



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:43 PM BST

PDB ID : 1FZT  
Title : SOLUTION STRUCTURE AND DYNAMICS OF AN OPEN B-SHEET,  
GLYCOLYTIC ENZYME-MONOMERIC 23.7 KDA PHOSPHOGLYCER-  
ATE MUTASE FROM SCHIZOSACCHAROMYCES POMBE  
Authors : Uhrinova, S.; Uhrin, D.; Nairn, J.; Price, N.C.; Fothergill-Gilmore, L.A.  
Deposited on : 2000-10-04

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

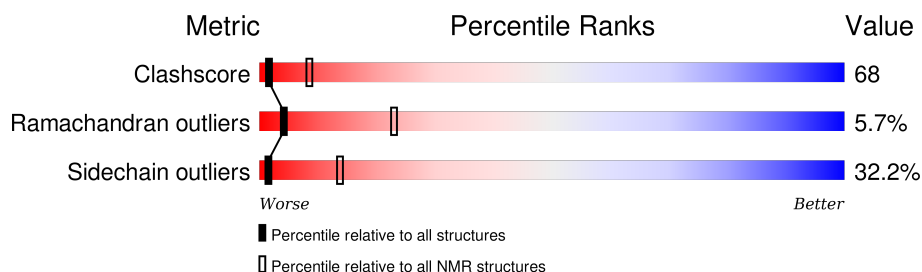
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

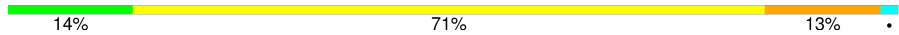
The overall completeness of chemical shifts assignment is 66%.

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  $\geq 3$ , 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	211	

## 2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 21 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 21 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:6-A:211 (206)	0.42	5

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 13, 14, 15, 17, 19, 20, 21
2	1, 7, 11
3	12, 16
Single-model clusters	18

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3382 atoms, of which 1706 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PHOSPHOGLYCERATE MUTASE.

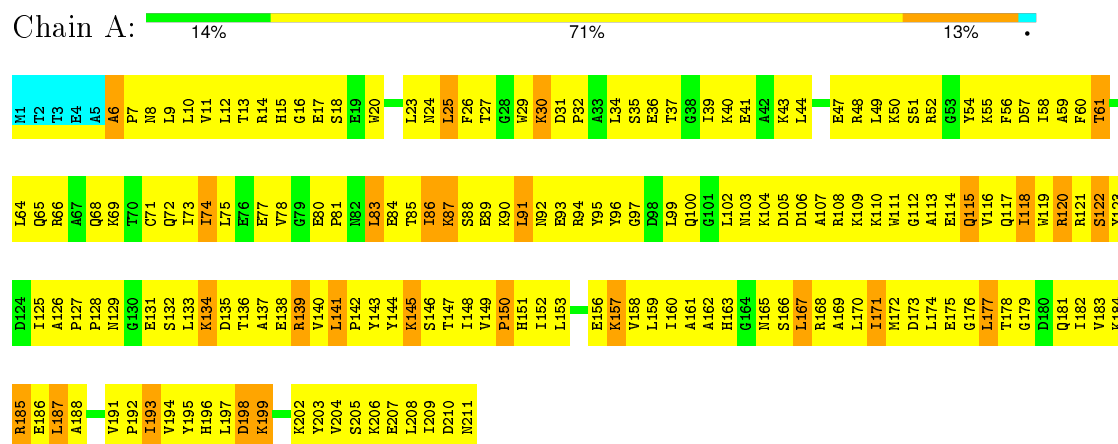
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	211	Total	C	H	N	O	S	0
			3382	1061	1706	292	320	3	

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

#### • Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

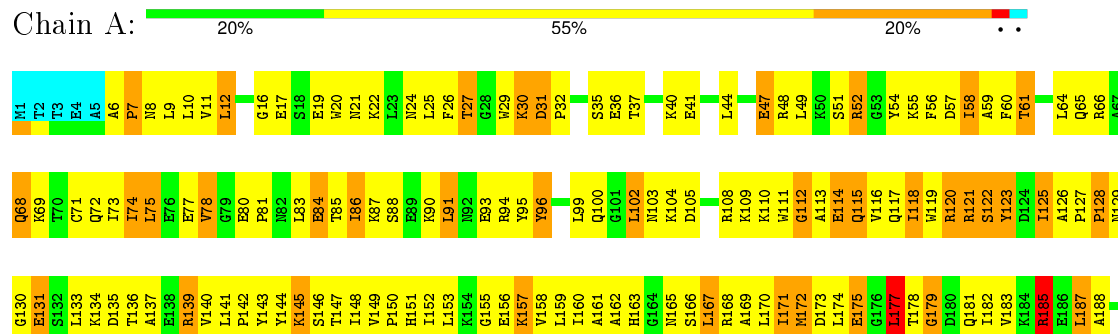


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

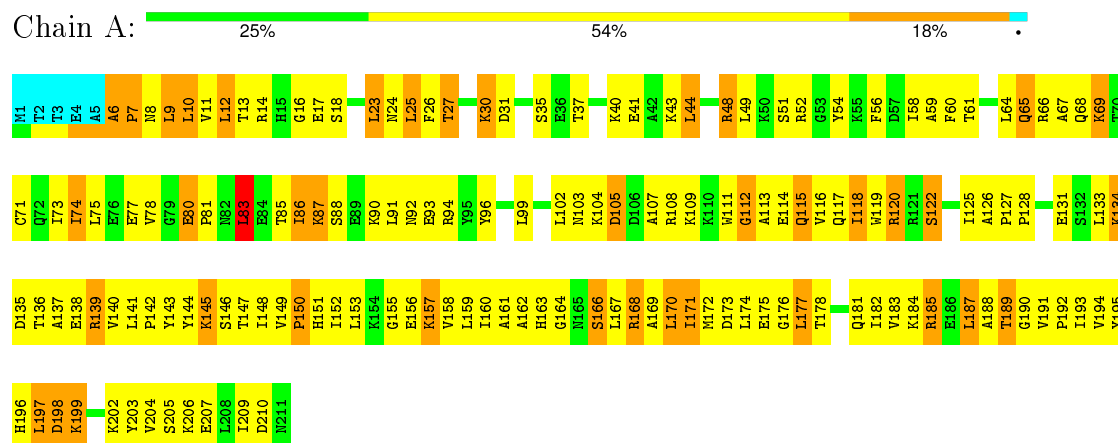
#### • Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE





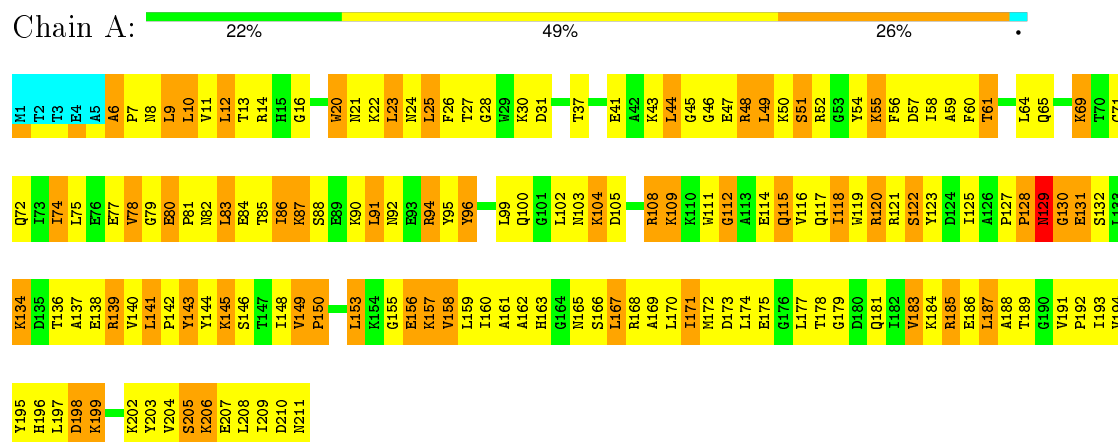
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



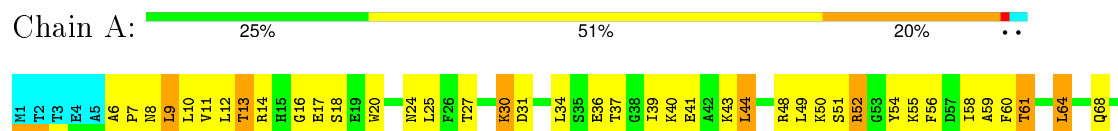
#### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

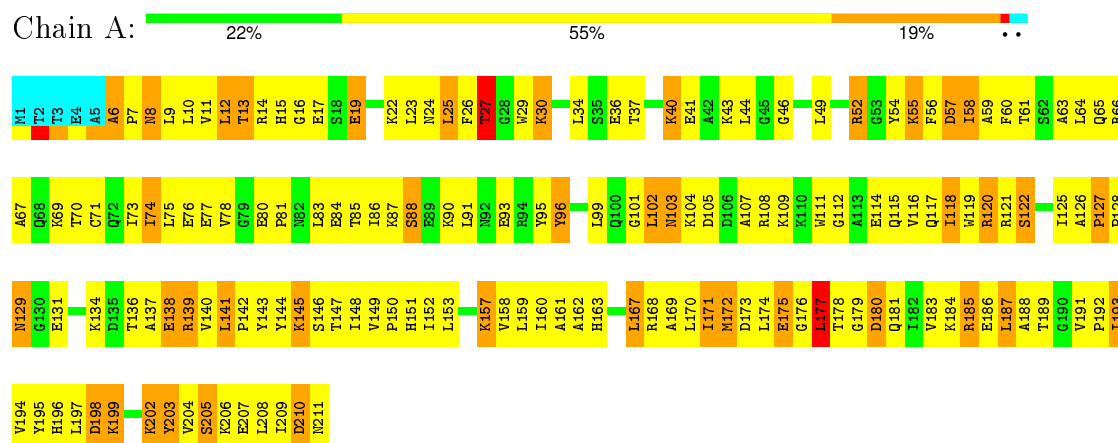
- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE





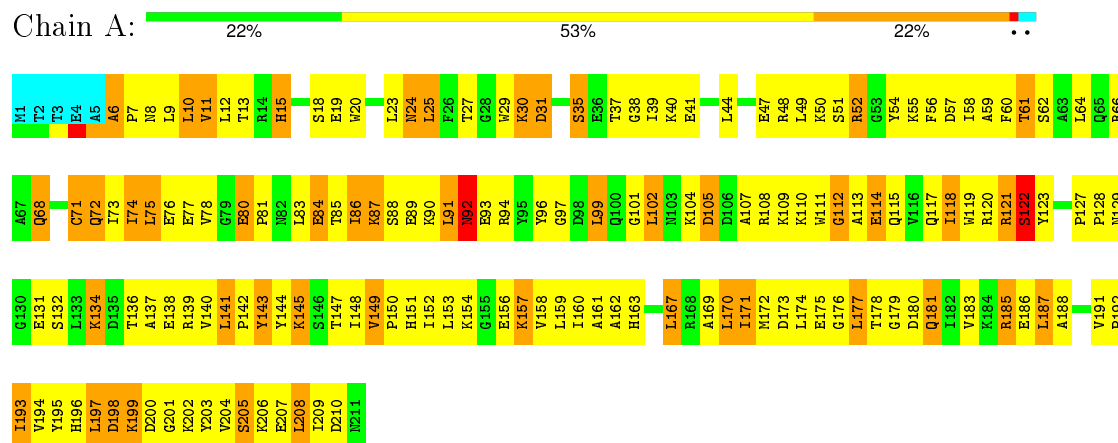
### 4.2.7 Score per residue for model 7

#### • Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



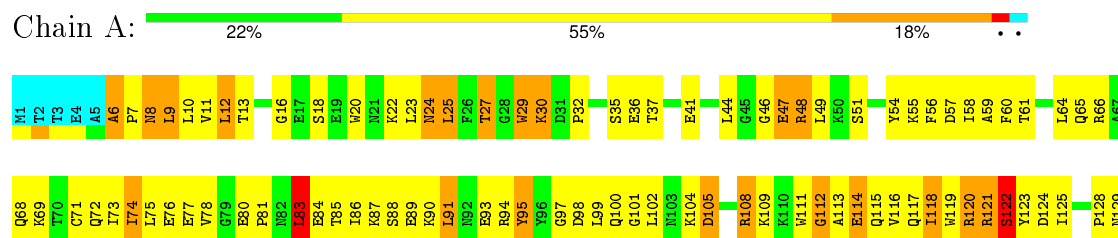
### 4.2.8 Score per residue for model 8

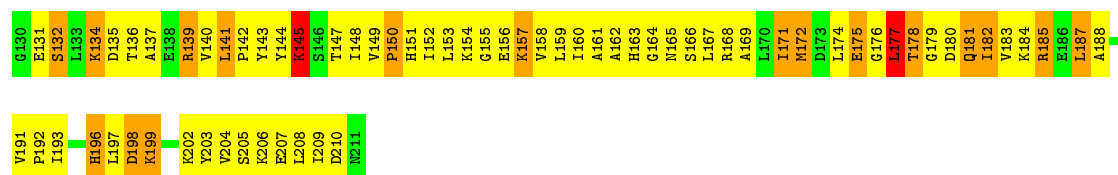
#### • Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



### 4.2.9 Score per residue for model 9

#### • Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

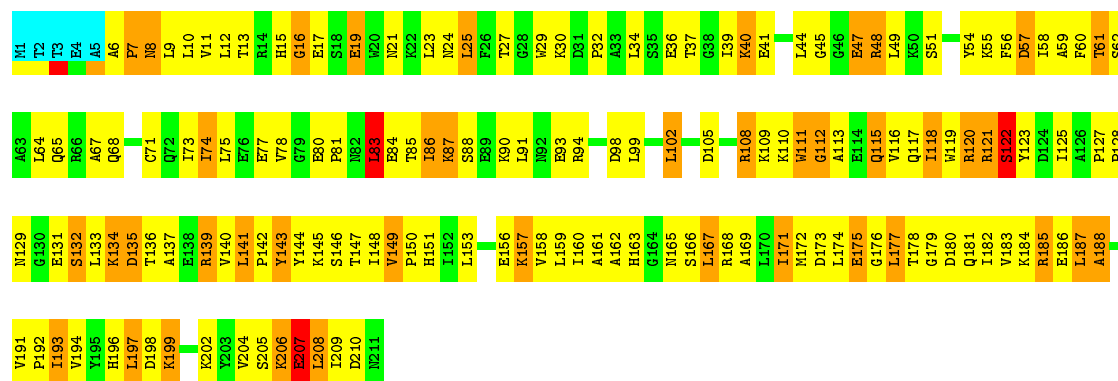




#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

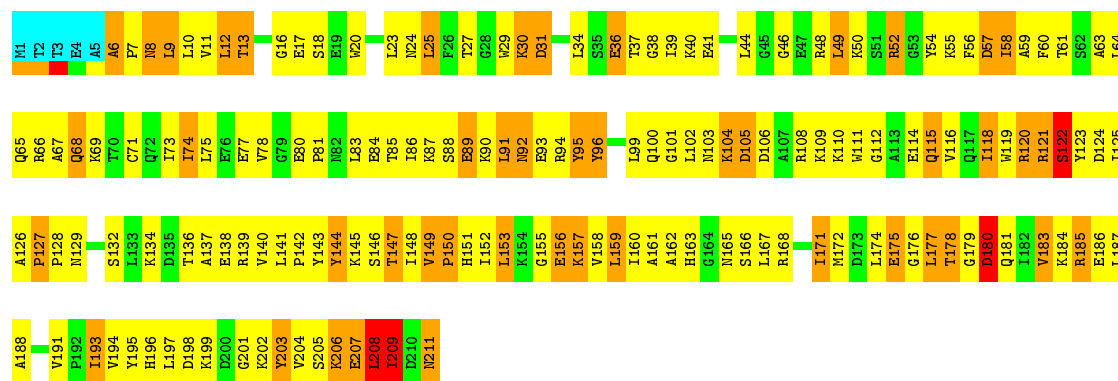
Chain A: 25% 52% 19% ..



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

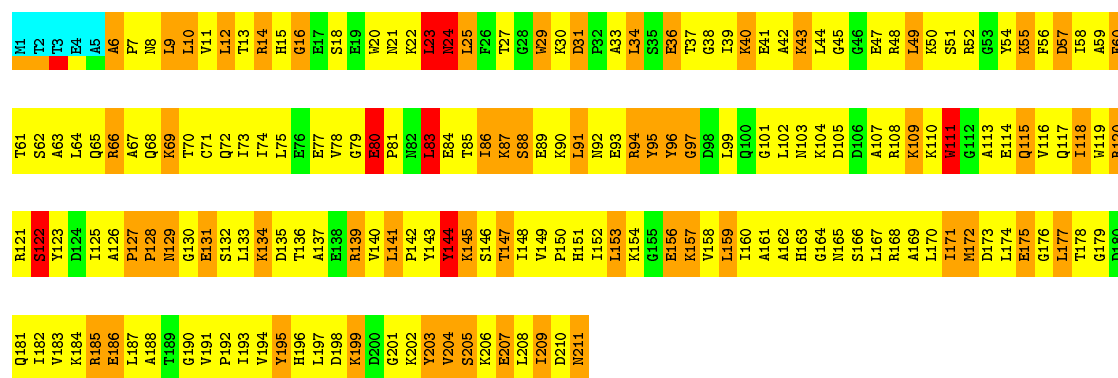
Chain A: 20% 54% 22% ..



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

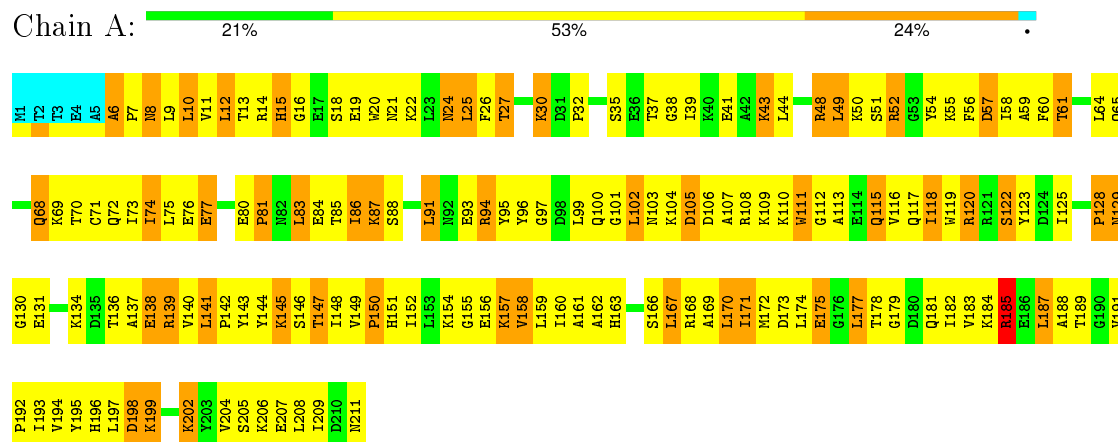
- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A: 9% 57% 27% ..



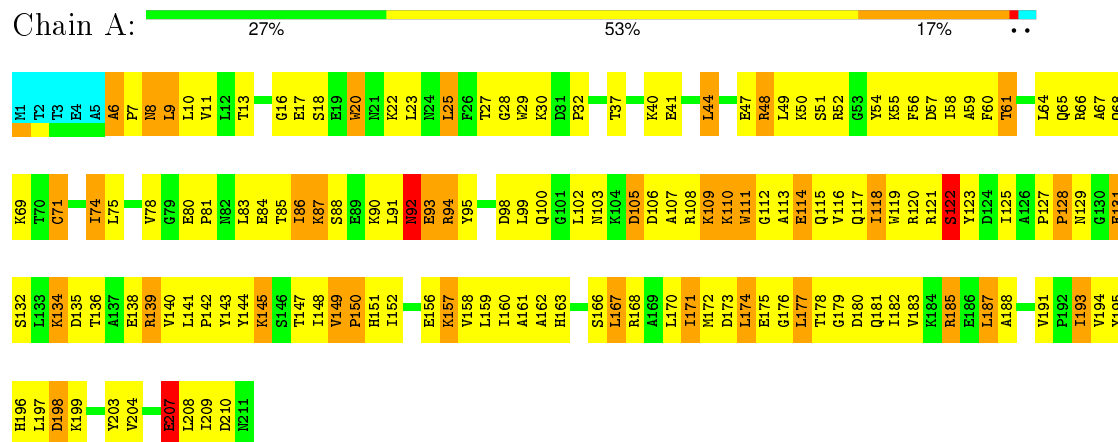
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

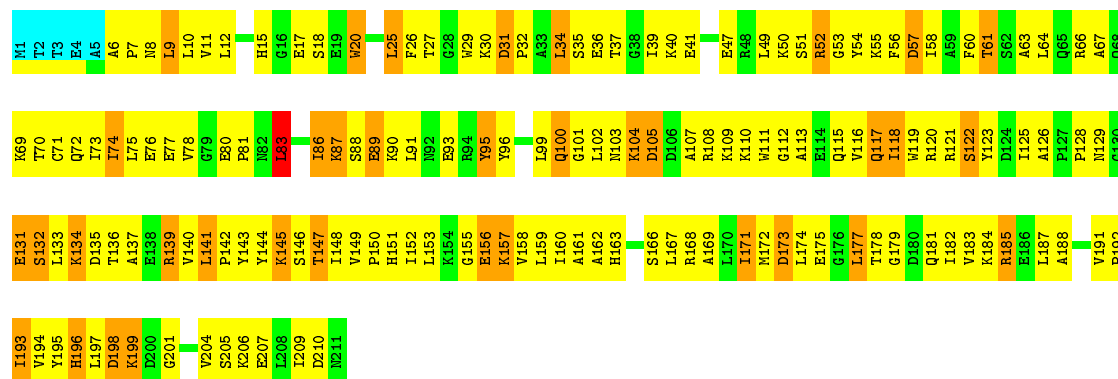
- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

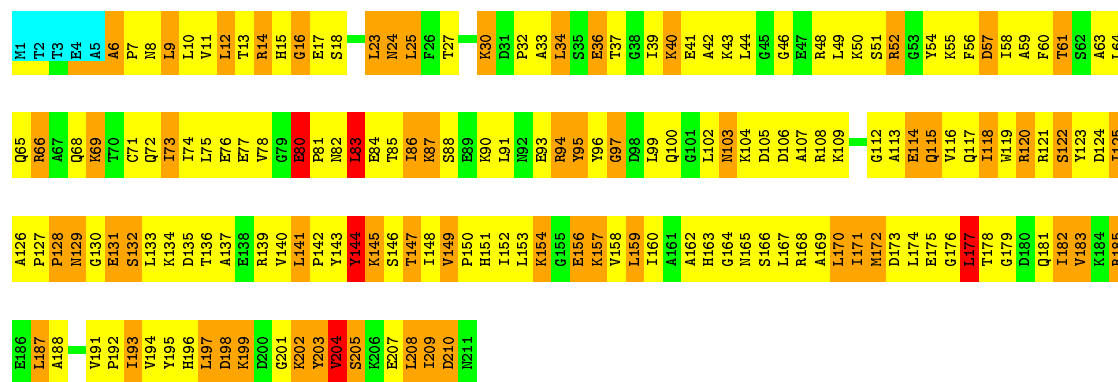
Chain A:  23% 57% 17% •



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

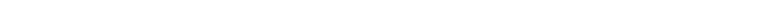
- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

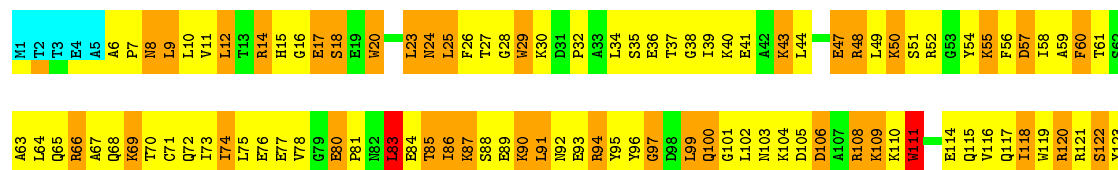
Chain A:  16% 51% 28% ..

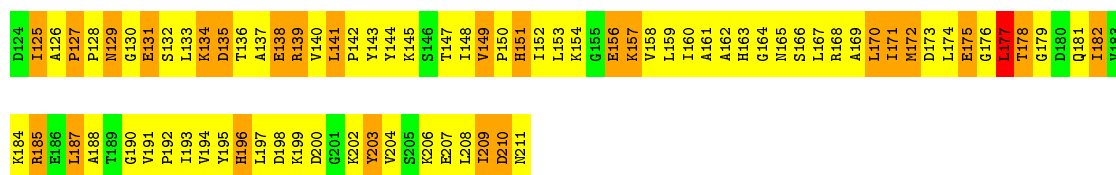


#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

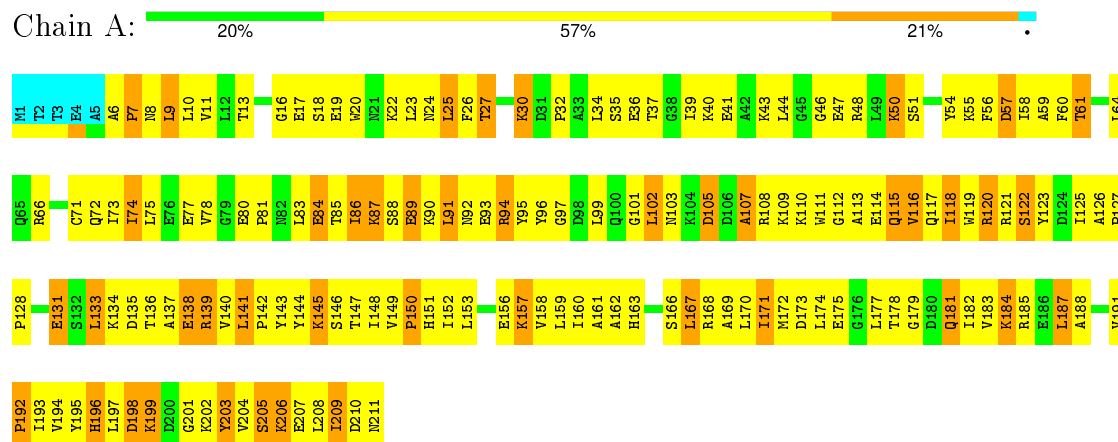
Chain A:  12% 55% 29% ..





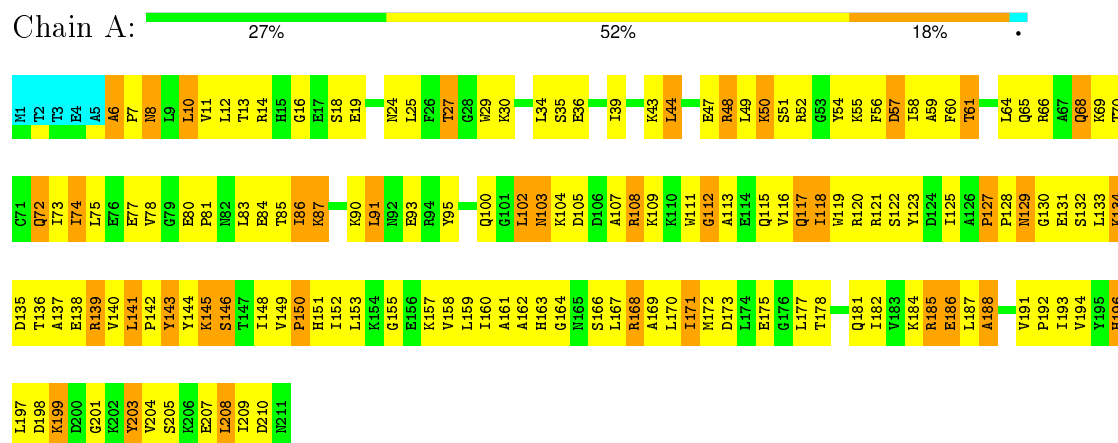
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

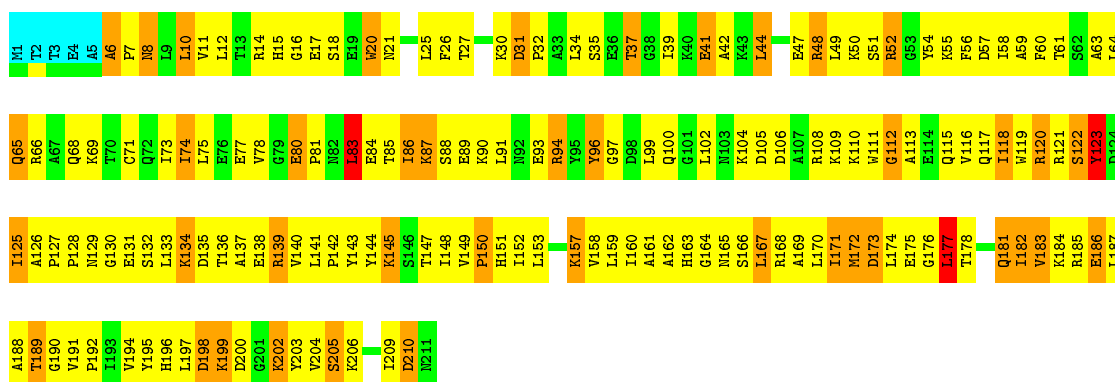
- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

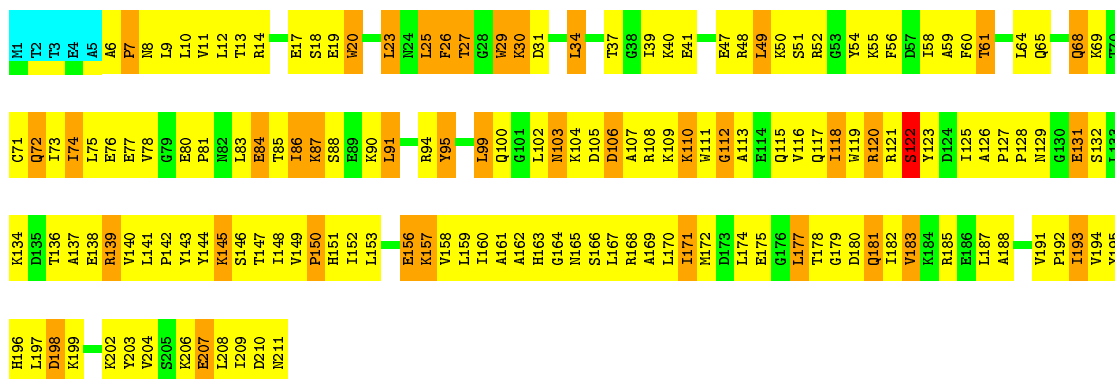




#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A: 23% 56% 18%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 55 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851

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

Chemical shift file(s)	BMRB entry 4648
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2018
Number of shifts mapped to atoms	2018
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	66%

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	1640	1670	1666	223±62
All	All	34440	35070	34986	4688

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 68.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HD13	1.11	1.22	3	9
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:CE1	1.04	1.87	17	10
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HG22	1.04	1.29	4	12
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HD12	0.97	1.94	4	9
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG13	0.95	1.90	12	7
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:CD1	0.95	1.91	12	7
1:A:99:LEU:HD21	1:A:119:TRP:CZ2	0.94	1.97	11	1
1:A:20:TRP:CE3	1:A:27:THR:HG23	0.92	1.97	21	1
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:CD	0.91	1.95	20	5
1:A:61:THR:HG23	1:A:161:ALA:HB3	0.91	1.40	1	4
1:A:137:ALA:HB2	1:A:169:ALA:HB1	0.91	1.43	4	13
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HD13	0.90	2.01	19	5
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG12	0.90	1.66	18	3
1:A:26:PHE:CE2	1:A:99:LEU:HD23	0.90	2.02	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD12	1:A:54:TYR:OH	0.89	1.67	17	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG22	0.88	1.68	3	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:HD23	0.88	1.40	4	2
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG13	0.88	1.69	16	3
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:HD23	0.88	1.88	17	11
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:HG23	0.88	2.04	17	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:167:LEU:HD23	0.88	1.45	11	1
1:A:196:HIS:C	1:A:204:VAL:HG12	0.87	1.88	12	3
1:A:141:LEU:HD12	1:A:173:ASP:OD2	0.87	1.69	12	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HD13	0.87	1.46	12	3
1:A:197:LEU:HD23	1:A:201:GLY:C	0.86	1.89	12	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:HG22	0.86	1.45	1	4
1:A:83:LEU:HD13	1:A:84:GLU:N	0.86	1.85	7	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:HG13	0.86	1.44	8	14
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:HG22	0.86	1.69	16	16
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD12	0.86	2.05	11	12
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:CD2	0.86	1.98	4	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HG13	0.86	1.48	12	5
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG22	0.85	1.71	10	3
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG22	0.85	1.70	19	7
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG12	0.85	2.02	8	1
1:A:42:ALA:O	1:A:74:ILE:HG22	0.85	1.71	16	2
1:A:178:THR:O	1:A:182:ILE:HG22	0.85	1.72	19	8
1:A:108:ARG:HA	1:A:116:VAL:HG21	0.84	1.49	11	9
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG23	0.84	1.72	21	8
1:A:61:THR:HG22	1:A:161:ALA:HB3	0.84	1.49	2	13
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:HG12	0.84	1.72	10	2
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:CB	0.84	2.02	1	7
1:A:151:HIS:NE2	1:A:158:VAL:HG21	0.84	1.87	15	11
1:A:6:ALA:HB3	1:A:7:PRO:HD3	0.84	1.47	12	15
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD11	0.83	2.08	17	9
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD12	0.83	2.07	18	1
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:HD12	0.83	1.72	9	13
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD11	0.83	2.03	7	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:199:LYS:O	0.83	1.74	6	4
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:HD13	0.83	1.50	12	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:126:ALA:N	0.83	1.88	1	2
1:A:102:LEU:HD12	1:A:103:ASN:N	0.83	1.88	18	1
1:A:137:ALA:HB1	1:A:173:ASP:OD2	0.82	1.73	3	2
1:A:193:ILE:HD13	1:A:194:VAL:N	0.82	1.90	16	4
1:A:99:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HD12	0.82	1.52	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:HIS:C	1:A:167:LEU:HD12	0.82	1.95	11	15
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD21	0.82	1.89	11	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:CG2	0.82	2.03	4	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:HG12	0.81	1.75	11	3
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:HG11	0.81	2.09	6	3
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:CG	0.81	1.96	18	8
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:OD1	0.81	1.74	6	4
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:O	0.81	1.75	13	2
1:A:118:ILE:HD13	1:A:118:ILE:O	0.81	1.76	15	7
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HG21	0.81	2.11	16	3
1:A:137:ALA:CA	1:A:169:ALA:HB1	0.81	2.06	17	14
1:A:91:LEU:HD11	1:A:143:TYR:CZ	0.81	2.11	4	2
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:HG13	0.80	2.05	2	15
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD22	0.80	2.10	8	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:163:HIS:CE1	0.80	2.11	15	16
1:A:118:ILE:O	1:A:118:ILE:HD13	0.80	1.75	12	9
1:A:20:TRP:CH2	1:A:27:THR:HG23	0.80	2.11	17	1
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:HB3	0.80	1.51	3	2
1:A:91:LEU:HD23	1:A:162:ALA:HB2	0.80	1.53	8	3
1:A:102:LEU:HG	1:A:107:ALA:HB2	0.80	1.51	12	2
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CB	0.80	2.07	4	7
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:HG22	0.80	1.77	1	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:187:LEU:HD12	0.80	1.51	14	1
1:A:14:ARG:CD	1:A:187:LEU:HD13	0.80	2.06	12	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:56:PHE:CZ	0.80	2.12	10	5
1:A:58:ILE:HG23	1:A:158:VAL:HG13	0.79	1.52	1	4
1:A:143:TYR:CE1	1:A:148:ILE:HD11	0.79	2.11	3	3
1:A:9:LEU:HD11	1:A:196:HIS:CE1	0.79	2.13	4	4
1:A:188:ALA:O	1:A:191:VAL:HG22	0.79	1.77	16	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:N	0.79	1.93	12	2
1:A:186:GLU:C	1:A:187:LEU:HD13	0.79	1.98	7	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:HG22	0.79	1.77	17	10
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:HG22	0.79	2.08	1	2
1:A:114:GLU:O	1:A:118:ILE:HG22	0.79	1.78	12	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:160:ILE:HD11	0.79	1.53	11	2
1:A:159:LEU:HD23	1:A:160:ILE:N	0.78	1.92	3	8
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:CG2	0.78	2.08	3	18
1:A:99:LEU:HD22	1:A:111:TRP:CH2	0.78	2.12	3	3
1:A:6:ALA:HB1	1:A:7:PRO:HD2	0.78	1.56	5	6
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:C	0.78	1.99	17	3
1:A:137:ALA:CB	1:A:169:ALA:HB1	0.78	2.08	4	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:CD1	0.78	2.09	17	2
1:A:91:LEU:O	1:A:162:ALA:HB1	0.78	1.79	3	15
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:HG2	0.78	1.53	17	2
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HG22	0.78	1.77	4	3
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG23	0.78	1.78	1	16
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:HB3	0.77	1.54	1	4
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD23	0.77	1.79	9	2
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:CE	0.77	2.08	19	4
1:A:43:LYS:NZ	1:A:73:ILE:HG23	0.77	1.94	7	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:HG21	0.77	1.54	14	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:C	0.77	2.00	20	2
1:A:143:TYR:CZ	1:A:148:ILE:HD11	0.77	2.15	3	2
1:A:59:ALA:HB3	1:A:85:THR:HA	0.77	1.57	19	19
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:HD11	0.76	2.14	1	4
1:A:174:LEU:HG	1:A:197:LEU:HD21	0.76	1.58	21	1
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:HB2	0.76	1.55	10	8
1:A:187:LEU:HD22	1:A:193:ILE:HG13	0.76	1.58	11	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:HE3	0.76	1.57	12	2
1:A:43:LYS:NZ	1:A:73:ILE:HG22	0.75	1.95	16	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HG21	0.75	2.11	1	3
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:HB2	0.75	1.57	21	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.75	1.97	17	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG22	0.75	1.59	12	13
1:A:143:TYR:CE1	1:A:147:THR:HG21	0.75	2.17	9	6
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:HD22	0.75	1.82	12	6
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:HG22	0.75	1.80	16	2
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:HD21	0.74	2.17	15	11
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:HG2	0.74	1.57	1	1
1:A:172:MET:CE	1:A:182:ILE:HG21	0.74	2.11	10	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:N	0.74	1.96	1	3
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HD13	0.74	1.59	4	8
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:HD12	0.74	1.58	4	1
1:A:175:GLU:CD	1:A:177:LEU:HD22	0.74	2.02	7	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:HD21	0.74	2.13	10	8
1:A:6:ALA:HB3	1:A:7:PRO:CD	0.74	2.12	16	14
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:CG	0.74	2.12	6	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:OG1	0.74	1.83	5	2
1:A:159:LEU:HD12	1:A:160:ILE:N	0.74	1.97	12	2
1:A:99:LEU:HD21	1:A:119:TRP:CH2	0.74	2.18	11	1
1:A:111:TRP:CD1	1:A:116:VAL:HG12	0.73	2.17	18	1
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:HD11	0.73	2.18	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:HD12	1:A:107:ALA:HB2	0.73	1.59	16	3
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:HD21	0.73	2.19	17	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:CD1	0.73	2.13	4	4
1:A:61:THR:HG22	1:A:67:ALA:HB1	0.73	1.60	5	2
1:A:88:SER:HB3	1:A:91:LEU:HD12	0.73	1.59	18	12
1:A:193:ILE:HD13	1:A:208:LEU:O	0.73	1.83	1	2
1:A:132:SER:O	1:A:136:THR:HG23	0.73	1.84	3	6
1:A:151:HIS:CD2	1:A:158:VAL:HG21	0.73	2.18	7	2
1:A:102:LEU:CD2	1:A:107:ALA:HB2	0.72	2.14	14	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:103:ASN:N	0.72	1.99	16	2
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD23	0.72	1.99	16	6
1:A:88:SER:CB	1:A:91:LEU:HD12	0.72	2.14	7	2
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:HG22	0.72	1.61	17	12
1:A:86:ILE:HD11	1:A:143:TYR:OH	0.72	1.84	21	1
1:A:67:ALA:HB1	1:A:161:ALA:O	0.72	1.83	12	5
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG13	0.72	1.85	15	2
1:A:113:ALA:O	1:A:118:ILE:HG22	0.72	1.84	18	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:N	0.72	2.22	12	15
1:A:43:LYS:CD	1:A:73:ILE:HG23	0.72	2.14	17	1
1:A:80:GLU:N	1:A:81:PRO:HD3	0.72	2.00	17	20
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD13	0.72	2.19	8	4
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HD11	0.72	2.20	5	2
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:HB2	0.72	1.60	8	15
1:A:13:THR:HG23	1:A:161:ALA:HB2	0.72	1.60	7	7
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:HB3	0.71	1.60	4	4
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:O	0.71	1.84	11	4
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG23	0.71	2.19	3	3
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD13	0.71	2.01	9	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:GLU:N	0.71	2.00	8	3
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HD12	0.71	2.20	18	1
1:A:136:THR:HG21	1:A:165:ASN:ND2	0.71	2.01	1	4
1:A:40:LYS:O	1:A:44:LEU:HD13	0.71	1.86	7	2
1:A:20:TRP:CD2	1:A:27:THR:HG23	0.71	2.21	21	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:194:VAL:HG13	0.70	1.61	13	5
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:CG2	0.70	2.15	14	3
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:HD21	0.70	1.87	18	1
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD11	0.70	1.61	3	2
1:A:35:SER:O	1:A:39:ILE:HD12	0.70	1.85	13	2
1:A:14:ARG:HB2	1:A:187:LEU:HD11	0.70	1.62	21	1
1:A:187:LEU:HD13	1:A:187:LEU:N	0.70	2.01	16	3
1:A:12:LEU:CD1	1:A:167:LEU:HD23	0.70	2.16	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LYS:CD	1:A:73:ILE:HD11	0.70	2.17	16	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HB2	0.70	2.21	17	9
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD11	0.70	2.17	21	6
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:HG22	0.70	2.16	7	4
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD12	0.70	1.63	6	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CB	0.70	2.75	12	7
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG23	0.70	1.63	8	8
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:CD	0.70	2.55	12	21
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:N	0.70	2.00	17	4
1:A:14:ARG:HD3	1:A:189:THR:HG22	0.70	1.61	7	5
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:HZ1	0.70	1.44	16	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:CG1	0.70	2.75	17	3
1:A:58:ILE:HD12	1:A:60:PHE:CE1	0.70	2.22	7	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HB2	0.69	2.21	16	9
1:A:123:TYR:CD2	1:A:133:LEU:HD23	0.69	2.22	19	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD11	0.69	2.01	7	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HD12	0.69	2.22	2	2
1:A:80:GLU:N	1:A:81:PRO:CD	0.69	2.55	16	10
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CH2	0.69	2.22	4	7
1:A:157:LYS:HZ1	1:A:159:LEU:N	0.69	1.85	8	2
1:A:54:TYR:CD1	1:A:56:PHE:CE1	0.69	2.80	16	5
1:A:133:LEU:HD11	1:A:168:ARG:HB3	0.69	1.65	2	3
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:HD11	0.69	1.86	9	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:HB2	0.69	2.22	17	7
1:A:99:LEU:HA	1:A:102:LEU:HD23	0.69	1.62	10	2
1:A:20:TRP:CH2	1:A:32:PRO:HG2	0.69	2.23	17	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD21	0.69	1.62	10	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:CD1	0.68	2.18	11	1
1:A:108:ARG:HA	1:A:116:VAL:HG11	0.68	1.63	4	5
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:CE	0.68	2.18	6	2
1:A:99:LEU:HD11	1:A:127:PRO:HB3	0.68	1.63	21	3
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD23	0.68	2.08	13	1
1:A:115:GLN:HG3	1:A:116:VAL:N	0.68	2.03	12	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:85:THR:HG23	0.68	2.29	2	4
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HA	0.68	1.66	18	2
1:A:91:LEU:HD22	1:A:162:ALA:HB2	0.68	1.66	20	5
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:HD11	0.68	2.23	20	2
1:A:192:PRO:O	1:A:209:ILE:HD13	0.68	1.89	13	5
1:A:153:LEU:HD21	1:A:199:LYS:HB2	0.68	1.66	2	2
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HB2	0.68	1.65	12	5
1:A:185:ARG:NH1	1:A:187:LEU:HD12	0.68	2.03	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:VAL:HG12	1:A:208:LEU:O	0.68	1.88	3	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:HD11	0.68	1.66	11	1
1:A:88:SER:OG	1:A:91:LEU:HD12	0.68	1.88	7	1
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:CD	0.68	2.57	16	19
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HE2	0.67	1.65	18	3
1:A:171:ILE:HD13	1:A:175:GLU:HB2	0.67	1.66	11	3
1:A:60:PHE:CD2	1:A:148:ILE:HD11	0.67	2.24	16	8
1:A:58:ILE:HG21	1:A:60:PHE:CZ	0.67	2.24	3	3
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:CG	0.67	2.19	5	1
1:A:20:TRP:CH2	1:A:27:THR:CG2	0.67	2.77	17	1
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:HG2	0.67	1.66	6	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:HD22	0.67	1.90	8	1
1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:ASP:N	0.67	2.05	1	5
1:A:153:LEU:HD22	1:A:199:LYS:O	0.67	1.90	9	3
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HD11	0.67	2.25	17	3
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG22	0.67	2.14	4	2
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:HD13	0.67	2.05	8	3
1:A:194:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	0.67	1.65	3	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:HG21	0.67	2.24	19	2
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG13	0.67	1.89	9	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:142:PRO:N	0.66	2.06	17	2
1:A:43:LYS:HD3	1:A:73:ILE:HG23	0.66	1.67	17	1
1:A:99:LEU:HD12	1:A:127:PRO:HB3	0.66	1.66	7	1
1:A:13:THR:HG21	1:A:159:LEU:HD21	0.66	1.66	10	4
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HG23	0.66	2.25	18	2
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD23	0.66	2.05	2	5
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:HD3	0.66	1.66	20	2
1:A:197:LEU:HD13	1:A:202:LYS:C	0.66	2.11	9	2
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD21	0.66	2.20	11	2
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG12	0.66	1.91	12	13
1:A:74:ILE:C	1:A:74:ILE:HD12	0.66	2.10	12	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:LEU:H	0.66	1.49	17	1
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:HE2	0.66	1.66	4	4
1:A:144:TYR:CG	1:A:145:LYS:N	0.66	2.62	12	2
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD13	0.66	1.91	4	1
1:A:99:LEU:HD21	1:A:111:TRP:CZ3	0.66	2.26	14	3
1:A:10:LEU:CD2	1:A:12:LEU:HD21	0.66	2.21	11	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:54:TYR:OH	0.66	1.91	12	1
1:A:198:ASP:HB3	1:A:204:VAL:HG11	0.65	1.66	20	12
1:A:147:THR:O	1:A:148:ILE:HD13	0.65	1.90	18	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:CG2	0.65	2.79	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:NZ	0.65	2.05	16	8
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CG	0.65	2.21	12	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:HD23	0.65	2.12	17	1
1:A:6:ALA:HB1	1:A:7:PRO:CD	0.65	2.21	5	6
1:A:91:LEU:HD12	1:A:162:ALA:HB2	0.65	1.69	3	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:HG21	0.65	2.21	14	4
1:A:86:ILE:CD1	1:A:143:TYR:CE1	0.65	2.79	12	1
1:A:119:TRP:CE3	1:A:127:PRO:HA	0.65	2.27	12	8
1:A:99:LEU:HD13	1:A:128:PRO:HD2	0.65	1.67	16	2
1:A:197:LEU:HD23	1:A:201:GLY:O	0.65	1.90	12	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:CG	0.65	2.21	17	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:HD12	0.65	1.91	10	2
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:HG21	0.64	1.69	21	9
1:A:12:LEU:HD12	1:A:195:TYR:CE1	0.64	2.27	20	2
1:A:86:ILE:HD12	1:A:86:ILE:C	0.64	2.12	1	3
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:O	0.64	1.91	1	5
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD23	0.64	1.91	7	2
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:CD2	0.64	2.81	17	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:167:LEU:N	0.64	2.07	5	2
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:CB	0.64	2.21	3	2
1:A:133:LEU:HD22	1:A:168:ARG:NH2	0.64	2.07	15	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD13	0.64	2.14	12	4
1:A:60:PHE:CD2	1:A:158:VAL:HG11	0.64	2.27	21	3
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG13	0.64	1.92	21	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:160:ILE:HB	0.64	1.69	4	2
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:32:PRO:HG3	0.64	2.28	17	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:54:TYR:HH	0.64	1.50	17	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:185:ARG:HG2	0.64	1.70	12	1
1:A:74:ILE:O	1:A:74:ILE:HD13	0.64	1.92	10	2
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:NE2	0.64	2.07	17	2
1:A:185:ARG:HH11	1:A:187:LEU:HD12	0.63	1.53	8	1
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD22	0.63	1.93	4	1
1:A:58:ILE:CB	1:A:158:VAL:HG13	0.63	2.24	21	8
1:A:13:THR:O	1:A:13:THR:HG23	0.63	1.94	16	5
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:LEU:N	0.63	2.09	17	1
1:A:185:ARG:HH22	1:A:187:LEU:HD21	0.63	1.53	20	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:173:ASP:CG	0.63	2.13	12	2
1:A:140:VAL:HG12	1:A:170:LEU:HD13	0.63	1.70	4	6
1:A:13:THR:HG23	1:A:13:THR:O	0.63	1.94	12	4
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CE2	0.63	2.29	7	2
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:HD21	0.62	1.69	2	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:HG22	1:A:28:GLY:N	0.62	2.09	17	4
1:A:14:ARG:CD	1:A:189:THR:HG22	0.62	2.23	6	1
1:A:115:GLN:CG	1:A:116:VAL:N	0.62	2.63	12	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:163:HIS:HE1	0.62	1.54	10	10
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD23	0.62	2.08	6	3
1:A:144:TYR:CD2	1:A:148:ILE:HD12	0.62	2.29	9	1
1:A:170:LEU:N	1:A:170:LEU:HD23	0.62	2.10	8	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:N	0.62	2.08	21	2
1:A:123:TYR:HD2	1:A:133:LEU:HD23	0.62	1.55	19	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:54:TYR:HB3	0.62	1.70	8	1
1:A:99:LEU:HG	1:A:102:LEU:HD12	0.62	1.70	4	2
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:HG22	0.62	1.94	13	1
1:A:43:LYS:HZ1	1:A:73:ILE:HG22	0.62	1.55	16	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:194:VAL:CG1	0.62	2.25	17	1
1:A:194:VAL:HG23	1:A:208:LEU:O	0.61	1.95	14	3
1:A:174:LEU:CG	1:A:197:LEU:HD21	0.61	2.24	21	2
1:A:170:LEU:HD23	1:A:170:LEU:N	0.61	2.11	13	2
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:CG2	0.61	2.26	4	9
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:HG23	0.61	2.14	17	1
1:A:191:VAL:O	1:A:191:VAL:HG23	0.61	1.95	20	9
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD13	0.61	1.53	9	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HD13	0.61	2.30	8	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HB	0.61	1.70	16	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HG22	0.61	2.26	19	3
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HA	0.61	1.73	15	1
1:A:151:HIS:NE2	1:A:158:VAL:CG2	0.61	2.63	16	5
1:A:168:ARG:CD	1:A:185:ARG:NH1	0.61	2.64	12	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD11	0.61	1.72	7	2
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:NZ	0.61	2.68	16	8
1:A:31:ASP:OD2	1:A:64:LEU:HD23	0.61	1.95	3	2
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:O	0.61	1.94	17	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HB2	0.61	2.31	16	10
1:A:60:PHE:CE2	1:A:143:TYR:CD1	0.61	2.89	17	2
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:CD2	0.61	2.84	17	1
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:HG23	0.60	2.26	17	8
1:A:49:LEU:HD13	1:A:56:PHE:CE1	0.60	2.31	7	3
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD12	0.60	2.26	17	2
1:A:102:LEU:CG	1:A:107:ALA:HB2	0.60	2.26	12	2
1:A:151:HIS:CD2	1:A:156:GLU:OE1	0.60	2.54	17	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:32:PRO:CG	0.60	2.84	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:N	0.60	2.34	16	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD13	0.60	2.16	16	1
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:HD11	0.60	1.73	19	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:HD22	0.60	1.95	16	3
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HG13	0.60	1.72	4	1
1:A:137:ALA:HA	1:A:169:ALA:HB1	0.60	1.71	18	11
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:HG21	0.60	1.74	18	3
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:CG	0.60	2.27	16	2
1:A:94:ARG:HB2	1:A:136:THR:HG21	0.60	1.71	21	7
1:A:191:VAL:HG23	1:A:191:VAL:O	0.60	1.97	3	8
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:CB	0.60	2.48	16	5
1:A:60:PHE:CZ	1:A:147:THR:HG23	0.60	2.31	4	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:160:ILE:CD1	0.60	2.27	7	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:152:ILE:N	0.60	2.69	16	16
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD13	0.60	2.32	6	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:56:PHE:CZ	0.60	2.32	19	2
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD12	0.60	1.57	16	1
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:HG21	0.60	1.73	9	2
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD2	0.60	2.26	10	2
1:A:133:LEU:HD11	1:A:168:ARG:CB	0.60	2.27	2	2
1:A:143:TYR:HE1	1:A:148:ILE:HD11	0.60	1.56	10	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:197:LEU:HD11	0.59	2.26	3	2
1:A:174:LEU:CG	1:A:197:LEU:HD11	0.59	2.27	9	1
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:HD2	0.59	1.73	20	3
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:HD13	0.59	1.75	15	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:OH	0.59	1.97	17	2
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CE2	0.59	2.32	14	3
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:CB	0.59	2.27	19	4
1:A:88:SER:HB3	1:A:91:LEU:HD13	0.59	1.74	8	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:HH2	0.59	1.57	14	1
1:A:191:VAL:HB	1:A:209:ILE:HD12	0.59	1.73	13	5
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:C	0.59	2.17	8	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:56:PHE:CE1	0.59	2.33	16	3
1:A:133:LEU:HD22	1:A:168:ARG:HH21	0.59	1.56	15	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:127:PRO:CD	0.59	2.28	11	5
1:A:91:LEU:HD11	1:A:143:TYR:CE2	0.59	2.31	4	1
1:A:110:LYS:O	1:A:111:TRP:CG	0.59	2.56	12	7
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:HG22	0.59	2.17	16	2
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:HD2	0.59	2.12	12	2
1:A:46:GLY:HA2	1:A:74:ILE:HD11	0.59	1.74	9	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:170:LEU:HD11	0.59	2.33	5	6
1:A:54:TYR:CE1	1:A:157:LYS:CE	0.59	2.85	17	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:ILE:HD13	1:A:170:LEU:HD23	0.59	1.73	6	2
1:A:93:GLU:N	1:A:163:HIS:CD2	0.59	2.70	12	16
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CD2	0.59	2.32	12	3
1:A:54:TYR:CE1	1:A:157:LYS:HE3	0.59	2.33	17	9
1:A:137:ALA:HB2	1:A:169:ALA:CB	0.59	2.25	4	8
1:A:197:LEU:CA	1:A:204:VAL:HG22	0.59	2.28	18	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:127:PRO:CB	0.59	2.27	21	2
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HG21	0.58	1.75	1	4
1:A:43:LYS:CD	1:A:73:ILE:CG2	0.58	2.81	17	2
1:A:151:HIS:CG	1:A:156:GLU:OE1	0.58	2.56	17	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:86:ILE:O	0.58	1.98	7	2
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:OE1	0.58	2.56	16	5
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CZ	0.58	2.86	12	15
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD12	0.58	2.32	13	2
1:A:50:LYS:CB	1:A:78:VAL:HG22	0.58	2.27	3	1
1:A:91:LEU:HD12	1:A:140:VAL:HG13	0.58	1.73	6	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:HG23	0.58	1.97	15	6
1:A:69:LYS:HD2	1:A:73:ILE:HD11	0.58	1.76	16	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HD11	0.58	1.75	11	2
1:A:148:ILE:CG2	1:A:151:HIS:CE1	0.58	2.78	17	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG13	0.58	1.75	6	6
1:A:91:LEU:HD23	1:A:143:TYR:CD2	0.58	2.33	19	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG13	0.58	2.34	12	2
1:A:91:LEU:HD21	1:A:143:TYR:OH	0.58	1.99	10	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:96:TYR:CE2	0.58	2.92	3	2
1:A:145:LYS:HA	1:A:149:VAL:HG13	0.58	1.76	9	2
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:HG21	0.58	1.74	3	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:CB	0.58	2.81	12	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:NZ	0.58	2.72	19	4
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG12	0.58	1.99	21	2
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:CD1	0.58	2.82	17	3
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:N	0.58	2.37	17	21
1:A:193:ILE:HD13	1:A:208:LEU:C	0.58	2.19	7	2
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:OD2	0.58	1.98	19	3
1:A:153:LEU:HD21	1:A:199:LYS:O	0.58	1.98	7	5
1:A:188:ALA:CB	1:A:191:VAL:HG22	0.58	2.28	12	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD11	0.58	1.74	17	1
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.58	1.97	13	2
1:A:111:TRP:CG	1:A:115:GLN:OE1	0.58	2.57	12	1
1:A:111:TRP:CD1	1:A:116:VAL:CG1	0.58	2.87	18	1
1:A:148:ILE:HA	1:A:151:HIS:CE1	0.58	2.33	12	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:CG2	0.58	2.52	17	14
1:A:140:VAL:HG11	1:A:170:LEU:HD21	0.58	1.75	8	2
1:A:15:HIS:HA	1:A:70:THR:HG21	0.57	1.76	13	5
1:A:185:ARG:NH1	1:A:187:LEU:HD21	0.57	2.13	7	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:HD11	0.57	2.30	19	2
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD2	0.57	2.68	16	4
1:A:14:ARG:NE	1:A:167:LEU:HD13	0.57	2.14	12	1
1:A:174:LEU:HG	1:A:197:LEU:HD11	0.57	1.76	9	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:152:ILE:HG23	0.57	2.35	12	7
1:A:91:LEU:CD1	1:A:162:ALA:HB2	0.57	2.29	3	2
1:A:113:ALA:CB	1:A:119:TRP:CD1	0.57	2.88	18	1
1:A:32:PRO:CG	1:A:66:ARG:NE	0.57	2.68	16	2
1:A:74:ILE:CD1	1:A:75:LEU:N	0.57	2.67	12	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG22	0.57	1.99	9	4
1:A:117:GLN:CG	1:A:118:ILE:N	0.57	2.67	17	2
1:A:162:ALA:C	1:A:163:HIS:CG	0.57	2.78	12	20
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:HD11	0.57	1.76	6	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:168:ARG:CZ	0.57	2.30	6	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CE1	0.57	2.93	13	2
1:A:193:ILE:N	1:A:209:ILE:HD11	0.57	2.15	19	3
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG13	0.56	1.76	19	1
1:A:112:GLY:C	1:A:116:VAL:HG22	0.56	2.20	19	2
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:CB	0.56	2.82	16	1
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:CG1	0.56	2.30	12	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:CG1	0.56	2.27	12	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CZ2	0.56	2.35	18	2
1:A:57:ASP:O	1:A:83:LEU:HD23	0.56	2.00	13	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:168:ARG:NH2	0.56	2.14	12	1
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:CD1	0.56	2.59	16	18
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:HE1	0.56	1.60	10	3
1:A:91:LEU:HD23	1:A:166:SER:OG	0.56	2.01	5	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:HD22	0.56	1.78	9	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:127:PRO:HD2	0.56	1.77	7	2
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD23	0.56	2.15	17	1
1:A:162:ALA:O	1:A:163:HIS:CG	0.56	2.58	12	12
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:CG	0.56	2.20	6	2
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:ASN:N	0.56	2.15	13	2
1:A:50:LYS:HB2	1:A:78:VAL:HG22	0.56	1.75	3	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:HB2	0.56	1.78	12	2
1:A:99:LEU:HD23	1:A:128:PRO:HD2	0.56	1.77	11	1
1:A:125:ILE:C	1:A:125:ILE:HD12	0.56	2.21	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HD12	0.56	1.75	17	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:187:LEU:HD12	0.56	2.28	14	1
1:A:6:ALA:O	1:A:199:LYS:N	0.56	2.39	16	7
1:A:209:ILE:CG2	1:A:210:ASP:N	0.56	2.69	16	15
1:A:54:TYR:CE2	1:A:194:VAL:HG11	0.56	2.36	15	2
1:A:175:GLU:OE1	1:A:177:LEU:HD21	0.56	2.00	2	3
1:A:188:ALA:CB	1:A:191:VAL:CG2	0.56	2.83	12	4
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:HH12	0.56	1.59	11	3
1:A:126:ALA:HB2	1:A:131:GLU:O	0.56	2.01	16	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:194:VAL:CG1	0.56	2.30	15	2
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:OH	0.56	2.01	12	6
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:HE3	0.56	2.36	1	7
1:A:99:LEU:HD22	1:A:111:TRP:CZ3	0.56	2.35	3	3
1:A:131:GLU:CG	1:A:132:SER:N	0.56	2.69	17	4
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD23	0.56	2.30	2	1
1:A:20:TRP:CH2	1:A:32:PRO:CG	0.56	2.88	17	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:66:ARG:HH21	0.56	1.59	12	4
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD13	0.56	2.21	6	2
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:CD2	0.56	2.54	16	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:CE	0.56	2.31	16	2
1:A:54:TYR:CE1	1:A:56:PHE:CZ	0.56	2.94	16	3
1:A:174:LEU:HD13	1:A:197:LEU:HD11	0.56	1.78	11	1
1:A:43:LYS:HZ2	1:A:73:ILE:HG23	0.56	1.61	7	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CE1	0.56	2.36	4	10
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG13	0.56	1.78	15	2
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:LEU:HD22	0.56	1.77	9	1
1:A:121:ARG:O	1:A:123:TYR:N	0.55	2.39	16	2
1:A:127:PRO:CB	1:A:128:PRO:HD2	0.55	2.31	16	3
1:A:39:ILE:HD13	1:A:39:ILE:N	0.55	2.15	16	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:N	0.55	2.39	16	15
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD13	0.55	2.36	4	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:143:TYR:CD1	0.55	2.94	17	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:173:ASP:CG	0.55	2.22	2	1
1:A:14:ARG:CZ	1:A:167:LEU:HD13	0.55	2.31	12	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:CG1	0.55	2.54	12	1
1:A:193:ILE:C	1:A:193:ILE:HD13	0.55	2.22	14	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:83:LEU:C	0.55	2.22	21	4
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:C	0.55	2.72	17	1
1:A:204:VAL:O	1:A:204:VAL:HG13	0.55	2.01	16	1
1:A:60:PHE:HD2	1:A:91:LEU:HD11	0.55	1.60	16	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CE1	0.55	2.90	1	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:N	0.55	2.39	12	20
1:A:49:LEU:CD1	1:A:74:ILE:HD11	0.55	2.31	6	1
1:A:108:ARG:CA	1:A:116:VAL:HG21	0.55	2.31	14	2
1:A:11:VAL:HG11	1:A:56:PHE:CE1	0.55	2.37	8	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD11	0.55	2.31	16	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:177:LEU:HD22	0.55	2.31	7	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:HG21	0.55	2.01	14	1
1:A:94:ARG:CB	1:A:165:ASN:ND2	0.55	2.70	16	3
1:A:168:ARG:NH1	1:A:183:VAL:HG12	0.55	2.16	16	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:161:ALA:HB2	0.55	2.32	3	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:79:GLY:HA3	0.55	1.77	3	1
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:CG2	0.55	2.55	12	1
1:A:117:GLN:O	1:A:121:ARG:N	0.55	2.39	3	11
1:A:17:GLU:OE1	1:A:37:THR:HG21	0.55	2.01	6	7
1:A:171:ILE:HD13	1:A:175:GLU:HB3	0.55	1.78	20	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:49:LEU:C	0.55	2.22	13	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CA	0.55	2.32	15	1
1:A:157:LYS:C	1:A:157:LYS:HE3	0.55	2.23	2	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:7:PRO:CD	0.54	2.82	16	17
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:CE1	0.54	2.37	1	3
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:HD11	0.54	2.22	16	5
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD22	0.54	2.22	13	1
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:CG	0.54	2.60	16	4
1:A:58:ILE:CG1	1:A:156:GLU:OE2	0.54	2.55	16	1
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:H	0.54	1.62	16	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:C	0.54	2.22	12	1
1:A:121:ARG:CB	1:A:183:VAL:HG12	0.54	2.32	11	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:143:TYR:CE1	0.54	2.95	4	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:203:TYR:N	0.54	2.17	20	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HD13	0.54	2.02	20	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HB	0.54	1.79	19	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD21	0.54	2.23	19	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HG21	0.54	2.38	10	3
1:A:139:ARG:CD	1:A:139:ARG:O	0.54	2.55	12	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:HB3	0.54	1.79	21	1
1:A:140:VAL:O	1:A:143:TYR:CD2	0.54	2.60	4	2
1:A:126:ALA:HB1	1:A:130:GLY:O	0.54	2.01	1	1
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:HG13	0.54	1.78	5	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:CD1	0.54	2.91	5	1
1:A:14:ARG:HB2	1:A:187:LEU:HD13	0.54	1.79	20	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:ND2	0.54	2.17	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD13	1:A:141:LEU:N	0.54	2.17	16	1
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:HD3	0.54	2.17	17	2
1:A:185:ARG:O	1:A:186:GLU:O	0.54	2.24	12	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD1	0.54	2.76	16	2
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:HB2	0.54	1.77	19	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:CG1	0.54	2.56	16	18
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:CB	0.54	2.56	12	13
1:A:187:LEU:HD13	1:A:188:ALA:O	0.54	2.03	19	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:7:PRO:HD3	0.54	2.29	12	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CD1	0.54	2.91	1	6
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HB3	0.54	1.79	4	2
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ASN:CB	0.54	2.55	17	9
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:CG2	0.54	2.27	1	4
1:A:143:TYR:CD1	1:A:147:THR:CG2	0.54	2.91	2	6
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:CD1	0.54	2.56	17	3
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD12	0.54	2.21	18	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CZ3	0.54	2.91	18	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:CZ	0.54	2.38	12	3
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:CB	0.54	2.55	12	6
1:A:24:ASN:C	1:A:25:LEU:HD23	0.54	2.23	9	3
1:A:177:LEU:O	1:A:178:THR:HB	0.54	2.03	11	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:66:ARG:NH2	0.53	2.18	14	3
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:CB	0.53	2.33	8	3
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:CG	0.53	2.56	16	7
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:CE	0.53	2.91	8	2
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG22	0.53	2.03	10	2
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CE2	0.53	2.92	7	2
1:A:111:TRP:CD2	1:A:115:GLN:OE1	0.53	2.62	12	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:CD1	0.53	2.90	17	2
1:A:127:PRO:CB	1:A:128:PRO:CD	0.53	2.85	11	2
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:CE	0.53	2.91	16	6
1:A:143:TYR:CE1	1:A:147:THR:CG2	0.53	2.91	2	5
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HD12	0.53	2.37	11	2
1:A:111:TRP:CH2	1:A:119:TRP:CZ2	0.53	2.96	11	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:187:LEU:CD1	0.53	2.32	14	1
1:A:90:LYS:CB	1:A:139:ARG:O	0.53	2.56	17	2
1:A:16:GLY:O	1:A:34:LEU:CD1	0.53	2.57	17	1
1:A:118:ILE:HD13	1:A:118:ILE:C	0.53	2.23	4	6
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:CA	0.53	2.33	2	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:144:TYR:OH	0.53	2.03	15	4
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:CD2	0.53	2.33	11	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG12	0.53	1.80	19	2
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:NH1	0.53	2.19	19	3
1:A:65:GLN:O	1:A:68:GLN:N	0.53	2.42	12	2
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:CD1	0.53	2.92	3	6
1:A:118:ILE:C	1:A:118:ILE:HD13	0.53	2.23	19	6
1:A:187:LEU:HD13	1:A:187:LEU:H	0.53	1.61	16	2
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CE1	0.53	2.91	1	2
1:A:12:LEU:O	1:A:193:ILE:N	0.53	2.39	17	11
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CZ	0.53	2.97	5	3
1:A:158:VAL:HG12	1:A:159:LEU:N	0.53	2.18	12	7
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:HD13	0.53	1.81	15	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:CB	0.53	2.34	8	3
1:A:187:LEU:H	1:A:187:LEU:HD13	0.53	1.62	1	1
1:A:60:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD13	0.53	1.63	18	2
1:A:115:GLN:HG3	1:A:119:TRP:CD1	0.53	2.39	12	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:143:TYR:CE1	0.53	2.38	12	1
1:A:185:ARG:HH22	1:A:187:LEU:HD11	0.53	1.64	11	1
1:A:16:GLY:O	1:A:17:GLU:C	0.53	2.46	17	1
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CE2	0.53	2.39	12	9
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:N	0.53	2.42	16	16
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:CG1	0.53	2.33	5	1
1:A:193:ILE:CG2	1:A:195:TYR:CE1	0.53	2.92	5	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:203:TYR:CG	0.53	2.92	19	3
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:HG22	0.53	2.33	16	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:119:TRP:CZ2	0.53	2.39	11	1
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD23	0.53	1.80	11	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:CB	0.53	2.33	17	1
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:HD2	0.53	2.18	16	16
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:LYS:N	0.53	2.72	3	8
1:A:126:ALA:CB	1:A:131:GLU:O	0.53	2.57	16	4
1:A:58:ILE:CB	1:A:158:VAL:HG22	0.53	2.34	16	4
1:A:96:TYR:O	1:A:97:GLY:C	0.53	2.47	12	3
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CG1	0.53	2.91	9	2
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HE3	0.53	2.04	12	2
1:A:85:THR:CG2	1:A:87:LYS:NZ	0.53	2.72	12	2
1:A:196:HIS:CD2	1:A:204:VAL:CG2	0.53	2.92	6	3
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:CA	0.53	2.92	8	2
1:A:94:ARG:CG	1:A:131:GLU:O	0.53	2.56	16	6
1:A:75:LEU:O	1:A:78:VAL:HG22	0.53	2.03	5	3
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:NE2	0.53	2.77	15	1
1:A:115:GLN:C	1:A:119:TRP:CD1	0.53	2.82	16	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:TYR:CE1	1:A:56:PHE:CE1	0.53	2.97	11	2
1:A:144:TYR:CD1	1:A:145:LYS:N	0.53	2.77	17	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CD2	0.52	2.39	15	2
1:A:198:ASP:N	1:A:202:LYS:O	0.52	2.43	17	4
1:A:65:GLN:O	1:A:69:LYS:N	0.52	2.42	12	10
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:CE	0.52	2.92	15	2
1:A:20:TRP:O	1:A:25:LEU:HD12	0.52	2.04	11	2
1:A:60:PHE:HE2	1:A:148:ILE:HG23	0.52	1.60	18	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:CB	0.52	2.87	7	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:157:LYS:CE	0.52	2.93	6	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:48:ARG:CZ	0.52	2.34	16	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:HD12	0.52	2.05	2	1
1:A:172:MET:SD	1:A:173:ASP:N	0.52	2.83	12	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:CB	0.52	2.58	16	11
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:CG	0.52	2.58	16	11
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:HE3	0.52	1.79	11	2
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD1	0.52	2.73	16	4
1:A:136:THR:OG1	1:A:165:ASN:ND2	0.52	2.42	12	4
1:A:205:SER:O	1:A:206:LYS:CE	0.52	2.57	12	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:H	0.52	1.60	17	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:CD	0.52	2.35	12	6
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:CA	0.52	2.92	13	4
1:A:47:GLU:O	1:A:51:SER:CB	0.52	2.56	12	15
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CG	0.52	2.35	6	2
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:TYR:CD2	0.52	2.92	6	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:157:LYS:HE2	0.52	2.40	3	2
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:CZ	0.52	2.57	16	2
1:A:96:TYR:O	1:A:99:LEU:N	0.52	2.43	16	2
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:NZ	0.52	2.20	7	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:80:GLU:OE1	0.52	2.05	12	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:170:LEU:HD21	0.52	2.39	18	1
1:A:208:LEU:CD2	1:A:209:ILE:O	0.52	2.58	17	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:CG1	0.52	2.33	17	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD11	0.52	2.25	1	3
1:A:172:MET:O	1:A:176:GLY:N	0.52	2.43	12	13
1:A:143:TYR:C	1:A:143:TYR:CD1	0.52	2.83	4	4
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:CG1	0.52	2.92	7	3
1:A:49:LEU:CD2	1:A:56:PHE:CE1	0.52	2.92	20	1
1:A:24:ASN:O	1:A:104:LYS:N	0.52	2.43	16	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:160:ILE:HD11	0.52	1.81	6	2
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HD12	0.52	1.80	11	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD12	0.52	2.35	17	4
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CE2	0.52	2.93	13	1
1:A:56:PHE:HZ	1:A:159:LEU:HD13	0.52	1.60	19	1
1:A:56:PHE:HE2	1:A:159:LEU:HD22	0.52	1.65	19	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:CB	0.52	2.35	19	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:60:PHE:CZ	0.52	2.92	3	1
1:A:31:ASP:CG	1:A:64:LEU:HD23	0.52	2.24	11	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:CD	0.52	2.92	4	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD12	0.52	2.19	4	1
1:A:24:ASN:O	1:A:103:ASN:ND2	0.52	2.42	16	7
1:A:171:ILE:CG1	1:A:195:TYR:CE2	0.52	2.92	20	2
1:A:152:ILE:HD12	1:A:153:LEU:N	0.52	2.20	11	3
1:A:183:VAL:HG22	1:A:183:VAL:O	0.52	2.04	2	1
1:A:182:ILE:O	1:A:185:ARG:CG	0.52	2.58	12	1
1:A:93:GLU:CA	1:A:163:HIS:CD2	0.52	2.93	11	1
1:A:20:TRP:HA	1:A:25:LEU:HD11	0.52	1.82	17	1
1:A:8:ASN:N	1:A:197:LEU:O	0.52	2.43	16	20
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:HD11	0.52	1.82	9	11
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:N	0.52	2.42	16	18
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG23	0.52	2.05	18	3
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:CD1	0.52	2.91	1	3
1:A:34:LEU:CB	1:A:69:LYS:CE	0.52	2.88	16	2
1:A:93:GLU:OE2	1:A:94:ARG:NH1	0.52	2.43	17	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:127:PRO:HB3	0.52	1.82	8	2
1:A:136:THR:C	1:A:140:VAL:HG12	0.52	2.26	9	3
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:N	0.52	2.43	17	7
1:A:144:TYR:HA	1:A:148:ILE:CG1	0.52	2.35	18	4
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CD1	0.51	2.91	10	7
1:A:121:ARG:O	1:A:122:SER:O	0.51	2.28	17	7
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:NH1	0.51	2.44	16	3
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:CB	0.51	2.57	12	3
1:A:39:ILE:O	1:A:42:ALA:N	0.51	2.43	12	1
1:A:114:GLU:O	1:A:117:GLN:HB3	0.51	2.04	18	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:HB2	0.51	1.82	6	3
1:A:17:GLU:CD	1:A:37:THR:HG21	0.51	2.26	11	7
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:GLU:C	0.51	2.25	8	3
1:A:94:ARG:HB2	1:A:165:ASN:ND2	0.51	2.20	16	3
1:A:49:LEU:CD2	1:A:56:PHE:CZ	0.51	2.92	19	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:168:ARG:CZ	0.51	2.34	16	1
1:A:69:LYS:HD3	1:A:73:ILE:HD11	0.51	1.83	16	1
1:A:162:ALA:C	1:A:163:HIS:CD2	0.51	2.84	17	16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:CG1	0.51	2.58	16	1
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:CG2	0.51	2.57	17	2
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:HD13	0.51	2.26	2	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:C	0.51	2.26	12	1
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:CG2	0.51	2.57	17	2
1:A:110:LYS:O	1:A:111:TRP:CB	0.51	2.57	17	6
1:A:141:LEU:HD13	1:A:173:ASP:OD1	0.51	2.06	2	2
1:A:99:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CH2	0.51	2.92	3	2
1:A:131:GLU:OE1	1:A:139:ARG:NH2	0.51	2.44	16	6
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:HG22	0.51	2.04	16	2
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:N	0.51	2.20	17	2
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:H	0.51	1.64	10	1
1:A:91:LEU:O	1:A:163:HIS:CD2	0.51	2.64	12	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:158:VAL:CG2	0.51	2.92	7	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:198:ASP:O	0.51	2.43	16	6
1:A:63:ALA:HB2	1:A:89:GLU:HA	0.51	1.80	15	4
1:A:152:ILE:HG13	1:A:153:LEU:HD23	0.51	1.82	21	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:86:ILE:C	0.51	2.26	13	1
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD23	0.51	1.65	19	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:205:SER:HB3	0.51	2.35	16	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CZ	0.51	2.41	16	5
1:A:10:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CG2	0.51	2.35	2	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HG12	0.51	2.40	12	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:ASN:N	0.51	2.44	12	1
1:A:13:THR:O	1:A:13:THR:CG2	0.51	2.58	16	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:HD22	0.51	1.66	3	3
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG23	0.51	2.06	3	2
1:A:116:VAL:O	1:A:116:VAL:HG23	0.51	2.06	18	1
1:A:207:GLU:C	1:A:208:LEU:HD12	0.51	2.25	18	1
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:HE1	0.51	1.60	1	2
1:A:144:TYR:CE1	1:A:174:LEU:HD21	0.51	2.41	13	2
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:N	0.51	2.21	2	2
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.51	2.36	16	6
1:A:204:VAL:O	1:A:204:VAL:CG1	0.51	2.59	16	1
1:A:14:ARG:O	1:A:190:GLY:N	0.51	2.43	12	3
1:A:177:LEU:O	1:A:178:THR:CB	0.51	2.59	11	1
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:HB	0.51	2.06	9	19
1:A:71:CYS:C	1:A:75:LEU:HD12	0.51	2.26	14	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:HE3	0.51	2.41	19	2
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:VAL:CG2	0.51	2.35	12	2
1:A:139:ARG:O	1:A:139:ARG:CD	0.51	2.58	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CB	0.51	2.59	16	1
1:A:67:ALA:CB	1:A:161:ALA:O	0.51	2.56	12	4
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:HB2	0.51	2.36	12	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:CD1	0.51	2.99	12	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:CD1	0.51	2.94	12	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:N	0.51	2.44	17	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:111:TRP:O	0.51	2.64	18	1
1:A:193:ILE:CG2	1:A:195:TYR:CE2	0.51	2.94	8	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:178:THR:N	0.50	2.73	1	3
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:ILE:HG22	0.50	1.83	13	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:83:LEU:CD2	0.50	2.36	15	1
1:A:178:THR:OG1	1:A:179:GLY:N	0.50	2.43	17	5
1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:OE1	0.50	2.44	12	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:143:TYR:CE2	0.50	2.94	4	1
1:A:47:GLU:N	1:A:77:GLU:OE1	0.50	2.44	17	1
1:A:127:PRO:O	1:A:129:ASN:N	0.50	2.44	16	5
1:A:99:LEU:CD1	1:A:111:TRP:CH2	0.50	2.94	8	2
1:A:137:ALA:HB1	1:A:141:LEU:HG	0.50	1.82	2	2
1:A:58:ILE:N	1:A:83:LEU:HD12	0.50	2.20	15	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:195:TYR:OH	0.50	2.05	4	1
1:A:139:ARG:C	1:A:142:PRO:CD	0.50	2.80	17	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:CG	0.50	2.37	17	1
1:A:148:ILE:HG22	1:A:148:ILE:O	0.50	2.06	6	6
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:CB	0.50	2.58	12	13
1:A:193:ILE:HG21	1:A:195:TYR:CE2	0.50	2.41	8	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:157:LYS:C	0.50	2.64	16	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:CB	0.50	2.59	12	3
1:A:52:ARG:NH1	1:A:210:ASP:CB	0.50	2.74	2	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:HB3	0.50	2.40	12	1
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:NH1	0.50	2.21	12	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HB	0.50	2.06	17	2
1:A:7:PRO:HB3	1:A:204:VAL:HG21	0.50	1.82	18	1
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:HE3	0.50	2.41	18	1
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:HD22	0.50	2.22	7	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:168:ARG:CZ	0.50	2.89	16	3
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:CD2	0.50	2.37	2	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:HE2	0.50	2.42	2	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:HG3	0.50	1.82	17	1
1:A:11:VAL:O	1:A:160:ILE:N	0.50	2.43	12	19
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:N	0.50	2.41	16	8
1:A:11:VAL:HG11	1:A:56:PHE:CZ	0.50	2.42	8	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PHE:N	1:A:159:LEU:O	0.50	2.44	17	5
1:A:168:ARG:NH1	1:A:183:VAL:CG1	0.50	2.75	16	1
1:A:202:LYS:O	1:A:203:TYR:O	0.50	2.30	16	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:57:ASP:N	0.50	2.44	12	2
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:N	0.50	2.40	12	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:43:LYS:HD3	0.50	1.82	19	1
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:HB2	0.50	2.37	16	1
1:A:34:LEU:HB3	1:A:69:LYS:CE	0.50	2.37	16	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:CD1	0.50	2.94	12	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:CE	0.50	2.37	7	3
1:A:64:LEU:HD13	1:A:163:HIS:CE1	0.50	2.41	4	1
1:A:157:LYS:HZ2	1:A:158:VAL:N	0.50	2.05	6	3
1:A:157:LYS:HZ1	1:A:158:VAL:HA	0.50	1.67	1	3
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:HB2	0.50	2.07	16	2
1:A:117:GLN:HG3	1:A:118:ILE:N	0.50	2.22	17	2
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:CD1	0.50	2.60	4	1
1:A:20:TRP:CE3	1:A:30:LYS:CD	0.50	2.95	4	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:N	0.50	2.45	17	1
1:A:144:TYR:HA	1:A:148:ILE:HD12	0.50	1.82	6	3
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:N	0.50	2.22	16	2
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:HA3	0.50	1.84	3	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:HH	0.50	1.67	12	1
1:A:185:ARG:HH12	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.66	14	1
1:A:35:SER:O	1:A:38:GLY:N	0.49	2.45	17	3
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:CG	0.49	2.36	1	1
1:A:95:TYR:CD2	1:A:130:GLY:HA2	0.49	2.42	16	3
1:A:193:ILE:HD13	1:A:193:ILE:C	0.49	2.27	16	2
1:A:197:LEU:HD13	1:A:203:TYR:N	0.49	2.22	3	2
1:A:102:LEU:HD21	1:A:107:ALA:HB2	0.49	1.84	21	2
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:OG1	0.49	2.65	21	3
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HD3	0.49	1.82	7	2
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:LEU:N	0.49	2.21	9	3
1:A:14:ARG:HD2	1:A:187:LEU:HD12	0.49	1.84	19	1
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:N	0.49	2.45	16	3
1:A:8:ASN:OD1	1:A:9:LEU:N	0.49	2.45	16	1
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:HB2	0.49	2.07	12	2
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:HD21	0.49	2.06	7	2
1:A:169:ALA:HA	1:A:172:MET:HE3	0.49	1.82	9	1
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:HD12	0.49	2.06	11	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:167:LEU:N	0.49	2.75	5	3
1:A:61:THR:HG23	1:A:161:ALA:CB	0.49	2.28	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:LEU:HD13	1:A:197:LEU:HD21	0.49	1.85	5	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG11	0.49	1.84	19	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:60:PHE:CE1	0.49	2.95	3	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CB	0.49	2.95	15	4
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:HB3	0.49	2.06	16	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:GLY:N	0.49	2.45	3	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:167:LEU:CD2	0.49	2.30	11	1
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:HD3	0.49	2.21	12	4
1:A:59:ALA:HB3	1:A:85:THR:CA	0.49	2.35	19	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:201:GLY:O	0.49	2.06	4	3
1:A:174:LEU:HD13	1:A:174:LEU:O	0.49	2.08	4	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:107:ALA:HB2	0.49	1.80	14	2
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:HA3	0.49	2.41	17	7
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HD22	0.49	2.42	8	1
1:A:193:ILE:HG21	1:A:195:TYR:CE1	0.49	2.43	5	1
1:A:54:TYR:HE2	1:A:194:VAL:HG11	0.49	1.68	20	2
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:CB	0.49	2.35	21	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:56:PHE:HE1	0.49	1.67	16	1
1:A:195:TYR:O	1:A:197:LEU:CD1	0.49	2.60	12	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:119:TRP:CD1	0.49	2.43	18	1
1:A:123:TYR:CE1	1:A:178:THR:OG1	0.49	2.66	11	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:20:TRP:NE1	0.49	2.23	17	1
1:A:168:ARG:O	1:A:171:ILE:HG22	0.49	2.07	16	4
1:A:91:LEU:HD23	1:A:143:TYR:CE2	0.49	2.41	19	1
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:HA2	0.49	1.84	19	2
1:A:151:HIS:CE1	1:A:158:VAL:CG2	0.49	2.96	16	2
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:N	0.49	2.43	12	2
1:A:116:VAL:O	1:A:116:VAL:CG2	0.49	2.60	18	1
1:A:18:SER:CB	1:A:20:TRP:NE1	0.49	2.75	17	1
1:A:194:VAL:O	1:A:195:TYR:CD1	0.49	2.65	17	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:CB	0.49	2.60	21	14
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CG2	0.49	2.95	6	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:127:PRO:CB	0.49	2.37	8	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CD2	0.49	2.92	8	2
1:A:60:PHE:CE1	1:A:148:ILE:HG12	0.49	2.43	17	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:211:ASN:ND2	0.49	2.61	17	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:N	0.49	2.71	17	3
1:A:93:GLU:HB2	1:A:163:HIS:CG	0.49	2.43	16	7
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:CG1	0.49	2.91	7	3
1:A:152:ILE:C	1:A:152:ILE:HD12	0.49	2.28	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CD1	0.49	2.43	17	3
1:A:27:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.49	2.38	16	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:CB	0.49	2.96	12	1
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:CD2	0.49	2.37	11	2
1:A:26:PHE:N	1:A:102:LEU:O	0.49	2.45	17	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CZ3	0.49	2.95	10	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:196:HIS:CE1	0.49	2.95	18	2
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:CG	0.49	2.60	16	9
1:A:88:SER:CB	1:A:143:TYR:CD2	0.49	2.96	12	3
1:A:167:LEU:O	1:A:171:ILE:HG22	0.49	2.08	19	6
1:A:115:GLN:HA	1:A:118:ILE:CG2	0.49	2.38	17	2
1:A:121:ARG:HB2	1:A:183:VAL:HG12	0.49	1.84	11	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:192:PRO:CB	0.48	2.91	21	3
1:A:75:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD21	0.48	2.38	15	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:133:LEU:HD22	0.48	2.43	16	1
1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLU:N	0.48	2.23	16	3
1:A:65:GLN:HG3	1:A:66:ARG:N	0.48	2.23	16	2
1:A:61:THR:HB	1:A:67:ALA:HB1	0.48	1.85	2	1
1:A:168:ARG:CD	1:A:185:ARG:CZ	0.48	2.91	10	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:143:TYR:CE1	0.48	3.01	17	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CZ3	0.48	2.43	17	4
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:CG	0.48	2.61	16	4
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:HA	0.48	2.23	1	3
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:HG22	0.48	2.08	18	1
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:CG2	0.48	2.81	17	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.92	18	6
1:A:170:LEU:C	1:A:170:LEU:HD13	0.48	2.28	21	1
1:A:108:ARG:O	1:A:112:GLY:HA2	0.48	2.08	16	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:CB	0.48	2.97	16	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:210:ASP:CB	0.48	2.91	2	1
1:A:125:ILE:CG1	1:A:126:ALA:N	0.48	2.76	12	1
1:A:169:ALA:O	1:A:172:MET:HG3	0.48	2.07	12	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:CB	0.48	2.96	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:HG23	0.48	2.08	8	3
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:HG3	0.48	1.84	3	2
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:N	0.48	2.41	16	4
1:A:151:HIS:CE1	1:A:158:VAL:HG21	0.48	2.44	17	3
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD12	0.48	2.34	4	3
1:A:75:LEU:HD12	1:A:81:PRO:HA	0.48	1.85	10	2
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HD13	0.48	2.42	18	2
1:A:107:ALA:O	1:A:111:TRP:HB2	0.48	2.08	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:CG	0.48	2.96	7	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:84:GLU:N	0.48	2.23	17	3
1:A:177:LEU:CD1	1:A:177:LEU:N	0.48	2.76	1	3
1:A:141:LEU:CD2	1:A:173:ASP:CB	0.48	2.91	4	1
1:A:20:TRP:HA	1:A:25:LEU:CD1	0.48	2.38	17	1
1:A:20:TRP:CE3	1:A:25:LEU:O	0.48	2.67	15	2
1:A:111:TRP:CB	1:A:116:VAL:HG13	0.48	2.39	19	1
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:CD1	0.48	2.82	16	1
1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:ARG:NE	0.48	2.23	3	1
1:A:194:VAL:HG13	1:A:207:GLU:CB	0.48	2.38	3	1
1:A:77:GLU:O	1:A:78:VAL:HG23	0.48	2.09	3	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:CB	0.48	2.38	17	2
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:HA	0.48	1.85	11	1
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:CG1	0.48	2.58	17	1
1:A:10:LEU:O	1:A:195:TYR:N	0.48	2.44	17	2
1:A:20:TRP:CE3	1:A:27:THR:OG1	0.48	2.61	17	4
1:A:126:ALA:HB1	1:A:131:GLU:O	0.48	2.08	12	2
1:A:63:ALA:N	1:A:88:SER:O	0.48	2.46	12	3
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HD12	0.48	1.86	2	2
1:A:153:LEU:HD23	1:A:199:LYS:O	0.48	2.09	12	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:25:LEU:N	0.48	2.68	17	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:CG1	0.48	2.36	20	6
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:O	0.48	2.09	8	1
1:A:172:MET:CG	1:A:173:ASP:N	0.48	2.76	1	3
1:A:15:HIS:CD2	1:A:162:ALA:O	0.48	2.66	20	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:HG3	0.48	2.09	12	4
1:A:145:LYS:HG3	1:A:146:SER:N	0.48	2.23	12	1
1:A:14:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HB2	0.48	2.38	12	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:195:TYR:CE2	0.48	2.44	17	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:138:GLU:OE1	0.48	2.45	17	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HG13	0.48	1.85	17	1
1:A:121:ARG:HD3	1:A:168:ARG:CZ	0.48	2.39	16	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:194:VAL:N	0.48	2.72	16	1
1:A:185:ARG:NH1	1:A:195:TYR:OH	0.48	2.47	16	1
1:A:38:GLY:O	1:A:42:ALA:N	0.48	2.46	12	1
1:A:112:GLY:O	1:A:115:GLN:N	0.48	2.46	18	1
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:HG23	0.48	2.08	17	1
1:A:122:SER:O	1:A:183:VAL:HG11	0.48	2.09	1	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:56:PHE:CZ	0.48	2.95	9	5
1:A:195:TYR:O	1:A:197:LEU:HD12	0.48	2.09	21	1
1:A:97:GLY:O	1:A:100:GLN:OE1	0.48	2.32	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:CG1	1:A:156:GLU:CD	0.48	2.82	16	1
1:A:94:ARG:HB3	1:A:165:ASN:ND2	0.48	2.24	17	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:203:TYR:HA	0.48	1.84	17	1
1:A:32:PRO:CG	1:A:66:ARG:CZ	0.47	2.92	9	5
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:26:PHE:HA	0.47	2.43	5	3
1:A:134:LYS:HE3	1:A:135:ASP:N	0.47	2.24	17	5
1:A:203:TYR:CD1	1:A:203:TYR:O	0.47	2.67	18	2
1:A:179:GLY:O	1:A:180:ASP:CB	0.47	2.61	11	1
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD2	0.47	2.77	8	2
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:CD2	0.47	2.39	16	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CE2	0.47	2.44	16	1
1:A:14:ARG:HH11	1:A:189:THR:HG22	0.47	1.69	3	1
1:A:113:ALA:O	1:A:116:VAL:N	0.47	2.47	18	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD1	0.47	2.38	17	1
1:A:185:ARG:CG	1:A:186:GLU:N	0.47	2.77	8	3
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:OE2	0.47	2.68	1	2
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:HE1	0.47	2.44	15	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:91:LEU:HD11	0.47	2.42	16	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:173:ASP:CG	0.47	2.82	12	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:160:ILE:CD1	0.47	2.92	7	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:CG	0.47	2.92	6	1
1:A:151:HIS:NE2	1:A:152:ILE:HG23	0.47	2.25	4	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:CG1	0.47	2.92	18	7
1:A:12:LEU:HD11	1:A:195:TYR:CE2	0.47	2.44	13	1
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:GLN:NE2	0.47	2.24	11	5
1:A:49:LEU:HD12	1:A:74:ILE:HD11	0.47	1.84	15	1
1:A:121:ARG:O	1:A:122:SER:C	0.47	2.52	17	2
1:A:114:GLU:O	1:A:118:ILE:CG2	0.47	2.58	12	1
1:A:186:GLU:O	1:A:187:LEU:HD23	0.47	2.09	11	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HG12	0.47	2.44	9	10
1:A:60:PHE:CD2	1:A:148:ILE:CD1	0.47	2.97	1	1
1:A:94:ARG:NH2	1:A:120:ARG:O	0.47	2.47	17	7
1:A:196:HIS:CG	1:A:205:SER:OG	0.47	2.68	1	1
1:A:117:GLN:NE2	1:A:121:ARG:CB	0.47	2.78	15	1
1:A:175:GLU:CD	1:A:203:TYR:CB	0.47	2.83	16	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:210:ASP:CB	0.47	2.39	16	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:HG13	0.47	2.10	16	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:PRO:HD2	0.47	2.30	12	2
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:HE2	0.47	2.10	12	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:13:THR:O	0.47	2.61	12	3
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:HA	0.47	2.10	2	16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ARG:NH1	1:A:96:TYR:CZ	0.47	2.83	16	2
1:A:95:TYR:CD1	1:A:100:GLN:OE1	0.47	2.67	21	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CG	0.47	2.45	17	3
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:CD2	0.47	2.62	16	1
1:A:113:ALA:O	1:A:114:GLU:C	0.47	2.53	12	2
1:A:116:VAL:CG1	1:A:120:ARG:NE	0.47	2.77	3	1
1:A:145:LYS:CA	1:A:149:VAL:HG13	0.47	2.40	9	1
1:A:120:ARG:NH1	1:A:121:ARG:CZ	0.47	2.78	18	1
1:A:118:ILE:O	1:A:118:ILE:CD1	0.47	2.62	18	4
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HB	0.47	1.86	1	1
1:A:51:SER:CB	1:A:52:ARG:NH1	0.47	2.77	4	2
1:A:87:LYS:CD	1:A:87:LYS:N	0.47	2.78	13	2
1:A:175:GLU:HG3	1:A:203:TYR:CG	0.47	2.45	19	3
1:A:203:TYR:O	1:A:203:TYR:CD1	0.47	2.68	7	2
1:A:135:ASP:O	1:A:139:ARG:N	0.47	2.48	12	3
1:A:42:ALA:C	1:A:74:ILE:HG22	0.47	2.30	16	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:167:LEU:HD23	0.47	1.86	16	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:N	0.47	2.25	16	1
1:A:89:GLU:O	1:A:92:ASN:ND2	0.47	2.47	12	2
1:A:29:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.47	2.67	11	2
1:A:121:ARG:NH2	1:A:168:ARG:CZ	0.47	2.78	11	1
1:A:11:VAL:O	1:A:159:LEU:HD12	0.47	2.10	7	1
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:HA2	0.47	2.45	14	6
1:A:171:ILE:CG2	1:A:172:MET:N	0.47	2.77	11	9
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:NH2	0.47	2.48	17	2
1:A:15:HIS:O	1:A:16:GLY:O	0.47	2.33	12	3
1:A:14:ARG:HG3	1:A:167:LEU:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:88:SER:HB3	1:A:143:TYR:CE2	0.47	2.45	6	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:56:PHE:CE1	0.47	2.98	8	1
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:HA3	0.47	2.45	8	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:C	0.47	2.29	1	2
1:A:193:ILE:HD12	1:A:209:ILE:HG12	0.47	1.86	19	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:CG2	0.47	2.92	19	2
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:CB	0.47	2.63	16	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:128:PRO:HD2	0.47	2.38	16	2
1:A:140:VAL:C	1:A:142:PRO:HD2	0.47	2.30	12	3
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ASN:HB2	0.47	2.10	17	3
1:A:91:LEU:HD21	1:A:143:TYR:CZ	0.47	2.45	10	1
1:A:167:LEU:O	1:A:170:LEU:N	0.47	2.48	12	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CE1	0.47	2.45	12	2
1:A:20:TRP:CE3	1:A:30:LYS:HD3	0.47	2.45	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:GLU:O	1:A:142:PRO:HG3	0.47	2.09	17	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:198:ASP:O	0.47	2.32	17	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:194:VAL:HG12	0.47	1.81	8	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:171:ILE:O	0.47	2.10	13	2
1:A:168:ARG:HG3	1:A:182:ILE:HD11	0.47	1.86	19	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:94:ARG:N	0.47	2.48	16	1
1:A:65:GLN:O	1:A:66:ARG:C	0.47	2.52	12	3
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:C	0.47	2.68	3	1
1:A:57:ASP:CB	1:A:157:LYS:O	0.47	2.63	3	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:80:GLU:HG2	0.47	1.85	11	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:HD3	0.47	2.44	4	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:59:ALA:H	0.46	1.70	7	2
1:A:143:TYR:CD1	1:A:147:THR:HG23	0.46	2.44	5	5
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HG23	0.46	2.45	21	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:48:ARG:NH1	0.46	2.25	19	1
1:A:12:LEU:O	1:A:192:PRO:HA	0.46	2.10	16	2
1:A:62:SER:HA	1:A:88:SER:O	0.46	2.11	12	1
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD13	0.46	1.86	4	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG12	0.46	2.45	9	9
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:HA2	0.46	2.46	21	8
1:A:12:LEU:N	1:A:193:ILE:O	0.46	2.45	16	7
1:A:171:ILE:O	1:A:175:GLU:N	0.46	2.42	12	4
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG13	0.46	2.40	15	3
1:A:192:PRO:O	1:A:209:ILE:CD1	0.46	2.64	17	5
1:A:65:GLN:O	1:A:69:LYS:CB	0.46	2.63	20	5
1:A:134:LYS:CE	1:A:135:ASP:N	0.46	2.79	20	5
1:A:94:ARG:HG3	1:A:131:GLU:O	0.46	2.09	17	3
1:A:41:GLU:O	1:A:45:GLY:N	0.46	2.44	12	2
1:A:74:ILE:C	1:A:74:ILE:HD13	0.46	2.31	10	1
1:A:132:SER:OG	1:A:133:LEU:N	0.46	2.48	12	2
1:A:195:TYR:CD1	1:A:203:TYR:CZ	0.46	3.03	11	1
1:A:194:VAL:O	1:A:208:LEU:HA	0.46	2.11	11	1
1:A:74:ILE:HG12	1:A:78:VAL:HG23	0.46	1.87	7	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HD12	0.46	2.11	14	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:193:ILE:HG23	0.46	1.87	6	1
1:A:136:THR:CG2	1:A:165:ASN:ND2	0.46	2.77	1	1
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:HB3	0.46	2.10	16	1
1:A:182:ILE:C	1:A:182:ILE:CD1	0.46	2.84	16	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CE2	0.46	3.03	3	1
1:A:119:TRP:CD2	1:A:127:PRO:HA	0.46	2.45	12	1
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:HG23	0.46	2.10	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ARG:NE	1:A:48:ARG:HA	0.46	2.26	12	1
1:A:184:LYS:O	1:A:184:LYS:CG	0.46	2.63	12	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:178:THR:OG1	0.46	2.68	11	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:163:HIS:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:32:PRO:HG3	0.46	1.71	6	1
1:A:31:ASP:OD2	1:A:64:LEU:HD22	0.46	2.10	20	1
1:A:118:ILE:HG23	1:A:119:TRP:HD1	0.46	1.69	7	1
1:A:133:LEU:HA	1:A:136:THR:OG1	0.46	2.11	17	1
1:A:156:GLU:HG2	1:A:157:LYS:N	0.46	2.25	17	1
1:A:197:LEU:CD2	1:A:197:LEU:N	0.46	2.79	8	3
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:CG2	0.46	2.93	21	2
1:A:103:ASN:O	1:A:104:LYS:C	0.46	2.54	12	3
1:A:172:MET:CB	1:A:182:ILE:HG13	0.46	2.41	17	1
1:A:198:ASP:CG	1:A:199:LYS:N	0.46	2.69	17	1
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:HG2	0.46	2.11	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:HB	0.46	2.11	17	1
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:CG2	0.46	2.93	6	6
1:A:111:TRP:O	1:A:115:GLN:CB	0.46	2.64	8	12
1:A:185:ARG:HG2	1:A:186:GLU:N	0.46	2.24	10	3
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CZ	0.46	2.46	16	4
1:A:198:ASP:OD2	1:A:204:VAL:HG13	0.46	2.11	15	1
1:A:137:ALA:HA	1:A:140:VAL:HG22	0.46	1.87	15	2
1:A:121:ARG:NH1	1:A:168:ARG:NH1	0.46	2.63	3	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:186:GLU:C	0.46	2.69	12	1
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:ARG:HG2	0.46	1.86	12	1
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:HB2	0.46	2.11	17	2
1:A:86:ILE:CD1	1:A:86:ILE:C	0.46	2.83	7	1
1:A:170:LEU:O	1:A:174:LEU:N	0.46	2.46	12	5
1:A:49:LEU:HD13	1:A:74:ILE:HD11	0.46	1.88	6	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:OD2	0.46	2.11	6	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:84:GLU:N	0.46	2.77	8	1
1:A:188:ALA:HB1	1:A:191:VAL:CG2	0.46	2.41	1	1
1:A:125:ILE:HG23	1:A:125:ILE:O	0.46	2.11	21	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:199:LYS:O	0.46	2.11	19	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:143:TYR:OH	0.46	2.68	19	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:78:VAL:HG22	0.46	1.87	17	2
1:A:44:LEU:HD11	1:A:48:ARG:NH2	0.46	2.25	16	1
1:A:194:VAL:CG2	1:A:195:TYR:N	0.46	2.78	3	1
1:A:196:HIS:C	1:A:197:LEU:HD22	0.46	2.30	3	2
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:N	0.46	2.48	3	1
1:A:140:VAL:HG11	1:A:170:LEU:CD2	0.46	2.40	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HG23	0.46	2.41	2	1
1:A:118:ILE:HG12	1:A:125:ILE:HD11	0.46	1.88	2	1
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:126:ALA:O	0.46	2.68	18	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:HG12	0.46	2.46	7	1
1:A:187:LEU:H	1:A:187:LEU:HD22	0.46	1.70	7	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:87:LYS:N	0.46	2.25	20	3
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:OE1	0.46	2.69	8	1
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:CD1	0.46	2.83	1	2
1:A:33:ALA:O	1:A:34:LEU:O	0.46	2.34	12	2
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:HG22	0.46	1.88	9	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD12	0.46	2.11	18	1
1:A:94:ARG:CZ	1:A:96:TYR:CZ	0.46	2.99	4	1
1:A:143:TYR:HE1	1:A:147:THR:HG21	0.46	1.68	17	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:56:PHE:CZ	0.46	2.99	8	1
1:A:151:HIS:O	1:A:154:LYS:N	0.46	2.45	16	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CD2	0.46	2.46	3	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:CG2	0.46	2.40	17	4
1:A:13:THR:HB	1:A:161:ALA:HB2	0.46	1.88	18	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:182:ILE:HG21	0.46	2.45	18	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:102:LEU:O	0.46	2.64	17	1
1:A:175:GLU:O	1:A:203:TYR:CE1	0.46	2.69	20	1
1:A:120:ARG:NH1	1:A:121:ARG:NH2	0.46	2.63	21	2
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HG23	0.46	2.11	16	3
1:A:85:THR:CG2	1:A:87:LYS:HZ1	0.46	2.20	16	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:54:TYR:HB3	0.46	2.41	12	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:O	0.46	2.11	17	1
1:A:202:LYS:O	1:A:204:VAL:HG13	0.46	2.11	17	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:CE2	0.45	2.47	21	2
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:N	0.45	2.26	11	2
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:CG	0.45	2.79	5	1
1:A:187:LEU:CD1	1:A:187:LEU:N	0.45	2.77	13	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:HB2	0.45	2.11	16	1
1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:CE	0.45	2.41	16	2
1:A:176:GLY:O	1:A:177:LEU:O	0.45	2.33	17	3
1:A:57:ASP:HB2	1:A:157:LYS:O	0.45	2.11	3	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD12	0.45	2.31	10	1
1:A:145:LYS:CG	1:A:146:SER:N	0.45	2.78	12	1
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:O	0.45	2.33	17	2
1:A:149:VAL:O	1:A:152:ILE:HD11	0.45	2.12	11	1
1:A:90:LYS:O	1:A:139:ARG:NH1	0.45	2.45	17	7
1:A:23:LEU:HD22	1:A:25:LEU:HD11	0.45	1.88	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:CB	0.45	2.64	21	2
1:A:137:ALA:HA	1:A:140:VAL:CG1	0.45	2.42	13	2
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:HB3	0.45	2.09	16	2
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CG1	0.45	2.62	16	1
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:HB3	0.45	2.41	16	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:NZ	0.45	2.47	16	1
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:N	0.45	2.45	12	1
1:A:88:SER:OG	1:A:143:TYR:CD2	0.45	2.67	9	2
1:A:133:LEU:HD11	1:A:165:ASN:O	0.45	2.11	20	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:CD1	0.45	2.94	10	3
1:A:31:ASP:CG	1:A:64:LEU:HD22	0.45	2.31	15	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:HG3	0.45	2.11	16	3
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:CZ	0.45	2.64	10	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:CE1	0.45	2.46	12	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:CZ	0.45	2.47	12	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CD1	0.45	2.32	12	1
1:A:136:THR:O	1:A:139:ARG:HG3	0.45	2.11	18	2
1:A:140:VAL:CG1	1:A:170:LEU:HD13	0.45	2.41	19	4
1:A:182:ILE:CG2	1:A:183:VAL:N	0.45	2.79	16	2
1:A:115:GLN:HG3	1:A:119:TRP:NE1	0.45	2.26	16	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:72:GLN:N	0.45	2.89	16	2
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CB	0.45	2.41	12	1
1:A:158:VAL:CG1	1:A:159:LEU:N	0.45	2.78	12	2
1:A:99:LEU:HD11	1:A:119:TRP:HZ2	0.45	1.70	11	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:138:GLU:OE1	0.45	2.64	17	1
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:N	0.45	2.43	17	1
1:A:54:TYR:CZ	1:A:157:LYS:HE2	0.45	2.46	6	7
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:SG	0.45	2.52	16	2
1:A:175:GLU:CG	1:A:176:GLY:N	0.45	2.79	20	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:56:PHE:CE1	0.45	2.47	16	1
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:CB	0.45	2.65	16	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:143:TYR:CE2	0.45	2.47	4	2
1:A:123:TYR:CD1	1:A:179:GLY:HA2	0.45	2.46	12	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:H	0.45	1.71	18	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:195:TYR:CE1	0.45	2.46	11	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:211:ASN:OD1	0.45	2.50	17	1
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:CG	0.45	2.64	17	1
1:A:88:SER:CB	1:A:143:TYR:CE2	0.45	2.99	8	5
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:CB	0.45	2.65	6	6
1:A:171:ILE:HG12	1:A:195:TYR:CE2	0.45	2.46	20	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:54:TYR:CE2	0.45	2.47	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ASP:CB	1:A:156:GLU:HG2	0.45	2.42	12	2
1:A:95:TYR:HB3	1:A:130:GLY:CA	0.45	2.42	12	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD11	0.45	1.87	9	1
1:A:90:LYS:HB3	1:A:139:ARG:O	0.45	2.10	17	1
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:MET:N	0.45	2.27	7	8
1:A:125:ILE:C	1:A:125:ILE:HD13	0.45	2.30	17	2
1:A:151:HIS:C	1:A:151:HIS:CD2	0.45	2.90	17	2
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:N	0.45	2.46	16	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:210:ASP:HB3	0.45	2.27	2	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:GLN:N	0.45	2.43	12	1
1:A:122:SER:HB3	1:A:125:ILE:HG23	0.45	1.89	17	2
1:A:6:ALA:O	1:A:8:ASN:N	0.45	2.50	8	2
1:A:143:TYR:CD1	1:A:143:TYR:C	0.45	2.90	10	1
1:A:195:TYR:CD2	1:A:207:GLU:OE1	0.45	2.70	7	1
1:A:134:LYS:HB2	1:A:134:LYS:NZ	0.45	2.26	17	1
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:CG2	0.45	2.65	6	6
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CZ	0.45	2.47	7	3
1:A:178:THR:HG23	1:A:180:ASP:H	0.45	1.71	7	3
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:HD11	0.45	1.89	18	2
1:A:123:TYR:HD1	1:A:133:LEU:HD23	0.45	1.71	15	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:CD2	0.45	2.81	16	1
1:A:198:ASP:OD2	1:A:202:LYS:O	0.45	2.35	16	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:HB2	0.45	2.12	16	2
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:N	0.45	2.50	2	1
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:ASP:N	0.45	2.27	12	1
1:A:13:THR:N	1:A:160:ILE:O	0.45	2.50	11	1
1:A:91:LEU:CG	1:A:143:TYR:CE2	0.45	3.00	4	1
1:A:59:ALA:N	1:A:84:GLU:O	0.45	2.44	12	10
1:A:121:ARG:NH1	1:A:168:ARG:NH2	0.45	2.64	1	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG2	0.45	2.42	1	1
1:A:136:THR:HG21	1:A:165:ASN:OD1	0.45	2.12	5	1
1:A:103:ASN:O	1:A:106:ASP:N	0.45	2.50	16	3
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:N	0.45	2.49	20	6
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HD13	0.45	2.45	21	1
1:A:182:ILE:O	1:A:185:ARG:HG2	0.45	2.11	12	1
1:A:114:GLU:O	1:A:115:GLN:CG	0.45	2.65	18	1
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:128:PRO:HD3	0.45	2.46	11	1
1:A:94:ARG:CZ	1:A:96:TYR:CE1	0.44	3.01	4	2
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.44	2.50	12	4
1:A:121:ARG:C	1:A:123:TYR:N	0.44	2.70	16	1
1:A:125:ILE:HG13	1:A:126:ALA:N	0.44	2.26	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:ARG:HD2	1:A:139:ARG:O	0.44	2.12	16	2
1:A:193:ILE:CD1	1:A:208:LEU:HA	0.44	2.41	11	2
1:A:77:GLU:O	1:A:78:VAL:CG2	0.44	2.66	3	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HG12	0.44	2.47	7	2
1:A:12:LEU:CD2	1:A:167:LEU:HD23	0.44	2.27	4	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:HD21	0.44	1.88	4	1
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:HB3	0.44	1.89	17	1
1:A:60:PHE:HA	1:A:86:ILE:O	0.44	2.12	17	1
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLU:HB2	0.44	2.42	16	3
1:A:8:ASN:OD1	1:A:156:GLU:N	0.44	2.50	6	1
1:A:59:ALA:N	1:A:83:LEU:HD21	0.44	2.27	13	1
1:A:167:LEU:O	1:A:171:ILE:N	0.44	2.41	12	5
1:A:183:VAL:O	1:A:183:VAL:HG22	0.44	2.12	13	1
1:A:211:ASN:OXT	1:A:211:ASN:OD1	0.44	2.34	12	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:144:TYR:N	0.44	2.85	4	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:160:ILE:CD1	0.44	2.95	7	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:156:GLU:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:CD	0.44	2.91	1	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:157:LYS:HE3	0.44	2.47	20	3
1:A:7:PRO:HB2	1:A:196:HIS:CD2	0.44	2.48	4	3
1:A:60:PHE:HE2	1:A:158:VAL:HG21	0.44	1.67	19	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:192:PRO:CG	0.44	2.42	15	1
1:A:151:HIS:HB2	1:A:156:GLU:OE2	0.44	2.12	16	1
1:A:57:ASP:HB2	1:A:156:GLU:OE1	0.44	2.13	16	1
1:A:172:MET:SD	1:A:177:LEU:O	0.44	2.75	16	1
1:A:174:LEU:O	1:A:202:LYS:HA	0.44	2.12	16	1
1:A:60:PHE:HZ	1:A:147:THR:HG23	0.44	1.68	4	1
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:HG3	0.44	2.11	17	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:CD1	0.44	2.43	6	1
1:A:119:TRP:CE3	1:A:127:PRO:CA	0.44	3.00	12	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:80:GLU:OE1	0.44	2.12	4	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:208:LEU:CA	0.44	2.96	7	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:HB2	0.44	2.43	7	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:210:ASP:CG	0.44	2.86	17	1
1:A:94:ARG:HB2	1:A:136:THR:CG2	0.44	2.43	17	1
1:A:121:ARG:HA	1:A:121:ARG:NE	0.44	2.28	4	4
1:A:20:TRP:CD1	1:A:21:ASN:N	0.44	2.85	3	3
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HD12	0.44	2.47	18	3
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:HB2	0.44	2.12	12	1
1:A:175:GLU:OE2	1:A:203:TYR:CZ	0.44	2.71	9	1
1:A:17:GLU:O	1:A:17:GLU:CG	0.44	2.66	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:CD	0.44	2.65	6	1
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:CA	0.44	2.66	21	8
1:A:195:TYR:CD1	1:A:207:GLU:HG3	0.44	2.48	1	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:182:ILE:O	0.44	2.11	16	1
1:A:42:ALA:HB1	1:A:74:ILE:HG23	0.44	1.88	16	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:LEU:HA	0.44	1.90	3	1
1:A:43:LYS:HE2	1:A:77:GLU:CG	0.44	2.43	12	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:75:LEU:N	0.44	2.81	3	7
1:A:80:GLU:HG2	1:A:83:LEU:HD13	0.44	1.89	20	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:CG	0.44	2.66	20	1
1:A:185:ARG:O	1:A:186:GLU:C	0.44	2.56	19	1
1:A:61:THR:O	1:A:88:SER:N	0.44	2.46	17	2
1:A:185:ARG:NH1	1:A:185:ARG:O	0.44	2.51	10	1
1:A:90:LYS:CE	1:A:143:TYR:HB2	0.44	2.43	12	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:39:ILE:HG13	0.44	2.43	17	1
1:A:191:VAL:O	1:A:191:VAL:CG2	0.44	2.66	14	10
1:A:121:ARG:NE	1:A:121:ARG:HA	0.44	2.27	3	2
1:A:97:GLY:CA	1:A:129:ASN:OD1	0.44	2.66	5	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:CG	0.44	2.66	11	7
1:A:57:ASP:CA	1:A:83:LEU:HD21	0.44	2.43	19	1
1:A:123:TYR:CE2	1:A:172:MET:CE	0.44	3.01	19	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:HG2	0.44	2.12	16	1
1:A:94:ARG:NE	1:A:131:GLU:O	0.44	2.51	3	1
1:A:167:LEU:O	1:A:168:ARG:C	0.44	2.56	12	1
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:CZ	0.44	2.43	12	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:CB	0.44	2.66	9	1
1:A:123:TYR:C	1:A:123:TYR:CD1	0.44	2.92	9	1
1:A:203:TYR:CE1	1:A:206:LYS:HA	0.44	2.47	11	1
1:A:29:TRP:HB2	1:A:95:TYR:CD1	0.44	2.48	17	1
1:A:170:LEU:N	1:A:170:LEU:CD2	0.44	2.81	8	2
1:A:61:THR:N	1:A:86:ILE:O	0.44	2.50	1	2
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:CA	0.44	2.42	1	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:CB	0.44	2.92	5	2
1:A:41:GLU:CG	1:A:190:GLY:CA	0.44	2.95	20	1
1:A:170:LEU:CD1	1:A:174:LEU:HD22	0.44	2.43	21	1
1:A:172:MET:HG3	1:A:173:ASP:N	0.44	2.28	13	5
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG11	0.44	2.12	16	1
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:HG3	0.44	1.90	16	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:HG2	0.44	2.12	16	2
1:A:87:LYS:N	1:A:87:LYS:HD2	0.44	2.28	2	1
1:A:60:PHE:CB	1:A:160:ILE:HG12	0.44	2.42	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:TRP:O	1:A:115:GLN:HB2	0.43	2.13	20	10
1:A:122:SER:HB2	1:A:125:ILE:HG22	0.43	1.90	20	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:70:THR:OG1	0.43	2.13	19	1
1:A:199:LYS:C	1:A:199:LYS:CD	0.43	2.86	16	1
1:A:120:ARG:CD	1:A:121:ARG:HG2	0.43	2.42	17	3
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HD2	0.43	2.13	12	4
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:CA	0.43	2.42	16	1
1:A:9:LEU:O	1:A:157:LYS:CB	0.43	2.66	11	2
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HD12	0.43	2.46	2	1
1:A:54:TYR:HE2	1:A:194:VAL:HG21	0.43	1.72	10	1
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CD	0.43	2.34	12	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:HD23	0.43	1.90	11	1
1:A:191:VAL:CG1	1:A:211:ASN:ND2	0.43	2.81	7	1
1:A:159:LEU:HD12	1:A:160:ILE:H	0.43	1.73	17	1
1:A:137:ALA:N	1:A:169:ALA:HB1	0.43	2.28	17	1
1:A:29:TRP:HB2	1:A:95:TYR:CE1	0.43	2.47	17	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:157:LYS:N	0.43	2.51	6	1
1:A:123:TYR:O	1:A:133:LEU:CB	0.43	2.66	10	3
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:CG	0.43	2.66	7	5
1:A:144:TYR:CD2	1:A:170:LEU:HD21	0.43	2.48	21	1
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG12	0.43	1.91	21	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:207:GLU:HB2	0.43	2.43	16	2
1:A:163:HIS:N	1:A:166:SER:OG	0.43	2.51	2	1
1:A:79:GLY:C	1:A:81:PRO:CD	0.43	2.87	12	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:195:TYR:CZ	0.43	3.01	11	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:CG	0.43	2.56	17	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:160:ILE:CD1	0.43	2.43	6	2
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LYS:CG	0.43	2.67	2	5
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:CZ	0.43	2.44	19	2
1:A:50:LYS:CE	1:A:78:VAL:O	0.43	2.67	5	3
1:A:153:LEU:CD2	1:A:199:LYS:O	0.43	2.67	7	4
1:A:29:TRP:CG	1:A:95:TYR:CD1	0.43	3.06	19	1
1:A:202:LYS:O	1:A:203:TYR:C	0.43	2.56	16	2
1:A:89:GLU:O	1:A:92:ASN:CG	0.43	2.56	12	2
1:A:99:LEU:O	1:A:101:GLY:N	0.43	2.51	11	2
1:A:120:ARG:C	1:A:120:ARG:CD	0.43	2.87	7	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:101:GLY:HA2	0.43	2.48	8	5
1:A:197:LEU:HD13	1:A:201:GLY:C	0.43	2.33	1	1
1:A:27:THR:O	1:A:100:GLN:CG	0.43	2.67	15	2
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:CG2	0.43	3.01	16	3
1:A:8:ASN:OD1	1:A:8:ASN:C	0.43	2.56	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD23	0.43	2.34	3	2
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CG	0.43	3.02	18	2
1:A:193:ILE:CG2	1:A:194:VAL:N	0.43	2.81	10	1
1:A:143:TYR:CG	1:A:144:TYR:N	0.43	2.86	4	2
1:A:162:ALA:O	1:A:163:HIS:ND1	0.43	2.51	12	1
1:A:121:ARG:O	1:A:168:ARG:NH1	0.43	2.51	9	1
1:A:107:ALA:O	1:A:111:TRP:CB	0.43	2.65	18	1
1:A:175:GLU:HA	1:A:203:TYR:CD1	0.43	2.48	7	2
1:A:207:GLU:HG3	1:A:208:LEU:N	0.43	2.29	11	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:207:GLU:O	0.43	2.71	11	1
1:A:57:ASP:HB2	1:A:156:GLU:CG	0.43	2.43	17	1
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:CB	0.43	2.66	10	3
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:CB	0.43	2.66	18	5
1:A:48:ARG:O	1:A:52:ARG:NH1	0.43	2.52	2	2
1:A:133:LEU:HD12	1:A:165:ASN:OD1	0.43	2.13	1	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CZ	0.43	3.01	1	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:CG2	0.43	2.94	1	2
1:A:90:LYS:CG	1:A:139:ARG:O	0.43	2.66	1	4
1:A:194:VAL:HG13	1:A:194:VAL:O	0.43	2.13	21	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HG	0.43	2.13	16	1
1:A:23:LEU:HB3	1:A:25:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:205:SER:OG	0.43	2.67	18	2
1:A:43:LYS:HD2	1:A:73:ILE:CG2	0.43	2.42	17	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:N	0.43	2.66	6	1
1:A:171:ILE:HG13	1:A:195:TYR:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:131:GLU:HG2	1:A:132:SER:N	0.43	2.29	9	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:144:TYR:OH	0.43	2.67	18	4
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:CG2	0.43	2.66	13	1
1:A:197:LEU:HA	1:A:202:LYS:O	0.43	2.14	16	1
1:A:50:LYS:HD3	1:A:78:VAL:O	0.43	2.13	16	1
1:A:19:GLU:N	1:A:19:GLU:OE1	0.43	2.52	10	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:38:GLY:HA3	0.43	1.89	11	1
1:A:43:LYS:O	1:A:77:GLU:OE1	0.43	2.36	17	1
1:A:198:ASP:OD2	1:A:204:VAL:CG1	0.43	2.67	14	8
1:A:92:ASN:C	1:A:163:HIS:CD2	0.43	2.92	8	3
1:A:138:GLU:O	1:A:142:PRO:CD	0.43	2.67	6	6
1:A:193:ILE:HG23	1:A:207:GLU:HB2	0.43	1.91	21	2
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:CG2	0.43	2.67	5	3
1:A:61:THR:CG2	1:A:161:ALA:HB3	0.43	2.38	3	2
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:NE	0.43	2.27	13	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:123:TYR:C	0.43	2.92	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ILE:CD1	1:A:175:GLU:HG3	0.43	2.44	16	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:202:LYS:CA	0.43	2.44	16	1
1:A:194:VAL:CG1	1:A:208:LEU:O	0.43	2.66	3	1
1:A:206:LYS:CD	1:A:206:LYS:N	0.43	2.82	3	1
1:A:205:SER:OG	1:A:206:LYS:N	0.43	2.52	18	2
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:CD1	0.43	2.65	4	1
1:A:71:CYS:HA	1:A:74:ILE:CG2	0.43	2.44	17	1
1:A:90:LYS:CD	1:A:139:ARG:O	0.43	2.67	21	8
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:N	0.43	2.51	6	1
1:A:62:SER:OG	1:A:67:ALA:CB	0.43	2.67	10	2
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:OG1	0.43	2.67	11	5
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:CD1	0.43	2.66	3	5
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:HB3	0.43	2.13	12	2
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.66	3	1
1:A:185:ARG:HG3	1:A:185:ARG:NH1	0.43	2.28	12	1
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:CD	0.43	2.92	18	2
1:A:75:LEU:HD22	1:A:83:LEU:HB3	0.43	1.91	7	1
1:A:122:SER:O	1:A:183:VAL:CG1	0.43	2.66	7	1
1:A:19:GLU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:102:LEU:O	0.43	2.13	17	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:197:LEU:CD1	0.43	2.67	4	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:115:GLN:HG2	0.43	2.49	4	4
1:A:210:ASP:OD1	1:A:211:ASN:N	0.43	2.51	6	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:CG2	0.43	2.67	8	2
1:A:58:ILE:HD13	1:A:59:ALA:N	0.43	2.28	1	2
1:A:160:ILE:HG21	1:A:170:LEU:CD2	0.43	2.44	20	1
1:A:193:ILE:CA	1:A:209:ILE:HD11	0.43	2.44	19	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:91:LEU:O	0.43	2.67	19	1
1:A:58:ILE:HG12	1:A:156:GLU:CD	0.43	2.34	16	1
1:A:32:PRO:HG2	1:A:66:ARG:CD	0.43	2.44	16	1
1:A:120:ARG:HG2	1:A:121:ARG:N	0.43	2.28	3	1
1:A:181:GLN:O	1:A:184:LYS:CG	0.43	2.67	2	2
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.80	2	1
1:A:131:GLU:HB3	1:A:136:THR:CG2	0.43	2.43	12	1
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:CD1	0.43	2.35	12	1
1:A:74:ILE:C	1:A:74:ILE:CD1	0.43	2.81	12	1
1:A:133:LEU:O	1:A:136:THR:OG1	0.43	2.36	17	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:87:LYS:N	0.43	2.28	8	5
1:A:171:ILE:O	1:A:175:GLU:CB	0.43	2.67	13	1
1:A:75:LEU:O	1:A:78:VAL:CG2	0.43	2.67	15	2
1:A:107:ALA:O	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.67	7	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:OE2	0.43	2.14	16	1
1:A:187:LEU:C	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.87	16	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:CG2	0.43	2.97	17	4
1:A:111:TRP:CB	1:A:116:VAL:HG23	0.43	2.44	2	1
1:A:24:ASN:O	1:A:103:ASN:HA	0.43	2.14	12	2
1:A:93:GLU:HB2	1:A:163:HIS:CD2	0.43	2.49	11	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:CA	0.43	2.43	11	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:HG23	0.43	1.90	4	1
1:A:175:GLU:OE2	1:A:177:LEU:N	0.43	2.52	7	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:HD23	0.43	2.54	17	1
1:A:94:ARG:HG2	1:A:95:TYR:N	0.43	2.29	17	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:GLU:CG	0.42	2.67	8	4
1:A:8:ASN:ND2	1:A:156:GLU:O	0.42	2.52	15	3
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:CG	0.42	2.67	13	1
1:A:73:ILE:O	1:A:76:GLU:CG	0.42	2.67	13	1
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:CG2	0.42	2.97	19	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:HG12	0.42	2.13	16	1
1:A:81:PRO:O	1:A:82:ASN:C	0.42	2.58	16	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:LEU:N	0.42	2.51	3	3
1:A:174:LEU:O	1:A:202:LYS:CG	0.42	2.67	11	3
1:A:8:ASN:CG	1:A:152:ILE:O	0.42	2.57	12	1
1:A:193:ILE:HG13	1:A:194:VAL:N	0.42	2.29	12	1
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:OD1	0.42	2.36	12	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:CG2	0.42	2.62	9	1
1:A:114:GLU:O	1:A:117:GLN:CB	0.42	2.67	18	1
1:A:198:ASP:HB3	1:A:204:VAL:CG1	0.42	2.44	17	1
1:A:27:THR:CG2	1:A:28:GLY:N	0.42	2.77	17	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:118:ILE:O	0.42	2.64	9	3
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:TYR:O	0.42	2.67	14	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CG2	0.42	2.66	4	3
1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:ASP:N	0.42	2.30	14	1
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:HD13	0.42	2.34	8	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:CG2	0.42	2.67	21	5
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:CD	0.42	2.92	21	2
1:A:175:GLU:CG	1:A:203:TYR:CD2	0.42	3.02	3	1
1:A:114:GLU:O	1:A:115:GLN:HG2	0.42	2.14	18	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:201:GLY:O	0.42	2.67	18	1
1:A:92:ASN:O	1:A:139:ARG:NH2	0.42	2.52	11	1
1:A:172:MET:O	1:A:177:LEU:N	0.42	2.52	11	1
1:A:141:LEU:O	1:A:144:TYR:HB3	0.42	2.14	17	1
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:CD	0.42	2.34	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ARG:CD	1:A:131:GLU:O	0.42	2.67	14	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:167:LEU:H	0.42	1.71	8	1
1:A:111:TRP:O	1:A:112:GLY:O	0.42	2.37	20	8
1:A:126:ALA:CB	1:A:130:GLY:O	0.42	2.68	1	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:163:HIS:CB	0.42	2.68	9	2
1:A:58:ILE:HD11	1:A:156:GLU:OE2	0.42	2.14	16	1
1:A:145:LYS:HA	1:A:149:VAL:CG1	0.42	2.44	9	2
1:A:194:VAL:HG22	1:A:195:TYR:N	0.42	2.28	3	1
1:A:209:ILE:HG22	1:A:211:ASN:N	0.42	2.30	3	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:54:TYR:O	0.42	2.67	2	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:CD2	0.42	2.92	10	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:152:ILE:O	0.42	2.37	12	1
1:A:203:TYR:CD1	1:A:203:TYR:C	0.42	2.91	12	1
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:CB	0.42	2.68	11	1
1:A:20:TRP:O	1:A:25:LEU:CD1	0.42	2.68	11	1
1:A:121:ARG:CZ	1:A:168:ARG:NE	0.42	2.82	7	1
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:HG3	0.42	2.49	7	1
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:OE1	0.42	2.15	17	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:CD2	0.42	3.07	17	1
1:A:43:LYS:HD2	1:A:73:ILE:HG23	0.42	1.85	17	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HB	0.42	2.13	10	7
1:A:23:LEU:HB2	1:A:25:LEU:HD11	0.42	1.90	14	2
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:CG	0.42	2.67	6	8
1:A:94:ARG:NH2	1:A:96:TYR:OH	0.42	2.53	8	3
1:A:51:SER:O	1:A:52:ARG:CZ	0.42	2.68	20	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:N	0.42	2.87	21	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HD13	0.42	1.91	15	2
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:CG1	0.42	2.45	13	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HB2	0.42	2.14	16	2
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:CD	0.42	2.44	16	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:CA	0.42	2.45	12	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:12:LEU:HD21	0.42	1.91	11	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.67	11	1
1:A:95:TYR:O	1:A:131:GLU:N	0.42	2.51	14	3
1:A:107:ALA:O	1:A:116:VAL:CG1	0.42	2.68	6	2
1:A:209:ILE:CG2	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.68	6	2
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LYS:N	0.42	2.51	2	2
1:A:30:LYS:O	1:A:30:LYS:CE	0.42	2.67	8	1
1:A:126:ALA:HB2	1:A:131:GLU:C	0.42	2.34	20	1
1:A:27:THR:O	1:A:30:LYS:CG	0.42	2.68	21	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:ALA:CA	1:A:116:VAL:HG22	0.42	2.44	21	1
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:CG1	0.42	2.67	3	2
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:CG	0.42	2.68	19	2
1:A:26:PHE:O	1:A:101:GLY:N	0.42	2.53	7	2
1:A:187:LEU:H	1:A:187:LEU:HD23	0.42	1.74	15	1
1:A:182:ILE:HG23	1:A:183:VAL:N	0.42	2.29	16	1
1:A:58:ILE:HG21	1:A:60:PHE:CE1	0.42	2.49	3	1
1:A:80:GLU:O	1:A:82:ASN:N	0.42	2.53	3	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:CG1	0.42	2.82	12	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:CB	0.42	2.68	12	1
1:A:29:TRP:O	1:A:64:LEU:HD21	0.42	2.14	12	1
1:A:115:GLN:C	1:A:117:GLN:N	0.42	2.72	18	1
1:A:174:LEU:CD1	1:A:174:LEU:O	0.42	2.67	4	1
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:OG	0.42	2.38	7	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:96:TYR:CE1	0.42	3.07	7	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.68	17	1
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:CB	0.42	2.67	13	5
1:A:48:ARG:HB3	1:A:210:ASP:CB	0.42	2.45	6	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:25:LEU:HD11	0.42	2.44	2	2
1:A:175:GLU:HB3	1:A:177:LEU:HD13	0.42	1.90	8	1
1:A:11:VAL:N	1:A:158:VAL:O	0.42	2.49	1	2
1:A:91:LEU:CD2	1:A:162:ALA:HB2	0.42	2.43	20	2
1:A:157:LYS:NZ	1:A:157:LYS:O	0.42	2.51	16	1
1:A:15:HIS:O	1:A:16:GLY:C	0.42	2.57	16	1
1:A:99:LEU:CD1	1:A:127:PRO:HB3	0.42	2.45	3	1
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:HD13	0.42	1.90	12	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:139:ARG:NH2	0.42	2.53	18	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:LEU:HD23	0.42	2.12	11	1
1:A:157:LYS:O	1:A:157:LYS:NZ	0.42	2.51	7	1
1:A:120:ARG:HD2	1:A:121:ARG:N	0.42	2.29	7	1
1:A:6:ALA:O	1:A:198:ASP:C	0.42	2.58	17	1
1:A:32:PRO:O	1:A:65:GLN:NE2	0.42	2.53	13	4
1:A:92:ASN:OD1	1:A:92:ASN:N	0.42	2.53	8	2
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:CG	0.42	2.68	6	2
1:A:68:GLN:O	1:A:72:GLN:NE2	0.42	2.53	19	6
1:A:20:TRP:CG	1:A:30:LYS:NZ	0.42	2.87	1	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:HG	0.42	2.14	9	3
1:A:188:ALA:O	1:A:189:THR:O	0.42	2.38	20	2
1:A:29:TRP:N	1:A:100:GLN:OE1	0.42	2.52	21	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:159:LEU:N	0.42	2.67	19	1
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:NE	0.42	2.53	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:TYR:O	1:A:133:LEU:HB3	0.42	2.14	16	1
1:A:97:GLY:HA3	1:A:129:ASN:O	0.42	2.14	12	2
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:54:TYR:CE2	0.42	3.02	10	1
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:CZ	0.42	2.44	10	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:90:LYS:HG3	0.42	2.15	12	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:CD1	0.42	2.68	18	1
1:A:119:TRP:CH2	1:A:128:PRO:HD3	0.42	2.49	11	1
1:A:29:TRP:CD1	1:A:95:TYR:CA	0.42	3.02	11	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:CD2	0.42	2.68	7	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:96:TYR:CE1	0.42	3.07	7	1
1:A:122:SER:HB2	1:A:125:ILE:HG23	0.42	1.90	17	1
1:A:151:HIS:HB2	1:A:156:GLU:OE1	0.42	2.14	17	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:105:ASP:CB	0.42	2.68	1	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:66:ARG:N	0.42	2.82	5	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:HD11	0.42	2.55	20	1
1:A:106:ASP:O	1:A:110:LYS:N	0.42	2.53	11	3
1:A:61:THR:CB	1:A:87:LYS:HG3	0.42	2.44	19	1
1:A:168:ARG:NH1	1:A:182:ILE:O	0.42	2.53	15	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:165:ASN:OD1	0.42	2.52	3	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:CG2	0.42	2.98	2	1
1:A:191:VAL:CG2	1:A:191:VAL:O	0.42	2.67	9	2
1:A:141:LEU:HA	1:A:170:LEU:HD11	0.42	1.91	12	1
1:A:14:ARG:NE	1:A:187:LEU:HB2	0.42	2.28	12	1
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD21	0.42	1.90	12	1
1:A:196:HIS:C	1:A:197:LEU:HD12	0.42	2.35	12	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:CG2	0.42	2.44	17	2
1:A:141:LEU:HD22	1:A:173:ASP:CG	0.42	2.35	4	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.15	17	1
1:A:28:GLY:CA	1:A:96:TYR:HB2	0.42	2.44	17	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:80:GLU:O	0.42	2.67	8	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD2	0.42	2.88	13	2
1:A:175:GLU:O	1:A:203:TYR:CD1	0.42	2.73	20	1
1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:OD1	0.42	2.53	15	3
1:A:193:ILE:HD13	1:A:194:VAL:C	0.42	2.35	15	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CG	0.42	3.03	15	1
1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:ARG:CD	0.42	2.44	3	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG21	0.42	2.45	2	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:160:ILE:CG2	0.42	2.45	12	1
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:HG13	0.42	2.13	12	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:ND2	0.42	2.53	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:TYR:OH	1:A:197:LEU:HD11	0.42	2.15	4	1
1:A:71:CYS:O	1:A:74:ILE:CG2	0.42	2.67	7	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:HG2	0.42	2.15	17	1
1:A:115:GLN:HG2	1:A:119:TRP:NE1	0.42	2.29	17	1
1:A:92:ASN:HA	1:A:163:HIS:NE2	0.42	2.30	17	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:78:VAL:CG2	0.42	2.45	17	1
1:A:56:PHE:C	1:A:83:LEU:HD13	0.42	2.35	14	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD12	0.42	2.42	6	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:204:VAL:HG23	0.42	2.49	6	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:SER:N	0.42	2.53	19	2
1:A:194:VAL:CG2	1:A:194:VAL:O	0.42	2.67	8	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD1	0.42	2.42	7	2
1:A:97:GLY:N	1:A:130:GLY:HA2	0.42	2.30	20	1
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:LEU:N	0.42	2.29	13	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:210:ASP:CB	0.42	2.98	19	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:148:ILE:HD12	0.42	2.50	15	1
1:A:67:ALA:O	1:A:71:CYS:N	0.42	2.52	15	1
1:A:136:THR:O	1:A:137:ALA:C	0.42	2.58	16	1
1:A:96:TYR:CD2	1:A:99:LEU:HB2	0.42	2.50	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:CG2	0.42	2.45	3	1
1:A:46:GLY:O	1:A:49:LEU:N	0.42	2.53	3	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:210:ASP:HB3	0.42	2.45	2	1
1:A:40:LYS:O	1:A:44:LEU:CB	0.42	2.68	2	2
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:CD1	0.42	2.44	12	1
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:HA	0.42	2.14	12	2
1:A:124:ASP:OD1	1:A:125:ILE:N	0.42	2.53	11	2
1:A:181:GLN:O	1:A:184:LYS:CD	0.42	2.68	18	1
1:A:90:LYS:O	1:A:139:ARG:CZ	0.42	2.68	11	1
1:A:48:ARG:O	1:A:52:ARG:HG2	0.42	2.15	17	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:37:THR:CG2	0.42	2.88	17	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:GLU:CB	0.41	2.68	14	3
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HB2	0.41	2.51	8	2
1:A:118:ILE:O	1:A:125:ILE:CG2	0.41	2.68	1	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:201:GLY:O	0.41	2.15	1	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HG	0.41	1.92	16	1
1:A:111:TRP:CB	1:A:115:GLN:CD	0.41	2.88	12	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:SER:C	0.41	2.59	12	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:HG13	0.41	2.45	11	2
1:A:172:MET:CB	1:A:182:ILE:HD13	0.41	2.45	4	1
1:A:120:ARG:HD3	1:A:121:ARG:NH1	0.41	2.30	17	1
1:A:125:ILE:HG12	1:A:126:ALA:N	0.41	2.28	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:CB	0.41	2.68	1	2
1:A:60:PHE:O	1:A:161:ALA:N	0.41	2.51	1	1
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:CD2	0.41	2.68	19	1
1:A:123:TYR:OH	1:A:172:MET:CE	0.41	2.69	16	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:139:ARG:CZ	0.41	2.68	16	1
1:A:144:TYR:O	1:A:145:LYS:C	0.41	2.58	16	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CZ	0.41	2.49	16	2
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HE2	0.41	1.91	2	1
1:A:120:ARG:HB2	1:A:120:ARG:NH1	0.41	2.30	12	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:163:HIS:HB2	0.41	2.15	12	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:197:LEU:HD21	0.41	2.45	12	1
1:A:71:CYS:O	1:A:74:ILE:HG13	0.41	2.13	12	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:116:VAL:HG12	0.41	2.50	18	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:CD2	0.41	2.66	18	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD13	0.41	2.15	11	1
1:A:52:ARG:NE	1:A:211:ASN:OXT	0.41	2.53	11	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HZ3	0.41	1.73	7	1
1:A:198:ASP:OD1	1:A:202:LYS:N	0.41	2.53	13	2
1:A:102:LEU:HD21	1:A:107:ALA:N	0.41	2.30	21	1
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:N	0.41	2.53	21	4
1:A:85:THR:O	1:A:87:LYS:NZ	0.41	2.52	19	1
1:A:196:HIS:HB3	1:A:205:SER:CB	0.41	2.46	16	1
1:A:94:ARG:HB3	1:A:94:ARG:NH1	0.41	2.30	16	1
1:A:86:ILE:C	1:A:87:LYS:HE2	0.41	2.36	12	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:195:TYR:N	0.41	2.87	4	2
1:A:145:LYS:C	1:A:149:VAL:HG13	0.41	2.36	9	1
1:A:112:GLY:O	1:A:115:GLN:CA	0.41	2.68	18	1
1:A:50:LYS:CE	1:A:77:GLU:O	0.41	2.67	18	1
1:A:191:VAL:HG11	1:A:211:ASN:ND2	0.41	2.30	7	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:CB	0.41	2.68	17	1
1:A:14:ARG:O	1:A:15:HIS:C	0.41	2.58	17	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:120:ARG:O	0.41	2.53	6	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:HB3	0.41	2.50	21	1
1:A:37:THR:HG22	1:A:41:GLU:OE2	0.41	2.15	13	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:209:ILE:HG12	0.41	2.45	19	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:CG2	0.41	2.68	15	1
1:A:140:VAL:C	1:A:142:PRO:CD	0.41	2.88	17	2
1:A:204:VAL:O	1:A:205:SER:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:H	0.41	1.75	3	1
1:A:65:GLN:OE1	1:A:66:ARG:N	0.41	2.53	2	1
1:A:94:ARG:CB	1:A:165:ASN:CG	0.41	2.89	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:THR:O	1:A:147:THR:CG2	0.41	2.68	12	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:179:GLY:N	0.41	2.84	9	1
1:A:19:GLU:O	1:A:23:LEU:CD1	0.41	2.68	7	1
1:A:35:SER:O	1:A:36:GLU:C	0.41	2.59	17	1
1:A:65:GLN:OE1	1:A:69:LYS:NZ	0.41	2.54	17	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:125:ILE:O	1:A:125:ILE:HG23	0.41	2.16	20	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:26:PHE:C	0.41	2.94	21	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:HB2	0.41	2.46	17	2
1:A:48:ARG:NE	1:A:211:ASN:OD1	0.41	2.53	21	1
1:A:152:ILE:CD1	1:A:199:LYS:O	0.41	2.69	19	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:HB3	0.41	2.16	16	2
1:A:142:PRO:HA	1:A:145:LYS:CG	0.41	2.46	16	1
1:A:52:ARG:HD2	1:A:210:ASP:HB2	0.41	1.93	16	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:107:ALA:CB	0.41	2.40	16	1
1:A:160:ILE:HG21	1:A:170:LEU:HD12	0.41	1.91	2	1
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:HB	0.41	1.92	12	1
1:A:60:PHE:HA	1:A:86:ILE:CG1	0.41	2.44	12	1
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:HG12	0.41	2.16	11	1
1:A:20:TRP:CZ2	1:A:32:PRO:HG2	0.41	2.51	17	1
1:A:50:LYS:HE3	1:A:78:VAL:O	0.41	2.15	17	1
1:A:75:LEU:CA	1:A:78:VAL:HG22	0.41	2.45	17	1
1:A:16:GLY:O	1:A:34:LEU:HD12	0.41	2.16	17	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:158:VAL:CG1	0.41	2.36	1	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:145:LYS:N	0.41	2.89	16	1
1:A:11:VAL:HA	1:A:193:ILE:O	0.41	2.15	16	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:39:ILE:HD13	0.41	2.45	16	1
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HG	0.41	2.50	3	1
1:A:95:TYR:O	1:A:130:GLY:CA	0.41	2.69	3	1
1:A:163:HIS:O	1:A:164:GLY:C	0.41	2.58	12	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:HD2	0.41	2.50	4	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:LEU:HD22	0.41	1.93	17	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:193:ILE:O	0.41	2.16	8	1
1:A:15:HIS:CE1	1:A:66:ARG:NH1	0.41	2.89	7	2
1:A:32:PRO:HG2	1:A:66:ARG:NE	0.41	2.31	20	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:194:VAL:HG22	0.41	1.92	21	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD11	0.41	2.50	12	1
1:A:139:ARG:HD2	1:A:139:ARG:C	0.41	2.35	12	1
1:A:115:GLN:C	1:A:116:VAL:HG13	0.41	2.34	18	1
1:A:144:TYR:CD1	1:A:144:TYR:C	0.41	2.93	17	1
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:HG	0.41	2.15	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:SER:HB3	1:A:20:TRP:CD1	0.41	2.51	17	1
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:CG	0.41	2.46	14	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:THR:N	0.41	2.53	21	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:211:ASN:OXT	0.41	2.53	13	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:192:PRO:HG3	0.41	2.46	15	1
1:A:108:ARG:O	1:A:112:GLY:CA	0.41	2.69	16	1
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:N	0.41	2.47	16	1
1:A:95:TYR:N	1:A:131:GLU:OE1	0.41	2.53	16	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:CA	0.41	2.46	3	1
1:A:148:ILE:CG2	1:A:148:ILE:O	0.41	2.67	9	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD22	0.41	2.35	9	1
1:A:144:TYR:C	1:A:144:TYR:CD1	0.41	2.93	11	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:OG1	0.41	2.15	4	1
1:A:168:ARG:HG2	1:A:185:ARG:CZ	0.41	2.46	10	2
1:A:175:GLU:OE1	1:A:175:GLU:N	0.41	2.53	14	1
1:A:91:LEU:O	1:A:162:ALA:CB	0.41	2.68	1	1
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:C	0.41	2.36	1	1
1:A:41:GLU:CG	1:A:190:GLY:HA3	0.41	2.46	20	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:42:ALA:N	0.41	2.53	20	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:48:ARG:NE	0.41	2.31	20	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:182:ILE:O	0.41	2.68	21	1
1:A:178:THR:O	1:A:182:ILE:CG2	0.41	2.68	21	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CE1	0.41	2.51	21	1
1:A:138:GLU:CA	1:A:138:GLU:OE1	0.41	2.69	13	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:194:VAL:HG21	0.41	2.51	19	1
1:A:194:VAL:CG1	1:A:208:LEU:HB3	0.41	2.46	19	1
1:A:46:GLY:O	1:A:78:VAL:HG12	0.41	2.15	16	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HB	0.41	2.46	2	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:135:ASP:OD1	0.41	2.69	2	1
1:A:143:TYR:CE1	1:A:148:ILE:CD1	0.41	3.02	10	1
1:A:11:VAL:HG13	1:A:193:ILE:O	0.41	2.16	10	1
1:A:118:ILE:HD12	1:A:119:TRP:CZ3	0.41	2.51	12	1
1:A:22:LYS:O	1:A:23:LEU:C	0.41	2.59	12	1
1:A:184:LYS:HG3	1:A:184:LYS:O	0.41	2.15	12	1
1:A:50:LYS:CD	1:A:78:VAL:O	0.41	2.68	11	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:160:ILE:CD1	0.41	2.46	7	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:77:GLU:CG	0.41	2.45	7	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CA	0.41	3.04	17	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:77:GLU:HG2	0.41	1.91	17	1
1:A:16:GLY:HA3	1:A:38:GLY:HA2	0.41	1.93	17	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:HG12	0.41	2.46	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD22	1:A:173:ASP:OD2	0.41	2.16	5	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:VAL:HG22	0.41	1.93	12	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:CG2	0.41	3.02	19	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:201:GLY:O	0.41	2.35	16	1
1:A:96:TYR:OH	1:A:120:ARG:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CE2	0.41	2.51	3	1
1:A:140:VAL:HG23	1:A:141:LEU:N	0.41	2.31	10	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:152:ILE:CD1	0.41	2.84	12	1
1:A:134:LYS:HE2	1:A:135:ASP:OD1	0.41	2.16	12	2
1:A:152:ILE:HG13	1:A:153:LEU:N	0.41	2.31	9	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:115:GLN:HG2	1:A:115:GLN:O	0.41	2.16	18	1
1:A:195:TYR:HD1	1:A:203:TYR:HH	0.41	1.53	11	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:37:THR:CG2	0.41	2.68	4	1
1:A:121:ARG:CD	1:A:168:ARG:CZ	0.41	2.99	7	1
1:A:34:LEU:HB2	1:A:69:LYS:CE	0.41	2.46	7	1
1:A:115:GLN:HA	1:A:118:ILE:HG22	0.41	1.93	17	1
1:A:134:LYS:HE2	1:A:135:ASP:N	0.40	2.31	6	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:170:LEU:HD13	0.40	2.51	8	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:96:TYR:CE2	0.40	2.88	20	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:74:ILE:HD11	0.40	2.46	13	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:81:PRO:CG	0.40	2.69	15	1
1:A:121:ARG:CZ	1:A:168:ARG:NH1	0.40	2.84	3	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:HB3	0.40	1.93	10	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:152:ILE:HD12	0.40	2.31	12	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:N	0.40	2.44	12	1
1:A:31:ASP:CB	1:A:64:LEU:HD22	0.40	2.46	12	1
1:A:46:GLY:O	1:A:50:LYS:N	0.40	2.53	18	2
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:127:PRO:HA	0.40	2.51	3	2
1:A:93:GLU:HG2	1:A:163:HIS:CB	0.40	2.46	14	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:HG3	0.40	2.46	6	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:85:THR:CG2	0.40	3.10	8	1
1:A:94:ARG:NE	1:A:96:TYR:CE1	0.40	2.89	8	1
1:A:177:LEU:CG	1:A:182:ILE:HB	0.40	2.46	1	2
1:A:167:LEU:CB	1:A:185:ARG:NH2	0.40	2.84	5	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:CB	0.40	2.69	16	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ALA:N	0.40	2.31	19	1
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:CB	0.40	2.69	15	2
1:A:141:LEU:O	1:A:144:TYR:N	0.40	2.54	15	1
1:A:49:LEU:CG	1:A:192:PRO:HG2	0.40	2.47	15	1
1:A:171:ILE:HD11	1:A:175:GLU:HG3	0.40	1.93	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ARG:HD2	1:A:210:ASP:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:N	0.40	2.32	12	1
1:A:207:GLU:OE1	1:A:207:GLU:N	0.40	2.54	18	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:CE	0.40	2.69	18	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:119:TRP:CZ2	0.40	2.87	11	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:CB	0.40	2.69	11	1
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG23	0.40	1.92	7	1
1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:O	0.40	2.17	17	1
1:A:122:SER:HB3	1:A:125:ILE:CG2	0.40	2.46	14	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:54:TYR:O	0.40	2.16	14	1
1:A:18:SER:OG	1:A:66:ARG:CD	0.40	2.69	6	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:SG	0.40	3.10	4	2
1:A:82:ASN:OD1	1:A:83:LEU:N	0.40	2.54	3	2
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:CD1	0.40	2.67	21	1
1:A:97:GLY:CA	1:A:130:GLY:N	0.40	2.84	13	1
1:A:15:HIS:ND1	1:A:66:ARG:HD2	0.40	2.31	16	1
1:A:186:GLU:O	1:A:187:LEU:HD12	0.40	2.16	3	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:CB	0.40	2.69	9	2
1:A:94:ARG:HB2	1:A:165:ASN:CG	0.40	2.37	12	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:211:ASN:C	0.40	2.59	12	1
1:A:180:ASP:O	1:A:183:VAL:HG12	0.40	2.16	9	1
1:A:111:TRP:O	1:A:112:GLY:C	0.40	2.59	18	1
1:A:126:ALA:CB	1:A:127:PRO:CD	0.40	2.96	11	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:152:ILE:C	0.40	2.37	11	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:CB	0.40	2.70	11	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:181:GLN:C	0.40	2.90	11	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:163:HIS:CE1	0.40	3.05	4	1
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HD3	0.40	2.16	7	1
1:A:43:LYS:CD	1:A:77:GLU:CG	0.40	2.99	7	1
1:A:13:THR:HG23	1:A:161:ALA:CB	0.40	2.40	7	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:173:ASP:OD1	0.40	2.70	14	1
1:A:23:LEU:HB3	1:A:25:LEU:HD11	0.40	1.93	6	1
1:A:194:VAL:O	1:A:208:LEU:N	0.40	2.53	19	1
1:A:56:PHE:CG	1:A:157:LYS:HE3	0.40	2.51	16	1
1:A:172:MET:HB2	1:A:182:ILE:HG13	0.40	1.94	16	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:CG	0.40	2.70	16	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:O	0.40	2.40	9	2
1:A:153:LEU:CG	1:A:199:LYS:O	0.40	2.70	2	1
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:NH2	0.40	2.32	10	1
1:A:115:GLN:CG	1:A:119:TRP:CD1	0.40	3.03	12	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:CG1	0.40	2.47	11	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:115:GLN:HB3	0.40	2.52	4	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:CB	0.40	3.05	17	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:THR:CB	0.40	2.69	17	1
1:A:9:LEU:O	1:A:157:LYS:HA	0.40	2.17	1	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HZ1	0.40	1.77	21	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:102:LEU:C	0.40	2.90	19	1
1:A:49:LEU:HG	1:A:192:PRO:CG	0.40	2.46	15	1
1:A:137:ALA:O	1:A:140:VAL:N	0.40	2.49	16	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HE3	0.40	1.93	16	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:208:LEU:C	0.40	2.37	3	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:CD1	0.40	2.47	2	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:CD1	0.40	2.69	2	1
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:HG23	0.40	2.16	12	1
1:A:197:LEU:C	1:A:204:VAL:HB	0.40	2.37	12	1
1:A:74:ILE:CG1	1:A:75:LEU:N	0.40	2.84	12	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:54:TYR:CE2	0.40	2.52	9	1
1:A:96:TYR:CD1	1:A:127:PRO:HG2	0.40	2.51	11	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:195:TYR:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:HD22	0.40	1.86	4	1
1:A:52:ARG:HG3	1:A:210:ASP:CB	0.40	2.47	7	1
1:A:121:ARG:HA	1:A:121:ARG:NH1	0.40	2.32	7	1
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CD2	0.40	2.84	17	1

## 6.3 Torsion angles ⓘ

### 6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	205/211 (97%)	162±4 (79±2%)	31±4 (15±2%)	12±2 (6±1%)	4	23
All	All	4305/4431 (97%)	3406 (79%)	652 (15%)	247 (6%)	4	23

All 57 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	122	SER	20
1	A	16	GLY	17
1	A	128	PRO	17
1	A	112	GLY	17
1	A	177	LEU	14
1	A	6	ALA	13
1	A	150	PRO	12
1	A	114	GLU	9
1	A	97	GLY	8
1	A	83	LEU	8
1	A	205	SER	8
1	A	24	ASN	8
1	A	111	TRP	7
1	A	7	PRO	6
1	A	127	PRO	6
1	A	155	GLY	5
1	A	129	ASN	4
1	A	92	ASN	4
1	A	34	LEU	4
1	A	80	GLU	3
1	A	100	GLN	3
1	A	188	ALA	3
1	A	207	GLU	3
1	A	185	ARG	3
1	A	15	HIS	2
1	A	186	GLU	2
1	A	189	THR	2
1	A	130	GLY	2
1	A	8	ASN	2
1	A	123	TYR	2
1	A	144	TYR	2
1	A	30	LYS	2
1	A	117	GLN	2
1	A	84	GLU	2
1	A	192	PRO	2
1	A	146	SER	2
1	A	23	LEU	1
1	A	66	ARG	1
1	A	108	ARG	1
1	A	78	VAL	1
1	A	53	GLY	1
1	A	203	TYR	1
1	A	94	ARG	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	193	ILE	1
1	A	149	VAL	1
1	A	208	LEU	1
1	A	116	VAL	1
1	A	179	GLY	1
1	A	81	PRO	1
1	A	204	VAL	1
1	A	27	THR	1
1	A	17	GLU	1
1	A	107	ALA	1
1	A	209	ILE	1
1	A	180	ASP	1
1	A	145	LYS	1
1	A	178	THR	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	175/179 (98%)	119±6 (68±3%)	56±6 (32±3%)	1	14
All	All	3675/3759 (98%)	2493 (68%)	1182 (32%)	1	14

All 148 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	171	ILE	21
1	A	118	ILE	21
1	A	120	ARG	21
1	A	25	LEU	21
1	A	134	LYS	21
1	A	198	ASP	20
1	A	157	LYS	20
1	A	139	ARG	19
1	A	87	LYS	19
1	A	30	LYS	19
1	A	199	LYS	19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	74	ILE	19
1	A	55	LYS	19
1	A	145	LYS	18
1	A	166	SER	18
1	A	185	ARG	18
1	A	86	ILE	18
1	A	206	LYS	17
1	A	18	SER	15
1	A	9	LEU	15
1	A	61	THR	14
1	A	131	GLU	14
1	A	187	LEU	14
1	A	141	LEU	14
1	A	68	GLN	14
1	A	57	ASP	14
1	A	115	GLN	13
1	A	122	SER	13
1	A	52	ARG	13
1	A	156	GLU	13
1	A	102	LEU	13
1	A	12	LEU	13
1	A	177	LEU	13
1	A	91	LEU	12
1	A	167	LEU	12
1	A	184	LYS	12
1	A	205	SER	12
1	A	29	TRP	11
1	A	94	ARG	11
1	A	183	VAL	11
1	A	129	ASN	11
1	A	193	ILE	11
1	A	203	TYR	11
1	A	69	LYS	10
1	A	23	LEU	10
1	A	48	ARG	10
1	A	50	LYS	10
1	A	35	SER	10
1	A	83	LEU	10
1	A	208	LEU	9
1	A	108	ARG	9
1	A	36	GLU	9
1	A	103	ASN	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	138	GLU	9
1	A	40	LYS	9
1	A	31	ASP	9
1	A	132	SER	9
1	A	27	THR	9
1	A	175	GLU	9
1	A	10	LEU	9
1	A	104	LYS	9
1	A	110	LYS	9
1	A	95	TYR	8
1	A	8	ASN	8
1	A	147	THR	8
1	A	19	GLU	8
1	A	105	ASP	8
1	A	22	LYS	8
1	A	20	TRP	7
1	A	149	VAL	7
1	A	200	ASP	7
1	A	49	LEU	7
1	A	181	GLN	7
1	A	43	LYS	7
1	A	44	LEU	7
1	A	207	GLU	7
1	A	154	LYS	7
1	A	114	GLU	7
1	A	172	MET	7
1	A	209	ILE	7
1	A	80	GLU	6
1	A	135	ASP	6
1	A	72	GLN	6
1	A	143	TYR	6
1	A	210	ASP	6
1	A	96	TYR	6
1	A	125	ILE	6
1	A	196	HIS	6
1	A	106	ASP	5
1	A	121	ARG	5
1	A	98	ASP	5
1	A	202	LYS	5
1	A	71	CYS	5
1	A	170	LEU	5
1	A	89	GLU	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	197	LEU	5
1	A	24	ASN	4
1	A	159	LEU	4
1	A	14	ARG	4
1	A	13	THR	4
1	A	84	GLU	4
1	A	65	GLN	4
1	A	182	ILE	4
1	A	109	LYS	4
1	A	180	ASP	4
1	A	58	ILE	4
1	A	47	GLU	4
1	A	21	ASN	3
1	A	99	LEU	3
1	A	178	THR	3
1	A	153	LEU	3
1	A	144	TYR	3
1	A	211	ASN	3
1	A	111	TRP	3
1	A	66	ARG	2
1	A	168	ARG	2
1	A	100	GLN	2
1	A	173	ASP	2
1	A	17	GLU	2
1	A	195	TYR	2
1	A	77	GLU	2
1	A	60	PHE	2
1	A	76	GLU	2
1	A	174	LEU	2
1	A	11	VAL	2
1	A	85	THR	2
1	A	158	VAL	2
1	A	186	GLU	2
1	A	90	LYS	2
1	A	75	LEU	2
1	A	88	SER	2
1	A	92	ASN	2
1	A	204	VAL	2
1	A	78	VAL	1
1	A	41	GLU	1
1	A	123	TYR	1
1	A	37	THR	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	26	PHE	1
1	A	151	HIS	1
1	A	93	GLU	1
1	A	81	PRO	1
1	A	133	LEU	1
1	A	73	ILE	1
1	A	51	SER	1
1	A	64	LEU	1
1	A	62	SER	1
1	A	124	ASP	1
1	A	34	LEU	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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 66% for the well-defined parts and 66% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 4648

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	2018
Number of shifts mapped to atoms	2018
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	3

#### 7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	198	$0.00 \pm 0.12$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	180	$0.36 \pm 0.14$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	—
$^{15}\text{N}$	188	$0.73 \pm 0.33$	Should be applied

#### 7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 66%, i.e. 1708 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2599. 35 out of 35 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	763/1014 (75%)	385/404 (95%)	194/412 (47%)	184/198 (93%)
Sidechain	893/1414 (63%)	502/827 (61%)	391/518 (75%)	0/69 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Aromatic	52/171 (30%)	42/87 (48%)	10/72 (14%)	0/12 (0%)
Overall	1708/2599 (66%)	929/1318 (70%)	595/1002 (59%)	184/279 (66%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 66%, i.e. 1736 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2649. 35 out of 35 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	779/1039 (75%)	393/414 (95%)	198/422 (47%)	188/203 (93%)
Sidechain	905/1439 (63%)	509/841 (61%)	396/529 (75%)	0/69 (0%)
Aromatic	52/171 (30%)	42/87 (48%)	10/72 (14%)	0/12 (0%)
Overall	1736/2649 (66%)	944/1342 (70%)	604/1023 (59%)	188/284 (66%)

#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	202	LYS	CD	42.10	34.86 – 23.06	11.1
1	A	202	LYS	HD2	3.19	2.76 – 0.46	6.9
1	A	159	LEU	HB3	-0.40	3.34 – -0.26	-5.4

#### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:

