



Full wwPDB NMR Structure Validation Report i

Mar 5, 2022 – 09:14 AM EST

PDB ID : 2K45
Title : C2A domain of synaptotagmin I solution structure in the FGF-1-C2A binary complex: key component in the fibroblast growthfactor non-classical pathway
Authors : Mohan, S.K.; Yu, C.
Deposited on : 2008-05-28

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the i symbol.

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

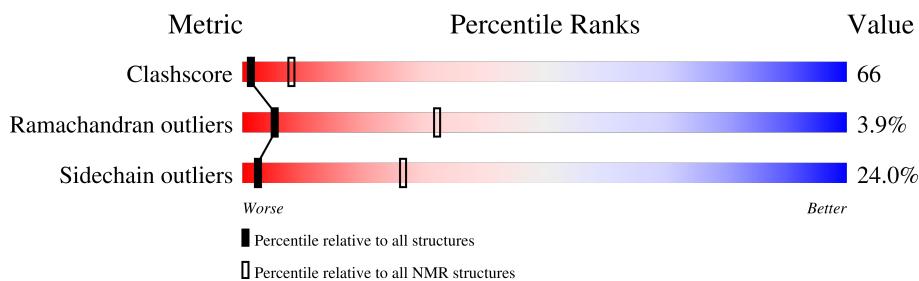
MolProbitY : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.27
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.27

1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

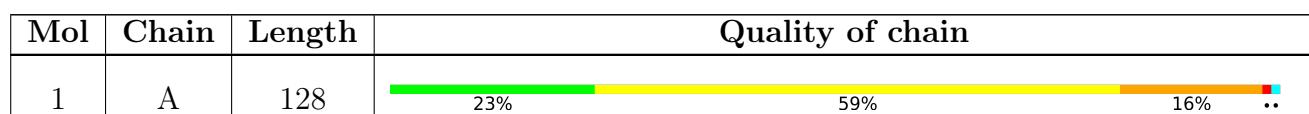
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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 $\leq 5\%$



2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 20 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 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:2-A:128 (127)	0.64	2

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 1 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, 16, 17, 18, 19, 20

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2086 atoms, of which 1042 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Synaptotagmin-1.

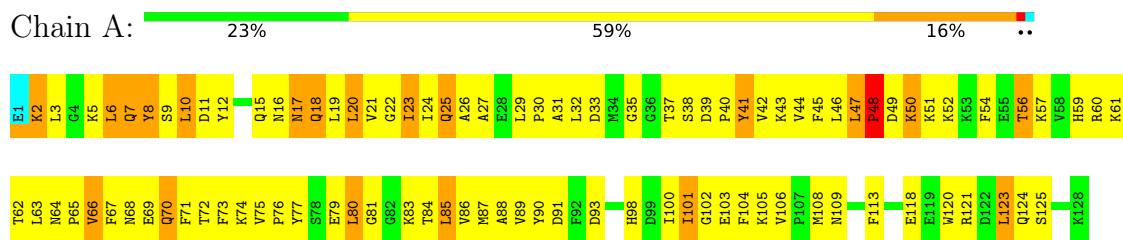
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	128	2086	677	1042	169	195	3	0

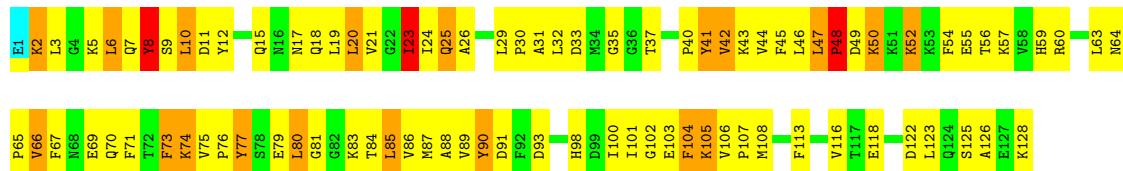
4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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.

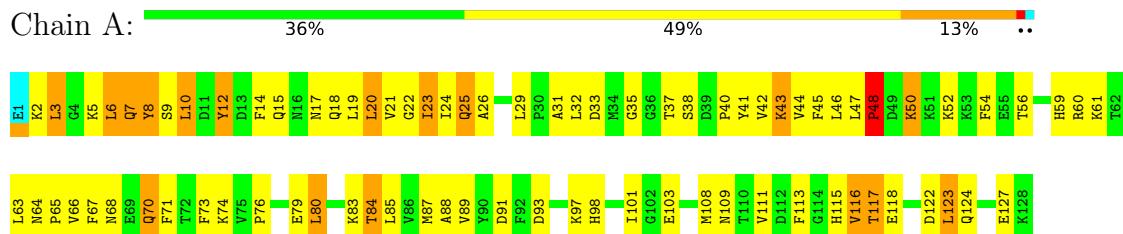
- Molecule 1: Synaptotagmin-1





4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



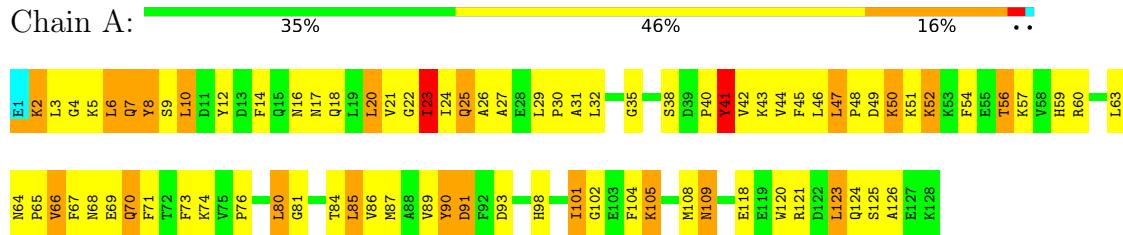
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



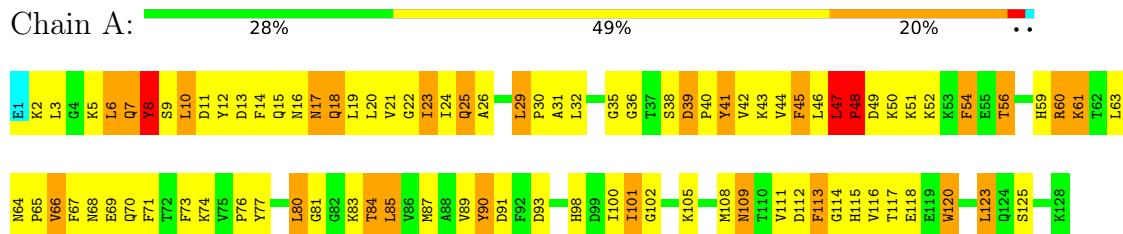
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



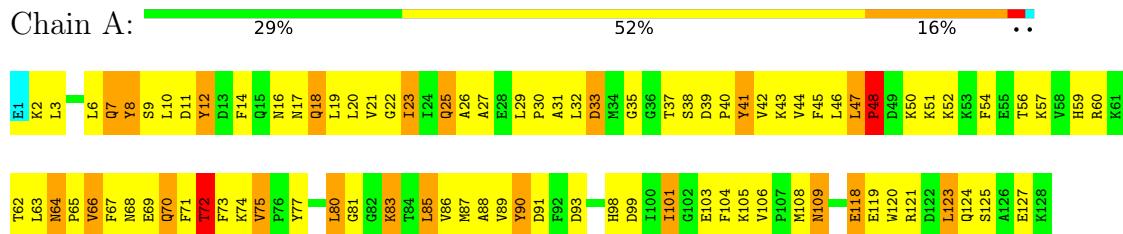
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



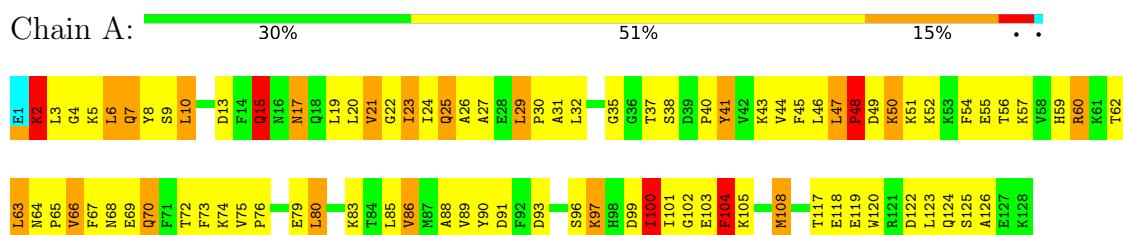
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



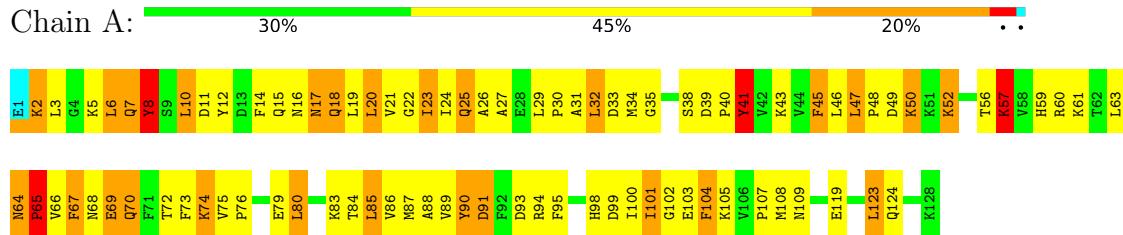
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



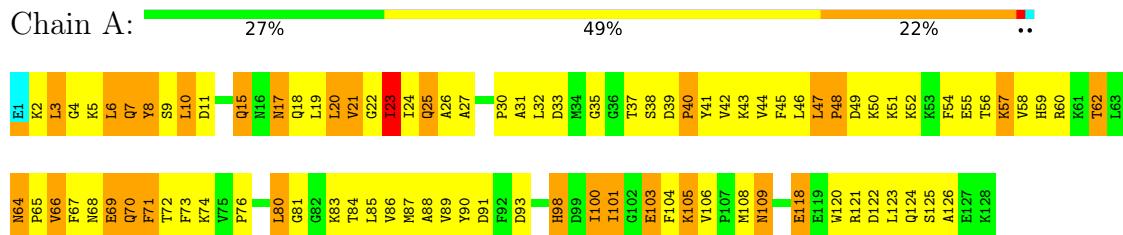
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



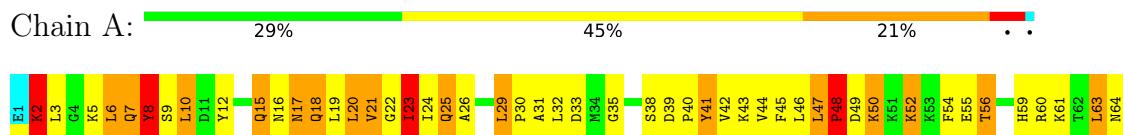
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



4.2.13 Score per residue for model 13

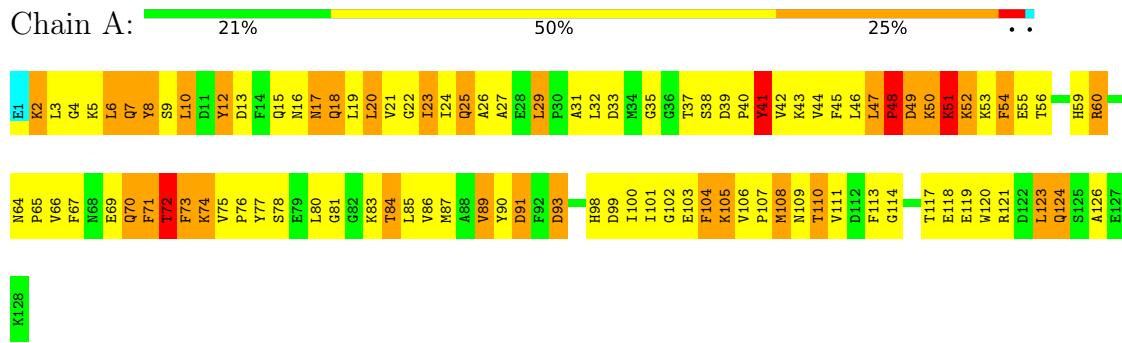
- Molecule 1: Synaptotagmin-1





4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



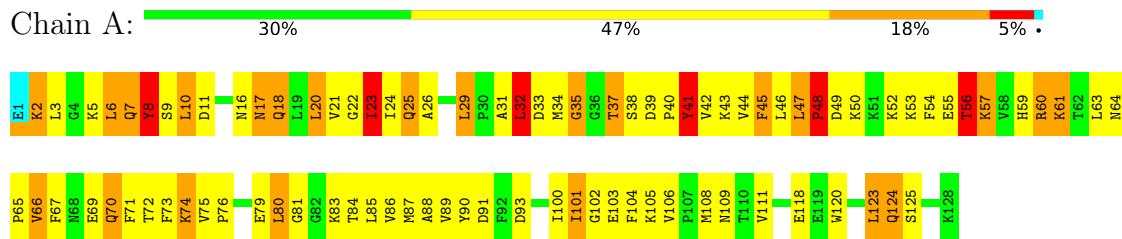
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Synaptotagmin-1



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Synaptotagmin-1

4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Synaptotagmin-1

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Synaptotagmin-1

Chain A: 29% 46% 22%

E1 K2 L3 G4 K5 L6 Q7 Y8 S9 L10 D11 K12 Y12 D13 F14

N17 Q18 L19 L20 V21 G22 I23 I24 A25 A26 A27 E28 L29 P30 A31 L32 D33 M34 G35 G36 T37 S38 D39 P40 M108 Y41 V42 M109 K43 V44 F45 L46 L47 W48 D49 K50 K51 K52 T56 K57 W58 H59 R60 K61 T62 L63

M64 P65 V66 F67 M68 E69 Q70 F71 T72 F73 K74 V75 P76

E79 L80 G81 K83 T84 V85 P86 M87 A88 V89 Y90 D91 F92 D93

H98 I101 G102 E103 F104 V105 V106 P107 M108 M109

F113 E118 E119 D122 L123 Q124 S125 A126

E127 K128

4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Synaptotagmin-1

Chain A: 28% 48% 21% ..

F67 E1
M68 K2
E69 L3
Q70 G4
F71 K5
F72 L6
F73 Q7
K74 Y8
V75 S9
P76 L10
Y77 Q15
N16 N17
Q18 L19
L20 V21
G22 E23
V89 I23
Y90 I24
D91 Q28
F92 A26
D93 A27
R94 E28
F95 L29
S96 P30
K97 A31
H98 L32
D99 D33
I100 M34
I101 G35
G102 G36
E103 T37
S38 V106
D39 P40
P107 Y41
M108 Y42
M109 V42
K43 V116
V44 F45
E118 L46
E119 L47
W120 P48
R121 D49
D122 K50
L123 K51
Q124 K52
S125 K53
A126 F54
E127 E55
R128 T56
K57 K58

T62 L63
N64 P65
V66

5 Refinement protocol and experimental data overview i

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *20 structures for lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	structure solution	1.2
ARIA	refinement	1.2

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.69±0.09	2±1/1060 (0.2± 0.1%)	0.76±0.05	0±0/1428 (0.0± 0.0%)
All	All	0.69	35/21200 (0.2%)	0.76	6/28560 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.5±1.9
All	All	0	69

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	8	TYR	CE2-CZ	-11.01	1.24	1.38	6	9
1	A	77	TYR	CE2-CZ	-10.65	1.24	1.38	11	1
1	A	77	TYR	CE1-CZ	10.29	1.51	1.38	11	1
1	A	8	TYR	CE1-CZ	9.80	1.51	1.38	6	9
1	A	41	TYR	CE1-CZ	9.60	1.51	1.38	6	7
1	A	41	TYR	CE2-CZ	-8.15	1.27	1.38	6	5
1	A	73	PHE	CE1-CZ	7.42	1.51	1.37	11	2
1	A	73	PHE	CE2-CZ	-6.51	1.25	1.37	11	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	121	ARG	N-CA-CB	-8.57	95.18	110.60	20	1
1	A	73	PHE	N-CA-CB	-6.67	98.60	110.60	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	104	PHE	CB-CA-C	-5.29	99.81	110.40	9	1
1	A	48	PRO	CA-N-CD	-5.10	104.36	111.50	3	2
1	A	65	PRO	N-CA-CB	-5.08	97.02	102.60	10	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	15	GLN	Peptide	11
1	A	90	TYR	Sidechain	5
1	A	41	TYR	Sidechain	4
1	A	47	LEU	Peptide	4
1	A	97	LYS	Peptide	3
1	A	57	LYS	Peptide	3
1	A	69	GLU	Peptide	3
1	A	54	PHE	Peptide	3
1	A	23	ILE	Peptide	2
1	A	100	ILE	Peptide	2
1	A	67	PHE	Peptide	2
1	A	105	LYS	Peptide	2
1	A	56	THR	Peptide	2
1	A	116	VAL	Peptide	1
1	A	117	THR	Peptide	1
1	A	73	PHE	Sidechain	1
1	A	72	THR	Peptide	1
1	A	96	SER	Peptide	1
1	A	104	PHE	Peptide	1
1	A	8	TYR	Sidechain	1
1	A	60	ARG	Peptide	1
1	A	65	PRO	Peptide	1
1	A	99	ASP	Peptide	1
1	A	20	LEU	Peptide	1
1	A	71	PHE	Peptide	1
1	A	110	THR	Peptide	1
1	A	32	LEU	Peptide	1
1	A	35	GLY	Peptide	1
1	A	37	THR	Peptide	1
1	A	22	GLY	Peptide	1
1	A	53	LYS	Peptide	1
1	A	55	GLU	Peptide	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	25	GLN	Peptide	1
1	A	26	ALA	Peptide	1
1	A	27	ALA	Peptide	1
1	A	118	GLU	Peptide	1

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	1035	1034	1031	135±19
All	All	20700	20680	20620	2707

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 66.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models Worst	Total
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:HA	1.13	1.20	4	10
1:A:86:VAL:HA	1:A:105:LYS:HB2	1.13	1.15	5	3
1:A:3:LEU:HD12	1:A:124:GLN:HA	1.09	1.18	11	2
1:A:25:GLN:HA	1:A:66:VAL:HB	1.08	1.21	11	2
1:A:80:LEU:HG	1:A:108:MET:HB2	1.08	1.24	11	3
1:A:80:LEU:HG	1:A:108:MET:HB3	1.08	1.23	13	13
1:A:3:LEU:HG	1:A:124:GLN:HA	1.06	1.14	4	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HB3	1.05	1.15	15	6
1:A:19:LEU:HA	1:A:114:GLY:HA2	1.04	1.06	7	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:69:GLU:HG2	1.04	1.22	19	1
1:A:47:LEU:HG	1:A:48:PRO:HD2	1.04	1.26	17	5
1:A:44:VAL:HB	1:A:53:LYS:HD3	1.04	1.18	15	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:23:ILE:HB	1.04	1.25	11	3
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:HB	1.02	1.29	6	1
1:A:85:LEU:HG	1:A:105:LYS:HG2	1.02	1.29	12	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:HB	1.01	1.25	10	3
1:A:22:GLY:HA3	1:A:70:GLN:CA	1.01	1.85	12	2
1:A:22:GLY:CA	1:A:70:GLN:HA	1.00	1.85	12	8
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:GLN:HG3	1.00	1.28	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:HD2	0.99	1.30	10	4
1:A:10:LEU:HB3	1:A:21:VAL:HG12	0.98	1.35	6	3
1:A:9:SER:HB3	1:A:23:ILE:HG13	0.98	1.29	6	1
1:A:86:VAL:HB	1:A:104:PHE:HB2	0.98	1.36	13	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:50:LYS:HA	0.97	1.37	17	6
1:A:25:GLN:HB2	1:A:66:VAL:HB	0.97	1.30	9	4
1:A:17:ASN:HD22	1:A:76:PRO:HB3	0.96	1.19	10	1
1:A:23:ILE:HG13	1:A:70:GLN:HB2	0.96	1.36	20	1
1:A:46:LEU:HD13	1:A:52:LYS:HG3	0.96	1.37	8	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:HG23	0.95	1.39	1	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HB2	0.95	1.37	17	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:72:THR:HB	0.95	1.36	17	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:102:GLY:HA3	0.95	1.39	5	2
1:A:52:LYS:HE3	1:A:74:LYS:H	0.93	1.22	13	3
1:A:3:LEU:HD22	1:A:102:GLY:HA3	0.93	1.41	15	6
1:A:90:TYR:HA	1:A:100:ILE:HB	0.93	1.39	11	2
1:A:23:ILE:O	1:A:68:ASN:HA	0.93	1.64	6	13
1:A:49:ASP:HB3	1:A:83:LYS:HG3	0.92	1.37	15	2
1:A:50:LYS:HE3	1:A:73:PHE:HB2	0.92	1.41	15	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:54:PHE:HB3	0.92	1.41	6	4
1:A:20:LEU:HA	1:A:72:THR:CB	0.92	1.93	17	1
1:A:25:GLN:HB3	1:A:66:VAL:HB	0.91	1.36	19	10
1:A:45:PHE:HB3	1:A:50:LYS:HE3	0.91	1.42	7	3
1:A:25:GLN:HB3	1:A:66:VAL:HA	0.91	1.43	17	12
1:A:3:LEU:HB3	1:A:29:LEU:HD23	0.91	1.43	1	1
1:A:25:GLN:CA	1:A:66:VAL:HB	0.90	1.94	11	2
1:A:50:LYS:HB2	1:A:52:LYS:HE2	0.90	1.42	1	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:118:GLU:HB3	0.90	1.39	3	3
1:A:32:LEU:HD22	1:A:91:ASP:HB3	0.90	1.41	9	2
1:A:10:LEU:HA	1:A:21:VAL:HB	0.89	1.42	12	4
1:A:57:LYS:HE2	1:A:57:LYS:H	0.89	1.25	10	1
1:A:3:LEU:HG	1:A:29:LEU:HD23	0.89	1.43	19	1
1:A:3:LEU:HA	1:A:123:LEU:O	0.89	1.68	12	4
1:A:45:PHE:HB2	1:A:50:LYS:HD3	0.89	1.44	20	4
1:A:8:TYR:CD2	1:A:23:ILE:HA	0.89	2.02	13	3
1:A:8:TYR:CA	1:A:23:ILE:HB	0.88	1.95	3	2
1:A:3:LEU:HD12	1:A:30:PRO:HD2	0.88	1.45	15	4
1:A:44:VAL:HB	1:A:53:LYS:HB2	0.88	1.45	14	1
1:A:51:LYS:HB2	1:A:75:VAL:HB	0.88	1.43	17	1
1:A:25:GLN:HA	1:A:66:VAL:CB	0.88	1.98	11	2
1:A:47:LEU:HB2	1:A:48:PRO:HD2	0.88	1.44	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ASN:HB3	1:A:76:PRO:HG3	0.88	1.44	11	12
1:A:56:THR:HG22	1:A:69:GLU:HG3	0.87	1.46	13	1
1:A:86:VAL:HA	1:A:105:LYS:CB	0.87	1.99	12	3
1:A:56:THR:HG23	1:A:69:GLU:HG3	0.87	1.43	9	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:114:GLY:HA2	0.87	1.99	7	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:48:PRO:HD2	0.86	1.47	3	6
1:A:32:LEU:HD11	1:A:99:ASP:HB3	0.86	1.45	8	3
1:A:12:TYR:HA	1:A:114:GLY:N	0.86	1.84	7	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:114:GLY:CA	0.86	1.99	7	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:108:MET:HB3	0.86	1.44	7	1
1:A:41:TYR:HE1	1:A:43:LYS:HG2	0.86	1.30	5	3
1:A:7:GLN:HB2	1:A:120:TRP:CE3	0.86	2.05	9	5
1:A:103:GLU:HB2	1:A:123:LEU:HD12	0.86	1.43	13	1
1:A:2:LYS:HB2	1:A:30:PRO:HD3	0.86	1.48	4	2
1:A:22:GLY:HA3	1:A:70:GLN:HA	0.86	0.93	17	2
1:A:3:LEU:HD23	1:A:124:GLN:HA	0.85	1.45	12	1
1:A:3:LEU:O	1:A:123:LEU:HB3	0.85	1.69	20	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:21:VAL:HG13	0.85	1.49	16	2
1:A:12:TYR:HA	1:A:114:GLY:CA	0.85	2.01	7	1
1:A:38:SER:HB3	1:A:63:LEU:HB2	0.85	1.47	1	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:23:ILE:CB	0.85	1.97	3	2
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:HE3	0.84	1.50	12	2
1:A:3:LEU:HB3	1:A:123:LEU:O	0.84	1.72	9	9
1:A:6:LEU:HG	1:A:23:ILE:HG21	0.84	1.47	14	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:HA	0.84	2.02	4	15
1:A:27:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	0.84	1.30	19	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:59:HIS:HB2	0.84	1.48	12	6
1:A:42:VAL:HG22	1:A:56:THR:HG23	0.83	1.50	11	2
1:A:7:GLN:HB3	1:A:120:TRP:CE3	0.83	2.08	17	10
1:A:46:LEU:HB2	1:A:52:LYS:HD2	0.83	1.47	16	1
1:A:93:ASP:H	1:A:98:HIS:HB2	0.83	1.33	20	1
1:A:52:LYS:HE3	1:A:74:LYS:N	0.83	1.89	13	4
1:A:93:ASP:HB2	1:A:98:HIS:HA	0.82	1.46	10	2
1:A:10:LEU:HA	1:A:21:VAL:CB	0.82	2.04	9	4
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:HD22	0.82	1.51	19	7
1:A:102:GLY:HA2	1:A:126:ALA:H	0.82	1.35	2	4
1:A:51:LYS:HA	1:A:74:LYS:H	0.82	1.35	14	1
1:A:102:GLY:HA2	1:A:125:SER:HA	0.82	1.50	4	3
1:A:9:SER:O	1:A:21:VAL:HG21	0.82	1.75	13	2
1:A:23:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG13	0.81	1.52	12	2
1:A:10:LEU:HB3	1:A:21:VAL:HA	0.81	1.51	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:ILE:HA	1:A:68:ASN:HA	0.81	1.53	7	6
1:A:86:VAL:HA	1:A:104:PHE:CD2	0.81	2.11	9	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:23:ILE:HB	0.81	2.10	12	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:HB2	0.80	1.50	7	1
1:A:119:GLU:HG3	1:A:121:ARG:HG2	0.80	1.54	8	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	0.80	1.50	1	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:118:GLU:HG2	0.80	1.51	7	4
1:A:108:MET:HG2	1:A:109:ASN:ND2	0.80	1.92	11	3
1:A:91:ASP:HB2	1:A:101:ILE:HG23	0.80	1.53	12	4
1:A:20:LEU:HD22	1:A:70:GLN:NE2	0.80	1.92	4	2
1:A:25:GLN:HB2	1:A:66:VAL:CB	0.80	2.07	9	3
1:A:19:LEU:O	1:A:73:PHE:HB3	0.80	1.77	14	1
1:A:47:LEU:CG	1:A:48:PRO:HD2	0.80	2.06	17	7
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:HA	0.80	1.52	5	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:25:GLN:O	0.79	1.77	4	17
1:A:21:VAL:O	1:A:70:GLN:HB3	0.79	1.77	10	3
1:A:75:VAL:HG21	1:A:83:LYS:HG2	0.79	1.52	15	1
1:A:25:GLN:HB2	1:A:65:PRO:O	0.79	1.78	20	5
1:A:85:LEU:HB3	1:A:105:LYS:HG2	0.79	1.54	6	1
1:A:27:ALA:O	1:A:29:LEU:HG	0.79	1.77	19	1
1:A:86:VAL:HB	1:A:104:PHE:CB	0.79	2.08	13	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:55:GLU:HB2	0.79	1.53	18	1
1:A:41:TYR:HH	1:A:54:PHE:HE2	0.79	0.80	6	1
1:A:32:LEU:HG	1:A:101:ILE:HG22	0.78	1.56	11	1
1:A:3:LEU:HG	1:A:102:GLY:HA3	0.78	1.55	14	4
1:A:7:GLN:HE21	1:A:7:GLN:N	0.78	1.75	19	2
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:LYS:HG3	0.78	1.52	15	2
1:A:31:ALA:HA	1:A:38:SER:HB3	0.78	1.54	18	11
1:A:85:LEU:O	1:A:105:LYS:HB3	0.78	1.77	12	3
1:A:85:LEU:HG	1:A:105:LYS:CG	0.78	2.08	12	1
1:A:44:VAL:HG22	1:A:87:MET:HG3	0.78	1.53	14	2
1:A:105:LYS:HE3	1:A:105:LYS:HA	0.78	1.56	6	2
1:A:93:ASP:OD2	1:A:98:HIS:HA	0.77	1.79	3	6
1:A:41:TYR:HB3	1:A:90:TYR:O	0.77	1.79	9	2
1:A:50:LYS:HD2	1:A:52:LYS:HB3	0.77	1.57	17	1
1:A:3:LEU:HD12	1:A:123:LEU:HB3	0.77	1.57	14	3
1:A:44:VAL:HG23	1:A:87:MET:HG2	0.77	1.55	4	1
1:A:7:GLN:O	1:A:24:ILE:HG22	0.77	1.78	5	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:80:LEU:HD22	0.77	1.57	14	1
1:A:54:PHE:CD2	1:A:71:PHE:HB2	0.77	2.14	5	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:HD21	0.77	1.56	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:VAL:CA	1:A:105:LYS:HB2	0.77	2.05	5	1
1:A:18:GLN:HB2	1:A:73:PHE:CB	0.77	2.10	14	2
1:A:3:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HB3	0.76	1.56	3	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:102:GLY:CA	0.76	2.09	10	2
1:A:85:LEU:HD22	1:A:108:MET:SD	0.76	2.18	18	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:73:PHE:CE2	0.76	2.15	1	1
1:A:3:LEU:HG	1:A:124:GLN:CA	0.76	2.03	4	1
1:A:23:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HG13	0.76	2.10	6	2
1:A:45:PHE:HB3	1:A:50:LYS:HD3	0.76	1.56	9	3
1:A:89:VAL:O	1:A:101:ILE:HB	0.76	1.81	9	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:111:VAL:HG23	0.76	1.55	14	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:70:GLN:HA	0.76	1.55	8	11
1:A:108:MET:O	1:A:111:VAL:HB	0.76	1.79	14	1
1:A:17:ASN:CB	1:A:76:PRO:HG3	0.76	2.11	11	4
1:A:31:ALA:HB1	1:A:37:THR:HA	0.76	1.56	16	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:HD2	0.76	1.40	12	3
1:A:23:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HG12	0.75	2.11	3	1
1:A:52:LYS:HD3	1:A:73:PHE:HD1	0.75	1.41	12	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:CD2	0.75	2.12	1	5
1:A:86:VAL:HB	1:A:104:PHE:CE1	0.75	2.16	9	1
1:A:32:LEU:HB3	1:A:93:ASP:HB3	0.75	1.56	19	4
1:A:25:GLN:HB2	1:A:66:VAL:HA	0.75	1.58	20	4
1:A:7:GLN:HB2	1:A:120:TRP:HE3	0.75	1.41	9	2
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:GLN:HB2	0.75	1.55	13	2
1:A:25:GLN:C	1:A:66:VAL:HB	0.75	2.01	10	2
1:A:25:GLN:HB3	1:A:66:VAL:CB	0.75	2.11	19	10
1:A:9:SER:HA	1:A:117:THR:O	0.75	1.81	7	5
1:A:56:THR:HG22	1:A:69:GLU:HG2	0.75	1.57	2	2
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:CB	0.75	2.09	10	5
1:A:49:ASP:HA	1:A:83:LYS:HE2	0.74	1.59	1	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:123:LEU:HD22	0.74	1.58	5	3
1:A:3:LEU:HD13	1:A:29:LEU:HD22	0.74	1.57	14	2
1:A:11:ASP:HB2	1:A:116:VAL:HG12	0.74	1.57	17	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:HG22	0.74	1.58	9	5
1:A:4:GLY:HA3	1:A:27:ALA:O	0.74	1.81	12	5
1:A:31:ALA:HB2	1:A:63:LEU:HD21	0.74	1.60	16	2
1:A:50:LYS:CE	1:A:73:PHE:HB2	0.74	2.13	15	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HG3	0.74	1.58	13	7
1:A:20:LEU:HG	1:A:70:GLN:NE2	0.74	1.98	15	4
1:A:3:LEU:CD2	1:A:102:GLY:HA3	0.74	2.11	9	2
1:A:4:GLY:CA	1:A:28:GLU:HB2	0.74	2.13	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:VAL:O	1:A:53:LYS:HB2	0.74	1.81	15	1
1:A:42:VAL:HA	1:A:56:THR:OG1	0.74	1.82	12	1
1:A:25:GLN:HB3	1:A:66:VAL:CA	0.74	2.13	17	10
1:A:31:ALA:HB2	1:A:63:LEU:HD11	0.74	1.60	11	9
1:A:12:TYR:HA	1:A:114:GLY:H	0.74	1.40	7	1
1:A:26:ALA:N	1:A:66:VAL:HB	0.74	1.97	10	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:18:GLN:O	0.74	1.82	5	1
1:A:53:LYS:HE3	1:A:55:GLU:HA	0.73	1.57	14	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:HD2	0.73	1.61	7	2
1:A:25:GLN:C	1:A:25:GLN:HE21	0.73	1.87	10	1
1:A:104:PHE:CE2	1:A:121:ARG:HD2	0.73	2.19	15	1
1:A:50:LYS:HE3	1:A:73:PHE:CB	0.73	2.13	15	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:23:ILE:HG12	0.73	1.60	20	1
1:A:74:LYS:HA	1:A:74:LYS:HE2	0.73	1.60	8	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:124:GLN:CA	0.73	2.14	12	1
1:A:27:ALA:N	1:A:65:PRO:HD2	0.73	1.98	19	1
1:A:3:LEU:HG	1:A:125:SER:H	0.73	1.43	8	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:102:GLY:CA	0.72	2.12	15	5
1:A:85:LEU:HD22	1:A:108:MET:HG2	0.72	1.61	12	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:85:LEU:HA	0.72	1.61	17	4
1:A:41:TYR:OH	1:A:54:PHE:HE2	0.72	1.63	6	1
1:A:3:LEU:HD21	1:A:101:ILE:HB	0.72	1.61	16	2
1:A:85:LEU:HD21	1:A:106:VAL:HB	0.72	1.61	13	2
1:A:108:MET:N	1:A:108:MET:SD	0.72	2.63	1	4
1:A:5:LYS:HE3	1:A:122:ASP:HB3	0.72	1.62	17	4
1:A:56:THR:HA	1:A:69:GLU:OE1	0.72	1.85	11	2
1:A:52:LYS:HD3	1:A:73:PHE:HA	0.72	1.60	9	1
1:A:105:LYS:HG3	1:A:121:ARG:HG2	0.72	1.61	13	1
1:A:44:VAL:HG21	1:A:71:PHE:HB3	0.72	1.61	6	3
1:A:73:PHE:CE2	1:A:85:LEU:HD22	0.72	2.19	13	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:75:VAL:HB	0.72	2.19	1	3
1:A:6:LEU:HD11	1:A:23:ILE:HG21	0.71	1.62	7	5
1:A:3:LEU:CG	1:A:124:GLN:HA	0.71	2.05	4	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:38:SER:HB2	0.71	1.61	16	1
1:A:90:TYR:HD1	1:A:100:ILE:HG12	0.71	1.43	2	3
1:A:79:GLU:HG3	1:A:83:LYS:HE3	0.71	1.62	16	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:23:ILE:HG13	0.71	1.61	18	4
1:A:103:GLU:HA	1:A:124:GLN:H	0.71	1.46	13	1
1:A:85:LEU:HB3	1:A:105:LYS:CG	0.71	2.15	6	1
1:A:25:GLN:HA	1:A:66:VAL:CA	0.71	2.14	10	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:84:THR:HG23	0.71	1.61	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:HD2	1:A:23:ILE:HA	0.71	1.40	17	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG13	0.71	1.60	15	1
1:A:32:LEU:HB2	1:A:91:ASP:OD2	0.71	1.86	9	9
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:N	0.71	2.01	16	1
1:A:52:LYS:O	1:A:52:LYS:HD3	0.71	1.86	15	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:23:ILE:HB	0.71	1.63	13	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:53:LYS:HE2	0.71	1.60	17	1
1:A:23:ILE:HG22	1:A:24:ILE:H	0.70	1.44	1	4
1:A:3:LEU:CD2	1:A:123:LEU:HB3	0.70	2.13	2	5
1:A:80:LEU:CD2	1:A:108:MET:HB3	0.70	2.15	7	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:123:LEU:CB	0.70	2.13	9	4
1:A:18:GLN:HB2	1:A:73:PHE:HB2	0.70	1.61	14	2
1:A:20:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HE21	0.70	1.44	5	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:63:LEU:HD21	0.70	1.60	11	4
1:A:43:LYS:HB2	1:A:88:ALA:HB3	0.70	1.63	11	5
1:A:56:THR:HG23	1:A:71:PHE:HE1	0.70	1.47	6	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:91:ASP:HB3	0.70	1.63	10	1
1:A:108:MET:HG2	1:A:109:ASN:HD22	0.70	1.43	11	1
1:A:43:LYS:HE3	1:A:45:PHE:HZ	0.70	1.45	12	2
1:A:3:LEU:CD2	1:A:123:LEU:HB2	0.70	2.16	17	1
1:A:104:PHE:CD2	1:A:105:LYS:HA	0.69	2.22	9	1
1:A:53:LYS:HD2	1:A:72:THR:HG22	0.69	1.63	17	1
1:A:89:VAL:HG22	1:A:101:ILE:HD11	0.69	1.64	7	3
1:A:54:PHE:HD2	1:A:72:THR:HG21	0.69	1.46	14	1
1:A:88:ALA:HB1	1:A:90:TYR:CE1	0.69	2.21	17	1
1:A:8:TYR:HE1	1:A:119:GLU:HG3	0.69	1.48	1	2
1:A:25:GLN:CB	1:A:66:VAL:HA	0.69	2.17	19	7
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:HG	0.69	1.47	7	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:108:MET:HE1	0.69	1.64	15	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:19:LEU:HD23	0.69	1.63	2	3
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:CA	0.69	2.11	4	4
1:A:44:VAL:HB	1:A:54:PHE:CB	0.69	2.16	5	4
1:A:30:PRO:HD2	1:A:101:ILE:HB	0.69	1.65	6	3
1:A:86:VAL:CB	1:A:104:PHE:HB2	0.69	2.16	13	1
1:A:20:LEU:HB3	1:A:71:PHE:HB2	0.69	1.65	19	1
1:A:23:ILE:HG12	1:A:69:GLU:HB2	0.69	1.63	19	1
1:A:103:GLU:O	1:A:124:GLN:HG2	0.69	1.87	12	6
1:A:91:ASP:O	1:A:98:HIS:HB3	0.69	1.87	20	5
1:A:21:VAL:CG1	1:A:71:PHE:HB2	0.69	2.18	4	1
1:A:44:VAL:HG22	1:A:87:MET:HB2	0.69	1.64	5	1
1:A:9:SER:CB	1:A:118:GLU:HB3	0.69	2.18	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:HB2	1:A:20:LEU:N	0.68	2.03	5	1
1:A:89:VAL:HG23	1:A:103:GLU:HB3	0.68	1.63	13	1
1:A:21:VAL:HB	1:A:71:PHE:HB3	0.68	1.65	1	2
1:A:19:LEU:O	1:A:72:THR:HB	0.68	1.88	17	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:21:VAL:HA	0.68	1.64	5	1
1:A:57:LYS:HB2	1:A:59:HIS:CD2	0.68	2.24	12	1
1:A:18:GLN:HB2	1:A:73:PHE:CG	0.68	2.24	14	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:101:ILE:HG22	0.68	1.63	9	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:23:ILE:CG2	0.68	2.19	8	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:70:GLN:HE22	0.68	1.47	12	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:23:ILE:HG13	0.68	1.65	14	1
1:A:51:LYS:O	1:A:74:LYS:HB2	0.68	1.89	6	5
1:A:25:GLN:HG3	1:A:66:VAL:HG12	0.68	1.63	6	1
1:A:79:GLU:O	1:A:83:LYS:HD3	0.68	1.89	1	5
1:A:51:LYS:HB2	1:A:75:VAL:CB	0.68	2.19	17	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:74:LYS:HD2	0.68	1.65	19	1
1:A:23:ILE:HG22	1:A:24:ILE:N	0.68	2.04	11	4
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:HB2	0.68	1.48	8	2
1:A:49:ASP:O	1:A:50:LYS:HB3	0.67	1.89	15	2
1:A:6:LEU:HA	1:A:26:ALA:HB3	0.67	1.65	19	1
1:A:21:VAL:C	1:A:71:PHE:HA	0.67	2.09	19	1
1:A:92:PHE:HA	1:A:98:HIS:H	0.67	1.50	20	1
1:A:23:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	0.67	1.66	11	2
1:A:3:LEU:HD11	1:A:29:LEU:HB3	0.67	1.66	7	3
1:A:20:LEU:HB3	1:A:70:GLN:NE2	0.67	2.04	5	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:74:LYS:HG2	0.67	2.04	20	1
1:A:17:ASN:O	1:A:75:VAL:HB	0.67	1.89	5	1
1:A:46:LEU:CB	1:A:51:LYS:H	0.67	2.03	14	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:54:PHE:CD2	0.67	2.25	17	1
1:A:87:MET:HB3	1:A:105:LYS:HD2	0.67	1.67	6	2
1:A:18:GLN:HE21	1:A:73:PHE:HB3	0.67	1.50	8	2
1:A:19:LEU:O	1:A:73:PHE:HA	0.67	1.90	8	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:70:GLN:O	0.67	1.90	20	3
1:A:23:ILE:HB	1:A:67:PHE:HE1	0.67	1.49	14	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:73:PHE:HA	0.67	2.04	5	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:80:LEU:HD12	0.67	1.65	19	2
1:A:26:ALA:HB1	1:A:29:LEU:HD11	0.67	1.65	7	5
1:A:6:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HD21	0.67	1.63	12	2
1:A:17:ASN:ND2	1:A:76:PRO:HB3	0.66	2.02	10	2
1:A:44:VAL:H	1:A:54:PHE:CB	0.66	2.03	11	1
1:A:105:LYS:HB2	1:A:106:VAL:HG22	0.66	1.66	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ASN:CB	1:A:76:PRO:HA	0.66	2.20	19	1
1:A:21:VAL:O	1:A:70:GLN:HA	0.66	1.91	11	2
1:A:41:TYR:CE1	1:A:43:LYS:HG2	0.66	2.22	5	5
1:A:44:VAL:HB	1:A:54:PHE:N	0.66	2.05	17	1
1:A:29:LEU:O	1:A:63:LEU:HD22	0.66	1.91	8	6
1:A:20:LEU:HA	1:A:72:THR:O	0.66	1.89	8	1
1:A:38:SER:HB2	1:A:91:ASP:OD2	0.66	1.91	8	3
1:A:20:LEU:O	1:A:21:VAL:HG23	0.66	1.91	13	4
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:HB	0.66	2.21	12	1
1:A:10:LEU:CA	1:A:21:VAL:HB	0.66	2.20	17	2
1:A:89:VAL:CG2	1:A:123:LEU:HG	0.66	2.21	17	2
1:A:50:LYS:HZ1	1:A:71:PHE:HE1	0.66	1.31	1	1
1:A:77:TYR:O	1:A:80:LEU:HB3	0.66	1.91	7	4
1:A:8:TYR:CG	1:A:10:LEU:HD11	0.66	2.26	3	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:24:ILE:HG13	0.66	2.26	15	6
1:A:10:LEU:CD1	1:A:21:VAL:HG13	0.66	2.21	11	4
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:GLN:CB	0.66	2.20	12	4
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:ILE:HG12	0.66	2.25	9	2
1:A:51:LYS:HG2	1:A:73:PHE:HA	0.66	1.66	14	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:10:LEU:N	0.66	2.06	10	7
1:A:32:LEU:HD12	1:A:93:ASP:OD2	0.66	1.91	18	5
1:A:6:LEU:HD12	1:A:8:TYR:CE1	0.66	2.25	6	1
1:A:25:GLN:HG2	1:A:66:VAL:HG12	0.66	1.66	13	1
1:A:10:LEU:CB	1:A:21:VAL:HA	0.66	2.20	5	2
1:A:20:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HB2	0.66	1.68	14	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:73:PHE:HB3	0.65	2.06	8	2
1:A:3:LEU:HG	1:A:29:LEU:HD22	0.65	1.67	2	3
1:A:56:THR:HG22	1:A:69:GLU:CG	0.65	2.20	13	3
1:A:86:VAL:HB	1:A:104:PHE:CZ	0.65	2.25	9	1
1:A:104:PHE:HD2	1:A:106:VAL:HG22	0.65	1.50	1	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:72:THR:O	0.65	1.91	5	1
1:A:56:THR:HG23	1:A:71:PHE:CE1	0.65	2.24	6	2
1:A:18:GLN:HE21	1:A:73:PHE:CB	0.65	2.04	14	2
1:A:86:VAL:HA	1:A:105:LYS:HB3	0.65	1.67	12	1
1:A:90:TYR:CD1	1:A:100:ILE:HG22	0.65	2.26	12	1
1:A:87:MET:HB3	1:A:104:PHE:HB3	0.65	1.67	14	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HB3	0.65	1.68	5	1
1:A:12:TYR:CA	1:A:114:GLY:H	0.65	2.05	7	1
1:A:23:ILE:H	1:A:23:ILE:HD13	0.65	1.52	4	7
1:A:85:LEU:HD23	1:A:106:VAL:O	0.65	1.90	8	5
1:A:6:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HD13	0.65	1.68	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LEU:HD22	1:A:52:LYS:HE2	0.65	1.68	11	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:105:LYS:HG3	0.65	1.68	16	3
1:A:9:SER:HB2	1:A:118:GLU:HB3	0.65	1.68	17	1
1:A:6:LEU:HB2	1:A:123:LEU:HD23	0.65	1.67	20	1
1:A:3:LEU:O	1:A:29:LEU:HD23	0.65	1.91	6	4
1:A:47:LEU:HB3	1:A:84:THR:HB	0.65	1.66	5	1
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:PHE:CE1	0.65	2.27	13	1
1:A:6:LEU:C	1:A:121:ARG:HB2	0.65	2.12	20	1
1:A:7:GLN:HB3	1:A:120:TRP:HE3	0.65	1.47	18	6
1:A:46:LEU:HD13	1:A:52:LYS:HG2	0.65	1.69	11	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:CE	0.65	2.20	12	3
1:A:92:PHE:HB2	1:A:97:LYS:HA	0.65	1.68	20	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:54:PHE:HB3	0.65	2.20	2	1
1:A:103:GLU:HG2	1:A:126:ALA:HB2	0.65	1.68	20	4
1:A:9:SER:HB3	1:A:23:ILE:CG1	0.65	2.17	6	1
1:A:3:LEU:HB2	1:A:123:LEU:HB3	0.65	1.68	10	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:51:LYS:HD2	0.65	1.69	14	1
1:A:43:LYS:HA	1:A:54:PHE:CD2	0.64	2.27	6	1
1:A:29:LEU:HB2	1:A:63:LEU:HD12	0.64	1.68	16	1
1:A:53:LYS:CB	1:A:72:THR:HA	0.64	2.23	17	1
1:A:53:LYS:HA	1:A:73:PHE:CD2	0.64	2.26	17	1
1:A:91:ASP:OD1	1:A:101:ILE:HD11	0.64	1.92	9	1
1:A:38:SER:HB2	1:A:91:ASP:OD1	0.64	1.93	9	10
1:A:46:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HB3	0.64	1.68	11	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:50:LYS:CA	0.64	2.23	14	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:18:GLN:HG2	0.64	1.91	17	3
1:A:90:TYR:OH	1:A:98:HIS:HB2	0.64	1.91	10	4
1:A:75:VAL:HG21	1:A:83:LYS:HG3	0.64	1.67	16	2
1:A:26:ALA:O	1:A:65:PRO:HD2	0.64	1.93	13	13
1:A:87:MET:O	1:A:104:PHE:HA	0.64	1.91	13	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:CB	0.64	2.18	6	1
1:A:12:TYR:HB2	1:A:19:LEU:HD23	0.64	1.70	14	1
1:A:3:LEU:CD1	1:A:29:LEU:HB3	0.64	2.22	7	3
1:A:67:PHE:CD1	1:A:69:GLU:HB2	0.64	2.27	8	6
1:A:94:ARG:H	1:A:98:HIS:HB2	0.64	1.53	20	1
1:A:41:TYR:CZ	1:A:43:LYS:HG2	0.64	2.28	4	2
1:A:5:LYS:O	1:A:26:ALA:HA	0.63	1.92	15	12
1:A:6:LEU:HB2	1:A:123:LEU:CD2	0.63	2.24	5	3
1:A:42:VAL:HG22	1:A:89:VAL:HG12	0.63	1.70	5	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:97:LYS:HA	0.63	1.93	17	2
1:A:3:LEU:HD11	1:A:101:ILE:CG2	0.63	2.23	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ILE:HD11	1:A:126:ALA:HB3	0.63	1.70	12	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:70:GLN:H	0.63	1.54	10	1
1:A:3:LEU:HB3	1:A:123:LEU:C	0.63	2.14	15	6
1:A:24:ILE:HB	1:A:25:GLN:HG3	0.63	1.71	3	3
1:A:69:GLU:O	1:A:69:GLU:HG3	0.63	1.92	18	1
1:A:30:PRO:HG2	1:A:101:ILE:HB	0.63	1.68	20	1
1:A:80:LEU:HA	1:A:83:LYS:NZ	0.63	2.08	8	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:74:LYS:H	0.63	1.52	3	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:52:LYS:HE2	0.63	1.68	11	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:55:GLU:HA	0.63	1.69	12	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:CG2	0.63	2.21	1	3
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:ARG:HA	0.63	1.93	16	4
1:A:52:LYS:CE	1:A:74:LYS:HB2	0.63	2.23	14	2
1:A:10:LEU:CD1	1:A:21:VAL:HG23	0.63	2.24	4	1
1:A:2:LYS:HG2	1:A:2:LYS:O	0.63	1.93	5	3
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:ILE:HG13	0.63	1.71	10	1
1:A:44:VAL:HG22	1:A:87:MET:HG2	0.63	1.69	17	1
1:A:21:VAL:HB	1:A:70:GLN:HE21	0.63	1.53	20	1
1:A:7:GLN:HE22	1:A:25:GLN:NE2	0.63	1.92	11	7
1:A:23:ILE:HG22	1:A:24:ILE:CG1	0.63	2.23	12	1
1:A:41:TYR:HB2	1:A:57:LYS:HA	0.63	1.71	16	2
1:A:17:ASN:O	1:A:76:PRO:HA	0.63	1.93	19	1
1:A:9:SER:C	1:A:10:LEU:HD23	0.62	2.15	16	6
1:A:40:PRO:CG	1:A:65:PRO:HG3	0.62	2.24	14	11
1:A:72:THR:HG22	1:A:74:LYS:HG2	0.62	1.70	11	2
1:A:12:TYR:HB3	1:A:114:GLY:O	0.62	1.94	14	1
1:A:105:LYS:HA	1:A:106:VAL:HG13	0.62	1.70	18	1
1:A:43:LYS:HG3	1:A:88:ALA:HB3	0.62	1.69	19	4
1:A:3:LEU:HD11	1:A:101:ILE:HG13	0.62	1.71	6	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:HG13	0.62	1.70	5	2
1:A:45:PHE:HD1	1:A:50:LYS:HE3	0.62	1.54	6	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:21:VAL:HG23	0.62	1.72	17	2
1:A:89:VAL:HB	1:A:102:GLY:O	0.62	1.94	13	1
1:A:103:GLU:CB	1:A:123:LEU:HD12	0.62	2.24	13	1
1:A:90:TYR:CD1	1:A:100:ILE:HG12	0.62	2.28	2	3
1:A:100:ILE:HD12	1:A:128:LYS:HB2	0.62	1.72	2	1
1:A:89:VAL:O	1:A:101:ILE:HG13	0.62	1.94	17	4
1:A:9:SER:CB	1:A:118:GLU:HG2	0.62	2.24	7	2
1:A:3:LEU:HD21	1:A:123:LEU:CB	0.62	2.24	3	1
1:A:12:TYR:CG	1:A:20:LEU:HD23	0.62	2.30	5	1
1:A:41:TYR:OH	1:A:54:PHE:CE2	0.62	2.48	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:VAL:HB	1:A:54:PHE:HB2	0.62	1.71	8	3
1:A:31:ALA:HA	1:A:63:LEU:HD11	0.62	1.70	5	1
1:A:3:LEU:HD21	1:A:89:VAL:CG2	0.62	2.25	6	1
1:A:105:LYS:O	1:A:106:VAL:HG23	0.62	1.95	13	1
1:A:19:LEU:H	1:A:74:LYS:CB	0.62	2.07	19	1
1:A:121:ARG:H	1:A:121:ARG:CD	0.62	2.08	20	1
1:A:41:TYR:C	1:A:41:TYR:CD1	0.62	2.73	6	10
1:A:20:LEU:HD23	1:A:72:THR:HA	0.62	1.71	4	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:69:GLU:O	0.62	1.94	9	2
1:A:86:VAL:HA	1:A:105:LYS:O	0.62	1.95	18	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:100:ILE:HB	0.62	2.30	20	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:HD22	0.62	1.55	6	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:23:ILE:HA	0.62	1.71	10	5
1:A:29:LEU:O	1:A:63:LEU:HD12	0.62	1.94	7	4
1:A:19:LEU:HB2	1:A:74:LYS:O	0.62	1.95	5	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:84:THR:HG23	0.62	1.72	16	3
1:A:2:LYS:HB2	1:A:29:LEU:HA	0.61	1.72	8	1
1:A:41:TYR:CE1	1:A:43:LYS:HB3	0.61	2.29	10	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:LEU:HD23	0.61	1.95	11	2
1:A:73:PHE:HE1	1:A:75:VAL:HB	0.61	1.54	13	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:124:GLN:N	0.61	2.10	13	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:71:PHE:CD1	0.61	2.29	1	1
1:A:104:PHE:CE2	1:A:121:ARG:HD3	0.61	2.30	11	2
1:A:60:ARG:HD2	1:A:60:ARG:O	0.61	1.96	7	10
1:A:16:ASN:OD1	1:A:18:GLN:HG3	0.61	1.94	10	8
1:A:76:PRO:HA	1:A:113:PHE:HD2	0.61	1.56	5	1
1:A:104:PHE:O	1:A:105:LYS:HE2	0.61	1.96	9	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:HG13	0.61	1.71	11	1
1:A:17:ASN:HB3	1:A:76:PRO:CG	0.61	2.23	11	2
1:A:56:THR:CG2	1:A:69:GLU:HG3	0.61	2.24	13	1
1:A:53:LYS:HA	1:A:73:PHE:HD2	0.61	1.55	17	1
1:A:70:GLN:HE21	1:A:71:PHE:N	0.61	1.93	19	1
1:A:51:LYS:HB2	1:A:75:VAL:CG2	0.61	2.25	19	1
1:A:80:LEU:HG	1:A:108:MET:CB	0.61	2.26	17	9
1:A:33:ASP:HB3	1:A:37:THR:O	0.61	1.96	17	9
1:A:38:SER:HB2	1:A:91:ASP:CG	0.61	2.15	8	8
1:A:54:PHE:CE1	1:A:56:THR:HG23	0.61	2.31	5	1
1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:THR:HG23	0.61	1.56	5	1
1:A:56:THR:HG23	1:A:69:GLU:CG	0.61	2.22	9	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:GLN:HB3	0.61	1.72	6	3
1:A:3:LEU:HB2	1:A:125:SER:N	0.61	2.11	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:LEU:HB3	1:A:108:MET:SD	0.61	2.35	5	2
1:A:85:LEU:CD2	1:A:106:VAL:HB	0.61	2.25	13	3
1:A:89:VAL:HG21	1:A:123:LEU:HG	0.60	1.72	19	4
1:A:42:VAL:HG22	1:A:56:THR:CG2	0.60	2.24	11	2
1:A:41:TYR:HB2	1:A:56:THR:O	0.60	1.96	15	2
1:A:53:LYS:HD2	1:A:72:THR:CG2	0.60	2.26	17	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:98:HIS:HA	0.60	2.16	13	4
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:CB	0.60	2.09	8	1
1:A:80:LEU:CG	1:A:108:MET:HB3	0.60	2.26	2	9
1:A:71:PHE:O	1:A:72:THR:HB	0.60	1.94	8	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:20:LEU:HB2	0.60	2.12	12	2
1:A:50:LYS:O	1:A:52:LYS:HG3	0.60	1.96	17	1
1:A:103:GLU:O	1:A:123:LEU:HA	0.60	1.96	18	1
1:A:3:LEU:HB3	1:A:29:LEU:CD2	0.60	2.24	1	2
1:A:3:LEU:HD21	1:A:89:VAL:HG11	0.60	1.73	7	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:6:LEU:O	0.60	1.96	9	4
1:A:29:LEU:O	1:A:63:LEU:HG	0.60	1.95	13	4
1:A:69:GLU:HB2	1:A:71:PHE:CE2	0.60	2.31	17	1
1:A:45:PHE:HA	1:A:50:LYS:NZ	0.60	2.11	15	1
1:A:25:GLN:HE21	1:A:25:GLN:C	0.60	2.00	5	11
1:A:61:LYS:HE3	1:A:61:LYS:HA	0.60	1.72	7	3
1:A:2:LYS:O	1:A:30:PRO:HD3	0.60	1.96	20	1
1:A:107:PRO:HG2	1:A:110:THR:OG1	0.60	1.95	14	3
1:A:32:LEU:HB3	1:A:93:ASP:CB	0.60	2.27	19	1
1:A:3:LEU:O	1:A:29:LEU:HD22	0.60	1.96	15	3
1:A:18:GLN:HG3	1:A:74:LYS:HD2	0.60	1.71	12	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:51:LYS:HB2	0.60	1.73	14	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:90:TYR:HB3	0.60	2.32	15	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:50:LYS:HA	0.60	1.74	14	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:52:LYS:CD	0.60	2.23	16	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:CG1	0.60	2.26	3	3
1:A:90:TYR:HD1	1:A:100:ILE:HG22	0.60	1.55	12	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HD11	0.60	1.74	17	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:23:ILE:HD13	0.59	1.72	1	1
1:A:86:VAL:HA	1:A:104:PHE:CE2	0.59	2.31	9	1
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:HD2	0.59	1.97	13	1
1:A:20:LEU:CA	1:A:72:THR:HB	0.59	2.20	17	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:21:VAL:HG22	0.59	1.74	20	5
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:CD	0.59	2.26	6	3
1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HD2	0.59	1.57	2	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:84:THR:HB	0.59	1.73	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CB	1:A:50:LYS:HD3	0.59	2.24	10	4
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:HG2	0.59	1.75	13	1
1:A:37:THR:HA	1:A:63:LEU:HD21	0.59	1.74	17	3
1:A:21:VAL:HG12	1:A:73:PHE:CE1	0.59	2.32	4	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:23:ILE:CA	0.59	2.28	5	1
1:A:119:GLU:OE2	1:A:121:ARG:HD2	0.59	1.97	5	3
1:A:83:LYS:O	1:A:108:MET:HB3	0.59	1.96	14	2
1:A:42:VAL:HB	1:A:71:PHE:CZ	0.59	2.33	16	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:CA	0.59	2.78	4	11
1:A:53:LYS:HE3	1:A:54:PHE:O	0.59	1.98	15	1
1:A:46:LEU:CG	1:A:50:LYS:HG3	0.59	2.26	1	2
1:A:80:LEU:HD23	1:A:81:GLY:N	0.59	2.13	18	4
1:A:104:PHE:CE2	1:A:106:VAL:HB	0.59	2.33	15	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:84:THR:CB	0.59	2.27	3	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:73:PHE:CD2	0.59	2.33	13	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:50:LYS:HB3	0.59	1.73	15	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:113:PHE:HB2	0.59	1.74	3	1
1:A:87:MET:HB2	1:A:104:PHE:HB3	0.59	1.73	18	2
1:A:42:VAL:HA	1:A:89:VAL:HA	0.59	1.73	17	3
1:A:75:VAL:HG11	1:A:80:LEU:HD13	0.59	1.74	14	1
1:A:11:ASP:O	1:A:114:GLY:N	0.59	2.36	7	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:56:THR:O	0.59	1.98	12	1
1:A:83:LYS:HB2	1:A:108:MET:SD	0.59	2.37	12	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:74:LYS:HA	0.59	1.74	16	1
1:A:83:LYS:HB2	1:A:108:MET:CE	0.58	2.28	13	1
1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:LYS:NZ	0.58	2.13	8	2
1:A:17:ASN:HD21	1:A:77:TYR:HD1	0.58	1.41	13	2
1:A:46:LEU:HD22	1:A:52:LYS:HZ3	0.58	1.58	8	1
1:A:21:VAL:HG23	1:A:21:VAL:O	0.58	1.98	6	2
1:A:12:TYR:HB2	1:A:20:LEU:HB2	0.58	1.74	5	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:70:GLN:CA	0.58	2.28	14	3
1:A:80:LEU:HD12	1:A:108:MET:SD	0.58	2.38	16	1
1:A:3:LEU:HB2	1:A:123:LEU:O	0.58	1.99	13	5
1:A:32:LEU:HB3	1:A:98:HIS:CE1	0.58	2.32	12	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:51:LYS:HD3	0.58	1.75	17	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:23:ILE:CG1	0.58	2.27	20	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	0.58	1.75	11	4
1:A:38:SER:C	1:A:40:PRO:HD3	0.58	2.18	20	6
1:A:10:LEU:O	1:A:117:THR:HB	0.58	1.98	7	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:99:ASP:HB3	0.58	2.25	8	2
1:A:25:GLN:CG	1:A:66:VAL:HG12	0.58	2.27	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:TYR:HA	1:A:80:LEU:HB3	0.58	1.73	13	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:80:LEU:HB2	0.58	1.74	8	1
1:A:11:ASP:O	1:A:115:HIS:N	0.58	2.37	7	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:29:LEU:HD11	0.58	2.28	7	5
1:A:10:LEU:HB3	1:A:20:LEU:O	0.58	1.97	19	4
1:A:80:LEU:CG	1:A:108:MET:HB2	0.58	2.16	11	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:HA	0.58	1.74	19	4
1:A:10:LEU:HA	1:A:20:LEU:O	0.58	1.99	11	3
1:A:85:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HD2	0.58	1.75	5	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:63:LEU:CD2	0.58	2.28	16	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:113:PHE:CG	0.58	2.34	19	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:87:MET:HE2	0.58	1.74	5	1
1:A:4:GLY:HA3	1:A:28:GLU:HB2	0.58	1.76	19	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:89:VAL:HG11	0.57	1.75	18	1
1:A:19:LEU:N	1:A:74:LYS:HB2	0.57	2.14	19	1
1:A:3:LEU:CA	1:A:123:LEU:O	0.57	2.50	12	4
1:A:10:LEU:HB3	1:A:22:GLY:H	0.57	1.59	5	1
1:A:83:LYS:HE2	1:A:108:MET:HG3	0.57	1.76	8	1
1:A:103:GLU:HB2	1:A:123:LEU:CD1	0.57	2.26	13	1
1:A:19:LEU:H	1:A:74:LYS:HB2	0.57	1.59	19	1
1:A:44:VAL:H	1:A:53:LYS:HB3	0.57	1.59	14	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:100:ILE:HB	0.57	2.34	16	2
1:A:38:SER:O	1:A:40:PRO:HD2	0.57	1.99	16	1
1:A:81:GLY:O	1:A:108:MET:HG2	0.57	2.00	14	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:51:LYS:HB3	0.57	2.30	17	1
1:A:17:ASN:HB2	1:A:76:PRO:HG3	0.57	1.74	19	1
1:A:45:PHE:CB	1:A:50:LYS:HE3	0.57	2.29	19	1
1:A:41:TYR:HE1	1:A:43:LYS:CG	0.57	2.12	6	1
1:A:9:SER:HA	1:A:118:GLU:HA	0.57	1.75	13	3
1:A:42:VAL:HG23	1:A:67:PHE:CE2	0.57	2.35	16	1
1:A:52:LYS:HG2	1:A:52:LYS:O	0.57	2.00	14	1
1:A:50:LYS:HD2	1:A:50:LYS:C	0.57	2.19	15	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:68:ASN:CA	0.57	2.26	18	3
1:A:25:GLN:CB	1:A:66:VAL:HB	0.57	2.29	17	6
1:A:38:SER:OG	1:A:40:PRO:HD3	0.57	1.99	8	4
1:A:44:VAL:HG21	1:A:70:GLN:OE1	0.57	1.99	20	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:HG	0.57	1.76	2	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:66:VAL:HB	0.57	1.77	3	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:CG	0.57	2.29	6	2
1:A:42:VAL:O	1:A:42:VAL:HG23	0.57	1.99	12	1
1:A:29:LEU:O	1:A:63:LEU:HD13	0.57	1.99	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LEU:HD23	1:A:52:LYS:HG3	0.57	1.75	5	1
1:A:41:TYR:HE1	1:A:43:LYS:HB3	0.57	1.60	9	4
1:A:93:ASP:CB	1:A:98:HIS:HA	0.57	2.23	10	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:100:ILE:HG22	0.57	2.34	11	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:85:LEU:HD22	0.57	2.35	13	1
1:A:22:GLY:H	1:A:70:GLN:CD	0.57	2.03	17	1
1:A:94:ARG:HG3	1:A:98:HIS:HA	0.57	1.76	20	1
1:A:5:LYS:O	1:A:27:ALA:HB2	0.57	2.00	19	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:73:PHE:CZ	0.56	2.36	3	3
1:A:88:ALA:HA	1:A:103:GLU:HA	0.56	1.77	3	1
1:A:53:LYS:HB3	1:A:73:PHE:N	0.56	2.15	17	1
1:A:47:LEU:C	1:A:49:ASP:H	0.56	2.03	1	6
1:A:90:TYR:CZ	1:A:98:HIS:HB2	0.56	2.35	19	3
1:A:90:TYR:CD2	1:A:100:ILE:HG12	0.56	2.35	10	1
1:A:7:GLN:HB3	1:A:121:ARG:HG3	0.56	1.76	20	1
1:A:18:GLN:HE21	1:A:73:PHE:HA	0.56	1.60	5	1
1:A:73:PHE:HE2	1:A:85:LEU:HD21	0.56	1.60	7	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:101:ILE:HD11	0.56	1.76	19	6
1:A:80:LEU:O	1:A:108:MET:HG3	0.56	2.00	11	2
1:A:40:PRO:O	1:A:58:VAL:HA	0.56	2.01	12	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:102:GLY:O	0.56	2.00	13	1
1:A:87:MET:C	1:A:103:GLU:HG3	0.56	2.21	13	1
1:A:50:LYS:HB2	1:A:74:LYS:O	0.56	2.00	15	1
1:A:32:LEU:HB2	1:A:91:ASP:CG	0.56	2.21	7	3
1:A:57:LYS:HB3	1:A:67:PHE:CE2	0.56	2.36	8	3
1:A:76:PRO:HA	1:A:113:PHE:CD2	0.56	2.36	5	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:55:GLU:CA	0.56	2.30	12	1
1:A:59:HIS:CG	1:A:65:PRO:HB3	0.56	2.36	12	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:29:LEU:HB3	0.56	1.77	13	1
1:A:47:LEU:C	1:A:49:ASP:N	0.56	2.59	1	2
1:A:104:PHE:CD2	1:A:106:VAL:HG22	0.56	2.34	1	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:10:LEU:HD21	0.56	1.78	2	1
1:A:10:LEU:C	1:A:117:THR:H	0.56	2.04	7	1
1:A:25:GLN:HG2	1:A:66:VAL:HB	0.56	1.77	17	2
1:A:80:LEU:HD13	1:A:109:ASN:HA	0.56	1.77	7	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:14:PHE:HB3	0.56	2.36	10	3
1:A:44:VAL:HG22	1:A:54:PHE:HB3	0.56	1.77	11	1
1:A:3:LEU:CD1	1:A:29:LEU:HD22	0.56	2.31	16	2
1:A:59:HIS:NE2	1:A:67:PHE:HB2	0.56	2.16	2	4
1:A:11:ASP:HB3	1:A:116:VAL:N	0.56	2.15	7	1
1:A:46:LEU:CB	1:A:50:LYS:HA	0.56	2.30	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:HG12	0.56	1.77	14	2
1:A:81:GLY:O	1:A:109:ASN:HB3	0.56	2.01	6	8
1:A:53:LYS:HB3	1:A:72:THR:HA	0.56	1.77	17	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:CA	0.56	2.31	18	1
1:A:41:TYR:OH	1:A:43:LYS:HB3	0.56	2.01	18	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:126:ALA:H	0.56	2.13	2	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:HG22	0.56	1.77	11	1
1:A:5:LYS:HG2	1:A:122:ASP:HB3	0.56	1.78	18	2
1:A:45:PHE:O	1:A:46:LEU:HD23	0.55	2.01	18	3
1:A:47:LEU:O	1:A:49:ASP:N	0.55	2.39	19	10
1:A:41:TYR:CE1	1:A:55:GLU:HG3	0.55	2.35	2	2
1:A:53:LYS:HA	1:A:72:THR:OG1	0.55	2.00	14	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:89:VAL:HG21	0.55	1.78	16	1
1:A:85:LEU:C	1:A:105:LYS:HG2	0.55	2.22	6	1
1:A:89:VAL:O	1:A:101:ILE:HG12	0.55	2.02	6	3
1:A:59:HIS:HB3	1:A:62:THR:HG23	0.55	1.78	12	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:128:LYS:HG2	0.55	1.78	5	1
1:A:52:LYS:CE	1:A:74:LYS:HG3	0.55	2.31	15	1
1:A:3:LEU:HD21	1:A:101:ILE:O	0.55	2.01	18	1
1:A:17:ASN:HB3	1:A:76:PRO:HA	0.55	1.77	19	1
1:A:3:LEU:CB	1:A:29:LEU:HD23	0.55	2.27	1	1
1:A:3:LEU:H	1:A:3:LEU:HD13	0.55	1.61	3	1
1:A:21:VAL:HB	1:A:71:PHE:O	0.55	2.02	8	1
1:A:57:LYS:HB3	1:A:69:GLU:OE1	0.55	2.02	12	1
1:A:50:LYS:CD	1:A:52:LYS:HD2	0.55	2.32	15	1
1:A:38:SER:HB3	1:A:63:LEU:HD11	0.55	1.79	16	1
1:A:21:VAL:O	1:A:71:PHE:HA	0.55	2.02	19	1
1:A:56:THR:HG23	1:A:69:GLU:CD	0.55	2.22	19	1
1:A:7:GLN:HE22	1:A:25:GLN:CD	0.55	2.05	17	3
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:HG22	0.55	2.31	10	2
1:A:31:ALA:CA	1:A:63:LEU:HD21	0.55	2.32	11	3
1:A:46:LEU:O	1:A:50:LYS:HG2	0.55	2.02	2	2
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:CD1	0.55	2.32	9	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:54:PHE:HB3	0.55	2.31	9	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:69:GLU:HB3	0.55	1.78	12	1
1:A:5:LYS:HE2	1:A:121:ARG:O	0.55	2.01	20	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:14:PHE:HB2	0.55	2.37	1	1
1:A:47:LEU:HG	1:A:48:PRO:CD	0.55	2.18	17	6
1:A:46:LEU:CG	1:A:52:LYS:HE2	0.55	2.31	18	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:50:LYS:HE3	0.55	2.36	6	2
1:A:21:VAL:N	1:A:72:THR:HB	0.55	2.17	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LYS:HD2	1:A:90:TYR:HB2	0.55	1.79	8	1
1:A:52:LYS:HZ1	1:A:75:VAL:HB	0.55	1.62	11	1
1:A:45:PHE:HD2	1:A:50:LYS:HD3	0.55	1.59	13	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:49:ASP:OD1	0.55	2.02	15	1
1:A:8:TYR:O	1:A:119:GLU:HG3	0.55	2.01	20	1
1:A:46:LEU:CG	1:A:52:LYS:HD2	0.55	2.30	2	3
1:A:22:GLY:HA3	1:A:70:GLN:OE1	0.55	2.02	4	3
1:A:19:LEU:HB3	1:A:113:PHE:O	0.55	2.02	7	1
1:A:85:LEU:HD12	1:A:113:PHE:CZ	0.55	2.37	7	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:23:ILE:HA	0.55	2.36	9	2
1:A:52:LYS:HE2	1:A:74:LYS:HG3	0.55	1.79	15	1
1:A:27:ALA:HB3	1:A:29:LEU:HD21	0.55	1.77	19	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:23:ILE:CB	0.54	2.32	17	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:84:THR:OG1	0.54	2.03	10	1
1:A:104:PHE:CD1	1:A:121:ARG:HD2	0.54	2.38	12	1
1:A:45:PHE:CD2	1:A:50:LYS:HD3	0.54	2.36	13	1
1:A:3:LEU:HD12	1:A:123:LEU:CB	0.54	2.30	16	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:67:PHE:CZ	0.54	2.37	14	1
1:A:85:LEU:HB2	1:A:106:VAL:O	0.54	2.01	20	3
1:A:70:GLN:HE21	1:A:70:GLN:C	0.54	2.06	19	1
1:A:5:LYS:HB3	1:A:121:ARG:O	0.54	2.02	20	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:71:PHE:CE1	0.54	2.38	6	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:80:LEU:HD23	0.54	1.79	7	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:10:LEU:HD21	0.54	2.38	10	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:56:THR:N	0.54	2.17	12	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:50:LYS:N	0.54	2.17	14	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:HD13	0.54	1.63	19	2
1:A:87:MET:CB	1:A:105:LYS:HD2	0.54	2.32	12	2
1:A:3:LEU:O	1:A:27:ALA:HB1	0.54	2.02	19	1
1:A:38:SER:CB	1:A:63:LEU:HD22	0.54	2.33	1	1
1:A:3:LEU:HD21	1:A:89:VAL:CG1	0.54	2.32	2	2
1:A:21:VAL:HG13	1:A:71:PHE:HB2	0.54	1.80	4	1
1:A:108:MET:HA	1:A:113:PHE:HZ	0.54	1.62	7	1
1:A:21:VAL:O	1:A:70:GLN:CB	0.54	2.55	10	2
1:A:104:PHE:HE2	1:A:121:ARG:HG2	0.54	1.62	14	1
1:A:107:PRO:O	1:A:110:THR:HB	0.54	2.02	14	1
1:A:49:ASP:HB3	1:A:83:LYS:CG	0.54	2.22	15	1
1:A:21:VAL:HG23	1:A:70:GLN:NE2	0.54	2.17	18	1
1:A:52:LYS:HZ1	1:A:75:VAL:HG23	0.54	1.63	18	1
1:A:43:LYS:HA	1:A:54:PHE:CE2	0.54	2.38	6	1
1:A:57:LYS:HD3	1:A:67:PHE:CZ	0.54	2.37	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:LEU:HD21	1:A:106:VAL:CB	0.54	2.32	13	1
1:A:44:VAL:CB	1:A:53:LYS:HD3	0.54	2.12	15	1
1:A:43:LYS:HE3	1:A:45:PHE:CZ	0.54	2.38	14	3
1:A:6:LEU:HD21	1:A:23:ILE:HG21	0.54	1.78	8	1
1:A:45:PHE:HB2	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.32	12	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:121:ARG:HG2	0.54	2.30	13	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:113:PHE:CD1	0.54	2.38	15	1
1:A:5:LYS:C	1:A:26:ALA:HB3	0.54	2.23	19	1
1:A:51:LYS:HB2	1:A:75:VAL:HG22	0.54	1.79	19	1
1:A:73:PHE:CG	1:A:85:LEU:HD23	0.54	2.38	20	1
1:A:89:VAL:C	1:A:101:ILE:HB	0.54	2.22	9	1
1:A:59:HIS:NE2	1:A:67:PHE:HA	0.54	2.18	19	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:116:VAL:HG12	0.54	1.79	2	1
1:A:21:VAL:CG2	1:A:70:GLN:HE21	0.54	2.16	10	1
1:A:21:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HE21	0.54	1.61	18	2
1:A:3:LEU:O	1:A:123:LEU:HB2	0.54	2.02	11	2
1:A:80:LEU:HD22	1:A:108:MET:CB	0.54	2.29	7	1
1:A:2:LYS:O	1:A:2:LYS:HD3	0.54	2.03	14	3
1:A:43:LYS:HB2	1:A:88:ALA:O	0.54	2.03	12	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:123:LEU:CD1	0.53	2.33	16	2
1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:PRO:O	0.53	2.03	14	1
1:A:75:VAL:CG2	1:A:83:LYS:HG2	0.53	2.32	15	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:49:ASP:HB3	0.53	1.78	5	1
1:A:93:ASP:O	1:A:95:PHE:N	0.53	2.41	20	4
1:A:93:ASP:H	1:A:98:HIS:CB	0.53	2.12	20	1
1:A:104:PHE:CE2	1:A:121:ARG:HG2	0.53	2.38	14	2
1:A:10:LEU:HA	1:A:21:VAL:HA	0.53	1.81	10	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:72:THR:HA	0.53	1.80	10	1
1:A:52:LYS:HE3	1:A:52:LYS:H	0.53	1.63	14	1
1:A:38:SER:HB3	1:A:63:LEU:CD1	0.53	2.32	16	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:53:LYS:HE2	0.53	2.33	17	1
1:A:37:THR:HA	1:A:63:LEU:CD2	0.53	2.34	17	2
1:A:63:LEU:C	1:A:65:PRO:HD3	0.53	2.24	11	5
1:A:44:VAL:HG13	1:A:73:PHE:CE2	0.53	2.38	20	3
1:A:27:ALA:HA	1:A:64:ASN:ND2	0.53	2.19	10	6
1:A:31:ALA:CA	1:A:63:LEU:HD11	0.53	2.33	5	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:51:LYS:H	0.53	1.63	14	1
1:A:46:LEU:HD12	1:A:51:LYS:HB3	0.53	1.79	17	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:22:GLY:N	0.53	2.18	5	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:CD2	0.53	2.15	6	1
1:A:73:PHE:HZ	1:A:85:LEU:HD13	0.53	1.62	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:LEU:HD23	1:A:124:GLN:CB	0.53	2.33	12	1
1:A:43:LYS:HB2	1:A:45:PHE:CE2	0.53	2.39	9	2
1:A:13:ASP:HB2	1:A:115:HIS:HB2	0.53	1.81	7	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:9:SER:N	0.53	2.77	9	4
1:A:8:TYR:HB2	1:A:23:ILE:CB	0.53	2.33	13	1
1:A:52:LYS:H	1:A:52:LYS:HE2	0.53	1.64	17	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:ARG:HA	0.53	2.03	7	3
1:A:19:LEU:N	1:A:74:LYS:O	0.53	2.42	5	1
1:A:25:GLN:HB2	1:A:66:VAL:CA	0.53	2.34	20	3
1:A:3:LEU:HB3	1:A:29:LEU:HD22	0.53	1.81	10	2
1:A:46:LEU:HD12	1:A:52:LYS:HZ3	0.53	1.63	10	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:117:THR:O	0.53	2.03	11	1
1:A:52:LYS:H	1:A:52:LYS:CD	0.53	2.16	17	1
1:A:46:LEU:O	1:A:51:LYS:HA	0.53	2.03	1	1
1:A:9:SER:CB	1:A:23:ILE:HG13	0.53	2.20	6	1
1:A:32:LEU:HG	1:A:99:ASP:HB3	0.53	1.79	10	1
1:A:3:LEU:O	1:A:29:LEU:HA	0.53	2.04	17	2
1:A:51:LYS:NZ	1:A:80:LEU:HB2	0.53	2.18	17	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:48:PRO:HD2	0.53	2.29	19	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:20:LEU:HD23	0.53	1.80	11	1
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:PHE:HE1	0.53	1.64	13	1
1:A:113:PHE:HB2	1:A:117:THR:OG1	0.53	2.04	14	1
1:A:93:ASP:N	1:A:98:HIS:HB2	0.53	2.13	20	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:87:MET:HE3	0.53	1.79	6	2
1:A:3:LEU:CB	1:A:124:GLN:HA	0.53	2.33	8	1
1:A:50:LYS:HE2	1:A:52:LYS:HB3	0.53	1.80	14	1
1:A:20:LEU:HB3	1:A:71:PHE:CB	0.53	2.32	19	1
1:A:44:VAL:HG21	1:A:70:GLN:CD	0.53	2.24	20	1
1:A:18:GLN:CB	1:A:73:PHE:HB2	0.52	2.34	8	2
1:A:5:LYS:HA	1:A:122:ASP:HA	0.52	1.82	18	4
1:A:7:GLN:H	1:A:7:GLN:HE21	0.52	1.47	11	5
1:A:77:TYR:HA	1:A:80:LEU:HD22	0.52	1.80	5	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:20:LEU:HD23	0.52	1.64	10	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:83:LYS:HB3	0.52	2.34	11	1
1:A:45:PHE:C	1:A:46:LEU:HD12	0.52	2.23	13	1
1:A:85:LEU:CG	1:A:106:VAL:HB	0.52	2.34	13	1
1:A:52:LYS:CE	1:A:73:PHE:HB3	0.52	2.34	17	1
1:A:83:LYS:O	1:A:108:MET:HB2	0.52	2.04	16	3
1:A:6:LEU:HD12	1:A:67:PHE:HZ	0.52	1.64	14	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:117:THR:HB	0.52	1.80	14	1
1:A:57:LYS:HE2	1:A:67:PHE:HE2	0.52	1.64	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LEU:HD21	1:A:73:PHE:CE2	0.52	2.40	18	2
1:A:3:LEU:CD2	1:A:124:GLN:HA	0.52	2.28	12	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:10:LEU:HD11	0.52	1.82	1	1
1:A:9:SER:C	1:A:10:LEU:HD13	0.52	2.25	3	1
1:A:32:LEU:O	1:A:93:ASP:HA	0.52	2.04	8	3
1:A:40:PRO:HG2	1:A:65:PRO:CG	0.52	2.35	3	4
1:A:43:LYS:HE2	1:A:90:TYR:CD2	0.52	2.39	11	2
1:A:25:GLN:HA	1:A:66:VAL:HA	0.52	1.81	13	1
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:H	0.52	1.61	16	1
1:A:54:PHE:CZ	1:A:72:THR:HB	0.52	2.39	16	1
1:A:104:PHE:CD2	1:A:121:ARG:HD2	0.52	2.40	6	2
1:A:51:LYS:HB3	1:A:74:LYS:HG3	0.52	1.80	7	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:91:ASP:HB3	0.52	1.81	12	2
1:A:89:VAL:CG1	1:A:101:ILE:HD11	0.52	2.35	19	4
1:A:24:ILE:O	1:A:67:PHE:N	0.52	2.43	16	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:29:LEU:HD13	0.52	1.81	17	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:59:HIS:HB2	0.52	1.81	10	1
1:A:21:VAL:HG12	1:A:71:PHE:O	0.52	2.04	15	1
1:A:52:LYS:HE3	1:A:74:LYS:HB2	0.52	1.81	1	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:87:MET:HG2	0.52	1.81	8	2
1:A:87:MET:HB3	1:A:104:PHE:CD2	0.52	2.40	10	2
1:A:20:LEU:HD12	1:A:71:PHE:CD1	0.52	2.40	19	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:79:GLU:HB3	0.52	2.30	1	1
1:A:5:LYS:HG2	1:A:122:ASP:HA	0.52	1.80	3	3
1:A:12:TYR:CD2	1:A:20:LEU:HD23	0.52	2.40	5	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:54:PHE:HB3	0.52	1.82	2	2
1:A:103:GLU:HG2	1:A:104:PHE:N	0.52	2.19	1	2
1:A:44:VAL:HG21	1:A:71:PHE:CB	0.52	2.35	8	1
1:A:65:PRO:O	1:A:66:VAL:HG23	0.52	2.05	10	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD11	0.52	1.82	14	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HB3	0.52	1.83	19	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:52:LYS:CE	0.51	2.34	11	1
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CD2	0.51	2.72	16	1
1:A:3:LEU:CD2	1:A:29:LEU:HD22	0.51	2.35	17	1
1:A:6:LEU:CA	1:A:26:ALA:HB3	0.51	2.35	19	1
1:A:25:GLN:O	1:A:25:GLN:NE2	0.51	2.41	19	1
1:A:89:VAL:HB	1:A:101:ILE:CG2	0.51	2.34	9	1
1:A:20:LEU:CB	1:A:71:PHE:HB2	0.51	2.34	19	1
1:A:22:GLY:N	1:A:71:PHE:HB3	0.51	2.20	19	1
1:A:90:TYR:CZ	1:A:100:ILE:HB	0.51	2.40	20	1
1:A:40:PRO:HG3	1:A:65:PRO:HG3	0.51	1.82	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ASP:HB2	1:A:117:THR:N	0.51	2.20	7	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:108:MET:SD	0.51	3.04	13	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:49:ASP:HB3	0.51	1.82	16	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:54:PHE:HB2	0.51	2.36	4	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:52:LYS:HE2	0.51	2.35	11	2
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:C	0.51	2.26	7	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:123:LEU:HD13	0.51	1.83	15	2
1:A:32:LEU:CG	1:A:101:ILE:HG22	0.51	2.33	11	1
1:A:75:VAL:HG21	1:A:80:LEU:HA	0.51	1.82	14	1
1:A:50:LYS:HD2	1:A:52:LYS:HD2	0.51	1.81	15	1
1:A:77:TYR:HB2	1:A:113:PHE:CD2	0.51	2.40	15	2
1:A:29:LEU:HD23	1:A:29:LEU:N	0.51	2.20	5	7
1:A:44:VAL:HG21	1:A:71:PHE:CG	0.51	2.41	14	2
1:A:87:MET:H	1:A:104:PHE:HA	0.51	1.66	13	1
1:A:46:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HB3	0.51	1.81	15	2
1:A:43:LYS:HZ1	1:A:45:PHE:HB2	0.51	1.65	18	1
1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:PHE:HB2	0.51	1.82	20	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:108:MET:CE	0.51	2.35	20	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:54:PHE:HB3	0.51	1.81	9	1
1:A:105:LYS:HG3	1:A:121:ARG:CG	0.51	2.34	13	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:HE2	0.51	1.82	18	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:108:MET:HE1	0.51	2.36	4	1
1:A:45:PHE:HB3	1:A:50:LYS:CD	0.51	2.33	9	1
1:A:90:TYR:HB3	1:A:99:ASP:HB2	0.51	1.82	9	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:C	0.51	2.26	18	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:85:LEU:HA	0.51	1.83	19	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:72:THR:HG23	0.51	2.19	12	3
1:A:52:LYS:HE2	1:A:73:PHE:CB	0.51	2.36	4	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:21:VAL:CG1	0.51	2.36	13	4
1:A:38:SER:OG	1:A:63:LEU:HD23	0.51	2.06	11	2
1:A:43:LYS:HD2	1:A:90:TYR:CD2	0.51	2.40	8	3
1:A:31:ALA:HA	1:A:38:SER:CB	0.51	2.33	16	1
1:A:120:TRP:O	1:A:120:TRP:CE3	0.51	2.64	20	1
1:A:20:LEU:N	1:A:113:PHE:O	0.51	2.44	7	1
1:A:23:ILE:HG13	1:A:66:VAL:CG1	0.51	2.36	10	1
1:A:71:PHE:HB2	1:A:73:PHE:CZ	0.51	2.41	12	1
1:A:39:ASP:HA	1:A:59:HIS:O	0.51	2.05	17	9
1:A:21:VAL:HG11	1:A:73:PHE:CE2	0.51	2.41	6	1
1:A:73:PHE:HE2	1:A:108:MET:HE3	0.51	1.66	15	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:91:ASP:CB	0.51	2.35	16	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:72:THR:OG1	0.51	2.06	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:THR:HB	1:A:107:PRO:CB	0.51	2.36	18	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:74:LYS:N	0.51	2.20	20	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:CD	0.50	2.35	7	3
1:A:52:LYS:NZ	1:A:75:VAL:HB	0.50	2.21	11	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:23:ILE:HG22	0.50	1.82	16	1
1:A:9:SER:HB3	1:A:118:GLU:CB	0.50	2.27	3	1
1:A:69:GLU:O	1:A:69:GLU:HG2	0.50	2.05	12	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:29:LEU:HB3	0.50	1.83	18	1
1:A:4:GLY:HA2	1:A:28:GLU:HB2	0.50	1.81	19	1
1:A:57:LYS:HE2	1:A:67:PHE:CE2	0.50	2.41	20	1
1:A:23:ILE:CG2	1:A:24:ILE:N	0.50	2.74	3	3
1:A:85:LEU:HD12	1:A:113:PHE:CE1	0.50	2.41	7	1
1:A:21:VAL:HB	1:A:71:PHE:HB2	0.50	1.84	11	1
1:A:44:VAL:H	1:A:54:PHE:HB3	0.50	1.66	11	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:89:VAL:HG11	0.50	2.36	18	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:123:LEU:HD21	0.50	1.83	8	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:7:GLN:H	0.50	2.05	16	4
1:A:37:THR:HA	1:A:63:LEU:HD13	0.50	1.82	15	2
1:A:12:TYR:CD2	1:A:14:PHE:HB3	0.50	2.41	3	2
1:A:45:PHE:HA	1:A:52:LYS:HG3	0.50	1.83	19	2
1:A:11:ASP:CB	1:A:21:VAL:HG23	0.50	2.35	17	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:118:GLU:HG2	0.50	1.82	2	1
1:A:42:VAL:N	1:A:56:THR:OG1	0.50	2.45	11	9
1:A:9:SER:OG	1:A:23:ILE:HG12	0.50	2.07	3	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:101:ILE:HD12	0.50	1.82	3	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:53:LYS:C	0.50	2.27	17	1
1:A:42:VAL:O	1:A:55:GLU:HB3	0.50	2.07	18	1
1:A:121:ARG:O	1:A:121:ARG:HG2	0.50	2.06	20	1
1:A:45:PHE:C	1:A:46:LEU:HD23	0.50	2.26	17	2
1:A:89:VAL:HG13	1:A:101:ILE:CG1	0.50	2.37	7	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HD23	0.50	1.83	6	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HB3	0.50	1.84	9	2
1:A:8:TYR:HD2	1:A:22:GLY:O	0.50	1.88	16	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:ILE:HB	0.50	2.42	5	1
1:A:46:LEU:CG	1:A:52:LYS:HE3	0.50	2.33	12	2
1:A:40:PRO:CG	1:A:65:PRO:HG2	0.50	2.37	11	1
1:A:41:TYR:HE2	1:A:55:GLU:HG3	0.50	1.67	13	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:48:PRO:HD2	0.50	1.83	20	2
1:A:3:LEU:CG	1:A:102:GLY:HA3	0.50	2.35	18	2
1:A:44:VAL:N	1:A:54:PHE:HB2	0.50	2.22	17	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:101:ILE:HB	0.50	1.83	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:THR:HA	1:A:107:PRO:HA	0.50	1.83	18	2
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:PHE:CZ	0.50	2.42	6	2
1:A:38:SER:HB3	1:A:63:LEU:CD2	0.50	2.37	16	2
1:A:80:LEU:HA	1:A:108:MET:CE	0.50	2.37	13	1
1:A:75:VAL:CG2	1:A:83:LYS:HG3	0.50	2.36	16	1
1:A:42:VAL:O	1:A:54:PHE:HB3	0.50	2.06	17	1
1:A:25:GLN:CG	1:A:66:VAL:HB	0.49	2.37	17	2
1:A:90:TYR:HE1	1:A:92:PHE:HA	0.49	1.67	11	1
1:A:85:LEU:HD13	1:A:108:MET:SD	0.49	2.47	16	1
1:A:15:GLN:NE2	1:A:15:GLN:H	0.49	2.04	1	1
1:A:38:SER:OG	1:A:63:LEU:HD22	0.49	2.06	1	1
1:A:91:ASP:HB2	1:A:101:ILE:HD11	0.49	1.83	1	1
1:A:32:LEU:HB3	1:A:93:ASP:OD2	0.49	2.07	4	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:89:VAL:HG21	0.49	1.83	7	1
1:A:49:ASP:HA	1:A:83:LYS:HE3	0.49	1.84	15	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:55:GLU:CD	0.49	2.27	18	1
1:A:104:PHE:CE1	1:A:121:ARG:HG2	0.49	2.42	18	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:80:LEU:CD1	0.49	2.36	19	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:108:MET:HE3	0.49	1.84	20	1
1:A:22:GLY:HA3	1:A:70:GLN:CD	0.49	2.28	5	1
1:A:12:TYR:HA	1:A:114:GLY:HA3	0.49	1.83	7	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:85:LEU:HD21	0.49	2.41	7	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:75:VAL:HG23	0.49	1.83	8	1
1:A:74:LYS:NZ	1:A:80:LEU:HA	0.49	2.22	19	1
1:A:121:ARG:H	1:A:121:ARG:NE	0.49	2.06	20	1
1:A:46:LEU:CB	1:A:49:ASP:HB2	0.49	2.37	1	1
1:A:24:ILE:HG22	1:A:25:GLN:HG3	0.49	1.83	10	1
1:A:3:LEU:HD12	1:A:30:PRO:CD	0.49	2.38	2	1
1:A:87:MET:HG2	1:A:105:LYS:HG2	0.49	1.84	5	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:115:HIS:HA	0.49	1.82	7	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:70:GLN:NE2	0.49	2.21	11	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:52:LYS:HE2	0.49	2.36	11	2
1:A:59:HIS:CD2	1:A:65:PRO:HB2	0.49	2.42	15	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:85:LEU:HG	0.49	2.42	16	1
1:A:108:MET:HA	1:A:113:PHE:CZ	0.49	2.42	7	1
1:A:30:PRO:HB2	1:A:101:ILE:HG21	0.49	1.84	13	1
1:A:52:LYS:CE	1:A:74:LYS:HG2	0.49	2.38	20	1
1:A:50:LYS:O	1:A:50:LYS:CG	0.49	2.60	15	2
1:A:3:LEU:CG	1:A:123:LEU:HB3	0.49	2.38	6	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:52:LYS:HE2	0.49	1.84	7	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:70:GLN:HB2	0.49	2.38	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ASN:ND2	1:A:76:PRO:HA	0.49	2.22	18	6
1:A:9:SER:N	1:A:23:ILE:HB	0.49	2.22	6	1
1:A:56:THR:HG22	1:A:57:LYS:O	0.49	2.07	19	2
1:A:3:LEU:HD11	1:A:101:ILE:O	0.49	2.07	1	1
1:A:7:GLN:O	1:A:24:ILE:HB	0.49	2.07	10	1
1:A:64:ASN:N	1:A:65:PRO:HD3	0.49	2.22	10	2
1:A:29:LEU:HB2	1:A:101:ILE:HD12	0.49	1.84	11	1
1:A:50:LYS:O	1:A:52:LYS:HD3	0.49	2.08	14	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:75:VAL:HG21	0.49	2.08	19	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:123:LEU:HG	0.49	1.84	20	1
1:A:47:LEU:CG	1:A:84:THR:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:25:GLN:HG2	1:A:65:PRO:O	0.49	2.08	12	1
1:A:87:MET:O	1:A:104:PHE:CA	0.49	2.61	13	1
1:A:29:LEU:C	1:A:63:LEU:HD22	0.48	2.28	5	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:89:VAL:HG22	0.48	1.85	8	1
1:A:34:MET:HA	1:A:37:THR:CG2	0.48	2.38	16	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:54:PHE:HD2	0.48	1.66	17	1
1:A:53:LYS:HB3	1:A:72:THR:HG21	0.48	1.85	18	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:CA	0.48	2.38	20	1
1:A:92:PHE:CG	1:A:92:PHE:O	0.48	2.66	20	1
1:A:5:LYS:HA	1:A:123:LEU:H	0.48	1.67	20	4
1:A:23:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	0.48	1.84	3	1
1:A:45:PHE:HB2	1:A:50:LYS:CD	0.48	2.29	10	1
1:A:10:LEU:O	1:A:116:VAL:HA	0.48	2.07	20	2
1:A:50:LYS:HG3	1:A:50:LYS:O	0.48	2.08	1	2
1:A:8:TYR:HB2	1:A:23:ILE:C	0.48	2.29	5	3
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:HE2	0.48	1.85	18	2
1:A:32:LEU:HD11	1:A:99:ASP:CB	0.48	2.28	8	1
1:A:71:PHE:O	1:A:72:THR:CB	0.48	2.61	8	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:92:PHE:HA	0.48	2.43	11	1
1:A:100:ILE:HG21	1:A:128:LYS:HB3	0.48	1.86	1	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:HA	0.48	1.85	4	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:18:GLN:HB3	0.48	2.08	6	1
1:A:54:PHE:CZ	1:A:72:THR:HA	0.48	2.43	8	1
1:A:87:MET:O	1:A:103:GLU:HG3	0.48	2.09	13	1
1:A:20:LEU:CG	1:A:70:GLN:NE2	0.48	2.75	15	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:67:PHE:CE2	0.48	2.42	15	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:91:ASP:HB3	0.48	2.33	17	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:123:LEU:HG	0.48	2.38	20	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:73:PHE:CE1	0.48	2.44	1	2
1:A:38:SER:HB3	1:A:63:LEU:HD21	0.48	1.83	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:PHE:CE2	0.48	2.44	12	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:ARG:HA	0.48	2.29	14	2
1:A:18:GLN:NE2	1:A:73:PHE:CD1	0.48	2.82	14	1
1:A:41:TYR:HB2	1:A:57:LYS:CA	0.48	2.37	16	1
1:A:7:GLN:N	1:A:121:ARG:HB2	0.48	2.23	20	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:59:HIS:O	0.48	2.09	6	7
1:A:19:LEU:HD22	1:A:113:PHE:CB	0.48	2.38	11	2
1:A:89:VAL:HG23	1:A:101:ILE:HB	0.48	1.84	5	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:88:ALA:HB3	0.48	1.84	8	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:91:ASP:CB	0.48	2.38	10	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:111:VAL:HG21	0.48	1.84	16	1
1:A:45:PHE:HB2	1:A:50:LYS:HE3	0.48	1.86	19	1
1:A:7:GLN:HA	1:A:121:ARG:HB3	0.48	1.86	20	1
1:A:92:PHE:HA	1:A:98:HIS:N	0.48	2.22	20	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:123:LEU:HD22	0.48	2.38	3	5
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CD2	0.48	2.76	9	6
1:A:57:LYS:HD3	1:A:67:PHE:HZ	0.48	1.68	9	1
1:A:85:LEU:CD2	1:A:108:MET:HG2	0.48	2.38	12	1
1:A:23:ILE:HB	1:A:67:PHE:CE1	0.48	2.39	14	1
1:A:42:VAL:O	1:A:55:GLU:HA	0.48	2.08	16	1
1:A:29:LEU:HB3	1:A:101:ILE:HD12	0.48	1.85	19	1
1:A:83:LYS:O	1:A:108:MET:CG	0.48	2.62	20	3
1:A:87:MET:HE2	1:A:104:PHE:CE2	0.48	2.43	2	1
1:A:46:LEU:N	1:A:50:LYS:O	0.48	2.45	15	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:26:ALA:HB2	0.48	2.24	19	1
1:A:25:GLN:CB	1:A:66:VAL:CB	0.48	2.88	19	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:44:VAL:HG13	0.48	1.85	1	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:85:LEU:HA	0.48	2.39	18	3
1:A:8:TYR:HB3	1:A:22:GLY:O	0.48	2.08	8	2
1:A:24:ILE:O	1:A:68:ASN:N	0.48	2.46	10	1
1:A:52:LYS:CE	1:A:52:LYS:H	0.48	2.20	14	1
1:A:53:LYS:HG3	1:A:73:PHE:HB3	0.48	1.85	15	1
1:A:85:LEU:HD13	1:A:108:MET:CE	0.48	2.39	16	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:84:THR:O	0.48	2.09	1	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.48	2.33	3	1
1:A:3:LEU:N	1:A:3:LEU:HD13	0.48	2.24	11	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:73:PHE:CE2	0.48	2.43	13	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:51:LYS:HD2	0.48	2.37	14	1
1:A:84:THR:HB	1:A:107:PRO:CA	0.48	2.38	18	1
1:A:41:TYR:O	1:A:89:VAL:HA	0.48	2.09	19	1
1:A:93:ASP:HB2	1:A:98:HIS:CG	0.47	2.43	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HB2	0.47	1.85	16	1
1:A:87:MET:SD	1:A:104:PHE:HE2	0.47	2.32	16	1
1:A:27:ALA:O	1:A:28:GLU:HG2	0.47	2.09	18	1
1:A:19:LEU:O	1:A:72:THR:HG22	0.47	2.09	5	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:68:ASN:HB2	0.47	1.86	5	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:68:ASN:OD1	0.47	2.08	6	1
1:A:3:LEU:CD1	1:A:30:PRO:HD2	0.47	2.31	15	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HG	0.47	1.84	14	1
1:A:12:TYR:HE1	1:A:114:GLY:O	0.47	1.92	17	1
1:A:57:LYS:HB3	1:A:67:PHE:HE2	0.47	1.69	20	1
1:A:108:MET:HA	1:A:111:VAL:CG1	0.47	2.39	3	1
1:A:29:LEU:HB3	1:A:101:ILE:HG21	0.47	1.85	5	1
1:A:43:LYS:HG2	1:A:88:ALA:O	0.47	2.09	10	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:51:LYS:HZ2	0.47	1.69	17	1
1:A:85:LEU:HB2	1:A:108:MET:SD	0.47	2.49	17	1
1:A:11:ASP:O	1:A:20:LEU:N	0.47	2.46	2	8
1:A:46:LEU:HD12	1:A:49:ASP:OD2	0.47	2.10	2	2
1:A:80:LEU:HA	1:A:83:LYS:HZ3	0.47	1.70	8	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:52:LYS:NZ	0.47	2.24	4	1
1:A:119:GLU:HG3	1:A:121:ARG:CG	0.47	2.36	8	1
1:A:44:VAL:CB	1:A:54:PHE:HB2	0.47	2.40	12	2
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:LYS:O	0.47	2.09	15	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:63:LEU:HD21	0.47	2.37	16	1
1:A:27:ALA:C	1:A:28:GLU:HG2	0.47	2.30	18	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:74:LYS:HB3	0.47	2.39	5	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:85:LEU:HG	0.47	2.40	7	2
1:A:3:LEU:HB2	1:A:124:GLN:C	0.47	2.30	9	1
1:A:31:ALA:C	1:A:32:LEU:HD23	0.47	2.30	20	3
1:A:21:VAL:CG2	1:A:71:PHE:HB2	0.47	2.39	6	2
1:A:3:LEU:CD1	1:A:102:GLY:HA3	0.47	2.27	5	1
1:A:41:TYR:HE1	1:A:43:LYS:HG3	0.47	1.69	6	1
1:A:87:MET:HB3	1:A:105:LYS:CD	0.47	2.40	6	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:117:THR:HB	0.47	1.86	11	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:22:GLY:N	0.47	2.25	16	1
1:A:27:ALA:HB3	1:A:29:LEU:CD2	0.47	2.40	19	1
1:A:89:VAL:HG13	1:A:101:ILE:HG13	0.47	1.86	2	2
1:A:8:TYR:CG	1:A:24:ILE:HG12	0.47	2.45	4	1
1:A:5:LYS:HB2	1:A:7:GLN:OE1	0.47	2.10	5	1
1:A:56:THR:HA	1:A:69:GLU:OE2	0.47	2.10	10	1
1:A:74:LYS:O	1:A:74:LYS:HG3	0.47	2.10	10	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:123:LEU:HD11	0.47	1.85	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LYS:H	1:A:52:LYS:CE	0.47	2.22	17	1
1:A:52:LYS:HD3	1:A:71:PHE:CZ	0.47	2.44	2	1
1:A:103:GLU:N	1:A:124:GLN:O	0.47	2.48	4	3
1:A:12:TYR:CD1	1:A:19:LEU:HD23	0.47	2.45	11	2
1:A:103:GLU:OE2	1:A:105:LYS:HE3	0.47	2.10	16	1
1:A:104:PHE:HE1	1:A:121:ARG:HG2	0.47	1.69	18	1
1:A:121:ARG:O	1:A:121:ARG:CG	0.47	2.63	20	1
1:A:33:ASP:OD2	1:A:61:LYS:HD3	0.47	2.10	3	1
1:A:3:LEU:HD12	1:A:3:LEU:H	0.47	1.70	8	1
1:A:39:ASP:CB	1:A:59:HIS:HB2	0.47	2.39	10	1
1:A:6:LEU:CG	1:A:23:ILE:HG21	0.47	2.32	14	1
1:A:46:LEU:O	1:A:51:LYS:HB3	0.47	2.10	15	1
1:A:41:TYR:CB	1:A:56:THR:O	0.47	2.63	16	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:90:TYR:CD2	0.47	2.45	17	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:55:GLU:HB2	0.46	2.44	1	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:10:LEU:HD21	0.46	2.44	19	2
1:A:10:LEU:HB3	1:A:21:VAL:CG1	0.46	2.23	6	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:51:LYS:HG2	0.46	2.11	12	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:107:PRO:HB3	0.46	2.40	18	1
1:A:52:LYS:HB2	1:A:72:THR:OG1	0.46	2.09	19	1
1:A:76:PRO:O	1:A:80:LEU:N	0.46	2.48	19	1
1:A:94:ARG:H	1:A:98:HIS:CB	0.46	2.22	20	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:108:MET:HE2	0.46	1.87	2	1
1:A:23:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG13	0.46	1.83	6	1
1:A:54:PHE:CD2	1:A:72:THR:HG21	0.46	2.36	14	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:3:LEU:O	0.46	2.11	16	1
1:A:84:THR:CA	1:A:107:PRO:HA	0.46	2.40	18	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:115:HIS:HA	0.46	2.45	1	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:MET:HE1	0.46	1.86	3	1
1:A:21:VAL:HG22	1:A:71:PHE:O	0.46	2.09	14	3
1:A:40:PRO:CG	1:A:65:PRO:CG	0.46	2.94	11	2
1:A:46:LEU:HB3	1:A:50:LYS:H	0.46	1.68	14	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:24:ILE:N	0.46	2.26	20	4
1:A:103:GLU:CG	1:A:126:ALA:HB2	0.46	2.39	20	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:22:GLY:O	0.46	2.69	15	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:50:LYS:CG	0.46	2.36	1	1
1:A:44:VAL:HG21	1:A:71:PHE:CD1	0.46	2.46	2	1
1:A:75:VAL:HG22	1:A:79:GLU:HB3	0.46	1.86	5	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:73:PHE:HE1	0.46	1.70	11	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:21:VAL:CG2	0.46	2.40	12	1
1:A:42:VAL:O	1:A:42:VAL:CG2	0.46	2.63	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LYS:HD3	1:A:73:PHE:CD1	0.46	2.33	12	1
1:A:50:LYS:HD2	1:A:52:LYS:CB	0.46	2.37	17	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:55:GLU:CB	0.46	2.35	18	1
1:A:7:GLN:HB3	1:A:121:ARG:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:120:TRP:CZ2	0.46	2.46	20	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:73:PHE:CE1	0.46	2.46	2	2
1:A:47:LEU:HB2	1:A:84:THR:OG1	0.46	2.10	11	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:23:ILE:HG13	0.46	2.37	14	2
1:A:49:ASP:CB	1:A:83:LYS:HD2	0.46	2.40	10	2
1:A:5:LYS:HA	1:A:123:LEU:N	0.46	2.25	20	1
1:A:108:MET:CE	1:A:109:ASN:HD22	0.46	2.24	20	1
1:A:44:VAL:HB	1:A:71:PHE:CE1	0.46	2.46	1	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:45:PHE:HE2	0.46	1.71	2	1
1:A:74:LYS:HZ1	1:A:79:GLU:HG3	0.46	1.71	5	1
1:A:9:SER:OG	1:A:118:GLU:HG2	0.46	2.11	6	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:84:THR:OG1	0.46	2.11	6	1
1:A:81:GLY:HA2	1:A:109:ASN:HB3	0.46	1.88	7	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:N	0.46	2.80	14	1
1:A:104:PHE:HB2	1:A:123:LEU:CD1	0.46	2.40	14	1
1:A:13:ASP:H	1:A:114:GLY:HA3	0.45	1.71	7	1
1:A:2:LYS:HG2	1:A:30:PRO:HD3	0.45	1.88	8	1
1:A:85:LEU:HD23	1:A:106:VAL:HB	0.45	1.87	11	1
1:A:7:GLN:HE21	1:A:7:GLN:H	0.45	1.54	13	2
1:A:3:LEU:CB	1:A:123:LEU:HB2	0.45	2.42	18	1
1:A:22:GLY:CA	1:A:70:GLN:CA	0.45	2.91	9	3
1:A:85:LEU:CB	1:A:105:LYS:HG2	0.45	2.37	6	1
1:A:3:LEU:CD2	1:A:29:LEU:HB3	0.45	2.41	14	1
1:A:17:ASN:CG	1:A:76:PRO:HB3	0.45	2.30	14	1
1:A:29:LEU:HB2	1:A:63:LEU:CD2	0.45	2.41	1	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:56:THR:OG1	0.45	2.12	1	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:48:PRO:CD	0.45	2.36	12	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:CG1	0.45	2.40	5	1
1:A:11:ASP:O	1:A:113:PHE:HA	0.45	2.11	7	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:48:PRO:HD2	0.45	2.42	20	3
1:A:104:PHE:CD2	1:A:105:LYS:CA	0.45	2.98	9	1
1:A:7:GLN:H	1:A:7:GLN:NE2	0.45	2.09	11	2
1:A:32:LEU:HB3	1:A:98:HIS:O	0.45	2.11	11	1
1:A:2:LYS:H	1:A:125:SER:HB2	0.45	1.72	12	1
1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:HD3	0.45	2.27	19	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:84:THR:HG22	0.45	1.88	13	1
1:A:23:ILE:HG13	1:A:71:PHE:CE1	0.45	2.46	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:N	0.45	2.26	19	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:116:VAL:HG13	0.45	2.46	3	1
1:A:89:VAL:O	1:A:90:TYR:HD1	0.45	1.94	9	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:103:GLU:HG2	0.45	1.87	18	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:10:LEU:HD11	0.45	2.46	11	2
1:A:85:LEU:O	1:A:105:LYS:CB	0.45	2.61	5	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:75:VAL:HB	0.45	1.87	14	2
1:A:80:LEU:O	1:A:108:MET:CB	0.45	2.64	14	1
1:A:94:ARG:HD2	1:A:97:LYS:O	0.45	2.12	20	1
1:A:23:ILE:HG12	1:A:24:ILE:N	0.45	2.27	2	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:37:THR:O	0.45	2.12	5	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:68:ASN:HB3	0.45	1.88	18	2
1:A:85:LEU:O	1:A:85:LEU:HG	0.45	2.12	10	1
1:A:104:PHE:CE1	1:A:124:GLN:HB2	0.45	2.46	13	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:51:LYS:H	0.45	1.71	14	1
1:A:32:LEU:HB2	1:A:93:ASP:OD2	0.45	2.11	15	1
1:A:85:LEU:CD1	1:A:108:MET:HG2	0.45	2.42	16	1
1:A:46:LEU:HB3	1:A:49:ASP:HB2	0.45	1.89	1	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:50:LYS:CA	0.45	2.38	13	2
1:A:50:LYS:HD2	1:A:52:LYS:H	0.45	1.71	15	1
1:A:87:MET:SD	1:A:105:LYS:NZ	0.45	2.88	18	1
1:A:50:LYS:O	1:A:50:LYS:HD2	0.45	2.12	19	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:63:LEU:N	0.45	2.27	19	1
1:A:7:GLN:HB3	1:A:121:ARG:CG	0.45	2.42	20	1
1:A:63:LEU:O	1:A:65:PRO:HD3	0.45	2.11	1	1
1:A:80:LEU:O	1:A:108:MET:CG	0.45	2.65	20	3
1:A:44:VAL:CB	1:A:54:PHE:HB3	0.45	2.29	6	1
1:A:105:LYS:HA	1:A:105:LYS:CE	0.45	2.37	6	1
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD23	0.45	2.27	12	1
1:A:59:HIS:HB3	1:A:62:THR:CG2	0.45	2.41	12	1
1:A:89:VAL:HG23	1:A:103:GLU:CB	0.45	2.39	13	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:HE3	0.45	1.88	2	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:105:LYS:HB3	0.45	1.88	2	1
1:A:52:LYS:CE	1:A:74:LYS:H	0.45	2.24	3	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:71:PHE:HB3	0.45	1.88	4	1
1:A:80:LEU:HD13	1:A:113:PHE:HB2	0.45	1.88	5	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:87:MET:HG2	0.45	2.42	7	1
1:A:12:TYR:CB	1:A:19:LEU:HD23	0.45	2.42	10	1
1:A:37:THR:HA	1:A:63:LEU:HG	0.45	1.88	11	1
1:A:45:PHE:HA	1:A:50:LYS:HZ1	0.45	1.70	15	1
1:A:3:LEU:CD1	1:A:89:VAL:HG21	0.45	2.41	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TRP:CE3	1:A:120:TRP:N	0.45	2.84	20	1
1:A:108:MET:SD	1:A:109:ASN:N	0.45	2.89	14	2
1:A:46:LEU:HD21	1:A:108:MET:SD	0.45	2.52	10	2
1:A:66:VAL:CG1	1:A:67:PHE:N	0.45	2.80	10	1
1:A:53:LYS:O	1:A:53:LYS:HG3	0.45	2.12	11	1
1:A:49:ASP:O	1:A:50:LYS:CB	0.45	2.64	15	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:54:PHE:CZ	0.45	2.48	17	1
1:A:18:GLN:CB	1:A:74:LYS:O	0.45	2.65	19	1
1:A:9:SER:N	1:A:23:ILE:CG1	0.44	2.80	11	1
1:A:24:ILE:O	1:A:66:VAL:HG12	0.44	2.12	11	1
1:A:101:ILE:O	1:A:125:SER:HA	0.44	2.12	16	2
1:A:20:LEU:HA	1:A:72:THR:OG1	0.44	2.11	17	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:113:PHE:HZ	0.44	1.72	18	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:75:VAL:HG23	0.44	2.27	18	2
1:A:6:LEU:HD21	1:A:87:MET:SD	0.44	2.52	5	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HB2	0.44	1.89	6	1
1:A:12:TYR:CA	1:A:115:HIS:H	0.44	2.26	7	1
1:A:45:PHE:O	1:A:46:LEU:HD12	0.44	2.11	13	2
1:A:42:VAL:HG21	1:A:55:GLU:HG2	0.44	1.89	12	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG23	0.44	1.87	14	1
1:A:104:PHE:HB3	1:A:123:LEU:HD12	0.44	1.87	16	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:23:ILE:HD12	0.44	1.87	19	1
1:A:61:LYS:HE3	1:A:61:LYS:CA	0.44	2.42	4	2
1:A:44:VAL:HB	1:A:54:PHE:CG	0.44	2.48	5	1
1:A:86:VAL:HA	1:A:104:PHE:CG	0.44	2.44	9	1
1:A:86:VAL:CB	1:A:104:PHE:CZ	0.44	2.99	9	1
1:A:21:VAL:C	1:A:70:GLN:HB3	0.44	2.33	10	1
1:A:57:LYS:HG2	1:A:57:LYS:O	0.44	2.11	10	1
1:A:6:LEU:HD23	1:A:121:ARG:O	0.44	2.12	19	2
1:A:80:LEU:HB2	1:A:108:MET:HE2	0.44	1.89	12	1
1:A:3:LEU:HB2	1:A:123:LEU:HB2	0.44	1.89	18	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:23:ILE:HG21	0.44	2.42	1	2
1:A:18:GLN:HB3	1:A:74:LYS:HD3	0.44	1.88	1	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:100:ILE:O	0.44	2.13	9	1
1:A:90:TYR:HD2	1:A:100:ILE:HG12	0.44	1.68	10	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:91:ASP:CB	0.44	2.42	12	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:70:GLN:CB	0.44	2.40	14	1
1:A:79:GLU:O	1:A:83:LYS:HD2	0.44	2.12	17	1
1:A:84:THR:HB	1:A:107:PRO:HB3	0.44	1.89	18	1
1:A:11:ASP:CB	1:A:116:VAL:HG12	0.44	2.43	2	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:108:MET:HG3	0.44	2.48	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:LEU:HD12	1:A:51:LYS:H	0.44	1.72	4	2
1:A:11:ASP:CB	1:A:116:VAL:HA	0.44	2.41	5	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:CD2	0.44	2.46	9	2
1:A:22:GLY:HA2	1:A:70:GLN:N	0.44	2.24	10	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:73:PHE:CE1	0.44	2.48	11	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:21:VAL:HG23	0.44	1.88	15	1
1:A:7:GLN:HG3	1:A:120:TRP:CE3	0.44	2.48	19	1
1:A:76:PRO:O	1:A:79:GLU:N	0.44	2.51	19	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:83:LYS:HA	0.44	2.13	1	1
1:A:50:LYS:NZ	1:A:71:PHE:HE1	0.44	2.08	1	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:85:LEU:HG	0.44	1.90	6	1
1:A:18:GLN:HB2	1:A:73:PHE:CD2	0.44	2.47	14	1
1:A:45:PHE:HB2	1:A:51:LYS:HA	0.44	1.90	15	1
1:A:3:LEU:CB	1:A:123:LEU:O	0.44	2.66	20	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:119:GLU:OE2	0.44	2.13	20	1
1:A:80:LEU:O	1:A:108:MET:HB2	0.44	2.13	6	2
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:HG3	0.44	2.13	5	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:89:VAL:HG11	0.44	1.90	9	2
1:A:73:PHE:CD2	1:A:73:PHE:O	0.44	2.71	14	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:83:LYS:HA	0.44	2.13	15	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:69:GLU:CG	0.44	2.42	17	1
1:A:25:GLN:CB	1:A:66:VAL:CA	0.44	2.95	19	1
1:A:20:LEU:HB3	1:A:70:GLN:OE1	0.44	2.13	1	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:25:GLN:NE2	0.44	2.66	3	2
1:A:69:GLU:HG2	1:A:71:PHE:CZ	0.44	2.47	4	2
1:A:51:LYS:O	1:A:52:LYS:HE3	0.44	2.12	6	1
1:A:59:HIS:HE2	1:A:67:PHE:HD2	0.44	1.56	8	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:71:PHE:CE2	0.44	2.48	12	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:21:VAL:HG12	0.43	1.88	9	1
1:A:24:ILE:C	1:A:66:VAL:HG12	0.43	2.33	10	1
1:A:52:LYS:HG3	1:A:74:LYS:H	0.43	1.73	11	1
1:A:18:GLN:HG2	1:A:19:LEU:N	0.43	2.28	12	1
1:A:93:ASP:OD1	1:A:98:HIS:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:67:PHE:O	1:A:69:GLU:HG2	0.43	2.12	13	1
1:A:100:ILE:H	1:A:100:ILE:HD12	0.43	1.72	14	1
1:A:85:LEU:HB2	1:A:106:VAL:HG13	0.43	1.89	16	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:23:ILE:HA	0.43	1.88	2	1
1:A:21:VAL:CG1	1:A:73:PHE:CE1	0.43	3.01	4	1
1:A:40:PRO:CB	1:A:65:PRO:HG3	0.43	2.43	4	2
1:A:79:GLU:O	1:A:83:LYS:HG2	0.43	2.12	4	2
1:A:3:LEU:HD22	1:A:30:PRO:HD2	0.43	1.88	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD12	1:A:40:PRO:HB3	0.43	1.90	6	2
1:A:59:HIS:CE1	1:A:67:PHE:HA	0.43	2.48	16	2
1:A:41:TYR:CZ	1:A:90:TYR:HB3	0.43	2.47	15	1
1:A:17:ASN:HB2	1:A:76:PRO:HA	0.43	1.90	19	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:CD1	0.43	2.49	1	1
1:A:11:ASP:C	1:A:115:HIS:H	0.43	2.16	7	1
1:A:38:SER:O	1:A:40:PRO:HD3	0.43	2.13	7	1
1:A:29:LEU:HB3	1:A:101:ILE:HB	0.43	1.89	8	1
1:A:22:GLY:CA	1:A:70:GLN:H	0.43	2.24	10	1
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:HG12	0.43	2.14	11	1
1:A:56:THR:HA	1:A:69:GLU:CD	0.43	2.34	14	1
1:A:3:LEU:O	1:A:29:LEU:CD2	0.43	2.66	15	1
1:A:3:LEU:CD2	1:A:101:ILE:HB	0.43	2.39	16	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:89:VAL:HG22	0.43	1.88	17	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:10:LEU:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:3:LEU:HG	1:A:29:LEU:CD2	0.43	2.30	19	2
1:A:36:GLY:O	1:A:63:LEU:HD21	0.43	2.13	7	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:N	0.43	2.28	10	1
1:A:2:LYS:HB2	1:A:30:PRO:CD	0.43	2.43	12	1
1:A:20:LEU:O	1:A:21:VAL:CG2	0.43	2.66	12	1
1:A:57:LYS:CB	1:A:67:PHE:HB2	0.43	2.43	12	1
1:A:52:LYS:CD	1:A:74:LYS:HB2	0.43	2.43	14	1
1:A:49:ASP:CB	1:A:83:LYS:HG3	0.43	2.26	15	1
1:A:46:LEU:HB2	1:A:50:LYS:H	0.43	1.73	18	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:45:PHE:HZ	0.43	1.72	6	1
1:A:80:LEU:HA	1:A:108:MET:HE3	0.43	1.89	7	1
1:A:41:TYR:CD1	1:A:41:TYR:C	0.43	2.92	8	2
1:A:104:PHE:CZ	1:A:121:ARG:HD2	0.43	2.47	8	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:85:LEU:CD1	0.43	2.43	14	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:54:PHE:CD2	0.43	2.48	17	1
1:A:98:HIS:O	1:A:98:HIS:CG	0.43	2.72	17	1
1:A:37:THR:HA	1:A:63:LEU:HD11	0.43	1.88	19	1
1:A:41:TYR:OH	1:A:43:LYS:HE2	0.43	2.14	2	1
1:A:51:LYS:C	1:A:52:LYS:HD2	0.43	2.33	11	1
1:A:9:SER:O	1:A:21:VAL:HB	0.43	2.14	12	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:83:LYS:HD3	0.43	1.90	17	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:73:PHE:CD1	0.43	2.49	2	1
1:A:67:PHE:O	1:A:68:ASN:HB2	0.43	2.13	8	2
1:A:12:TYR:HE1	1:A:17:ASN:HD22	0.43	1.57	14	1
1:A:53:LYS:HB2	1:A:72:THR:HA	0.43	1.88	17	1
1:A:83:LYS:O	1:A:108:MET:HG3	0.43	2.13	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:VAL:H	1:A:72:THR:HB	0.43	1.74	5	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:87:MET:SD	0.43	2.54	8	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:55:GLU:HG2	0.43	2.48	9	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:107:PRO:HB3	0.43	1.90	10	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:85:LEU:HB3	0.43	1.91	13	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:123:LEU:CB	0.43	2.26	17	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:71:PHE:CD1	0.43	3.06	17	1
1:A:22:GLY:HA2	1:A:69:GLU:C	0.43	2.33	9	1
1:A:70:GLN:O	1:A:70:GLN:HG3	0.43	2.13	11	2
1:A:45:PHE:HB2	1:A:86:VAL:HG23	0.43	1.90	12	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:103:GLU:HB2	0.43	2.44	12	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:105:LYS:NZ	0.43	2.29	13	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:105:LYS:CD	0.43	2.44	14	1
1:A:51:LYS:HE3	1:A:108:MET:SD	0.43	2.54	17	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:21:VAL:HG13	0.43	2.44	20	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:89:VAL:CG1	0.43	2.44	3	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:21:VAL:HA	0.43	2.43	4	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:99:ASP:HB2	0.43	1.89	5	1
1:A:45:PHE:HA	1:A:52:LYS:HB2	0.43	1.89	5	1
1:A:10:LEU:HA	1:A:21:VAL:CG2	0.43	2.44	13	2
1:A:50:LYS:HE3	1:A:73:PHE:CA	0.43	2.43	15	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:20:LEU:O	0.42	2.14	5	1
1:A:56:THR:HG22	1:A:69:GLU:OE1	0.42	2.13	6	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:123:LEU:C	0.42	2.34	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:VAL:CG2	0.42	2.43	11	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:CB	0.42	2.96	13	1
1:A:50:LYS:C	1:A:50:LYS:CD	0.42	2.87	15	1
1:A:52:LYS:HA	1:A:52:LYS:HD3	0.42	1.67	18	1
1:A:91:ASP:O	1:A:98:HIS:CB	0.42	2.65	20	1
1:A:17:ASN:ND2	1:A:77:TYR:HD1	0.42	2.12	7	1
1:A:50:LYS:O	1:A:50:LYS:HE2	0.42	2.14	9	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:123:LEU:HD21	0.42	2.44	13	1
1:A:104:PHE:CD1	1:A:105:LYS:HG3	0.42	2.49	18	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:23:ILE:C	0.42	2.87	20	1
1:A:29:LEU:HB2	1:A:63:LEU:HG	0.42	1.91	1	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	0.42	1.72	4	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:61:LYS:HZ3	0.42	2.17	5	1
1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:HD3	0.42	2.30	7	1
1:A:33:ASP:OD2	1:A:61:LYS:HE3	0.42	2.14	13	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:75:VAL:CG1	0.42	2.43	14	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:119:GLU:HG2	0.42	1.91	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HB2	1:A:74:LYS:HB3	0.42	1.91	5	1
1:A:90:TYR:HE1	1:A:98:HIS:HB3	0.42	1.73	5	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:HG3	0.42	1.91	14	1
1:A:6:LEU:CB	1:A:123:LEU:HD21	0.42	2.40	18	1
1:A:67:PHE:CB	1:A:69:GLU:HG2	0.42	2.16	19	1
1:A:7:GLN:CA	1:A:121:ARG:CB	0.42	2.97	20	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:89:VAL:HG22	0.42	1.89	20	1
1:A:74:LYS:HE2	1:A:74:LYS:CA	0.42	2.41	8	1
1:A:85:LEU:HD11	1:A:105:LYS:HE2	0.42	1.90	18	1
1:A:27:ALA:O	1:A:29:LEU:CG	0.42	2.60	19	1
1:A:120:TRP:N	1:A:120:TRP:CD2	0.42	2.87	20	1
1:A:57:LYS:HD3	1:A:67:PHE:HE2	0.42	1.75	2	1
1:A:76:PRO:HD2	1:A:79:GLU:HB2	0.42	1.90	3	1
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:GLN:N	0.42	2.30	5	1
1:A:41:TYR:HD1	1:A:41:TYR:O	0.42	1.98	6	1
1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:LYS:HZ2	0.42	1.72	8	1
1:A:42:VAL:CA	1:A:56:THR:H	0.42	2.26	12	1
1:A:44:VAL:H	1:A:53:LYS:CB	0.42	2.25	14	1
1:A:56:THR:HG21	1:A:69:GLU:OE1	0.42	2.15	16	1
1:A:87:MET:HB3	1:A:104:PHE:CE2	0.42	2.49	16	1
1:A:74:LYS:HE3	1:A:75:VAL:H	0.42	1.74	5	1
1:A:77:TYR:HA	1:A:80:LEU:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:113:PHE:CD1	0.42	2.50	18	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:72:THR:HB	0.42	1.91	20	1
1:A:46:LEU:H	1:A:50:LYS:HD3	0.42	1.75	4	1
1:A:30:PRO:O	1:A:38:SER:HB3	0.42	2.15	12	1
1:A:50:LYS:CD	1:A:50:LYS:O	0.42	2.67	15	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HB3	0.42	1.92	16	1
1:A:46:LEU:HA	1:A:84:THR:O	0.42	2.15	17	1
1:A:14:PHE:HB2	1:A:76:PRO:HG3	0.42	1.91	5	1
1:A:3:LEU:HD21	1:A:89:VAL:HG22	0.42	1.90	6	1
1:A:26:ALA:HB1	1:A:123:LEU:HD21	0.42	1.91	13	1
1:A:90:TYR:HD1	1:A:100:ILE:HG13	0.42	1.75	18	1
1:A:21:VAL:HB	1:A:72:THR:HG22	0.42	1.92	19	1
1:A:103:GLU:O	1:A:124:GLN:N	0.42	2.52	8	1
1:A:13:ASP:OD1	1:A:15:GLN:NE2	0.42	2.53	9	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:105:LYS:HD3	0.42	1.91	10	1
1:A:44:VAL:N	1:A:54:PHE:HB3	0.42	2.30	11	1
1:A:33:ASP:HB2	1:A:94:ARG:HH22	0.42	1.74	15	1
1:A:4:GLY:HA3	1:A:27:ALA:HB1	0.42	1.92	19	1
1:A:103:GLU:CB	1:A:126:ALA:HB2	0.41	2.45	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:CD1	1:A:8:TYR:C	0.41	2.94	2	1
1:A:108:MET:HA	1:A:111:VAL:HG12	0.41	1.92	3	1
1:A:47:LEU:HG	1:A:84:THR:H	0.41	1.75	4	1
1:A:85:LEU:C	1:A:105:LYS:HB3	0.41	2.33	5	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:83:LYS:HZ2	0.41	2.28	8	1
1:A:103:GLU:HB2	1:A:123:LEU:HA	0.41	1.90	13	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:21:VAL:HG23	0.41	2.45	15	1
1:A:104:PHE:HE2	1:A:106:VAL:HB	0.41	1.72	15	1
1:A:128:LYS:HZ2	1:A:128:LYS:HB2	0.41	1.75	17	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:92:PHE:CD1	0.41	2.50	18	1
1:A:62:THR:OG1	1:A:65:PRO:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:7:GLN:CA	1:A:121:ARG:HB3	0.41	2.44	20	1
1:A:52:LYS:HE2	1:A:73:PHE:HB3	0.41	1.91	4	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:117:THR:O	0.41	2.15	9	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:108:MET:CE	0.41	2.45	15	1
1:A:108:MET:CE	1:A:108:MET:HA	0.41	2.45	16	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:87:MET:HG2	0.41	2.42	17	1
1:A:24:ILE:CA	1:A:68:ASN:HA	0.41	2.37	18	1
1:A:70:GLN:NE2	1:A:71:PHE:N	0.41	2.66	19	1
1:A:3:LEU:H	1:A:3:LEU:HD23	0.41	1.75	20	1
1:A:108:MET:CG	1:A:109:ASN:ND2	0.41	2.83	20	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:73:PHE:CB	0.41	2.35	7	1
1:A:7:GLN:CB	1:A:120:TRP:CE3	0.41	3.03	8	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:75:VAL:HB	0.41	2.45	14	1
1:A:8:TYR:CE1	1:A:119:GLU:HG3	0.41	2.39	1	1
1:A:28:GLU:HG3	1:A:64:ASN:OD1	0.41	2.15	1	1
1:A:12:TYR:CB	1:A:112:ASP:HB3	0.41	2.45	7	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:91:ASP:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:75:VAL:O	1:A:76:PRO:O	0.41	2.38	19	1
1:A:12:TYR:CB	1:A:114:GLY:H	0.41	2.29	7	1
1:A:30:PRO:O	1:A:101:ILE:HG22	0.41	2.15	8	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:72:THR:H	0.41	1.76	10	1
1:A:53:LYS:HZ1	1:A:71:PHE:HD2	0.41	1.57	15	1
1:A:53:LYS:O	1:A:54:PHE:CD1	0.41	2.74	17	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:72:THR:HA	0.41	1.92	20	1
1:A:23:ILE:HG22	1:A:119:GLU:OE2	0.41	2.16	20	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:108:MET:HB3	0.41	2.46	3	1
1:A:22:GLY:HA3	1:A:70:GLN:CG	0.41	2.45	5	1
1:A:123:LEU:HD12	1:A:123:LEU:HA	0.41	1.69	7	2
1:A:90:TYR:CD2	1:A:100:ILE:CG2	0.41	3.03	11	1
1:A:59:HIS:CE1	1:A:67:PHE:CD2	0.41	3.09	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:ILE:CG1	1:A:69:GLU:HB2	0.41	2.40	19	1
1:A:29:LEU:O	1:A:63:LEU:HB3	0.41	2.16	20	1
1:A:121:ARG:CD	1:A:121:ARG:N	0.41	2.78	20	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:112:ASP:HB3	0.41	1.93	7	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:108:MET:SD	0.41	3.14	13	1
1:A:13:ASP:HB3	1:A:16:ASN:OD1	0.41	2.15	14	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:83:LYS:HG3	0.41	2.15	14	1
1:A:56:THR:HG22	1:A:69:GLU:CD	0.41	2.36	14	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:113:PHE:HD1	0.41	1.75	3	1
1:A:46:LEU:HG	1:A:52:LYS:HG2	0.41	1.92	4	1
1:A:85:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HD3	0.41	1.93	6	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:CG	0.41	2.46	11	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:23:ILE:HG13	0.41	2.51	12	1
1:A:32:LEU:HB3	1:A:93:ASP:CG	0.41	2.35	13	1
1:A:22:GLY:CA	1:A:70:GLN:O	0.41	2.68	18	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:83:LYS:CE	0.41	2.46	18	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:65:PRO:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:21:VAL:H	1:A:70:GLN:HE22	0.41	1.58	1	1
1:A:105:LYS:HZ1	1:A:121:ARG:HG2	0.41	1.76	5	1
1:A:80:LEU:O	1:A:83:LYS:N	0.41	2.54	14	1
1:A:90:TYR:CD1	1:A:100:ILE:HG13	0.41	2.50	14	1
1:A:10:LEU:CB	1:A:21:VAL:HG12	0.41	2.46	18	1
1:A:11:ASP:O	1:A:20:LEU:HB2	0.41	2.16	19	1
1:A:23:ILE:H	1:A:70:GLN:CB	0.41	2.29	20	1
1:A:119:GLU:CD	1:A:120:TRP:CZ3	0.41	2.95	20	1
1:A:104:PHE:O	1:A:105:LYS:HG2	0.41	2.16	5	1
1:A:3:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HG	0.41	1.92	6	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:98:HIS:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:80:LEU:HD23	0.41	2.44	7	1
1:A:86:VAL:CA	1:A:105:LYS:CB	0.41	2.88	12	1
1:A:85:LEU:HD21	1:A:106:VAL:CG1	0.41	2.45	13	1
1:A:3:LEU:CG	1:A:29:LEU:HD23	0.40	2.46	3	1
1:A:11:ASP:O	1:A:113:PHE:C	0.40	2.59	7	1
1:A:27:ALA:HA	1:A:64:ASN:CG	0.40	2.36	10	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:108:MET:SD	0.40	2.57	11	1
1:A:10:LEU:HA	1:A:21:VAL:CA	0.40	2.45	17	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:52:LYS:HE2	0.40	1.92	18	1
1:A:89:VAL:HG22	1:A:123:LEU:HG	0.40	1.94	3	1
1:A:124:GLN:O	1:A:124:GLN:HG3	0.40	2.16	4	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:116:VAL:HA	0.40	1.92	5	1
1:A:3:LEU:CD2	1:A:123:LEU:HG	0.40	2.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:ALA:CB	1:A:63:LEU:HD11	0.40	2.44	6	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:10:LEU:H	0.40	1.74	11	1
1:A:104:PHE:O	1:A:105:LYS:NZ	0.40	2.51	12	1
1:A:42:VAL:HB	1:A:55:GLU:HG2	0.40	1.91	18	1
1:A:111:VAL:HB	1:A:113:PHE:CE2	0.40	2.50	7	1
1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:HD23	0.40	2.31	9	1
1:A:32:LEU:HD23	1:A:101:ILE:HG22	0.40	1.93	14	1
1:A:110:THR:HG22	1:A:110:THR:O	0.40	2.17	14	1
1:A:7:GLN:O	1:A:24:ILE:HG12	0.40	2.16	16	1
1:A:33:ASP:O	1:A:37:THR:HA	0.40	2.16	16	1
1:A:38:SER:CB	1:A:63:LEU:HD11	0.40	2.45	16	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:105:LYS:CB	0.40	2.46	2	1
1:A:87:MET:HB3	1:A:105:LYS:NZ	0.40	2.31	6	1
1:A:14:PHE:HB2	1:A:77:TYR:CE1	0.40	2.52	7	1
1:A:11:ASP:N	1:A:20:LEU:O	0.40	2.53	10	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:69:GLU:HG2	0.40	2.51	17	1
1:A:83:LYS:CE	1:A:108:MET:HG3	0.40	2.46	8	1
1:A:49:ASP:CB	1:A:83:LYS:HG2	0.40	2.46	11	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:114:GLY:O	0.40	2.74	17	1
1:A:7:GLN:CB	1:A:121:ARG:CB	0.40	2.99	20	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	126/128 (98%)	108±2 (85±1%)	14±2 (11±1%)	5±1 (4±1%)	5 32
All	All	2520/2560 (98%)	2151 (85%)	271 (11%)	98 (4%)	5 32

All 18 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	23	ILE	20
1	A	35	GLY	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	48	PRO	20
1	A	2	LYS	9
1	A	94	ARG	6
1	A	72	THR	4
1	A	65	PRO	3
1	A	21	VAL	3
1	A	50	LYS	2
1	A	76	PRO	2
1	A	95	PHE	2
1	A	47	LEU	1
1	A	96	SER	1
1	A	40	PRO	1
1	A	51	LYS	1
1	A	107	PRO	1
1	A	27	ALA	1
1	A	28	GLU	1

6.3.2 Protein sidechains [\(i\)](#)

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	114/115 (99%)	87±4 (76±4%)	27±4 (24±4%)	2 26
All	All	2280/2300 (99%)	1733 (76%)	547 (24%)	2 26

All 86 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	7	GLN	20
1	A	25	GLN	20
1	A	64	ASN	20
1	A	8	TYR	18
1	A	80	LEU	18
1	A	6	LEU	17
1	A	10	LEU	17
1	A	41	TYR	16
1	A	50	LYS	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	70	GLN	15
1	A	2	LYS	15
1	A	18	GLN	15
1	A	85	LEU	15
1	A	109	ASN	13
1	A	123	LEU	13
1	A	17	ASN	13
1	A	15	GLN	12
1	A	66	VAL	11
1	A	48	PRO	11
1	A	56	THR	11
1	A	101	ILE	11
1	A	20	LEU	10
1	A	47	LEU	10
1	A	60	ARG	9
1	A	62	THR	9
1	A	29	LEU	8
1	A	108	MET	7
1	A	23	ILE	7
1	A	52	LYS	7
1	A	105	LYS	7
1	A	83	LYS	6
1	A	74	LYS	6
1	A	118	GLU	6
1	A	91	ASP	6
1	A	33	ASP	6
1	A	3	LEU	5
1	A	61	LYS	5
1	A	93	ASP	5
1	A	124	GLN	5
1	A	51	LYS	4
1	A	77	TYR	4
1	A	104	PHE	4
1	A	12	TYR	4
1	A	75	VAL	4
1	A	57	LYS	4
1	A	63	LEU	4
1	A	71	PHE	4
1	A	72	THR	4
1	A	79	GLU	3
1	A	84	THR	3
1	A	46	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	45	PHE	3
1	A	100	ILE	3
1	A	119	GLU	3
1	A	44	VAL	2
1	A	99	ASP	2
1	A	73	PHE	2
1	A	127	GLU	2
1	A	76	PRO	2
1	A	90	TYR	2
1	A	54	PHE	2
1	A	113	PHE	2
1	A	120	TRP	2
1	A	21	VAL	2
1	A	32	LEU	2
1	A	69	GLU	2
1	A	98	HIS	2
1	A	103	GLU	2
1	A	121	ARG	2
1	A	49	ASP	2
1	A	78	SER	2
1	A	89	VAL	2
1	A	53	LYS	2
1	A	67	PHE	2
1	A	92	PHE	2
1	A	40	PRO	1
1	A	42	VAL	1
1	A	43	LYS	1
1	A	117	THR	1
1	A	19	LEU	1
1	A	39	ASP	1
1	A	86	VAL	1
1	A	34	MET	1
1	A	65	PRO	1
1	A	68	ASN	1
1	A	9	SER	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 monosaccharides 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 i

No chemical shift data were provided