
1	A	49	ARG	14
1	A	41	ARG	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	131	GLN	14
1	A	115	ASN	14
1	A	79	SER	14
1	A	33	LEU	13
1	A	57	GLN	13
1	A	112	ASP	13
1	A	84	LYS	13
1	A	76	LYS	13
1	A	133	LYS	12
1	A	126	ASP	12
1	A	95	GLN	12
1	A	72	ARG	12
1	A	50	PHE	12
1	A	69	SER	12
1	A	109	LEU	12
1	A	54	ASP	11
1	A	100	ARG	11
1	A	43	ASP	11
1	A	124	ASP	11
1	A	59	MET	10
1	A	116	LYS	10
1	A	38	VAL	10
1	A	52	THR	10
1	A	35	LYS	9
1	A	40	HIS	9
1	A	53	TRP	9
1	A	113	TRP	9
1	A	110	TRP	8
1	A	30	CYS	8
1	A	23	SER	8
1	A	20	ASP	8
1	A	12	ARG	8
1	A	24	ASN	8
1	A	65	GLN	8
1	A	114	GLU	8
1	A	55	GLN	8
1	A	68	VAL	7
1	A	83	TYR	7
1	A	46	ILE	6
1	A	19	ASN	6
1	A	70	LEU	6
1	A	93	ASP	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	31	LEU	6
1	A	97	CYS	6
1	A	10	GLN	5
1	A	39	SER	5
1	A	48	ASN	5
1	A	111	VAL	5
1	A	90	PHE	4
1	A	17	PHE	4
1	A	98	VAL	3
1	A	37	ASP	3
1	A	120	ASN	3
1	A	71	GLN	3
1	A	96	LYS	3
1	A	25	ILE	3
1	A	104	ASN	2
1	A	28	GLN	2
1	A	44	VAL	2
1	A	18	THR	2
1	A	85	HIS	2
1	A	118	VAL	1
1	A	58	TYR	1
1	A	107	GLU	1
1	A	62	SER	1
1	A	128	TYR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided