



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 07:03 PM BST

PDB ID : 1YGW
Title : NMR STRUCTURE OF RIBONUCLEASE T1, 34 STRUCTURES
Authors : Pfeiffer, S.; Karimi-Nejad, Y.; Ruterjans, H.
Deposited on : 1996-09-28

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

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

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

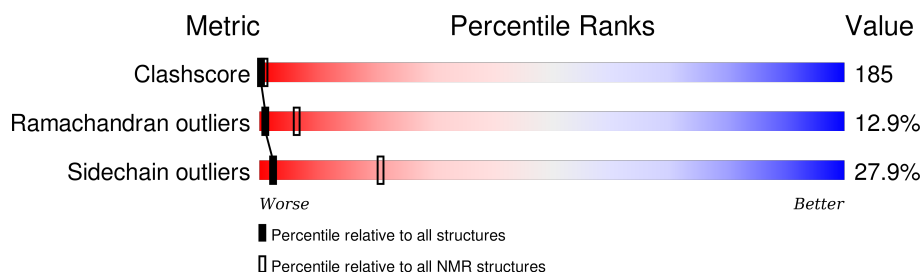
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR


The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	104	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 34 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:104 (103)	0.45	1

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

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

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

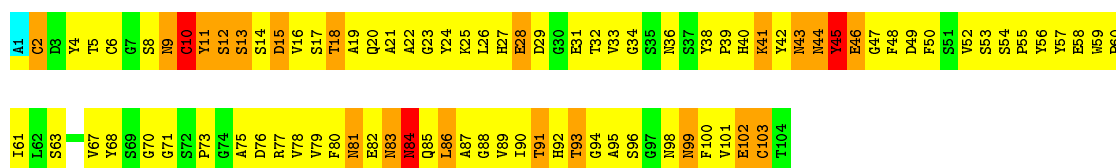
Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 23, 26, 29, 30, 31, 32, 33, 34
2	18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 27, 28
3	16, 17

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1459 atoms, of which 679 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called RIBONUCLEASE T1.

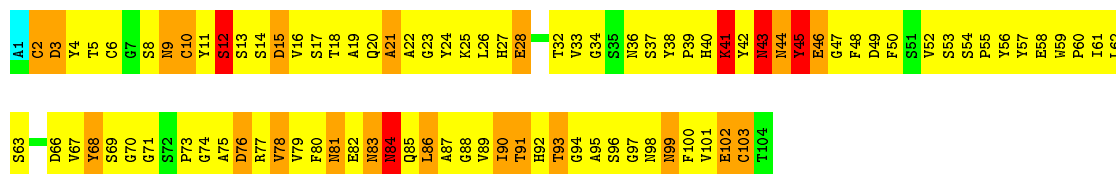
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	104	Total	C	H	N	O	S	0
			1459	480	679	127	169	4	



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

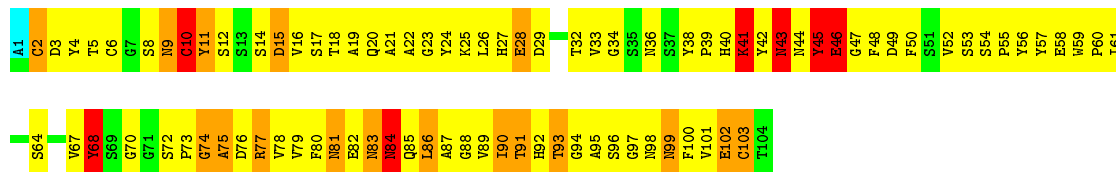
Chain A: 10% 64% 20% 5%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

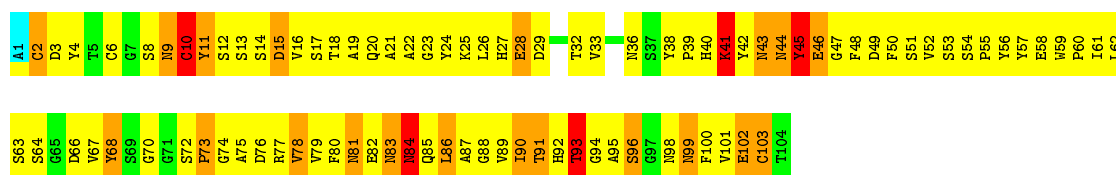
Chain A: 13% 63% 16% 7%



4.2.5 Score per residue for model 5

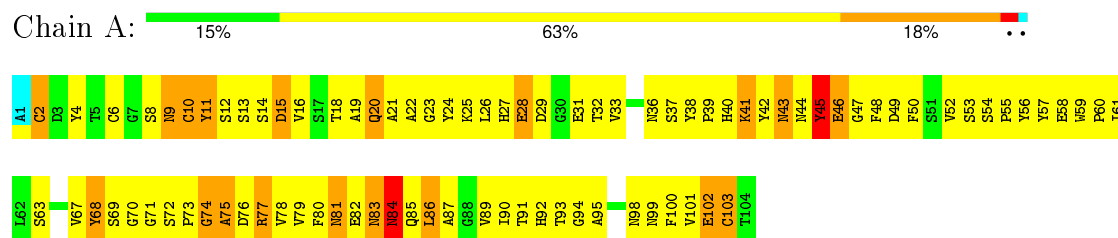
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

Chain A: 12% 63% 19% 5%



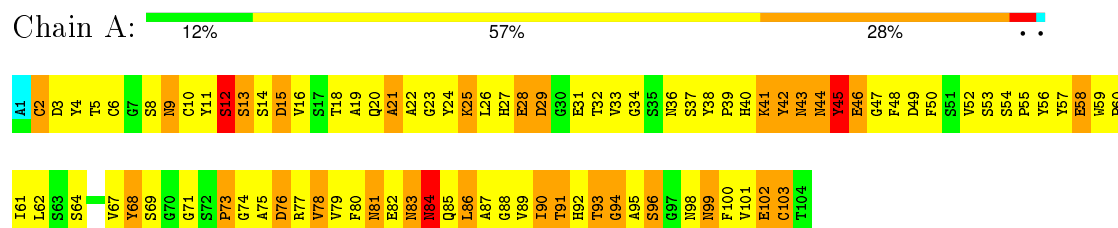
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



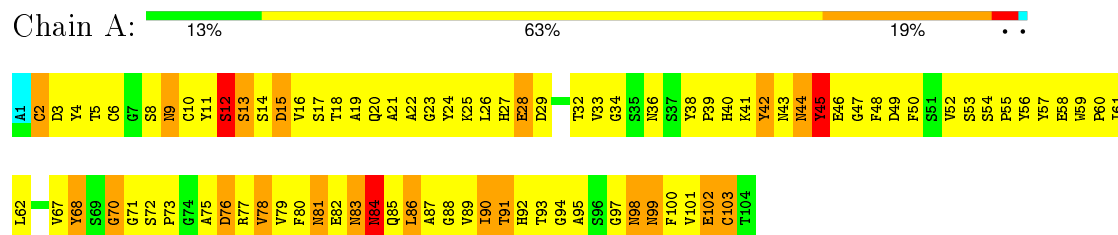
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



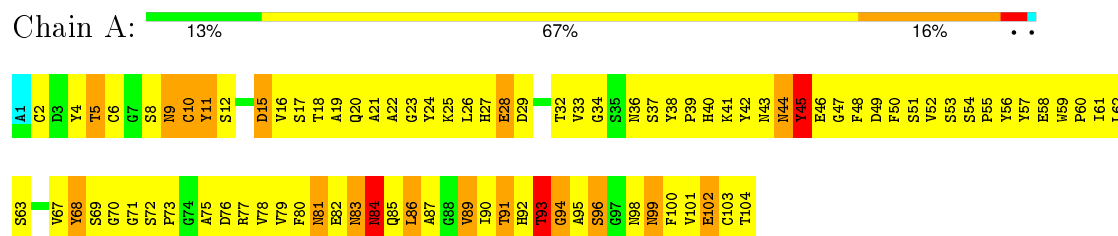
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



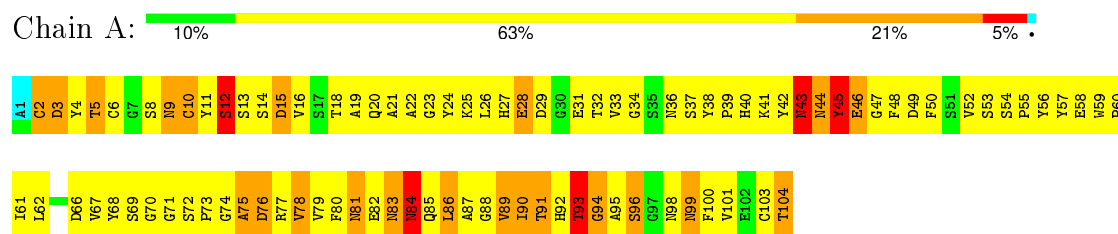
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



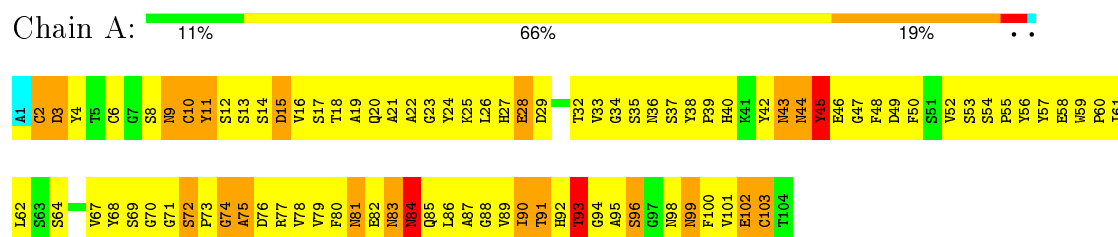
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



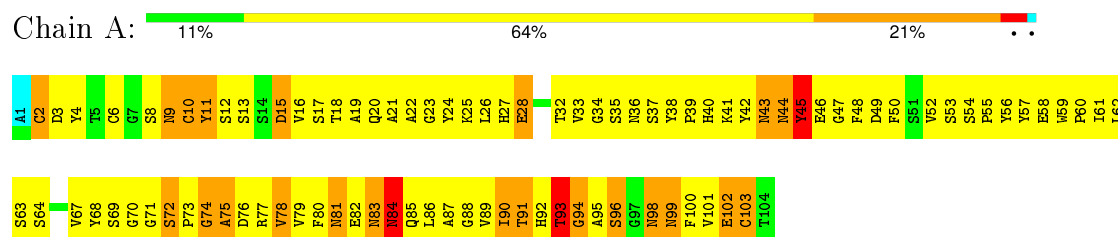
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



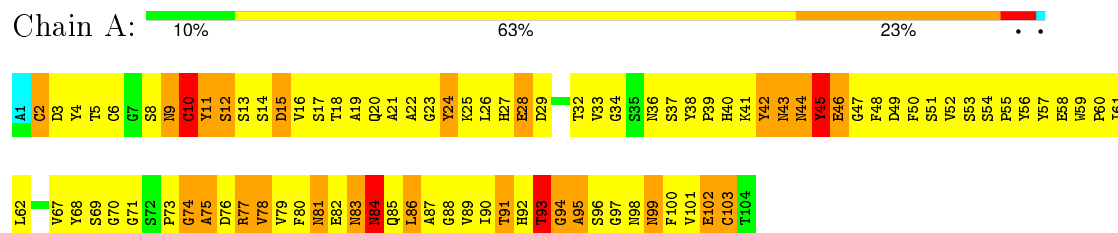
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



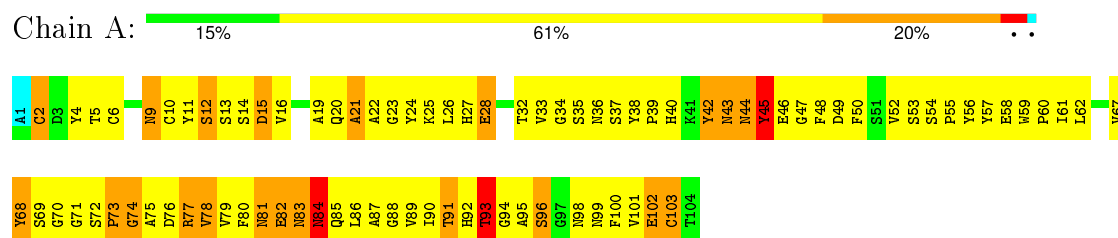
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



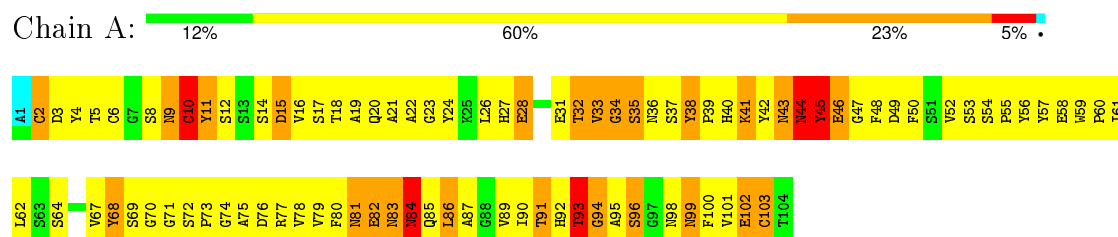
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



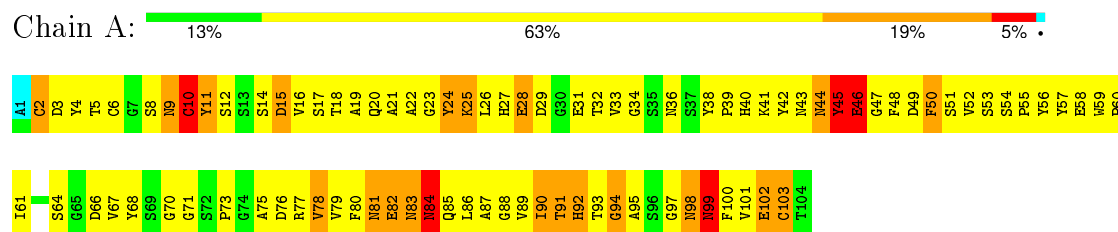
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



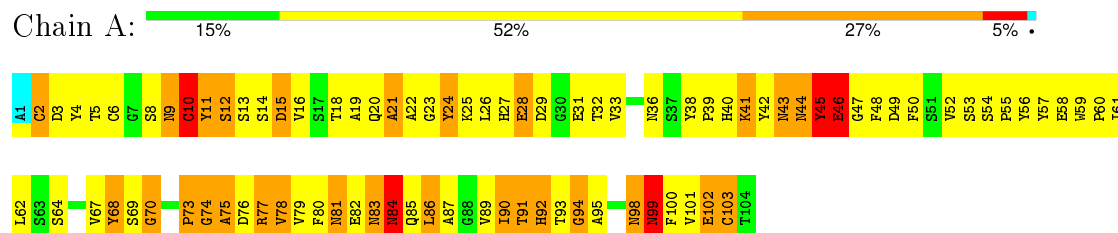
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



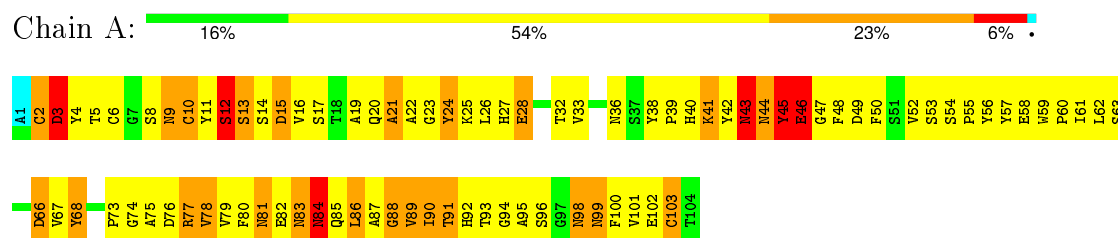
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



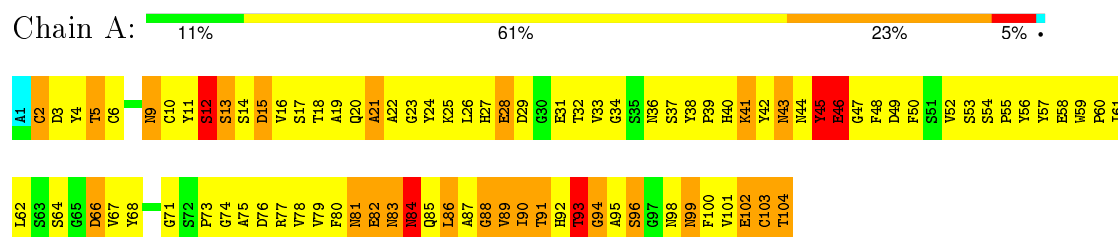
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



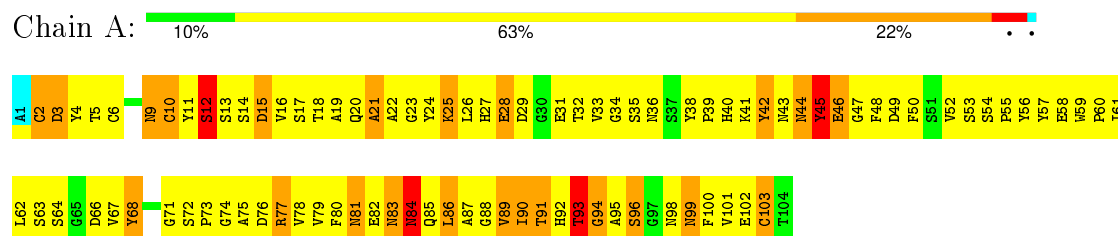
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



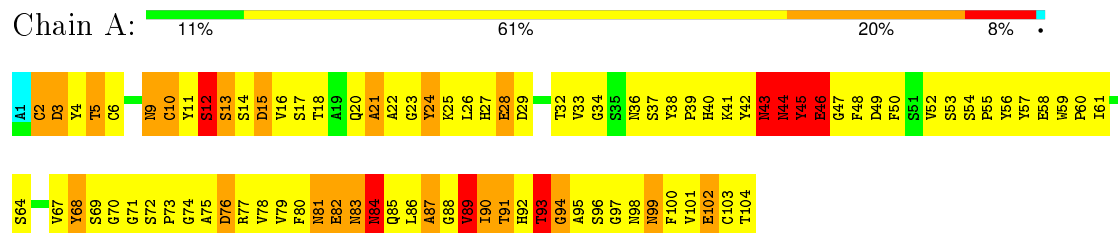
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



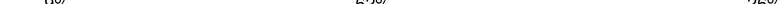
4.2.21 Score per residue for model 21

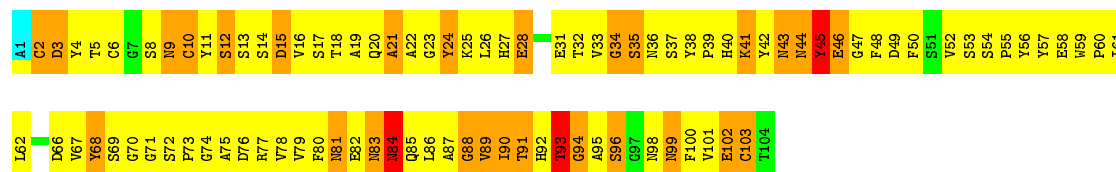
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



4.2.22 Score per residue for model 22

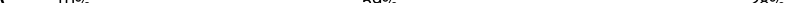
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

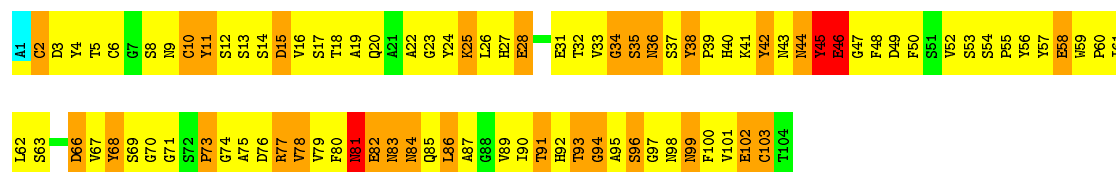
Chain A:  9% 62% 26% •



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

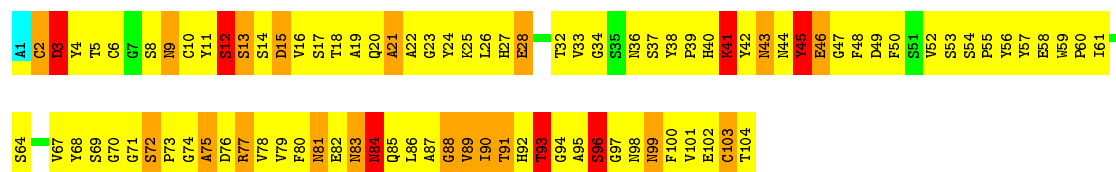
Chain A:  10% 59% 28% •



4.2.24 Score per residue for model 24


- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

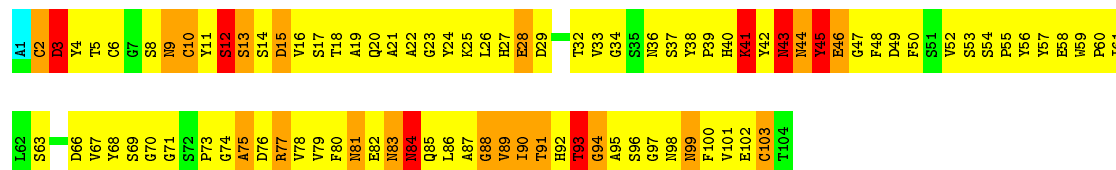
Chain A: 10% 64% 18% 7%



4.2.25 Score per residue for model 25

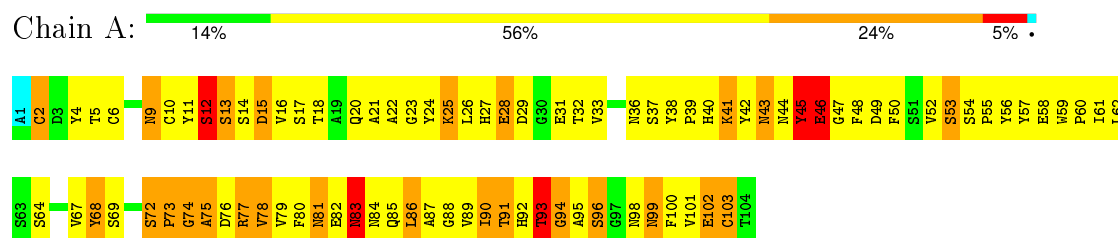
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

Chain A:  10% 64% 18% 7%



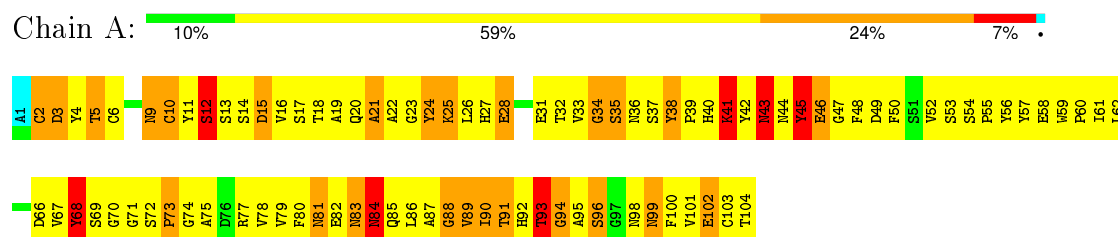
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



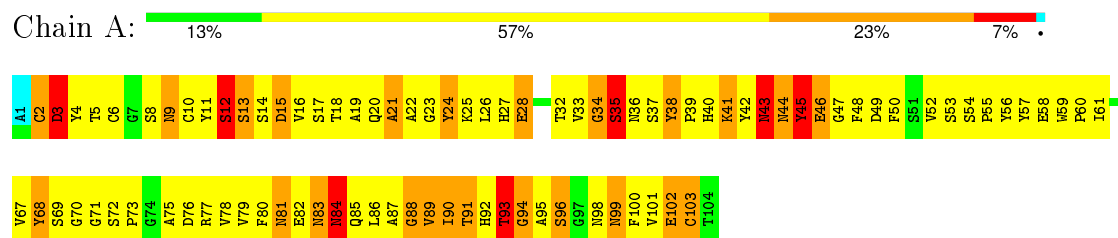
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



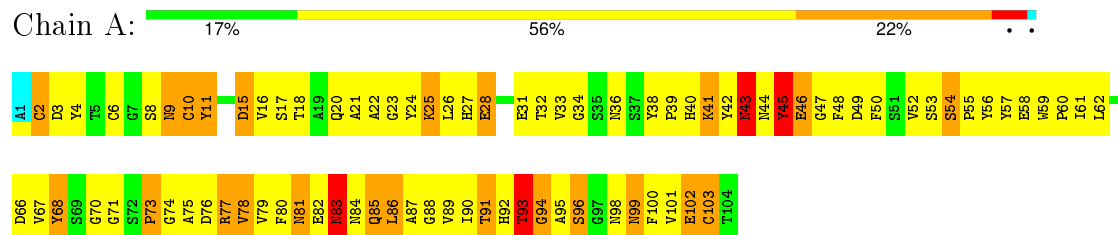
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



4.2.29 Score per residue for model 29

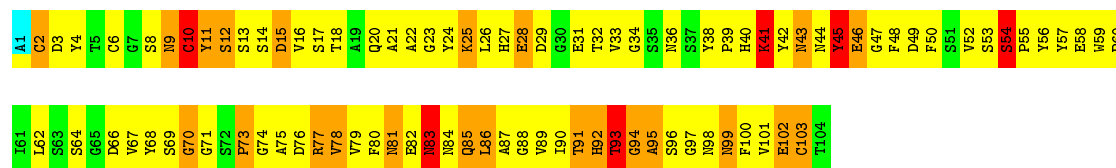
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1



4.2.30 Score per residue for model 30

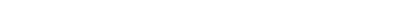
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

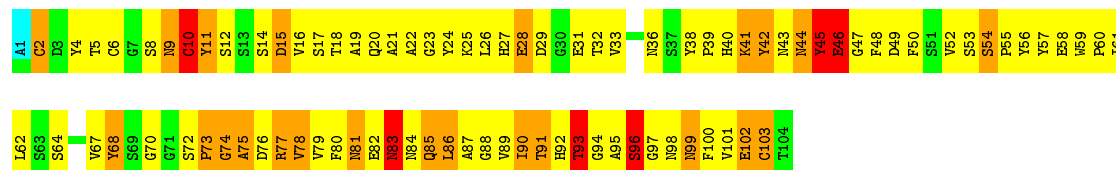
Chain A: 12% 60% 22% 6%



4.2.31 Score per residue for model 31

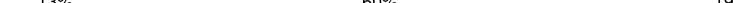
- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

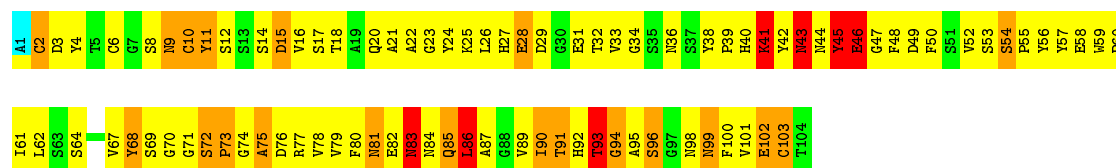
Chain A:  13% 58% 22% 6%



4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

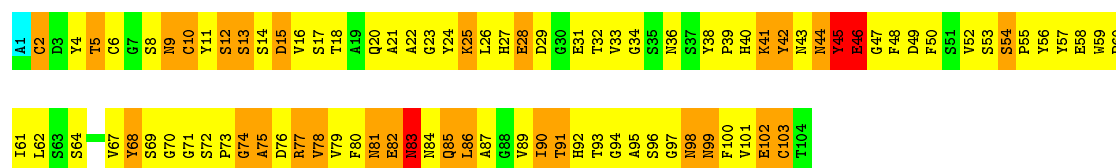
Chain A:  13% 60% 19% 7%



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

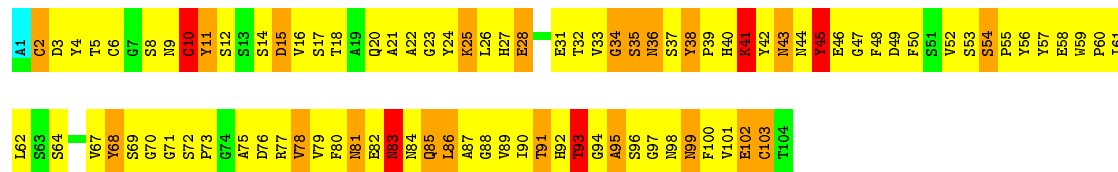
Chain A: 12% 58% 27% •



4.2.34 Score per residue for model 34

● Molecule 1: RIBONUCLEASE T1

Chain A: 11% 63% 20% 5% •



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *VARIABLE TARGET FUNCTION*.

Of the 50 calculated structures, 34 were deposited, based on the following criterion: *SEE JRNL REFERENCE*.

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

Software name	Classification	Version
DIANA	refinement	
DIANA	structure solution	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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 [i](#)

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	775	674	674	268±25
All	All	26350	22916	22922	9107

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 185.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:CG	1.54	1.69	33	3
1:A:85:GLN:NE2	1:A:85:GLN:H	1.48	1.06	33	4
1:A:85:GLN:H	1:A:85:GLN:NE2	1.45	0.99	32	2
1:A:85:GLN:N	1:A:85:GLN:HE21	1.45	0.92	34	2
1:A:85:GLN:HE21	1:A:85:GLN:N	1.45	0.94	31	4
1:A:81:ASN:CG	1:A:82:GLU:H	1.41	1.07	33	8
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HG2	1.37	1.25	33	2
1:A:98:ASN:O	1:A:100:PHE:N	1.30	1.64	16	2
1:A:79:VAL:CB	1:A:88:GLY:HA3	1.29	1.56	21	9
1:A:53:SER:O	1:A:81:ASN:OD1	1.26	1.53	28	28
1:A:81:ASN:HD21	1:A:85:GLN:CG	1.25	1.44	23	2
1:A:85:GLN:N	1:A:85:GLN:NE2	1.21	1.71	33	3
1:A:6:CYS:CB	1:A:103:CYS:SG	1.20	2.30	9	33
1:A:83:ASN:O	1:A:85:GLN:NE2	1.20	1.75	33	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ASN:C	1:A:85:GLN:NE2	1.19	1.95	32	6
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HB2	1.18	1.50	26	22
1:A:4:TYR:CE2	1:A:16:VAL:HG21	1.17	1.74	21	17
1:A:81:ASN:CG	1:A:82:GLU:N	1.17	1.85	33	8
1:A:79:VAL:HB	1:A:88:GLY:CA	1.17	1.70	19	9
1:A:79:VAL:O	1:A:87:ALA:N	1.16	1.77	3	30
1:A:81:ASN:N	1:A:85:GLN:OE1	1.16	1.77	32	6
1:A:85:GLN:NE2	1:A:85:GLN:N	1.16	1.68	32	3
1:A:5:THR:O	1:A:103:CYS:O	1.15	1.64	27	5
1:A:81:ASN:ND2	1:A:82:GLU:N	1.13	1.95	26	8
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:HG21	1.12	1.79	21	9
1:A:60:PRO:HG2	1:A:68:TYR:CG	1.11	1.81	5	23
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD13	1.10	1.14	8	11
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:CB	1.09	2.15	26	3
1:A:79:VAL:HB	1:A:88:GLY:HA3	1.09	1.20	25	9
1:A:26:LEU:HD22	1:A:33:VAL:HG13	1.09	1.17	24	21
1:A:68:TYR:OH	1:A:71:GLY:N	1.08	1.84	24	4
1:A:35:SER:HB3	1:A:71:GLY:N	1.08	1.63	28	5
1:A:81:ASN:CG	1:A:85:GLN:HG2	1.07	1.69	33	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:HD13	1.07	1.08	20	9
1:A:35:SER:CB	1:A:70:GLY:C	1.07	2.23	28	3
1:A:81:ASN:ND2	1:A:82:GLU:H	1.07	1.46	32	7
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:HB2	1.07	1.50	29	8
1:A:87:ALA:O	1:A:89:VAL:N	1.06	1.87	28	7
1:A:35:SER:HB3	1:A:70:GLY:C	1.06	1.69	28	4
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD23	1.06	1.50	32	3
1:A:68:TYR:CE1	1:A:70:GLY:O	1.06	2.08	5	7
1:A:24:TYR:CE1	1:A:83:ASN:HA	1.05	1.86	23	1
1:A:22:ALA:HB2	1:A:67:VAL:HG22	1.04	1.23	20	34
1:A:78:VAL:HG23	1:A:86:LEU:HD23	1.04	1.13	10	5
1:A:50:PHE:CD2	1:A:87:ALA:HB1	1.04	1.88	26	25
1:A:82:GLU:N	1:A:85:GLN:HG2	1.04	1.66	33	6
1:A:78:VAL:HG23	1:A:86:LEU:HD12	1.03	1.31	7	1
1:A:57:TYR:N	1:A:80:PHE:O	1.03	1.92	32	34
1:A:78:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD11	1.03	1.84	27	9
1:A:75:ALA:O	1:A:91:THR:HA	1.02	1.53	31	30
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:HD23	1.02	1.24	28	2
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD13	1.01	1.85	8	19
1:A:59:TRP:CD2	1:A:60:PRO:HD2	1.01	1.89	10	34
1:A:89:VAL:CG1	1:A:103:CYS:HB2	1.01	1.86	19	11
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:CD1	1.01	1.84	20	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TRP:O	1:A:78:VAL:N	1.01	1.93	14	34
1:A:50:PHE:CG	1:A:87:ALA:HB1	1.00	1.91	26	25
1:A:52:VAL:HG21	1:A:85:GLN:O	1.00	1.57	30	8
1:A:78:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD11	1.00	1.29	27	10
1:A:81:ASN:HD21	1:A:85:GLN:HG3	0.99	1.14	23	2
1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:GLN:OE1	0.99	1.55	26	26
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:CD1	0.99	1.88	4	13
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:OD1	0.99	1.58	31	7
1:A:20:GLN:OE1	1:A:80:PHE:HB3	0.98	1.57	21	1
1:A:78:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD21	0.98	1.89	28	3
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:CD	0.97	2.13	32	1
1:A:78:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD21	0.97	1.34	28	3
1:A:86:LEU:CD2	1:A:89:VAL:HG23	0.97	1.88	21	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:80:PHE:CD2	0.97	2.51	23	1
1:A:79:VAL:O	1:A:86:LEU:HD22	0.97	1.59	10	6
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:O	0.97	1.60	9	3
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:CB	0.96	2.12	34	23
1:A:83:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HE21	0.96	1.57	11	26
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD12	0.96	1.91	32	6
1:A:78:VAL:HG23	1:A:86:LEU:CD2	0.96	1.89	14	5
1:A:4:TYR:CG	1:A:89:VAL:HG21	0.96	1.93	28	32
1:A:73:PRO:HG2	1:A:77:ARG:NH1	0.95	1.74	17	14
1:A:48:PHE:CE1	1:A:90:ILE:HG22	0.95	1.97	28	33
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:HA	0.95	1.97	17	15
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD12	0.95	1.38	9	6
1:A:24:TYR:CE1	1:A:80:PHE:HD2	0.94	1.80	23	1
1:A:4:TYR:HB3	1:A:89:VAL:HG11	0.94	1.36	24	20
1:A:35:SER:CB	1:A:71:GLY:N	0.94	2.31	34	3
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:HA	0.94	1.62	33	15
1:A:86:LEU:HD21	1:A:89:VAL:HG23	0.94	1.36	19	7
1:A:100:PHE:O	1:A:101:VAL:HG13	0.94	1.63	16	34
1:A:61:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HG11	0.94	1.33	21	8
1:A:86:LEU:HD23	1:A:87:ALA:N	0.94	1.77	22	6
1:A:80:PHE:HB2	1:A:85:GLN:O	0.93	1.61	17	18
1:A:103:CYS:O	1:A:104:THR:OG1	0.93	1.85	21	3
1:A:78:VAL:HA	1:A:88:GLY:O	0.93	1.63	25	9
1:A:60:PRO:HB2	1:A:68:TYR:CD2	0.93	1.98	19	7
1:A:22:ALA:CB	1:A:67:VAL:HG22	0.92	1.95	14	33
1:A:2:CYS:CB	1:A:10:CYS:SG	0.92	2.56	30	23
1:A:26:LEU:HD23	1:A:39:PRO:HD3	0.92	1.39	22	32
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HG3	0.92	1.80	33	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:VAL:CG2	1:A:88:GLY:HA3	0.92	1.93	25	9
1:A:4:TYR:OH	1:A:86:LEU:HD21	0.91	1.66	8	2
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD23	0.91	1.86	33	8
1:A:78:VAL:CG2	1:A:86:LEU:HD12	0.91	1.95	7	1
1:A:77:ARG:O	1:A:88:GLY:O	0.91	1.89	20	9
1:A:26:LEU:CD2	1:A:33:VAL:HG13	0.90	1.96	2	33
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:CZ	0.90	2.18	32	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:103:CYS:SG	0.90	2.07	30	25
1:A:81:ASN:C	1:A:85:GLN:OE1	0.89	2.11	33	6
1:A:26:LEU:HD22	1:A:33:VAL:CG1	0.89	1.97	25	32
1:A:61:ILE:HD12	1:A:78:VAL:CG1	0.89	1.97	21	11
1:A:27:HIS:NE2	1:A:57:TYR:CE2	0.89	2.40	19	34
1:A:26:LEU:HD23	1:A:39:PRO:CD	0.88	1.99	23	19
1:A:33:VAL:HG11	1:A:59:TRP:HH2	0.88	1.26	22	25
1:A:92:HIS:O	1:A:94:GLY:N	0.88	2.07	13	23
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:ND2	0.88	1.84	6	6
1:A:27:HIS:CD2	1:A:57:TYR:CD2	0.88	2.62	15	1
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:CG2	0.88	2.57	22	21
1:A:48:PHE:CE1	1:A:90:ILE:CG2	0.87	2.58	28	22
1:A:33:VAL:CG2	1:A:68:TYR:CE2	0.87	2.57	26	12
1:A:60:PRO:HB3	1:A:73:PRO:CG	0.87	1.99	34	21
1:A:80:PHE:CD2	1:A:85:GLN:OE1	0.87	2.27	33	6
1:A:34:GLY:O	1:A:35:SER:HB2	0.87	1.69	28	1
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:NE	0.87	2.05	32	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:85:GLN:C	0.87	1.90	23	8
1:A:62:LEU:HD23	1:A:68:TYR:CE2	0.87	2.04	33	4
1:A:26:LEU:HD21	1:A:32:THR:HA	0.86	1.47	25	18
1:A:16:VAL:HG13	1:A:78:VAL:CG1	0.86	1.99	4	8
1:A:78:VAL:CG2	1:A:86:LEU:HD23	0.86	1.99	10	4
1:A:26:LEU:HD11	1:A:31:GLU:C	0.86	1.90	32	9
1:A:33:VAL:O	1:A:35:SER:N	0.86	2.08	23	4
1:A:79:VAL:N	1:A:88:GLY:HA3	0.86	1.85	20	9
1:A:26:LEU:HD21	1:A:33:VAL:HG13	0.86	1.43	7	12
1:A:78:VAL:HB	1:A:86:LEU:CD1	0.86	2.00	27	10
1:A:24:TYR:CZ	1:A:80:PHE:HD2	0.86	1.89	23	1
1:A:24:TYR:CZ	1:A:80:PHE:CD2	0.86	2.64	23	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:68:TYR:CD2	0.85	2.58	16	27
1:A:60:PRO:HG2	1:A:68:TYR:CD2	0.84	2.07	6	26
1:A:27:HIS:CD2	1:A:57:TYR:CE2	0.84	2.65	15	34
1:A:12:SER:O	1:A:15:ASP:N	0.84	2.10	33	28
1:A:4:TYR:CD2	1:A:16:VAL:HG21	0.84	2.07	21	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:CYS:HG	1:A:10:CYS:HG	0.84	0.97	2	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:85:GLN:O	0.84	1.73	34	8
1:A:99:ASN:OD1	1:A:100:PHE:N	0.84	2.10	21	3
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:HD12	0.84	1.73	21	1
1:A:74:GLY:O	1:A:76:ASP:N	0.84	2.11	17	3
1:A:26:LEU:CD2	1:A:33:VAL:CG1	0.83	2.56	30	15
1:A:34:GLY:O	1:A:35:SER:OG	0.83	1.96	34	2
1:A:42:TYR:CD1	1:A:42:TYR:O	0.83	2.32	21	9
1:A:9:ASN:OD1	1:A:11:TYR:OH	0.83	1.96	26	34
1:A:103:CYS:C	1:A:104:THR:HG23	0.83	1.93	27	4
1:A:89:VAL:O	1:A:103:CYS:N	0.83	2.11	1	29
1:A:86:LEU:HD21	1:A:88:GLY:O	0.83	1.73	11	6
1:A:90:ILE:HG13	1:A:100:PHE:CD1	0.83	2.08	21	24
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:HD3	0.83	1.73	32	1
1:A:11:TYR:C	1:A:15:ASP:HB2	0.82	1.93	24	20
1:A:74:GLY:C	1:A:77:ARG:HE	0.82	1.76	32	1
1:A:89:VAL:CG1	1:A:89:VAL:O	0.82	2.27	21	6
1:A:61:ILE:HB	1:A:78:VAL:HG12	0.82	1.52	7	6
1:A:44:ASN:O	1:A:45:TYR:CD1	0.82	2.33	28	34
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:CG1	0.82	2.27	22	3
1:A:42:TYR:CD1	1:A:79:VAL:HG11	0.81	2.10	21	10
1:A:46:GLU:OE2	1:A:100:PHE:N	0.81	2.12	10	7
1:A:75:ALA:O	1:A:91:THR:CA	0.81	2.29	31	7
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:CD2	0.81	2.05	28	5
1:A:52:VAL:HG23	1:A:56:TYR:CE1	0.81	2.11	16	14
1:A:60:PRO:HA	1:A:77:ARG:HA	0.81	1.52	26	20
1:A:33:VAL:HG11	1:A:59:TRP:CH2	0.80	2.11	23	34
1:A:4:TYR:CE2	1:A:16:VAL:CG2	0.80	2.63	19	16
1:A:24:TYR:CZ	1:A:84:ASN:N	0.80	2.50	23	1
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HG	0.80	1.49	11	4
1:A:74:GLY:N	1:A:77:ARG:HH12	0.80	1.74	6	14
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HB3	0.80	2.07	20	9
1:A:75:ALA:O	1:A:91:THR:CB	0.80	2.29	25	7
1:A:60:PRO:CG	1:A:68:TYR:CG	0.80	2.64	5	16
1:A:4:TYR:O	1:A:11:TYR:CE1	0.80	2.35	13	16
1:A:79:VAL:N	1:A:88:GLY:CA	0.80	2.44	20	9
1:A:78:VAL:HB	1:A:86:LEU:CD2	0.80	2.06	28	3
1:A:35:SER:OG	1:A:70:GLY:C	0.79	2.20	34	2
1:A:4:TYR:CD2	1:A:16:VAL:CG2	0.79	2.65	21	17
1:A:68:TYR:OH	1:A:71:GLY:HA2	0.79	1.77	30	8
1:A:78:VAL:CA	1:A:88:GLY:O	0.79	2.29	25	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:C	0.79	1.97	18	2
1:A:59:TRP:CZ3	1:A:68:TYR:CD2	0.79	2.71	27	4
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD22	0.79	1.54	17	2
1:A:42:TYR:OH	1:A:48:PHE:CE2	0.79	2.36	8	31
1:A:16:VAL:HG13	1:A:78:VAL:HG11	0.79	1.53	11	8
1:A:78:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD21	0.79	2.06	24	3
1:A:84:ASN:C	1:A:85:GLN:HE21	0.79	1.80	30	6
1:A:43:ASN:O	1:A:44:ASN:HB3	0.78	1.78	8	15
1:A:82:GLU:N	1:A:85:GLN:CG	0.78	2.46	33	6
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:HG12	0.78	1.77	28	4
1:A:95:ALA:O	1:A:99:ASN:ND2	0.78	2.16	34	7
1:A:83:ASN:ND2	1:A:84:ASN:H	0.78	1.77	30	6
1:A:57:TYR:CE2	1:A:81:ASN:O	0.78	2.37	34	7
1:A:35:SER:HB2	1:A:71:GLY:N	0.78	1.93	27	2
1:A:42:TYR:O	1:A:42:TYR:CD1	0.78	2.37	18	7
1:A:92:HIS:CD2	1:A:100:PHE:CE1	0.78	2.71	18	34
1:A:81:ASN:ND2	1:A:83:ASN:HD21	0.78	1.76	21	26
1:A:50:PHE:CD1	1:A:87:ALA:HB1	0.78	2.14	3	23
1:A:94:GLY:O	1:A:101:VAL:HG21	0.77	1.79	33	4
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:HB3	0.77	1.79	20	20
1:A:33:VAL:CG2	1:A:68:TYR:CZ	0.77	2.67	27	2
1:A:89:VAL:HG12	1:A:89:VAL:O	0.77	1.78	22	5
1:A:79:VAL:CB	1:A:88:GLY:CA	0.77	2.45	21	9
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:HG	0.77	1.56	3	3
1:A:19:ALA:CB	1:A:78:VAL:HG11	0.77	2.09	7	4
1:A:95:ALA:O	1:A:96:SER:CB	0.77	2.33	14	20
1:A:68:TYR:OH	1:A:71:GLY:C	0.77	2.23	15	10
1:A:5:THR:O	1:A:104:THR:HG23	0.77	1.80	10	2
1:A:99:ASN:OD1	1:A:99:ASN:C	0.77	2.22	21	2
1:A:26:LEU:HD21	1:A:32:THR:CA	0.77	2.09	25	18
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:CG	0.77	2.00	21	9
1:A:57:TYR:CD2	1:A:81:ASN:O	0.76	2.38	30	8
1:A:69:SER:O	1:A:70:GLY:O	0.76	2.03	30	2
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:CB	0.76	2.64	21	5
1:A:68:TYR:CD1	1:A:73:PRO:HG3	0.76	2.16	24	1
1:A:73:PRO:CB	1:A:77:ARG:NH1	0.76	2.49	32	1
1:A:42:TYR:CE2	1:A:90:ILE:HD12	0.76	2.15	16	29
1:A:56:TYR:HA	1:A:80:PHE:O	0.76	1.80	28	27
1:A:6:CYS:SG	1:A:91:THR:HB	0.76	2.20	33	33
1:A:83:ASN:O	1:A:84:ASN:CB	0.76	2.34	23	27
1:A:33:VAL:HB	1:A:69:SER:C	0.76	2.02	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:VAL:CG2	1:A:90:ILE:HD13	0.75	2.11	2	25
1:A:81:ASN:O	1:A:85:GLN:OE1	0.75	2.04	33	6
1:A:103:CYS:O	1:A:104:THR:HG23	0.75	1.81	21	5
1:A:5:THR:HG23	1:A:9:ASN:O	0.75	1.81	17	9
1:A:68:TYR:CZ	1:A:70:GLY:O	0.75	2.38	15	8
1:A:81:ASN:HD22	1:A:85:GLN:HB2	0.75	1.40	26	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:55:PRO:HA	0.75	1.58	7	34
1:A:68:TYR:CE2	1:A:73:PRO:HG3	0.75	2.17	12	3
1:A:34:GLY:CA	1:A:69:SER:O	0.75	2.35	13	3
1:A:33:VAL:HG21	1:A:68:TYR:CE2	0.75	2.17	27	4
1:A:9:ASN:CB	1:A:11:TYR:CZ	0.75	2.70	17	33
1:A:68:TYR:CZ	1:A:71:GLY:N	0.74	2.54	24	2
1:A:11:TYR:HA	1:A:15:ASP:CB	0.74	2.13	24	16
1:A:48:PHE:HB3	1:A:50:PHE:CE1	0.74	2.17	31	34
1:A:40:HIS:CE1	1:A:58:GLU:CD	0.74	2.60	30	15
1:A:6:CYS:SG	1:A:103:CYS:CB	0.74	2.71	27	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ALA:HB2	0.74	1.82	13	9
1:A:81:ASN:OD1	1:A:82:GLU:N	0.74	2.12	33	6
1:A:35:SER:HB2	1:A:70:GLY:CA	0.74	2.12	15	3
1:A:26:LEU:HD23	1:A:39:PRO:HD2	0.74	1.59	25	18
1:A:68:TYR:OH	1:A:72:SER:N	0.74	2.21	1	10
1:A:73:PRO:C	1:A:77:ARG:NH2	0.74	2.41	32	1
1:A:19:ALA:HB1	1:A:78:VAL:HG11	0.74	1.56	7	4
1:A:62:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CE2	0.74	2.69	33	4
1:A:33:VAL:HG21	1:A:68:TYR:CD2	0.74	2.18	32	14
1:A:72:SER:N	1:A:73:PRO:HD3	0.74	1.98	33	10
1:A:68:TYR:OH	1:A:71:GLY:CA	0.74	2.36	2	5
1:A:99:ASN:C	1:A:99:ASN:OD1	0.74	2.26	24	1
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HB3	0.74	1.92	33	1
1:A:80:PHE:CB	1:A:85:GLN:O	0.74	2.36	17	10
1:A:79:VAL:CA	1:A:88:GLY:HA3	0.74	2.13	20	9
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ALA:CB	0.73	2.35	33	10
1:A:81:ASN:N	1:A:85:GLN:CD	0.73	2.40	33	6
1:A:34:GLY:O	1:A:70:GLY:HA2	0.73	1.82	27	3
1:A:89:VAL:HG13	1:A:103:CYS:HB2	0.73	1.60	21	3
1:A:24:TYR:OH	1:A:82:GLU:C	0.73	2.26	13	11
1:A:68:TYR:CE1	1:A:70:GLY:C	0.73	2.62	24	3
1:A:79:VAL:HG12	1:A:87:ALA:CB	0.73	2.13	12	25
1:A:42:TYR:O	1:A:43:ASN:HB2	0.73	1.82	28	1
1:A:71:GLY:O	1:A:73:PRO:HD3	0.73	1.83	34	8
1:A:81:ASN:C	1:A:85:GLN:HG2	0.73	2.02	33	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:PHE:CD2	1:A:81:ASN:O	0.73	2.42	27	25
1:A:91:THR:O	1:A:93:THR:N	0.73	2.22	17	2
1:A:36:ASN:CB	1:A:38:TYR:CE1	0.73	2.72	23	4
1:A:22:ALA:HB2	1:A:67:VAL:CG2	0.72	2.14	34	28
1:A:52:VAL:CG2	1:A:85:GLN:O	0.72	2.34	23	8
1:A:62:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CE1	0.72	2.18	19	7
1:A:33:VAL:HG21	1:A:59:TRP:CH2	0.72	2.20	8	28
1:A:20:GLN:CD	1:A:86:LEU:HB2	0.72	2.05	21	26
1:A:73:PRO:CA	1:A:77:ARG:CZ	0.72	2.68	32	1
1:A:6:CYS:CA	1:A:103:CYS:SG	0.72	2.77	9	33
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:CG	0.72	2.13	33	5
1:A:86:LEU:CD2	1:A:86:LEU:C	0.72	2.57	20	1
1:A:73:PRO:CB	1:A:77:ARG:CZ	0.72	2.67	32	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:66:ASP:HB2	0.72	1.62	23	10
1:A:35:SER:HB2	1:A:70:GLY:C	0.72	2.05	15	3
1:A:16:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD12	0.72	2.15	32	6
1:A:96:SER:N	1:A:99:ASN:HD21	0.72	1.82	3	9
1:A:61:ILE:HB	1:A:78:VAL:CG1	0.72	2.14	18	4
1:A:57:TYR:HD2	1:A:80:PHE:CE2	0.72	2.03	23	34
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:CA	0.72	2.38	33	8
1:A:68:TYR:CD1	1:A:73:PRO:HB3	0.71	2.20	5	11
1:A:90:ILE:HG13	1:A:100:PHE:CG	0.71	2.20	24	9
1:A:24:TYR:CG	1:A:83:ASN:HB3	0.71	2.20	26	7
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD22	0.71	2.15	17	6
1:A:42:TYR:O	1:A:43:ASN:C	0.71	2.29	25	19
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ALA:HB3	0.71	1.84	10	1
1:A:62:LEU:HG	1:A:68:TYR:CD2	0.71	2.20	20	7
1:A:98:ASN:ND2	1:A:98:ASN:O	0.71	2.23	13	14
1:A:81:ASN:CB	1:A:85:GLN:HG2	0.71	2.16	33	1
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:HG2	0.71	2.16	24	1
1:A:73:PRO:HG2	1:A:77:ARG:CZ	0.71	2.15	7	12
1:A:91:THR:C	1:A:93:THR:H	0.71	1.87	17	8
1:A:83:ASN:O	1:A:84:ASN:HB3	0.71	1.86	23	27
1:A:60:PRO:HG2	1:A:68:TYR:CB	0.71	2.15	30	28
1:A:68:TYR:OH	1:A:72:SER:C	0.71	2.28	15	8
1:A:4:TYR:CB	1:A:89:VAL:HG21	0.70	2.16	34	23
1:A:68:TYR:CE2	1:A:70:GLY:CA	0.70	2.74	21	6
1:A:59:TRP:CH2	1:A:68:TYR:CD2	0.70	2.79	27	3
1:A:59:TRP:N	1:A:78:VAL:O	0.70	2.24	25	21
1:A:60:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CD2	0.70	2.21	21	18
1:A:34:GLY:N	1:A:69:SER:O	0.70	2.24	21	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:HA	0.70	2.15	2	34
1:A:81:ASN:ND2	1:A:85:GLN:O	0.70	2.24	24	19
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HB3	0.70	1.61	21	1
1:A:95:ALA:HB3	1:A:99:ASN:O	0.70	1.87	21	2
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD2	0.70	2.60	33	8
1:A:24:TYR:OH	1:A:82:GLU:O	0.70	2.08	10	20
1:A:78:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HD11	0.70	2.15	25	6
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:HA	0.70	2.22	8	3
1:A:57:TYR:HB2	1:A:80:PHE:CE1	0.70	2.21	26	28
1:A:9:ASN:CG	1:A:11:TYR:OH	0.69	2.30	17	34
1:A:42:TYR:OH	1:A:48:PHE:CZ	0.69	2.44	2	22
1:A:26:LEU:CD1	1:A:31:GLU:CB	0.69	2.70	30	11
1:A:61:ILE:HB	1:A:78:VAL:HG13	0.69	1.62	21	8
1:A:81:ASN:CA	1:A:85:GLN:OE1	0.69	2.40	32	6
1:A:99:ASN:O	1:A:100:PHE:CD1	0.69	2.45	16	2
1:A:35:SER:HB2	1:A:70:GLY:HA3	0.69	1.64	15	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:87:ALA:N	0.69	2.03	3	6
1:A:96:SER:HB3	1:A:99:ASN:ND2	0.69	2.03	14	1
1:A:82:GLU:O	1:A:82:GLU:CG	0.69	2.41	10	8
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:HG3	0.68	2.23	24	5
1:A:68:TYR:O	1:A:68:TYR:CG	0.68	2.44	27	3
1:A:83:ASN:O	1:A:84:ASN:ND2	0.68	2.26	25	27
1:A:40:HIS:CE1	1:A:58:GLU:HG2	0.68	2.24	24	12
1:A:35:SER:HB2	1:A:71:GLY:CA	0.68	2.19	27	1
1:A:36:ASN:HB3	1:A:38:TYR:CD1	0.68	2.24	12	31
1:A:4:TYR:CB	1:A:89:VAL:HG11	0.68	2.17	24	2
1:A:82:GLU:H	1:A:85:GLN:HG2	0.68	1.49	33	1
1:A:57:TYR:HB2	1:A:80:PHE:CD1	0.68	2.24	34	28
1:A:20:GLN:NE2	1:A:86:LEU:N	0.68	2.42	28	9
1:A:100:PHE:O	1:A:101:VAL:CG1	0.68	2.41	16	34
1:A:57:TYR:O	1:A:79:VAL:HA	0.68	1.89	13	30
1:A:40:HIS:CD2	1:A:58:GLU:OE2	0.68	2.47	33	16
1:A:95:ALA:C	1:A:99:ASN:ND2	0.68	2.47	21	15
1:A:16:VAL:CG1	1:A:78:VAL:CG2	0.67	2.72	23	7
1:A:62:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CZ	0.67	2.77	20	7
1:A:33:VAL:HG21	1:A:59:TRP:CZ3	0.67	2.25	8	28
1:A:33:VAL:O	1:A:34:GLY:C	0.67	2.33	23	5
1:A:60:PRO:HB3	1:A:73:PRO:CB	0.67	2.18	15	29
1:A:35:SER:O	1:A:36:ASN:O	0.67	2.12	34	2
1:A:24:TYR:CE2	1:A:28:GLU:OE1	0.67	2.47	15	4
1:A:11:TYR:O	1:A:16:VAL:HG23	0.67	1.89	26	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:TYR:CB	1:A:80:PHE:CE1	0.67	2.78	26	25
1:A:6:CYS:HB2	1:A:11:TYR:OH	0.67	1.89	6	18
1:A:80:PHE:HA	1:A:85:GLN:O	0.67	1.89	20	19
1:A:73:PRO:C	1:A:77:ARG:CZ	0.67	2.63	32	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:84:ASN:N	0.67	2.62	1	13
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:HG2	0.67	1.90	26	8
1:A:93:THR:O	1:A:94:GLY:C	0.67	2.33	16	23
1:A:33:VAL:HB	1:A:69:SER:HA	0.67	1.65	7	3
1:A:23:GLY:O	1:A:27:HIS:HB2	0.67	1.89	15	4
1:A:24:TYR:O	1:A:27:HIS:N	0.67	2.28	31	33
1:A:59:TRP:CD1	1:A:60:PRO:O	0.67	2.48	9	20
1:A:57:TYR:OH	1:A:82:GLU:HB2	0.67	1.90	27	23
1:A:84:ASN:C	1:A:84:ASN:ND2	0.67	2.48	13	14
1:A:62:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CD1	0.67	2.25	13	7
1:A:84:ASN:ND2	1:A:84:ASN:C	0.67	2.47	2	12
1:A:52:VAL:HG22	1:A:87:ALA:CB	0.67	2.20	20	8
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:OD1	0.67	2.12	28	7
1:A:4:TYR:CG	1:A:89:VAL:CG2	0.67	2.78	26	23
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:CB	0.67	2.72	22	27
1:A:27:HIS:NE2	1:A:57:TYR:CZ	0.66	2.63	26	31
1:A:26:LEU:CD1	1:A:31:GLU:HB2	0.66	2.20	30	13
1:A:11:TYR:HB2	1:A:15:ASP:HB3	0.66	1.67	2	17
1:A:94:GLY:O	1:A:96:SER:N	0.66	2.28	13	4
1:A:62:LEU:HD23	1:A:68:TYR:CZ	0.66	2.25	18	7
1:A:11:TYR:O	1:A:12:SER:O	0.66	2.12	24	16
1:A:95:ALA:O	1:A:96:SER:HB2	0.66	1.89	14	6
1:A:33:VAL:HG23	1:A:70:GLY:HA2	0.66	1.66	28	3
1:A:33:VAL:C	1:A:69:SER:O	0.66	2.33	14	8
1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:O	0.66	2.44	9	3
1:A:79:VAL:HG23	1:A:90:ILE:HD13	0.66	1.66	31	25
1:A:33:VAL:HG23	1:A:68:TYR:CE2	0.66	2.24	30	10
1:A:42:TYR:HB2	1:A:58:GLU:HB3	0.66	1.68	25	32
1:A:90:ILE:HA	1:A:101:VAL:O	0.66	1.91	18	16
1:A:85:GLN:NE2	1:A:85:GLN:CA	0.66	2.59	33	3
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLY:C	0.66	2.34	6	8
1:A:72:SER:N	1:A:73:PRO:CD	0.66	2.59	33	8
1:A:81:ASN:H	1:A:85:GLN:CD	0.66	1.94	32	6
1:A:42:TYR:O	1:A:44:ASN:N	0.66	2.29	25	19
1:A:74:GLY:N	1:A:77:ARG:NE	0.66	2.44	32	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:87:ALA:CB	0.66	2.77	26	1
1:A:75:ALA:HB1	1:A:92:HIS:HB2	0.66	1.67	22	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:CA	0.66	2.78	19	12
1:A:24:TYR:CD2	1:A:28:GLU:OE2	0.65	2.49	29	9
1:A:79:VAL:HB	1:A:87:ALA:HB3	0.65	1.68	11	24
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:CG	0.65	2.21	20	7
1:A:24:TYR:CE2	1:A:28:GLU:OE2	0.65	2.49	26	7
1:A:99:ASN:ND2	1:A:99:ASN:N	0.65	2.42	8	9
1:A:93:THR:O	1:A:95:ALA:N	0.65	2.30	17	20
1:A:89:VAL:HG12	1:A:103:CYS:HB2	0.65	1.66	19	11
1:A:95:ALA:HB3	1:A:99:ASN:ND2	0.65	2.07	10	15
1:A:9:ASN:HB3	1:A:11:TYR:CZ	0.65	2.25	17	23
1:A:83:ASN:HD22	1:A:84:ASN:N	0.65	1.89	29	6
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HG	0.65	2.21	14	5
1:A:36:ASN:HB2	1:A:71:GLY:H	0.65	1.52	15	1
1:A:76:ASP:O	1:A:77:ARG:NH1	0.65	2.29	32	1
1:A:20:GLN:CD	1:A:86:LEU:CB	0.65	2.64	28	17
1:A:73:PRO:HB3	1:A:77:ARG:NH1	0.65	2.07	32	1
1:A:98:ASN:C	1:A:100:PHE:N	0.65	2.49	16	2
1:A:11:TYR:CB	1:A:15:ASP:CB	0.65	2.75	6	17
1:A:4:TYR:HB2	1:A:11:TYR:HB2	0.65	1.67	28	15
1:A:83:ASN:ND2	1:A:85:GLN:NE2	0.65	2.40	11	26
1:A:68:TYR:CE2	1:A:70:GLY:O	0.65	2.49	1	1
1:A:11:TYR:HB2	1:A:15:ASP:CB	0.65	2.22	2	17
1:A:35:SER:HB3	1:A:71:GLY:CA	0.65	2.21	23	4
1:A:99:ASN:ND2	1:A:99:ASN:H	0.65	1.88	23	8
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:CB	0.65	2.80	19	9
1:A:79:VAL:HG23	1:A:88:GLY:HA3	0.65	1.66	25	8
1:A:74:GLY:HA2	1:A:92:HIS:CD2	0.65	2.27	13	4
1:A:81:ASN:C	1:A:81:ASN:ND2	0.65	2.49	26	2
1:A:93:THR:HG22	1:A:93:THR:O	0.65	1.90	34	14
1:A:103:CYS:O	1:A:104:THR:CG2	0.65	2.44	21	4
1:A:19:ALA:HB2	1:A:61:ILE:HG13	0.64	1.68	19	20
1:A:68:TYR:CE2	1:A:70:GLY:HA2	0.64	2.27	21	4
1:A:68:TYR:CZ	1:A:70:GLY:CA	0.64	2.80	24	2
1:A:76:ASP:C	1:A:77:ARG:HG2	0.64	2.12	9	27
1:A:34:GLY:O	1:A:35:SER:CB	0.64	2.46	15	3
1:A:6:CYS:O	1:A:9:ASN:ND2	0.64	2.30	28	34
1:A:20:GLN:NE2	1:A:86:LEU:HB2	0.64	2.08	25	17
1:A:36:ASN:ND2	1:A:38:TYR:CE1	0.64	2.66	11	31
1:A:24:TYR:O	1:A:28:GLU:CG	0.64	2.46	15	34
1:A:59:TRP:CG	1:A:60:PRO:HD2	0.64	2.26	34	25
1:A:59:TRP:CE3	1:A:60:PRO:HD2	0.64	2.27	10	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:TYR:CD1	1:A:38:TYR:N	0.64	2.66	27	19
1:A:50:PHE:CE2	1:A:87:ALA:HB1	0.64	2.28	23	11
1:A:92:HIS:NE2	1:A:100:PHE:CE1	0.64	2.66	6	28
1:A:4:TYR:O	1:A:11:TYR:CD1	0.64	2.50	16	17
1:A:75:ALA:HB1	1:A:92:HIS:H	0.64	1.53	7	11
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:HG11	0.64	2.28	19	9
1:A:103:CYS:O	1:A:104:THR:CB	0.64	2.46	21	2
1:A:80:PHE:HB2	1:A:85:GLN:NE2	0.64	2.08	33	6
1:A:9:ASN:HB3	1:A:11:TYR:CE2	0.64	2.28	12	18
1:A:86:LEU:CD2	1:A:86:LEU:O	0.64	2.46	33	3
1:A:37:SER:O	1:A:39:PRO:O	0.63	2.16	34	20
1:A:98:ASN:O	1:A:98:ASN:ND2	0.63	2.31	24	15
1:A:35:SER:CB	1:A:70:GLY:CA	0.63	2.75	28	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:28:GLU:CD	0.63	2.72	26	4
1:A:20:GLN:O	1:A:23:GLY:N	0.63	2.31	22	32
1:A:33:VAL:CG2	1:A:68:TYR:CD2	0.63	2.81	32	9
1:A:68:TYR:CZ	1:A:70:GLY:HA2	0.63	2.28	24	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:87:ALA:O	0.63	2.52	26	6
1:A:24:TYR:CD2	1:A:28:GLU:OE1	0.63	2.52	15	4
1:A:62:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HD1	0.63	1.51	13	3
1:A:24:TYR:CE1	1:A:83:ASN:CA	0.63	2.77	23	1
1:A:27:HIS:NE2	1:A:57:TYR:CD2	0.63	2.65	15	1
1:A:83:ASN:ND2	1:A:84:ASN:N	0.63	2.47	30	6
1:A:33:VAL:HG23	1:A:70:GLY:CA	0.63	2.23	11	7
1:A:50:PHE:CE2	1:A:79:VAL:HG11	0.63	2.29	14	13
1:A:94:GLY:C	1:A:96:SER:H	0.63	1.97	13	1
1:A:24:TYR:CD1	1:A:80:PHE:CE2	0.63	2.86	23	1
1:A:103:CYS:C	1:A:104:THR:CG2	0.63	2.67	19	3
1:A:26:LEU:HD21	1:A:33:VAL:CG1	0.63	2.23	33	4
1:A:99:ASN:H	1:A:99:ASN:ND2	0.63	1.89	18	9
1:A:86:LEU:HD12	1:A:88:GLY:O	0.63	1.93	4	9
1:A:42:TYR:O	1:A:42:TYR:CD2	0.63	2.51	2	1
1:A:52:VAL:HG23	1:A:56:TYR:HE1	0.63	1.51	14	10
1:A:84:ASN:O	1:A:84:ASN:OD1	0.63	2.16	23	1
1:A:95:ALA:HB3	1:A:99:ASN:HA	0.63	1.70	17	2
1:A:20:GLN:OE1	1:A:80:PHE:CB	0.63	2.44	21	1
1:A:94:GLY:O	1:A:97:GLY:N	0.63	2.20	34	2
1:A:68:TYR:OH	1:A:70:GLY:C	0.63	2.37	16	2
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ALA:C	0.63	2.36	24	1
1:A:83:ASN:O	1:A:84:ASN:CG	0.62	2.37	11	27
1:A:78:VAL:HG12	1:A:89:VAL:HG22	0.62	1.71	24	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:GLN:CD	1:A:86:LEU:HD12	0.62	2.15	21	1
1:A:81:ASN:HD21	1:A:85:GLN:HG2	0.62	1.44	23	2
1:A:36:ASN:CB	1:A:38:TYR:CD1	0.62	2.82	23	4
1:A:33:VAL:HG23	1:A:70:GLY:N	0.62	2.09	13	4
1:A:60:PRO:CG	1:A:73:PRO:HG2	0.62	2.24	24	1
1:A:59:TRP:O	1:A:78:VAL:HG13	0.62	1.94	20	2
1:A:84:ASN:N	1:A:85:GLN:NE2	0.62	2.46	32	6
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:ND2	0.62	2.43	33	7
1:A:83:ASN:ND2	1:A:83:ASN:N	0.62	2.43	34	2
1:A:83:ASN:N	1:A:85:GLN:CD	0.62	2.53	33	6
1:A:42:TYR:CE1	1:A:50:PHE:CE2	0.62	2.88	15	30
1:A:2:CYS:CB	1:A:10:CYS:HG	0.62	2.07	15	6
1:A:75:ALA:O	1:A:91:THR:OG1	0.62	2.18	6	6
1:A:42:TYR:CD2	1:A:79:VAL:HG11	0.62	2.29	27	1
1:A:102:GLU:C	1:A:104:THR:H	0.62	1.97	19	3
1:A:24:TYR:CZ	1:A:83:ASN:HA	0.62	2.28	23	1
1:A:16:VAL:O	1:A:20:GLN:HG3	0.62	1.94	24	23
1:A:59:TRP:CH2	1:A:68:TYR:O	0.62	2.52	7	15
1:A:84:ASN:OD1	1:A:85:GLN:NE2	0.62	2.32	23	1
1:A:35:SER:CB	1:A:71:GLY:CA	0.62	2.77	27	3
1:A:36:ASN:HB2	1:A:38:TYR:CE1	0.62	2.30	27	3
1:A:95:ALA:O	1:A:97:GLY:N	0.62	2.32	31	3
1:A:42:TYR:CD2	1:A:42:TYR:O	0.62	2.53	30	2
1:A:35:SER:HB3	1:A:70:GLY:CA	0.62	2.24	28	1
1:A:83:ASN:N	1:A:83:ASN:ND2	0.62	2.42	33	6
1:A:6:CYS:SG	1:A:89:VAL:HG12	0.62	2.34	30	14
1:A:40:HIS:O	1:A:58:GLU:HG3	0.62	1.95	24	6
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:HD22	0.62	1.55	4	4
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:CB	0.62	2.48	21	5
1:A:68:TYR:CE1	1:A:71:GLY:N	0.62	2.68	24	1
1:A:2:CYS:HA	1:A:10:CYS:SG	0.61	2.35	33	15
1:A:68:TYR:CD2	1:A:68:TYR:O	0.61	2.52	5	3
1:A:61:ILE:HD12	1:A:78:VAL:HG13	0.61	1.70	1	1
1:A:11:TYR:CB	1:A:15:ASP:HB3	0.61	2.25	6	17
1:A:23:GLY:O	1:A:39:PRO:HG3	0.61	1.95	22	12
1:A:86:LEU:HD11	1:A:88:GLY:CA	0.61	2.25	10	6
1:A:95:ALA:CB	1:A:99:ASN:ND2	0.61	2.63	18	22
1:A:20:GLN:HG2	1:A:78:VAL:HG21	0.61	1.72	12	4
1:A:11:TYR:CA	1:A:15:ASP:CB	0.61	2.78	24	21
1:A:44:ASN:O	1:A:45:TYR:CG	0.61	2.54	23	25
1:A:91:THR:CG2	1:A:103:CYS:SG	0.61	2.89	8	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:CD2	0.61	2.41	32	1
1:A:20:GLN:HG2	1:A:86:LEU:CB	0.61	2.26	28	2
1:A:60:PRO:CG	1:A:73:PRO:HG3	0.61	2.25	33	1
1:A:46:GLU:HB2	1:A:48:PHE:CE2	0.61	2.30	16	30
1:A:80:PHE:C	1:A:85:GLN:OE1	0.61	2.38	32	6
1:A:33:VAL:HG23	1:A:68:TYR:CZ	0.61	2.29	27	2
1:A:94:GLY:C	1:A:101:VAL:HG21	0.61	2.16	8	4
1:A:79:VAL:O	1:A:86:LEU:CD2	0.61	2.45	3	3
1:A:24:TYR:CE2	1:A:84:ASN:HA	0.61	2.31	13	2
1:A:5:THR:C	1:A:103:CYS:HB3	0.61	2.16	20	20
1:A:32:THR:HG21	1:A:37:SER:HA	0.61	1.71	34	3
1:A:78:VAL:HB	1:A:86:LEU:CG	0.61	2.25	24	8
1:A:68:TYR:CE2	1:A:73:PRO:HB3	0.61	2.31	33	2
1:A:92:HIS:CD2	1:A:99:ASN:O	0.61	2.53	17	2
1:A:42:TYR:CE2	1:A:79:VAL:HG21	0.61	2.31	24	8
1:A:94:GLY:C	1:A:96:SER:N	0.61	2.52	13	3
1:A:75:ALA:O	1:A:77:ARG:HG2	0.61	1.95	32	2
1:A:68:TYR:CZ	1:A:70:GLY:C	0.61	2.74	25	5
1:A:32:THR:HA	1:A:38:TYR:O	0.60	1.96	33	17
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:CD1	0.60	2.47	21	1
1:A:60:PRO:CD	1:A:68:TYR:CD2	0.60	2.83	27	4
1:A:78:VAL:CB	1:A:86:LEU:CD1	0.60	2.79	18	3
1:A:38:TYR:CE2	1:A:58:GLU:OE1	0.60	2.54	33	3
1:A:98:ASN:ND2	1:A:100:PHE:CD2	0.60	2.70	17	2
1:A:81:ASN:CA	1:A:85:GLN:HG2	0.60	2.27	33	2
1:A:24:TYR:O	1:A:28:GLU:HG3	0.60	1.97	15	33
1:A:12:SER:O	1:A:14:SER:N	0.60	2.34	24	17
1:A:80:PHE:HD2	1:A:85:GLN:OE1	0.60	1.78	33	6
1:A:81:ASN:ND2	1:A:83:ASN:ND2	0.60	2.49	21	25
1:A:35:SER:OG	1:A:68:TYR:OH	0.60	2.12	23	2
1:A:11:TYR:HB3	1:A:15:ASP:CB	0.60	2.27	17	1
1:A:91:THR:C	1:A:93:THR:N	0.60	2.55	17	2
1:A:62:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CE1	0.60	2.84	19	3
1:A:68:TYR:CD1	1:A:70:GLY:O	0.60	2.54	27	1
1:A:85:GLN:O	1:A:86:LEU:C	0.60	2.40	32	8
1:A:68:TYR:CE2	1:A:73:PRO:CG	0.60	2.84	13	3
1:A:95:ALA:CB	1:A:99:ASN:OD1	0.60	2.50	3	2
1:A:27:HIS:CD2	1:A:82:GLU:OE2	0.60	2.55	11	2
1:A:36:ASN:HB3	1:A:38:TYR:CE1	0.59	2.32	34	6
1:A:79:VAL:CB	1:A:87:ALA:HB3	0.59	2.27	11	22
1:A:42:TYR:HE2	1:A:90:ILE:HD12	0.59	1.55	17	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:GLN:CA	1:A:85:GLN:NE2	0.59	2.62	29	3
1:A:42:TYR:CG	1:A:42:TYR:O	0.59	2.55	30	7
1:A:74:GLY:N	1:A:77:ARG:NH1	0.59	2.50	11	6
1:A:80:PHE:CA	1:A:85:GLN:O	0.59	2.50	20	17
1:A:74:GLY:O	1:A:77:ARG:NH1	0.59	2.36	1	7
1:A:23:GLY:O	1:A:39:PRO:CG	0.59	2.50	22	8
1:A:92:HIS:CE1	1:A:98:ASN:ND2	0.59	2.70	21	7
1:A:42:TYR:CD1	1:A:42:TYR:C	0.59	2.75	23	7
1:A:16:VAL:HG21	1:A:89:VAL:CG2	0.59	2.28	5	9
1:A:81:ASN:C	1:A:85:GLN:CG	0.59	2.70	33	5
1:A:68:TYR:CG	1:A:68:TYR:O	0.59	2.55	26	2
1:A:24:TYR:CD2	1:A:83:ASN:HB3	0.59	2.32	29	7
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:GLY:H	0.59	1.57	2	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:76:ASP:HB3	0.59	1.75	6	5
1:A:57:TYR:CD2	1:A:80:PHE:CE2	0.59	2.90	23	2
1:A:57:TYR:CB	1:A:80:PHE:O	0.59	2.51	33	6
1:A:68:TYR:HH	1:A:71:GLY:HA2	0.59	1.57	30	3
1:A:59:TRP:O	1:A:78:VAL:HG22	0.59	1.98	21	4
1:A:42:TYR:O	1:A:42:TYR:CG	0.58	2.56	34	12
1:A:57:TYR:HB2	1:A:80:PHE:O	0.58	1.98	33	6
1:A:71:GLY:C	1:A:73:PRO:HD3	0.58	2.18	33	6
1:A:42:TYR:CE1	1:A:50:PHE:CZ	0.58	2.91	15	30
1:A:52:VAL:CG1	1:A:85:GLN:O	0.58	2.49	34	7
1:A:20:GLN:O	1:A:22:ALA:N	0.58	2.35	21	28
1:A:73:PRO:HB2	1:A:77:ARG:CZ	0.58	2.28	32	1
1:A:3:ASP:N	1:A:12:SER:OG	0.58	2.37	12	2
1:A:83:ASN:N	1:A:83:ASN:HD22	0.58	1.96	33	3
1:A:78:VAL:HA	1:A:88:GLY:C	0.58	2.18	20	7
1:A:84:ASN:OD1	1:A:84:ASN:C	0.58	2.42	23	1
1:A:48:PHE:CD1	1:A:90:ILE:HG22	0.58	2.33	28	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:85:GLN:CA	0.58	2.28	23	7
1:A:43:ASN:O	1:A:44:ASN:CB	0.58	2.52	28	15
1:A:20:GLN:NE2	1:A:85:GLN:O	0.58	2.36	14	7
1:A:24:TYR:OH	1:A:84:ASN:N	0.58	2.32	23	1
1:A:38:TYR:N	1:A:38:TYR:CD1	0.58	2.70	22	15
1:A:79:VAL:CG1	1:A:87:ALA:HB3	0.58	2.28	16	21
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:CD2	0.58	2.29	11	1
1:A:2:CYS:HB3	1:A:10:CYS:SG	0.57	2.39	24	21
1:A:11:TYR:HB3	1:A:15:ASP:HB3	0.57	1.74	17	1
1:A:24:TYR:O	1:A:28:GLU:N	0.57	2.34	15	23
1:A:94:GLY:O	1:A:101:VAL:HG11	0.57	1.99	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:HD22	0.57	1.96	10	7
1:A:20:GLN:CG	1:A:86:LEU:HD12	0.57	2.28	21	1
1:A:11:TYR:O	1:A:12:SER:C	0.57	2.43	26	16
1:A:24:TYR:CD2	1:A:83:ASN:CB	0.57	2.87	30	7
1:A:16:VAL:HB	1:A:86:LEU:HD12	0.57	1.75	32	2
1:A:79:VAL:H	1:A:88:GLY:CA	0.57	2.13	25	8
1:A:33:VAL:O	1:A:70:GLY:HA3	0.57	1.98	11	8
1:A:42:TYR:CE1	1:A:90:ILE:HD12	0.57	2.34	2	2
1:A:34:GLY:O	1:A:70:GLY:CA	0.57	2.53	22	2
1:A:42:TYR:N	1:A:56:TYR:O	0.57	2.36	23	15
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:CG	0.57	2.83	33	6
1:A:60:PRO:HB3	1:A:73:PRO:HB2	0.57	1.76	13	7
1:A:97:GLY:N	1:A:99:ASN:HD21	0.57	1.98	4	3
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:HD22	0.57	1.74	27	3
1:A:53:SER:O	1:A:81:ASN:CB	0.57	2.52	26	2
1:A:95:ALA:HB3	1:A:99:ASN:HD22	0.57	1.59	20	10
1:A:62:LEU:HD11	1:A:68:TYR:HA	0.57	1.76	14	8
1:A:60:PRO:HB3	1:A:73:PRO:HG2	0.57	1.77	24	3
1:A:95:ALA:CB	1:A:99:ASN:O	0.57	2.53	18	8
1:A:20:GLN:HG2	1:A:86:LEU:HD12	0.57	1.75	21	3
1:A:24:TYR:CE1	1:A:80:PHE:CE2	0.57	2.92	23	1
1:A:86:LEU:HD11	1:A:88:GLY:O	0.57	2.00	7	3
1:A:20:GLN:NE2	1:A:86:LEU:HB3	0.57	2.15	26	2
1:A:38:TYR:HD1	1:A:38:TYR:N	0.57	1.95	27	10
1:A:57:TYR:O	1:A:80:PHE:N	0.57	2.34	12	19
1:A:94:GLY:O	1:A:101:VAL:CG2	0.57	2.53	6	3
1:A:78:VAL:CG2	1:A:86:LEU:HD11	0.57	2.30	21	4
1:A:16:VAL:CG1	1:A:78:VAL:HG21	0.57	2.30	31	4
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ALA:O	0.57	2.22	32	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:92:HIS:NE2	0.57	2.52	17	4
1:A:46:GLU:CD	1:A:100:PHE:O	0.57	2.43	8	2
1:A:6:CYS:HA	1:A:103:CYS:SG	0.56	2.40	16	15
1:A:20:GLN:CD	1:A:86:LEU:HB3	0.56	2.20	28	7
1:A:73:PRO:CG	1:A:77:ARG:NH1	0.56	2.68	14	2
1:A:43:ASN:O	1:A:56:TYR:CD2	0.56	2.58	23	13
1:A:42:TYR:C	1:A:42:TYR:CD1	0.56	2.79	31	8
1:A:89:VAL:O	1:A:103:CYS:SG	0.56	2.63	28	9
1:A:20:GLN:HG2	1:A:86:LEU:HB2	0.56	1.78	28	7
1:A:42:TYR:OH	1:A:90:ILE:HG21	0.56	1.99	22	4
1:A:59:TRP:CZ3	1:A:68:TYR:CE2	0.56	2.92	27	1
1:A:41:LYS:CD	1:A:43:ASN:ND2	0.56	2.68	33	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PRO:HG3	1:A:73:PRO:HG3	0.56	1.77	33	6
1:A:60:PRO:CB	1:A:77:ARG:HH11	0.56	2.14	32	1
1:A:52:VAL:CG1	1:A:85:GLN:HB3	0.56	2.31	24	8
1:A:80:PHE:CB	1:A:86:LEU:HA	0.56	2.31	28	5
1:A:36:ASN:HB2	1:A:38:TYR:CD1	0.56	2.36	27	3
1:A:23:GLY:O	1:A:27:HIS:CB	0.56	2.53	33	13
1:A:23:GLY:HA2	1:A:39:PRO:HG3	0.56	1.77	34	12
1:A:4:TYR:HB3	1:A:89:VAL:HG21	0.56	1.76	1	13
1:A:2:CYS:HB2	1:A:10:CYS:SG	0.56	2.40	17	7
1:A:74:GLY:HA2	1:A:92:HIS:NE2	0.56	2.15	13	4
1:A:24:TYR:CE2	1:A:84:ASN:N	0.56	2.73	23	2
1:A:79:VAL:CG1	1:A:87:ALA:CB	0.56	2.84	16	21
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:HB3	0.56	2.36	33	4
1:A:42:TYR:CE2	1:A:50:PHE:CE2	0.56	2.94	2	3
1:A:80:PHE:CD2	1:A:83:ASN:O	0.56	2.59	34	7
1:A:45:TYR:O	1:A:47:GLY:N	0.56	2.39	27	34
1:A:75:ALA:CB	1:A:92:HIS:HB2	0.56	2.30	21	11
1:A:74:GLY:O	1:A:77:ARG:NH2	0.56	2.39	19	5
1:A:24:TYR:CD1	1:A:83:ASN:HB3	0.56	2.36	29	6
1:A:39:PRO:O	1:A:40:HIS:HB3	0.56	2.00	25	16
1:A:95:ALA:C	1:A:97:GLY:H	0.56	2.04	25	2
1:A:6:CYS:H	1:A:9:ASN:HB2	0.56	1.61	16	18
1:A:20:GLN:CG	1:A:86:LEU:HB2	0.56	2.31	28	6
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD13	0.56	2.21	10	1
1:A:24:TYR:CD1	1:A:28:GLU:HG2	0.55	2.35	30	14
1:A:78:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD21	0.55	1.76	24	2
1:A:81:ASN:HB2	1:A:83:ASN:OD1	0.55	2.01	14	18
1:A:89:VAL:HG12	1:A:103:CYS:CB	0.55	2.32	1	8
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:C	0.55	2.20	3	3
1:A:102:GLU:C	1:A:104:THR:N	0.55	2.59	19	3
1:A:52:VAL:HB	1:A:85:GLN:HB3	0.55	1.79	23	2
1:A:74:GLY:O	1:A:100:PHE:HE1	0.55	1.85	32	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:92:HIS:CE1	0.55	2.75	16	3
1:A:79:VAL:H	1:A:88:GLY:N	0.55	2.00	20	4
1:A:35:SER:OG	1:A:71:GLY:CA	0.55	2.54	27	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:103:CYS:H	0.55	1.61	19	4
1:A:24:TYR:CZ	1:A:28:GLU:CD	0.55	2.80	26	3
1:A:25:LYS:CD	1:A:26:LEU:N	0.55	2.70	29	10
1:A:26:LEU:HD11	1:A:32:THR:O	0.55	2.02	25	9
1:A:86:LEU:HD13	1:A:88:GLY:N	0.55	2.16	16	6
1:A:34:GLY:O	1:A:70:GLY:C	0.55	2.45	22	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:HD12	1:A:31:GLU:HB2	0.55	1.77	7	16
1:A:24:TYR:CG	1:A:28:GLU:OE2	0.55	2.59	3	8
1:A:57:TYR:O	1:A:80:PHE:CD1	0.55	2.59	15	11
1:A:93:THR:CG2	1:A:94:GLY:N	0.55	2.70	16	5
1:A:42:TYR:CD2	1:A:58:GLU:HB3	0.55	2.37	11	11
1:A:42:TYR:CE2	1:A:90:ILE:CD1	0.55	2.90	15	13
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:GLY:N	0.55	2.17	2	3
1:A:60:PRO:HG3	1:A:73:PRO:HG2	0.55	1.76	24	1
1:A:9:ASN:CB	1:A:11:TYR:OH	0.55	2.54	17	1
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:HB2	0.55	2.01	21	2
1:A:11:TYR:CA	1:A:15:ASP:HB2	0.55	2.31	10	32
1:A:85:GLN:CD	1:A:85:GLN:N	0.55	2.48	32	1
1:A:60:PRO:HD2	1:A:68:TYR:CD2	0.55	2.37	27	2
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:HB3	0.55	2.37	5	5
1:A:12:SER:C	1:A:14:SER:N	0.55	2.60	21	31
1:A:59:TRP:CZ2	1:A:68:TYR:HB3	0.55	2.37	25	9
1:A:6:CYS:N	1:A:103:CYS:HB3	0.54	2.17	21	5
1:A:55:PRO:O	1:A:81:ASN:CG	0.54	2.45	28	3
1:A:50:PHE:C	1:A:52:VAL:H	0.54	2.04	13	33
1:A:20:GLN:CG	1:A:86:LEU:CB	0.54	2.86	28	2
1:A:62:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CD2	0.54	2.89	33	3
1:A:36:ASN:HB2	1:A:71:GLY:N	0.54	2.17	15	1
1:A:83:ASN:H	1:A:85:GLN:CG	0.54	2.16	31	6
1:A:42:TYR:CE2	1:A:50:PHE:CZ	0.54	2.96	2	3
1:A:24:TYR:CZ	1:A:28:GLU:OE2	0.54	2.60	33	3
1:A:73:PRO:HG2	1:A:77:ARG:HH11	0.54	1.58	14	2
1:A:46:GLU:OE2	1:A:99:ASN:CB	0.54	2.56	11	2
1:A:24:TYR:CZ	1:A:82:GLU:OE1	0.54	2.61	11	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:39:PRO:HD3	0.54	2.33	31	11
1:A:83:ASN:HD22	1:A:83:ASN:N	0.54	1.99	34	3
1:A:68:TYR:OH	1:A:70:GLY:O	0.54	2.26	2	5
1:A:100:PHE:C	1:A:101:VAL:HG13	0.54	2.24	6	32
1:A:11:TYR:CD1	1:A:11:TYR:N	0.54	2.75	9	10
1:A:33:VAL:CG2	1:A:59:TRP:CZ3	0.54	2.91	8	17
1:A:17:SER:N	1:A:20:GLN:OE1	0.54	2.41	11	9
1:A:74:GLY:O	1:A:100:PHE:CE1	0.54	2.61	32	1
1:A:33:VAL:CG1	1:A:59:TRP:HH2	0.53	2.11	28	2
1:A:58:GLU:HA	1:A:78:VAL:O	0.53	2.03	19	2
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LYS:CB	0.53	2.56	21	7
1:A:62:LEU:HG	1:A:68:TYR:CE2	0.53	2.39	20	2
1:A:74:GLY:HA2	1:A:92:HIS:CE1	0.53	2.38	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:TYR:CA	1:A:80:PHE:O	0.53	2.55	28	4
1:A:92:HIS:HA	1:A:99:ASN:O	0.53	2.02	16	2
1:A:52:VAL:HG22	1:A:87:ALA:HB2	0.53	1.79	21	3
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:HB3	0.53	2.34	17	8
1:A:38:TYR:N	1:A:38:TYR:HD1	0.53	2.02	15	16
1:A:34:GLY:HA3	1:A:69:SER:O	0.53	2.04	12	5
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:CA	0.53	2.92	8	5
1:A:78:VAL:CG2	1:A:86:LEU:HG	0.53	2.34	20	1
1:A:86:LEU:CD1	1:A:88:GLY:O	0.53	2.57	4	10
1:A:35:SER:CB	1:A:68:TYR:HH	0.53	2.14	23	1
1:A:60:PRO:HB2	1:A:73:PRO:CB	0.53	2.33	22	3
1:A:48:PHE:CD1	1:A:102:GLU:HG2	0.53	2.39	29	5
1:A:89:VAL:CG1	1:A:103:CYS:CB	0.53	2.77	19	6
1:A:24:TYR:CD1	1:A:28:GLU:OE2	0.53	2.62	16	2
1:A:2:CYS:CA	1:A:10:CYS:SG	0.53	2.96	8	13
1:A:20:GLN:NE2	1:A:86:LEU:CB	0.53	2.72	30	19
1:A:34:GLY:CA	1:A:70:GLY:O	0.53	2.56	4	3
1:A:86:LEU:CD1	1:A:88:GLY:N	0.53	2.72	11	6
1:A:83:ASN:H	1:A:85:GLN:HG3	0.53	1.62	33	6
1:A:79:VAL:HG12	1:A:87:ALA:HB2	0.53	1.81	11	21
1:A:73:PRO:CA	1:A:77:ARG:NH2	0.53	2.72	32	1
1:A:77:ARG:HG3	1:A:100:PHE:CE1	0.53	2.38	33	15
1:A:59:TRP:O	1:A:78:VAL:CG2	0.53	2.56	24	5
1:A:96:SER:CB	1:A:99:ASN:ND2	0.53	2.72	14	1
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:CA	0.52	2.88	30	24
1:A:99:ASN:HD22	1:A:99:ASN:N	0.52	2.00	29	1
1:A:40:HIS:O	1:A:58:GLU:HG2	0.52	2.05	25	1
1:A:74:GLY:HA3	1:A:92:HIS:NE2	0.52	2.19	24	1
1:A:94:GLY:HA3	1:A:101:VAL:HG21	0.52	1.80	6	1
1:A:58:GLU:CD	1:A:58:GLU:O	0.52	2.47	20	9
1:A:22:ALA:HB1	1:A:67:VAL:HG13	0.52	1.80	23	10
1:A:33:VAL:HB	1:A:70:GLY:N	0.52	2.19	15	1
1:A:4:TYR:CE1	1:A:89:VAL:HG21	0.52	2.40	24	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:HB2	0.52	2.34	21	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CZ	0.52	2.39	7	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:86:LEU:O	0.52	2.04	6	5
1:A:92:HIS:CD2	1:A:100:PHE:CD1	0.52	2.98	33	1
1:A:68:TYR:CE1	1:A:71:GLY:HA2	0.52	2.40	22	3
1:A:58:GLU:O	1:A:58:GLU:CD	0.52	2.47	23	7
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:CG1	0.52	2.93	19	4
1:A:73:PRO:HD2	1:A:77:ARG:NH1	0.52	2.19	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CZ	1:A:87:ALA:HB1	0.52	2.39	23	1
1:A:95:ALA:O	1:A:99:ASN:CB	0.52	2.57	14	2
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:CG	0.52	2.92	24	1
1:A:35:SER:HB3	1:A:68:TYR:OH	0.52	2.03	27	1
1:A:5:THR:C	1:A:103:CYS:O	0.52	2.48	19	1
1:A:68:TYR:CD1	1:A:73:PRO:HA	0.52	2.40	17	1
1:A:6:CYS:CB	1:A:76:ASP:OD1	0.52	2.57	30	9
1:A:33:VAL:CG2	1:A:70:GLY:HA2	0.52	2.33	15	2
1:A:89:VAL:CG1	1:A:103:CYS:SG	0.52	2.97	1	8
1:A:52:VAL:HB	1:A:85:GLN:CB	0.52	2.35	23	3
1:A:79:VAL:HB	1:A:88:GLY:N	0.52	2.19	25	5
1:A:26:LEU:HD21	1:A:32:THR:C	0.52	2.25	23	5
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:CB	0.52	2.35	28	2
1:A:35:SER:CB	1:A:70:GLY:HA3	0.52	2.35	28	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:87:ALA:HB1	0.52	2.39	23	10
1:A:68:TYR:OH	1:A:73:PRO:N	0.52	2.43	15	3
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LYS:HB3	0.52	2.05	27	5
1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:GLN:CD	0.52	2.23	26	3
1:A:20:GLN:O	1:A:21:ALA:C	0.52	2.49	19	33
1:A:40:HIS:ND1	1:A:41:LYS:O	0.52	2.43	33	16
1:A:74:GLY:O	1:A:77:ARG:CG	0.52	2.58	32	1
1:A:5:THR:HG23	1:A:9:ASN:H	0.52	1.64	14	2
1:A:88:GLY:O	1:A:89:VAL:HG23	0.52	2.05	10	1
1:A:95:ALA:O	1:A:96:SER:C	0.52	2.48	31	2
1:A:5:THR:O	1:A:103:CYS:HB3	0.52	2.04	17	1
1:A:19:ALA:CB	1:A:78:VAL:HG21	0.52	2.35	17	1
1:A:81:ASN:C	1:A:85:GLN:CD	0.51	2.69	33	5
1:A:26:LEU:HD11	1:A:31:GLU:CB	0.51	2.36	30	8
1:A:79:VAL:HG21	1:A:90:ILE:HD13	0.51	1.80	2	7
1:A:83:ASN:H	1:A:85:GLN:CD	0.51	2.09	34	6
1:A:83:ASN:O	1:A:83:ASN:ND2	0.51	2.44	23	1
1:A:42:TYR:CD2	1:A:79:VAL:HG21	0.51	2.40	24	3
1:A:55:PRO:HG2	1:A:57:TYR:CE1	0.51	2.40	34	8
1:A:9:ASN:N	1:A:9:ASN:ND2	0.51	2.58	17	13
1:A:89:VAL:O	1:A:102:GLU:HA	0.51	2.05	1	12
1:A:82:GLU:O	1:A:82:GLU:HG3	0.51	2.04	2	4
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:CB	0.51	2.94	5	3
1:A:70:GLY:C	1:A:72:SER:N	0.51	2.64	5	1
1:A:2:CYS:O	1:A:4:TYR:N	0.51	2.44	20	16
1:A:42:TYR:CE1	1:A:90:ILE:CD1	0.51	2.94	2	2
1:A:77:ARG:C	1:A:88:GLY:O	0.51	2.49	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ASN:ND2	1:A:9:ASN:N	0.51	2.58	9	21
1:A:16:VAL:HG22	1:A:61:ILE:CD1	0.51	2.36	23	2
1:A:23:GLY:CA	1:A:39:PRO:HG3	0.51	2.36	11	11
1:A:81:ASN:N	1:A:81:ASN:ND2	0.51	2.59	11	8
1:A:73:PRO:HD2	1:A:77:ARG:CZ	0.51	2.36	28	2
1:A:34:GLY:O	1:A:71:GLY:N	0.51	2.44	27	1
1:A:82:GLU:CD	1:A:82:GLU:O	0.51	2.49	8	1
1:A:38:TYR:CE2	1:A:58:GLU:OE2	0.51	2.64	7	1
1:A:20:GLN:C	1:A:22:ALA:N	0.51	2.62	21	25
1:A:52:VAL:HG22	1:A:87:ALA:HB3	0.51	1.83	18	5
1:A:45:TYR:C	1:A:47:GLY:N	0.50	2.65	18	34
1:A:22:ALA:CB	1:A:67:VAL:CG2	0.50	2.87	15	10
1:A:81:ASN:ND2	1:A:81:ASN:N	0.50	2.58	14	6
1:A:95:ALA:O	1:A:99:ASN:OD1	0.50	2.30	13	3
1:A:81:ASN:O	1:A:82:GLU:O	0.50	2.29	23	1
1:A:17:SER:HA	1:A:20:GLN:OE1	0.50	2.06	32	14
1:A:32:THR:CG2	1:A:37:SER:C	0.50	2.79	15	2
1:A:5:THR:OG1	1:A:10:CYS:SG	0.50	2.69	17	1
1:A:92:HIS:CG	1:A:99:ASN:HB3	0.50	2.41	16	2
1:A:12:SER:OG	1:A:13:SER:N	0.50	2.44	6	5
1:A:74:GLY:C	1:A:76:ASP:N	0.50	2.65	17	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:SER:O	0.50	2.29	34	6
1:A:35:SER:OG	1:A:71:GLY:N	0.50	2.43	34	1
1:A:19:ALA:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.50	2.37	9	14
1:A:78:VAL:HG21	1:A:86:LEU:HD12	0.50	1.81	18	2
1:A:93:THR:O	1:A:93:THR:HG22	0.50	2.07	28	7
1:A:73:PRO:HB2	1:A:77:ARG:NH1	0.50	2.22	5	1
1:A:11:TYR:N	1:A:11:TYR:CD1	0.50	2.80	34	5
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:HB2	0.50	1.82	34	1
1:A:40:HIS:CE1	1:A:58:GLU:OE2	0.50	2.65	30	4
1:A:16:VAL:HB	1:A:86:LEU:CD1	0.50	2.37	32	2
1:A:6:CYS:SG	1:A:89:VAL:CG1	0.50	3.00	1	5
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:HD12	0.50	1.83	24	2
1:A:60:PRO:HB2	1:A:73:PRO:HB3	0.50	1.83	22	1
1:A:81:ASN:O	1:A:82:GLU:C	0.50	2.48	26	6
1:A:92:HIS:O	1:A:93:THR:C	0.50	2.49	25	7
1:A:24:TYR:CE2	1:A:81:ASN:O	0.50	2.65	13	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:86:LEU:HD11	0.50	1.81	25	1
1:A:92:HIS:ND1	1:A:97:GLY:O	0.50	2.45	8	2
1:A:32:THR:CG2	1:A:37:SER:HA	0.50	2.37	34	2
1:A:34:GLY:HA3	1:A:70:GLY:CA	0.50	2.37	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:VAL:HG12	1:A:86:LEU:HD21	0.50	1.83	21	1
1:A:73:PRO:C	1:A:77:ARG:NH1	0.50	2.65	25	1
1:A:24:TYR:CE2	1:A:83:ASN:HB3	0.50	2.42	29	1
1:A:33:VAL:HG21	1:A:68:TYR:O	0.49	2.07	32	5
1:A:68:TYR:CE2	1:A:70:GLY:C	0.49	2.86	11	6
1:A:25:LYS:HA	1:A:28:GLU:OE2	0.49	2.07	11	5
1:A:24:TYR:O	1:A:28:GLU:HG2	0.49	2.07	10	27
1:A:6:CYS:HG	1:A:103:CYS:SG	0.49	0.30	14	1
1:A:95:ALA:C	1:A:97:GLY:N	0.49	2.64	21	6
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:HA	0.49	1.84	28	2
1:A:5:THR:CG2	1:A:9:ASN:O	0.49	2.59	17	1
1:A:24:TYR:O	1:A:25:LYS:C	0.49	2.50	29	25
1:A:6:CYS:SG	1:A:91:THR:CB	0.49	2.98	24	6
1:A:80:PHE:CA	1:A:86:LEU:HA	0.49	2.37	28	4
1:A:79:VAL:O	1:A:88:GLY:N	0.49	2.43	28	2
1:A:48:PHE:CE1	1:A:102:GLU:HG2	0.49	2.43	14	5
1:A:11:TYR:HD1	1:A:11:TYR:O	0.49	1.89	5	7
1:A:92:HIS:CE1	1:A:98:ASN:HA	0.49	2.42	33	2
1:A:90:ILE:HG13	1:A:100:PHE:HB3	0.49	1.84	25	3
1:A:61:ILE:CG2	1:A:76:ASP:HB3	0.49	2.38	26	17
1:A:6:CYS:HB2	1:A:9:ASN:ND2	0.49	2.22	13	21
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:CB	0.49	2.95	9	4
1:A:68:TYR:CE2	1:A:70:GLY:N	0.49	2.81	9	3
1:A:24:TYR:HH	1:A:82:GLU:C	0.49	2.10	24	1
1:A:67:VAL:O	1:A:69:SER:N	0.49	2.45	3	6
1:A:24:TYR:CG	1:A:83:ASN:CB	0.49	2.94	30	6
1:A:26:LEU:CD1	1:A:31:GLU:C	0.49	2.75	32	9
1:A:44:ASN:C	1:A:44:ASN:ND2	0.49	2.66	21	6
1:A:33:VAL:CG1	1:A:59:TRP:CH2	0.49	2.91	28	2
1:A:91:THR:HG22	1:A:101:VAL:O	0.49	2.08	17	2
1:A:9:ASN:HD22	1:A:9:ASN:N	0.49	2.05	9	8
1:A:96:SER:N	1:A:99:ASN:ND2	0.49	2.61	4	5
1:A:46:GLU:N	1:A:46:GLU:CD	0.49	2.65	16	2
1:A:20:GLN:O	1:A:24:TYR:N	0.49	2.38	24	1
1:A:40:HIS:CE1	1:A:58:GLU:CG	0.49	2.95	32	11
1:A:25:LYS:O	1:A:28:GLU:HG3	0.49	2.07	11	8
1:A:46:GLU:CD	1:A:46:GLU:N	0.49	2.66	17	3
1:A:94:GLY:CA	1:A:101:VAL:HG21	0.49	2.38	8	2
1:A:75:ALA:HB1	1:A:92:HIS:N	0.49	2.22	8	6
1:A:40:HIS:NE2	1:A:58:GLU:CD	0.49	2.67	7	2
1:A:19:ALA:HB1	1:A:78:VAL:HG21	0.49	1.83	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ASN:OD1	1:A:11:TYR:CE2	0.48	2.65	34	16
1:A:27:HIS:NE2	1:A:82:GLU:OE2	0.48	2.46	11	2
1:A:4:TYR:HD1	1:A:89:VAL:HG11	0.48	1.67	20	8
1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:GLN:CG	0.48	2.37	11	1
1:A:2:CYS:N	1:A:12:SER:OG	0.48	2.46	17	1
1:A:79:VAL:HG12	1:A:87:ALA:HB3	0.48	1.85	26	2
1:A:58:GLU:C	1:A:58:GLU:CD	0.48	2.71	23	7
1:A:79:VAL:HG23	1:A:90:ILE:CD1	0.48	2.36	10	4
1:A:52:VAL:O	1:A:56:TYR:OH	0.48	2.28	7	4
1:A:93:THR:CG2	1:A:93:THR:O	0.48	2.61	13	2
1:A:48:PHE:CE1	1:A:102:GLU:N	0.48	2.82	28	1
1:A:2:CYS:C	1:A:4:TYR:N	0.48	2.66	20	16
1:A:60:PRO:HB3	1:A:73:PRO:HG3	0.48	1.86	14	3
1:A:92:HIS:HD2	1:A:100:PHE:CE1	0.48	2.24	29	7
1:A:20:GLN:HE22	1:A:86:LEU:N	0.48	2.04	19	7
1:A:70:GLY:O	1:A:72:SER:N	0.48	2.45	31	2
1:A:84:ASN:CG	1:A:85:GLN:NE2	0.48	2.66	26	2
1:A:73:PRO:O	1:A:77:ARG:NH1	0.48	2.46	8	2
1:A:16:VAL:HG13	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.39	23	7
1:A:80:PHE:HD2	1:A:81:ASN:O	0.48	1.92	28	7
1:A:36:ASN:ND2	1:A:71:GLY:O	0.48	2.47	15	4
1:A:90:ILE:CG1	1:A:100:PHE:CD1	0.48	2.95	24	2
1:A:33:VAL:HG23	1:A:69:SER:O	0.48	2.08	9	3
1:A:34:GLY:O	1:A:69:SER:O	0.48	2.31	15	1
1:A:55:PRO:HG2	1:A:57:TYR:CZ	0.48	2.43	34	4
1:A:57:TYR:CE2	1:A:82:GLU:N	0.48	2.82	24	6
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:HB3	0.48	1.86	24	4
1:A:40:HIS:CE1	1:A:58:GLU:OE1	0.48	2.66	19	3
1:A:99:ASN:O	1:A:99:ASN:ND2	0.48	2.46	29	3
1:A:4:TYR:O	1:A:11:TYR:CD2	0.48	2.67	33	11
1:A:79:VAL:CG2	1:A:90:ILE:CD1	0.48	2.92	10	9
1:A:93:THR:O	1:A:101:VAL:CG2	0.48	2.62	3	1
1:A:48:PHE:CB	1:A:50:PHE:CE1	0.48	2.94	31	4
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:CG	0.48	2.62	21	1
1:A:11:TYR:O	1:A:11:TYR:HD1	0.48	1.92	23	9
1:A:56:TYR:HB3	1:A:79:VAL:CG1	0.48	2.38	25	4
1:A:42:TYR:CD2	1:A:79:VAL:CG2	0.48	2.97	24	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:99:ASN:HA	0.48	2.38	17	2
1:A:6:CYS:C	1:A:9:ASN:ND2	0.47	2.68	26	16
1:A:8:SER:C	1:A:9:ASN:ND2	0.47	2.67	9	18
1:A:6:CYS:CB	1:A:11:TYR:OH	0.47	2.61	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:PHE:HB3	1:A:50:PHE:CD1	0.47	2.44	17	4
1:A:91:THR:H	1:A:101:VAL:H	0.47	1.52	16	2
1:A:102:GLU:O	1:A:103:CYS:O	0.47	2.32	23	26
1:A:73:PRO:HA	1:A:77:ARG:NH2	0.47	2.24	32	1
1:A:82:GLU:OE2	1:A:82:GLU:O	0.47	2.31	2	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:HIS:N	0.47	2.46	15	1
1:A:84:ASN:HD22	1:A:84:ASN:C	0.47	2.12	9	11
1:A:15:ASP:O	1:A:18:THR:HB	0.47	2.09	6	2
1:A:81:ASN:HD22	1:A:83:ASN:HD21	0.47	1.51	11	2
1:A:24:TYR:CD2	1:A:80:PHE:CE2	0.47	3.02	13	2
1:A:53:SER:O	1:A:56:TYR:CE1	0.47	2.67	7	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:89:VAL:CG2	0.47	2.39	22	2
1:A:99:ASN:OD1	1:A:100:PHE:O	0.47	2.32	21	1
1:A:52:VAL:CG2	1:A:87:ALA:CB	0.47	2.92	20	2
1:A:35:SER:CB	1:A:70:GLY:O	0.47	2.62	28	1
1:A:84:ASN:C	1:A:84:ASN:HD22	0.47	2.12	2	10
1:A:36:ASN:CB	1:A:71:GLY:H	0.47	2.22	15	1
1:A:52:VAL:CG2	1:A:87:ALA:HB2	0.47	2.40	21	1
1:A:33:VAL:HB	1:A:69:SER:O	0.47	2.10	28	1
1:A:11:TYR:CD1	1:A:61:ILE:HD13	0.47	2.44	28	1
1:A:11:TYR:O	1:A:11:TYR:CD1	0.47	2.67	12	8
1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:TYR:N	0.47	2.24	18	4
1:A:68:TYR:CG	1:A:73:PRO:HB3	0.47	2.45	8	4
1:A:68:TYR:OH	1:A:71:GLY:O	0.47	2.32	25	1
1:A:24:TYR:HE1	1:A:82:GLU:O	0.47	1.92	23	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:76:ASP:CB	0.47	2.92	10	2
1:A:92:HIS:CD2	1:A:100:PHE:HE1	0.47	2.27	10	2
1:A:70:GLY:C	1:A:72:SER:H	0.47	2.12	5	1
1:A:73:PRO:O	1:A:77:ARG:NH2	0.47	2.47	32	1
1:A:67:VAL:O	1:A:68:TYR:O	0.47	2.31	28	3
1:A:2:CYS:HB3	1:A:10:CYS:CA	0.47	2.40	13	3
1:A:95:ALA:O	1:A:96:SER:HB3	0.47	2.09	12	9
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:HG23	0.47	2.45	8	2
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:C	0.47	2.88	17	1
1:A:81:ASN:CA	1:A:85:GLN:CG	0.47	2.93	33	1
1:A:59:TRP:CZ3	1:A:68:TYR:HD2	0.47	2.28	26	5
1:A:40:HIS:O	1:A:41:LYS:O	0.47	2.33	30	7
1:A:26:LEU:HD11	1:A:32:THR:N	0.47	2.25	32	3
1:A:86:LEU:CD1	1:A:88:GLY:CA	0.47	2.92	11	5
1:A:57:TYR:CB	1:A:80:PHE:CZ	0.47	2.98	15	2
1:A:88:GLY:O	1:A:89:VAL:CG2	0.47	2.63	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ASN:O	1:A:98:ASN:CG	0.47	2.53	34	7
1:A:16:VAL:HG13	1:A:86:LEU:CB	0.47	2.37	21	4
1:A:41:LYS:CG	1:A:42:TYR:N	0.47	2.78	29	1
1:A:41:LYS:HE3	1:A:55:PRO:CB	0.47	2.40	6	1
1:A:44:ASN:OD1	1:A:56:TYR:CE2	0.47	2.68	29	5
1:A:73:PRO:HB2	1:A:77:ARG:CD	0.47	2.40	32	1
1:A:20:GLN:CG	1:A:78:VAL:HG21	0.47	2.39	12	3
1:A:82:GLU:HG2	1:A:82:GLU:O	0.47	2.10	6	3
1:A:6:CYS:SG	1:A:91:THR:CG2	0.47	3.02	24	4
1:A:52:VAL:CB	1:A:85:GLN:O	0.46	2.63	23	2
1:A:11:TYR:CD1	1:A:11:TYR:O	0.46	2.68	23	8
1:A:20:GLN:NE2	1:A:85:GLN:C	0.46	2.69	17	2
1:A:20:GLN:HG2	1:A:78:VAL:CG2	0.46	2.40	12	3
1:A:61:ILE:HG22	1:A:76:ASP:CB	0.46	2.41	3	2
1:A:53:SER:O	1:A:81:ASN:CG	0.46	2.53	26	6
1:A:38:TYR:HA	1:A:39:PRO:C	0.46	2.31	33	34
1:A:6:CYS:HB3	1:A:76:ASP:OD1	0.46	2.11	32	5
1:A:16:VAL:HG13	1:A:78:VAL:CB	0.46	2.40	6	2
1:A:48:PHE:CE1	1:A:90:ILE:HG21	0.46	2.45	22	3
1:A:6:CYS:HB2	1:A:9:ASN:CG	0.46	2.30	9	4
1:A:34:GLY:HA3	1:A:70:GLY:C	0.46	2.31	3	3
1:A:95:ALA:CB	1:A:100:PHE:N	0.46	2.78	17	2
1:A:59:TRP:CG	1:A:60:PRO:CD	0.46	2.97	9	5
1:A:90:ILE:HG13	1:A:100:PHE:CB	0.46	2.41	25	3
1:A:5:THR:OG1	1:A:9:ASN:O	0.46	2.30	10	4
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:CA	0.46	2.41	28	2
1:A:24:TYR:CE1	1:A:83:ASN:HB3	0.46	2.45	29	1
1:A:24:TYR:CZ	1:A:83:ASN:HB3	0.46	2.46	29	1
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASN:C	0.46	2.42	16	2
1:A:61:ILE:CD1	1:A:78:VAL:CG1	0.46	2.85	21	1
1:A:90:ILE:HB	1:A:100:PHE:HB3	0.46	1.88	30	4
1:A:93:THR:CG2	1:A:94:GLY:H	0.46	2.24	2	1
1:A:52:VAL:CG2	1:A:56:TYR:CE1	0.46	2.95	16	3
1:A:102:GLU:O	1:A:104:THR:N	0.46	2.49	19	1
1:A:84:ASN:OD1	1:A:84:ASN:O	0.46	2.34	26	1
1:A:68:TYR:CE1	1:A:73:PRO:HD3	0.46	2.46	32	1
1:A:73:PRO:O	1:A:74:GLY:O	0.46	2.34	4	3
1:A:57:TYR:CE2	1:A:82:GLU:HB2	0.46	2.46	2	6
1:A:50:PHE:C	1:A:52:VAL:N	0.46	2.68	20	11
1:A:82:GLU:O	1:A:82:GLU:HG2	0.46	2.10	13	1
1:A:9:ASN:OD1	1:A:76:ASP:OD2	0.46	2.34	32	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ASN:N	1:A:85:GLN:HE21	0.46	2.07	32	3
1:A:8:SER:OG	1:A:8:SER:O	0.46	2.33	7	5
1:A:69:SER:O	1:A:70:GLY:C	0.46	2.54	17	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:99:ASN:CG	0.46	2.80	21	1
1:A:62:LEU:CG	1:A:68:TYR:CD2	0.46	2.99	33	1
1:A:16:VAL:CB	1:A:86:LEU:HD13	0.46	2.39	34	2
1:A:56:TYR:CD1	1:A:81:ASN:OD1	0.46	2.69	13	5
1:A:68:TYR:CG	1:A:69:SER:N	0.46	2.83	14	2
1:A:81:ASN:H	1:A:85:GLN:CG	0.46	2.24	33	3
1:A:16:VAL:CG1	1:A:20:GLN:OE1	0.46	2.51	7	3
1:A:25:LYS:O	1:A:29:ASP:CG	0.46	2.54	31	2
1:A:80:PHE:HB2	1:A:85:GLN:HE22	0.46	1.68	33	3
1:A:81:ASN:HB2	1:A:83:ASN:CG	0.46	2.31	17	12
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:HB2	0.46	2.41	10	7
1:A:97:GLY:N	1:A:99:ASN:ND2	0.46	2.64	3	3
1:A:11:TYR:HH	1:A:76:ASP:CG	0.46	2.15	17	1
1:A:58:GLU:O	1:A:58:GLU:OE2	0.46	2.34	33	1
1:A:73:PRO:HG2	1:A:77:ARG:HD3	0.46	1.88	28	1
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HG	0.45	2.10	34	2
1:A:22:ALA:O	1:A:26:LEU:HB3	0.45	2.11	19	1
1:A:90:ILE:HA	1:A:101:VAL:C	0.45	2.31	18	8
1:A:6:CYS:SG	1:A:11:TYR:OH	0.45	2.74	9	1
1:A:32:THR:HG21	1:A:37:SER:C	0.45	2.32	15	1
1:A:16:VAL:HG11	1:A:86:LEU:CB	0.45	2.29	21	1
1:A:11:TYR:CD2	1:A:89:VAL:HG11	0.45	2.46	33	1
1:A:16:VAL:O	1:A:17:SER:C	0.45	2.55	11	25
1:A:61:ILE:HG23	1:A:61:ILE:O	0.45	2.12	24	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:103:CYS:N	0.45	2.27	19	3
1:A:74:GLY:O	1:A:92:HIS:CD2	0.45	2.69	32	1
1:A:16:VAL:O	1:A:19:ALA:N	0.45	2.49	8	10
1:A:8:SER:O	1:A:8:SER:OG	0.45	2.34	8	5
1:A:11:TYR:OH	1:A:76:ASP:CG	0.45	2.55	14	4
1:A:43:ASN:O	1:A:50:PHE:CE2	0.45	2.70	16	4
1:A:50:PHE:CE1	1:A:88:GLY:HA2	0.45	2.45	22	3
1:A:32:THR:HG21	1:A:37:SER:CA	0.45	2.40	28	1
1:A:73:PRO:HB2	1:A:77:ARG:NE	0.45	2.27	32	1
1:A:24:TYR:CE2	1:A:84:ASN:CA	0.45	2.99	13	1
1:A:46:GLU:OE1	1:A:100:PHE:O	0.45	2.35	10	7
1:A:4:TYR:O	1:A:11:TYR:HE1	0.45	1.89	12	1
1:A:33:VAL:O	1:A:70:GLY:CA	0.45	2.65	24	1
1:A:55:PRO:HG2	1:A:57:TYR:OH	0.45	2.11	26	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TYR:C	1:A:15:ASP:CB	0.45	2.78	33	3
1:A:34:GLY:HA2	1:A:70:GLY:O	0.45	2.12	32	2
1:A:58:GLU:CD	1:A:58:GLU:C	0.45	2.75	13	3
1:A:75:ALA:HB1	1:A:92:HIS:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:100:PHE:C	1:A:101:VAL:CG1	0.45	2.84	6	10
1:A:26:LEU:HG	1:A:31:GLU:O	0.45	2.11	23	1
1:A:4:TYR:CD1	1:A:89:VAL:HB	0.45	2.47	19	3
1:A:44:ASN:HD22	1:A:45:TYR:N	0.45	2.10	21	1
1:A:81:ASN:N	1:A:85:GLN:CG	0.45	2.79	33	1
1:A:11:TYR:HB3	1:A:61:ILE:HD11	0.45	1.89	8	2
1:A:58:GLU:OE2	1:A:58:GLU:O	0.45	2.35	20	5
1:A:42:TYR:HB2	1:A:58:GLU:CB	0.45	2.40	16	3
1:A:52:VAL:O	1:A:56:TYR:CE1	0.45	2.70	25	3
1:A:60:PRO:HG3	1:A:73:PRO:CG	0.45	2.41	25	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:82:GLU:O	0.45	2.70	23	1
1:A:4:TYR:CE1	1:A:89:VAL:CG2	0.45	3.00	24	1
1:A:34:GLY:HA3	1:A:71:GLY:N	0.45	2.27	19	3
1:A:75:ALA:H	1:A:92:HIS:CD2	0.45	2.30	31	1
1:A:84:ASN:ND2	1:A:85:GLN:NE2	0.45	2.65	26	1
1:A:48:PHE:HE1	1:A:90:ILE:HG22	0.45	1.69	1	5
1:A:27:HIS:CD2	1:A:82:GLU:HG3	0.45	2.47	4	3
1:A:92:HIS:O	1:A:93:THR:O	0.45	2.34	2	1
1:A:44:ASN:HB3	1:A:50:PHE:CE2	0.45	2.47	21	1
1:A:24:TYR:CD2	1:A:83:ASN:HB2	0.45	2.47	30	1
1:A:48:PHE:CE1	1:A:101:VAL:HA	0.45	2.46	28	2
1:A:60:PRO:CB	1:A:73:PRO:HG3	0.44	2.42	33	1
1:A:81:ASN:HB2	1:A:83:ASN:ND2	0.44	2.27	9	7
1:A:86:LEU:HD22	1:A:87:ALA:H	0.44	1.68	10	1
1:A:42:TYR:CZ	1:A:79:VAL:HG21	0.44	2.47	24	1
1:A:35:SER:OG	1:A:71:GLY:HA3	0.44	2.12	27	2
1:A:98:ASN:CG	1:A:98:ASN:O	0.44	2.56	2	11
1:A:77:ARG:HG3	1:A:100:PHE:CZ	0.44	2.47	32	1
1:A:9:ASN:N	1:A:9:ASN:HD22	0.44	2.11	20	7
1:A:59:TRP:NE1	1:A:60:PRO:O	0.44	2.50	9	1
1:A:46:GLU:OE1	1:A:46:GLU:N	0.44	2.51	16	1
1:A:2:CYS:O	1:A:3:ASP:C	0.44	2.56	20	10
1:A:35:SER:CB	1:A:71:GLY:HA2	0.44	2.42	23	1
1:A:83:ASN:C	1:A:83:ASN:HD22	0.44	2.15	23	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:103:CYS:SG	0.44	2.52	8	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:86:LEU:CD2	0.44	2.93	17	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:86:LEU:HG	0.44	1.89	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:GLN:OE1	1:A:86:LEU:HB3	0.44	2.12	9	3
1:A:33:VAL:CB	1:A:69:SER:O	0.44	2.66	14	2
1:A:50:PHE:HD2	1:A:56:TYR:CD2	0.44	2.31	14	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:99:ASN:CG	0.44	2.56	14	1
1:A:92:HIS:CE1	1:A:98:ASN:HD21	0.44	2.31	21	1
1:A:71:GLY:C	1:A:73:PRO:CD	0.44	2.86	33	1
1:A:43:ASN:O	1:A:56:TYR:HD2	0.44	1.96	20	1
1:A:88:GLY:C	1:A:90:ILE:H	0.44	2.16	20	1
1:A:25:LYS:CA	1:A:28:GLU:HG3	0.44	2.43	3	10
1:A:24:TYR:CZ	1:A:83:ASN:CA	0.44	2.99	23	1
1:A:4:TYR:HD1	1:A:89:VAL:CG1	0.44	2.24	19	2
1:A:98:ASN:O	1:A:100:PHE:CA	0.44	2.57	17	2
1:A:91:THR:HG22	1:A:103:CYS:SG	0.44	2.53	16	1
1:A:82:GLU:HB3	1:A:85:GLN:CG	0.44	2.43	26	1
1:A:95:ALA:C	1:A:99:ASN:HB2	0.44	2.33	14	1
1:A:95:ALA:O	1:A:99:ASN:CG	0.44	2.56	13	4
1:A:62:LEU:C	1:A:64:SER:H	0.44	2.16	7	1
1:A:9:ASN:OD1	1:A:76:ASP:CG	0.44	2.55	6	6
1:A:83:ASN:C	1:A:84:ASN:HD22	0.44	2.16	19	26
1:A:74:GLY:C	1:A:77:ARG:HH12	0.44	2.15	21	2
1:A:9:ASN:OD1	1:A:11:TYR:CZ	0.44	2.71	34	4
1:A:24:TYR:OH	1:A:83:ASN:C	0.44	2.56	1	3
1:A:81:ASN:CG	1:A:85:GLN:HB2	0.44	2.31	23	1
1:A:59:TRP:CE3	1:A:68:TYR:CD2	0.44	3.06	27	1
1:A:78:VAL:C	1:A:88:GLY:O	0.44	2.56	27	3
1:A:86:LEU:HG	1:A:86:LEU:O	0.44	2.13	30	2
1:A:40:HIS:NE2	1:A:58:GLU:OE2	0.44	2.50	19	2
1:A:33:VAL:O	1:A:35:SER:OG	0.44	2.36	22	1
1:A:94:GLY:HA3	1:A:101:VAL:CG2	0.44	2.43	6	1
1:A:87:ALA:C	1:A:89:VAL:N	0.43	2.70	27	5
1:A:26:LEU:CD1	1:A:31:GLU:O	0.43	2.67	34	1
1:A:17:SER:HA	1:A:20:GLN:CD	0.43	2.34	15	5
1:A:77:ARG:HB2	1:A:90:ILE:CG1	0.43	2.42	6	8
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG23	0.43	2.12	25	2
1:A:4:TYR:CZ	1:A:86:LEU:HD11	0.43	2.48	33	2
1:A:83:ASN:C	1:A:84:ASN:ND2	0.43	2.72	14	18
1:A:6:CYS:HA	1:A:103:CYS:CB	0.43	2.44	10	2
1:A:68:TYR:HD1	1:A:70:GLY:O	0.43	1.94	27	1
1:A:79:VAL:N	1:A:88:GLY:N	0.43	2.65	20	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:46:GLU:N	0.43	2.51	33	2
1:A:25:LYS:O	1:A:29:ASP:OD1	0.43	2.37	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:SER:O	1:A:99:ASN:OD1	0.43	2.36	32	3
1:A:86:LEU:HD23	1:A:87:ALA:CA	0.43	2.41	22	3
1:A:95:ALA:CB	1:A:100:PHE:H	0.43	2.26	17	1
1:A:34:GLY:HA3	1:A:70:GLY:O	0.43	2.13	33	1
1:A:6:CYS:HB2	1:A:76:ASP:OD1	0.43	2.14	30	1
1:A:52:VAL:CG1	1:A:86:LEU:O	0.43	2.66	6	1
1:A:27:HIS:CE1	1:A:57:TYR:CZ	0.43	3.06	26	2
1:A:75:ALA:N	1:A:92:HIS:CD2	0.43	2.86	6	5
1:A:24:TYR:OH	1:A:83:ASN:N	0.43	2.51	13	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:78:VAL:HB	0.43	1.90	5	2
1:A:59:TRP:O	1:A:78:VAL:O	0.43	2.36	32	1
1:A:74:GLY:C	1:A:92:HIS:CD2	0.43	2.92	24	1
1:A:83:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HB2	0.43	2.29	9	6
1:A:68:TYR:OH	1:A:73:PRO:O	0.43	2.29	18	1
1:A:40:HIS:N	1:A:58:GLU:OE2	0.43	2.51	23	1
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:HG3	0.43	2.48	25	1
1:A:69:SER:C	1:A:70:GLY:O	0.43	2.56	30	1
1:A:82:GLU:OE1	1:A:82:GLU:HA	0.43	2.13	11	1
1:A:82:GLU:HG2	1:A:83:ASN:CG	0.43	2.34	23	1
1:A:35:SER:C	1:A:36:ASN:O	0.43	2.56	34	1
1:A:44:ASN:O	1:A:45:TYR:CB	0.43	2.67	23	2
1:A:11:TYR:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.43	2.44	8	1
1:A:57:TYR:HB3	1:A:80:PHE:CE1	0.42	2.47	26	1
1:A:73:PRO:CD	1:A:77:ARG:NH1	0.42	2.82	25	3
1:A:67:VAL:O	1:A:68:TYR:C	0.42	2.58	24	2
1:A:16:VAL:CG1	1:A:78:VAL:HG23	0.42	2.42	23	1
1:A:27:HIS:HB2	1:A:39:PRO:HG2	0.42	1.91	15	1
1:A:45:TYR:C	1:A:47:GLY:H	0.42	2.18	24	3
1:A:95:ALA:HB1	1:A:100:PHE:H	0.42	1.74	17	2
1:A:77:ARG:HH21	1:A:92:HIS:CE1	0.42	2.32	16	1
1:A:36:ASN:N	1:A:71:GLY:H	0.42	2.11	15	1
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:HB2	0.42	1.90	28	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:86:LEU:CD1	0.42	2.97	18	1
1:A:5:THR:N	1:A:103:CYS:O	0.42	2.51	19	1
1:A:60:PRO:HG2	1:A:68:TYR:HB3	0.42	1.90	10	1
1:A:42:TYR:CD1	1:A:79:VAL:CG1	0.42	2.98	19	1
1:A:25:LYS:CD	1:A:25:LYS:C	0.42	2.88	27	1
1:A:38:TYR:CD2	1:A:58:GLU:OE1	0.42	2.73	33	1
1:A:80:PHE:HD2	1:A:83:ASN:O	0.42	1.95	30	3
1:A:84:ASN:CA	1:A:85:GLN:HE21	0.42	2.27	32	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:66:ASP:C	0.42	2.35	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:GLU:N	1:A:46:GLU:OE2	0.42	2.53	31	1
1:A:16:VAL:HG12	1:A:78:VAL:HG21	0.42	1.90	5	1
1:A:68:TYR:CZ	1:A:73:PRO:N	0.42	2.88	15	2
1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CD1	0.42	2.88	23	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:99:ASN:CA	0.42	2.68	29	1
1:A:25:LYS:O	1:A:29:ASP:OD2	0.42	2.37	33	2
1:A:62:LEU:C	1:A:64:SER:N	0.42	2.74	34	3
1:A:12:SER:C	1:A:14:SER:H	0.42	2.18	24	6
1:A:27:HIS:CD2	1:A:57:TYR:HE2	0.42	2.27	27	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:89:VAL:HG22	0.42	2.45	6	1
1:A:12:SER:O	1:A:13:SER:C	0.42	2.57	33	10
1:A:77:ARG:HG3	1:A:100:PHE:HE1	0.42	1.75	9	1
1:A:68:TYR:CD2	1:A:73:PRO:HB3	0.42	2.50	33	4
1:A:68:TYR:CD2	1:A:70:GLY:N	0.42	2.88	12	1
1:A:95:ALA:HB3	1:A:99:ASN:HD21	0.42	1.74	10	1
1:A:5:THR:H	1:A:104:THR:C	0.42	2.18	24	1
1:A:52:VAL:HG12	1:A:85:GLN:HB3	0.42	1.92	24	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:68:TYR:CD1	0.42	3.02	5	1
1:A:60:PRO:HB3	1:A:77:ARG:HD3	0.41	1.92	26	1
1:A:48:PHE:HE1	1:A:102:GLU:N	0.41	2.13	28	3
1:A:68:TYR:CZ	1:A:71:GLY:HA2	0.41	2.49	23	2
1:A:92:HIS:HD2	1:A:100:PHE:CD1	0.41	2.33	33	1
1:A:26:LEU:HD11	1:A:31:GLU:O	0.41	2.14	34	1
1:A:4:TYR:HB3	1:A:89:VAL:CG1	0.41	2.44	19	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:LYS:HB2	0.41	2.14	21	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:28:GLU:OE2	0.41	2.73	33	1
1:A:11:TYR:HA	1:A:15:ASP:HB3	0.41	1.88	25	2
1:A:56:TYR:HD1	1:A:81:ASN:OD1	0.41	1.97	2	1
1:A:84:ASN:ND2	1:A:85:GLN:HG3	0.41	2.30	7	2
1:A:89:VAL:HG13	1:A:89:VAL:O	0.41	2.11	21	1
1:A:94:GLY:C	1:A:101:VAL:CG2	0.41	2.89	6	1
1:A:42:TYR:CE1	1:A:50:PHE:HE2	0.41	2.33	14	1
1:A:53:SER:C	1:A:56:TYR:CE1	0.41	2.93	25	1
1:A:52:VAL:CG1	1:A:85:GLN:CA	0.41	2.98	23	1
1:A:38:TYR:CZ	1:A:58:GLU:OE2	0.41	2.73	19	1
1:A:99:ASN:OD1	1:A:101:VAL:HG13	0.41	2.15	21	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:88:GLY:CA	0.41	2.90	20	1
1:A:59:TRP:CH2	1:A:68:TYR:HD2	0.41	2.31	4	1
1:A:60:PRO:CA	1:A:77:ARG:HD3	0.41	2.46	4	1
1:A:42:TYR:CD1	1:A:58:GLU:HB3	0.41	2.50	2	1
1:A:50:PHE:O	1:A:52:VAL:N	0.41	2.51	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:C	1:A:95:ALA:N	0.41	2.74	10	4
1:A:33:VAL:HG23	1:A:70:GLY:HA3	0.41	1.93	13	1
1:A:35:SER:CB	1:A:68:TYR:OH	0.41	2.69	22	1
1:A:83:ASN:N	1:A:85:GLN:CG	0.41	2.83	33	1
1:A:68:TYR:CE1	1:A:71:GLY:CA	0.41	3.03	32	1
1:A:90:ILE:HB	1:A:101:VAL:N	0.41	2.30	18	2
1:A:24:TYR:CD2	1:A:80:PHE:CD2	0.41	3.09	13	1
1:A:81:ASN:CB	1:A:85:GLN:CG	0.41	2.94	33	1
1:A:42:TYR:CB	1:A:58:GLU:HB3	0.41	2.42	16	1
1:A:9:ASN:CG	1:A:11:TYR:CZ	0.41	2.94	34	2
1:A:54:SER:HB2	1:A:55:PRO:CA	0.41	2.42	34	1
1:A:94:GLY:O	1:A:95:ALA:C	0.41	2.59	34	1
1:A:4:TYR:HB3	1:A:89:VAL:CG2	0.41	2.44	1	1
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:20:GLN:HG2	1:A:86:LEU:CD1	0.41	2.45	25	1
1:A:57:TYR:HB2	1:A:80:PHE:CZ	0.41	2.50	15	1
1:A:40:HIS:O	1:A:58:GLU:N	0.41	2.47	22	1
1:A:16:VAL:HG21	1:A:89:VAL:HG22	0.41	1.93	6	2
1:A:58:GLU:HA	1:A:79:VAL:HG22	0.41	1.92	28	1
1:A:93:THR:O	1:A:93:THR:CG2	0.41	2.69	14	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:92:HIS:CD2	0.41	2.89	10	1
1:A:25:LYS:HD3	1:A:26:LEU:N	0.41	2.31	29	1
1:A:23:GLY:C	1:A:80:PHE:CZ	0.41	2.94	28	1
1:A:92:HIS:CE1	1:A:98:ASN:HD22	0.40	2.34	1	3
1:A:80:PHE:HB3	1:A:86:LEU:CD1	0.40	2.46	28	2
1:A:57:TYR:CZ	1:A:82:GLU:HB2	0.40	2.51	27	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:87:ALA:N	0.40	2.69	27	2
1:A:35:SER:CB	1:A:71:GLY:HA3	0.40	2.47	22	1
1:A:41:LYS:HD3	1:A:43:ASN:ND2	0.40	2.31	33	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:90:ILE:HG12	0.40	1.92	5	1
1:A:46:GLU:N	1:A:46:GLU:OE1	0.40	2.55	4	1
1:A:95:ALA:C	1:A:99:ASN:OD1	0.40	2.60	10	1
1:A:41:LYS:CE	1:A:43:ASN:ND2	0.40	2.84	21	1
1:A:41:LYS:O	1:A:58:GLU:OE2	0.40	2.39	30	1
1:A:34:GLY:HA3	1:A:71:GLY:CA	0.40	2.47	7	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:87:ALA:CB	0.40	3.04	26	1
1:A:5:THR:HG23	1:A:9:ASN:N	0.40	2.31	14	1
1:A:3:ASP:N	1:A:12:SER:HB2	0.40	2.31	11	1
1:A:42:TYR:CE1	1:A:50:PHE:HZ	0.40	2.34	25	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:38:TYR:O	0.40	2.70	23	1
1:A:80:PHE:HA	1:A:86:LEU:HA	0.40	1.93	23	2

Continued on next page...





Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PRO:HG2	1:A:68:TYR:HB2	0.40	1.93	15	1
1:A:57:TYR:CD1	1:A:57:TYR:N	0.40	2.88	10	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:87:ALA:CB	0.40	2.94	29	1
1:A:9:ASN:HB2	1:A:11:TYR:CZ	0.40	2.49	17	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:89:VAL:CG2	0.40	2.80	21	1
1:A:94:GLY:O	1:A:95:ALA:O	0.40	2.40	30	1
1:A:17:SER:CA	1:A:20:GLN:HG3	0.40	2.46	28	1
1:A:86:LEU:HD11	1:A:88:GLY:HA2	0.40	1.93	11	1
1:A:82:GLU:HG2	1:A:83:ASN:ND2	0.40	2.30	23	1
1:A:81:ASN:HD22	1:A:83:ASN:ND2	0.40	2.14	15	1
1:A:60:PRO:HB2	1:A:68:TYR:CE2	0.40	2.48	20	2
1:A:95:ALA:HB1	1:A:99:ASN:O	0.40	2.16	31	1
1:A:17:SER:CA	1:A:20:GLN:OE1	0.40	2.69	33	1
1:A:75:ALA:HA	1:A:92:HIS:H	0.40	1.76	32	1
1:A:81:ASN:HD21	1:A:82:GLU:HB3	0.40	1.76	32	1
1:A:75:ALA:CA	1:A:77:ARG:NH1	0.40	2.85	10	1
1:A:75:ALA:HA	1:A:92:HIS:HB2	0.40	1.92	24	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	102/104 (98%)	63±4 (62±4%)	25±3 (25±3%)	13±3 (13±3%)		
All	All	3468/3536 (98%)	2158 (62%)	861 (25%)	449 (13%)		

All 36 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	45	TYR	34
1	A	103	CYS	30
1	A	46	GLU	27
1	A	84	ASN	27
1	A	10	CYS	27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	93	THR	25
1	A	96	SER	23
1	A	94	GLY	20
1	A	43	ASN	20
1	A	44	ASN	19
1	A	41	LYS	19
1	A	68	TYR	17
1	A	13	SER	17
1	A	12	SER	16
1	A	21	ALA	13
1	A	75	ALA	13
1	A	89	VAL	11
1	A	73	PRO	11
1	A	74	GLY	11
1	A	3	ASP	9
1	A	99	ASN	7
1	A	88	GLY	7
1	A	83	ASN	7
1	A	54	SER	6
1	A	34	GLY	6
1	A	35	SER	6
1	A	51	SER	5
1	A	95	ALA	3
1	A	70	GLY	3
1	A	92	HIS	3
1	A	36	ASN	2
1	A	50	PHE	1
1	A	87	ALA	1
1	A	82	GLU	1
1	A	81	ASN	1
1	A	86	LEU	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	85/85 (100%)	61±3 (72±3%)	24±3 (28±3%)	2 21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	2890/2890 (100%)	2085 (72%)	805 (28%)	2 21

All 52 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	2	CYS	34
1	A	15	ASP	34
1	A	45	TYR	34
1	A	49	ASP	34
1	A	83	ASN	34
1	A	28	GLU	34
1	A	81	ASN	34
1	A	91	THR	33
1	A	9	ASN	32
1	A	18	THR	31
1	A	102	GLU	30
1	A	93	THR	30
1	A	99	ASN	27
1	A	84	ASN	26
1	A	90	ILE	24
1	A	86	LEU	24
1	A	3	ASP	20
1	A	41	LYS	19
1	A	12	SER	19
1	A	11	TYR	18
1	A	43	ASN	18
1	A	78	VAL	18
1	A	10	CYS	17
1	A	46	GLU	16
1	A	77	ARG	16
1	A	64	SER	15
1	A	29	ASP	12
1	A	63	SER	10
1	A	25	LYS	10
1	A	68	TYR	9
1	A	42	TYR	8
1	A	24	TYR	8
1	A	44	ASN	7
1	A	98	ASN	7
1	A	76	ASP	6
1	A	72	SER	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	85	GLN	6
1	A	82	GLU	6
1	A	13	SER	6
1	A	5	THR	6
1	A	66	ASP	5
1	A	38	TYR	5
1	A	35	SER	5
1	A	104	THR	2
1	A	96	SER	2
1	A	58	GLU	2
1	A	89	VAL	1
1	A	32	THR	1
1	A	54	SER	1
1	A	33	VAL	1
1	A	20	GLN	1
1	A	53	SER	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided