



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 26, 2022 – 03:41 PM EST

PDB ID : 2AFJ
Title : SPRY domain-containing SOCS box protein 2 (SSB-2)
Authors : Masters, S.L.; Yao, S.; Willson, T.A.; Zhang, J.G.; Palmer, K.R.; Smith, B.J.;
Babon, J.J.; Nicola, N.A.; Norton, R.S.; Nicholson, S.E.
Deposited on : 2005-07-26

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 ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) 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

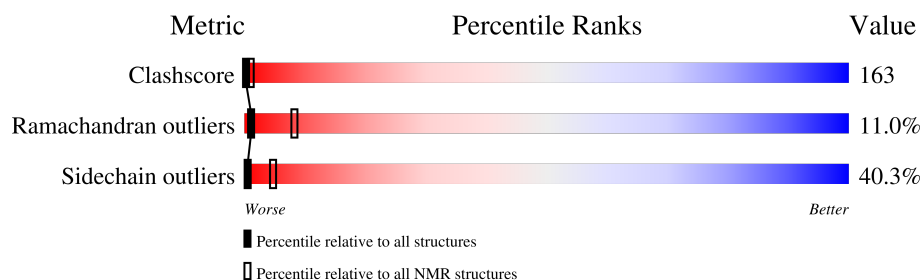
1 Overall quality at a glance

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	226	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:29-A:97, A:105-A:113, A:128-A:135, A:163-A:219 (143)	1.21	14

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

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

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

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3458 atoms, of which 1703 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called gene rich cluster, C9 gene.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	226	Total	C	H	N	O	S	0
			3458	1096	1703	324	330	5	

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

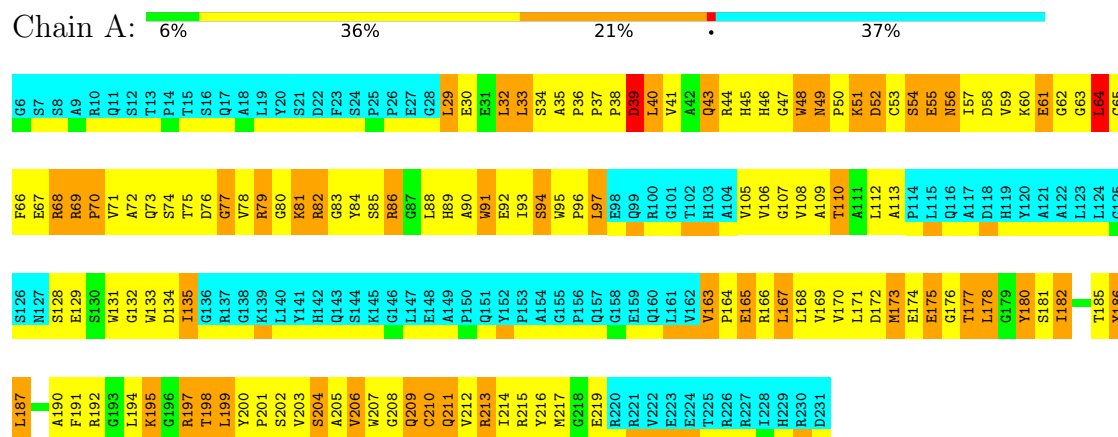
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	6	GLY	-	cloning artifact	UNP O88838
A	7	SER	-	cloning artifact	UNP O88838
A	8	SER	-	cloning artifact	UNP O88838
A	9	ALA	-	cloning artifact	UNP O88838
A	10	ARG	-	cloning artifact	UNP O88838
A	11	GLN	-	cloning artifact	UNP O88838
A	225	THR	-	cloning artifact	UNP O88838
A	226	ARG	-	cloning artifact	UNP O88838
A	227	ARG	-	cloning artifact	UNP O88838
A	228	ILE	-	cloning artifact	UNP O88838
A	229	HIS	-	cloning artifact	UNP O88838
A	230	ARG	-	cloning artifact	UNP O88838
A	231	ASP	-	cloning artifact	UNP O88838

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: gene rich cluster, C9 gene

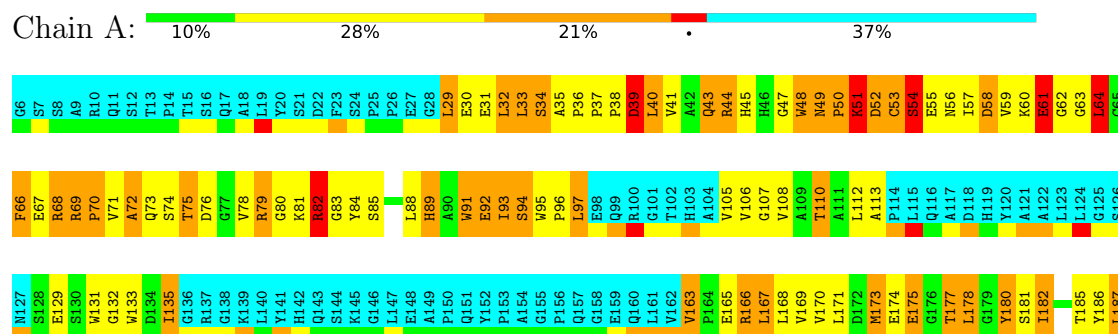


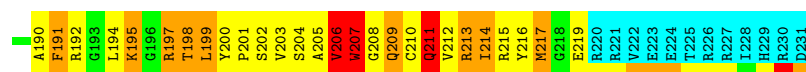
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

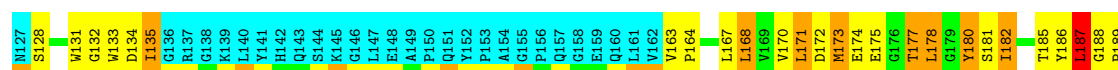
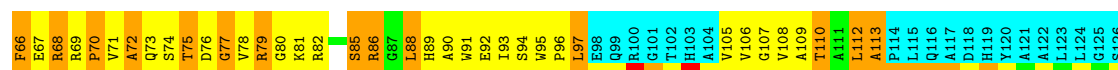
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





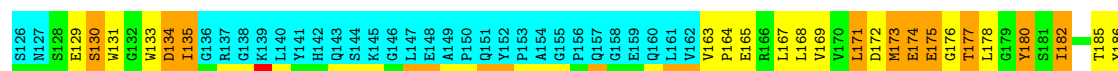
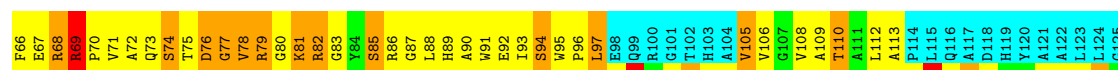
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.3 Score per residue for model 3

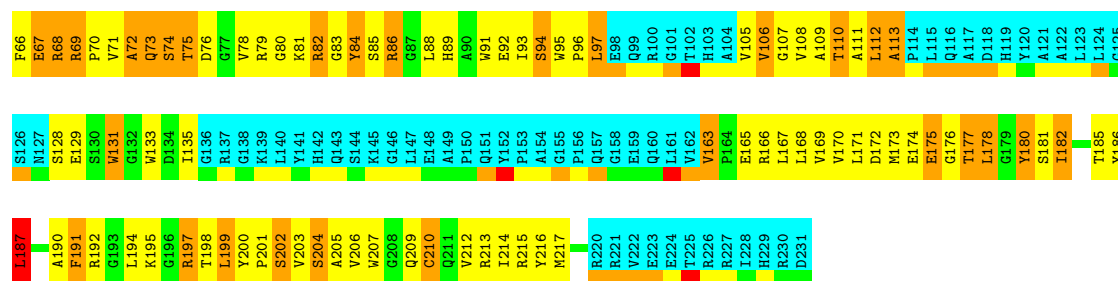
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.4 Score per residue for model 4

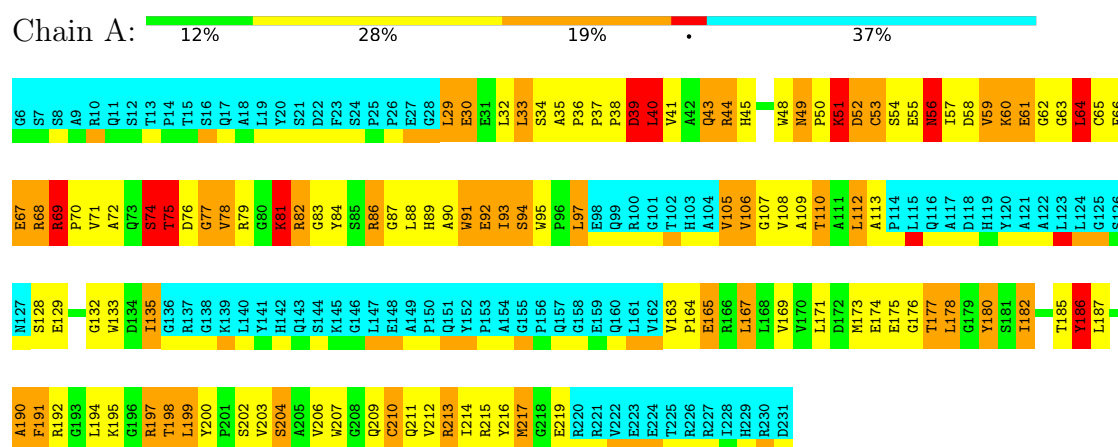
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





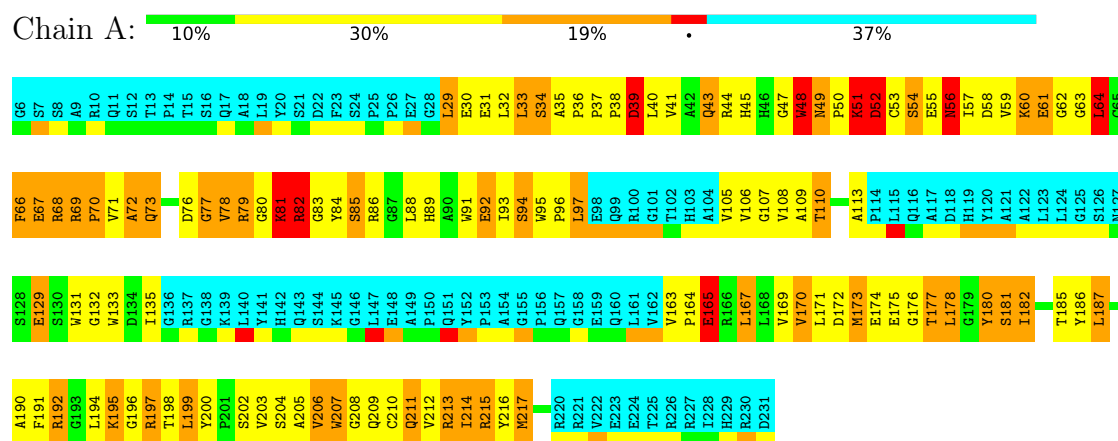
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



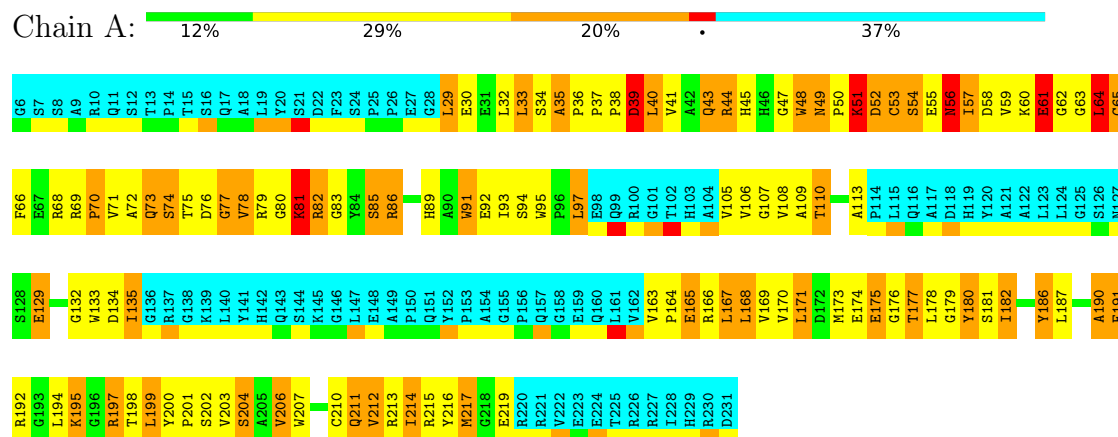
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



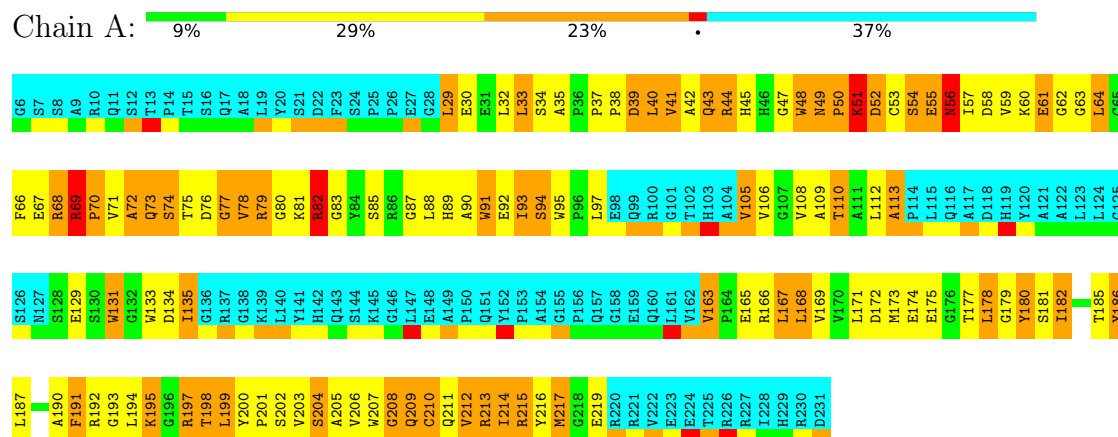
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



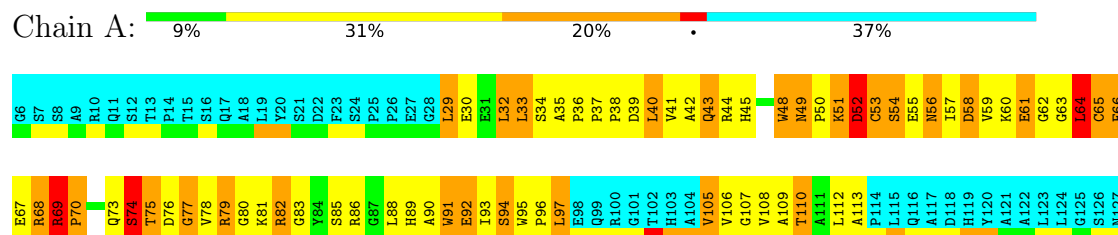
4.2.8 Score per residue for model 8

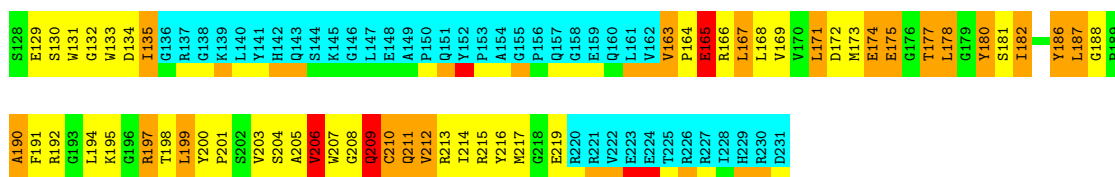
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.9 Score per residue for model 9

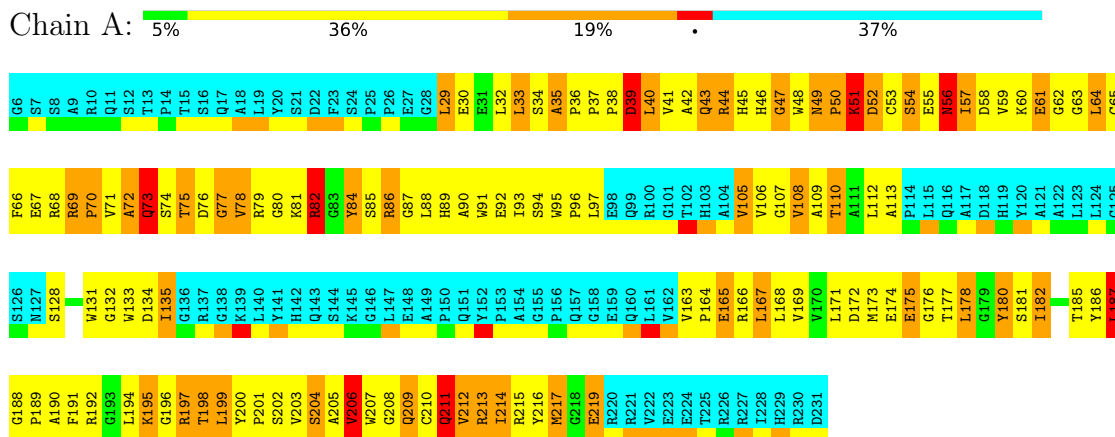
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





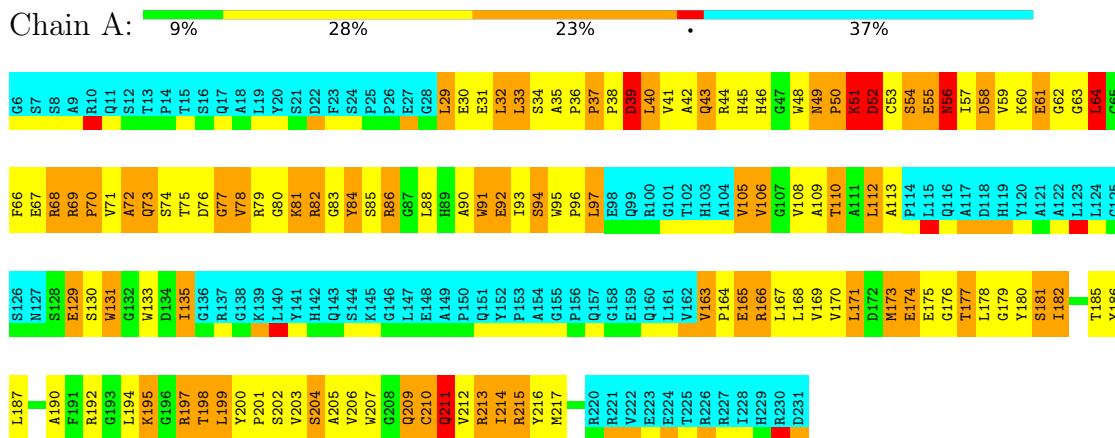
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.11 Score per residue for model 11

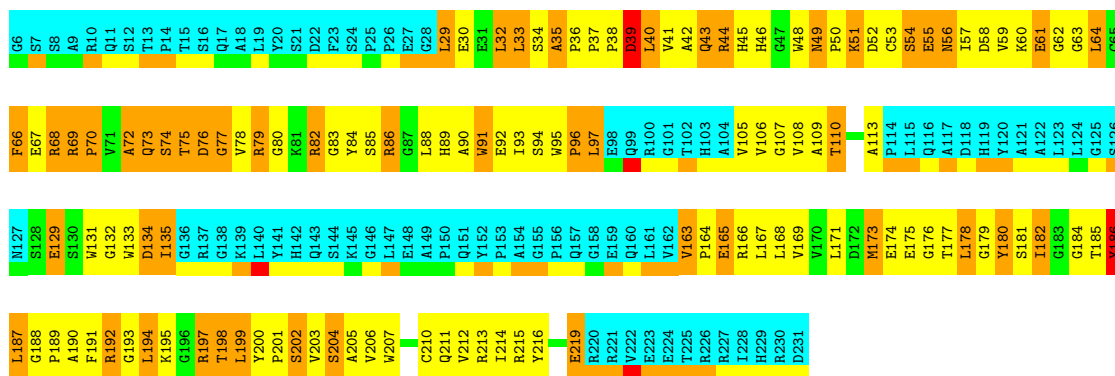
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.12 Score per residue for model 12

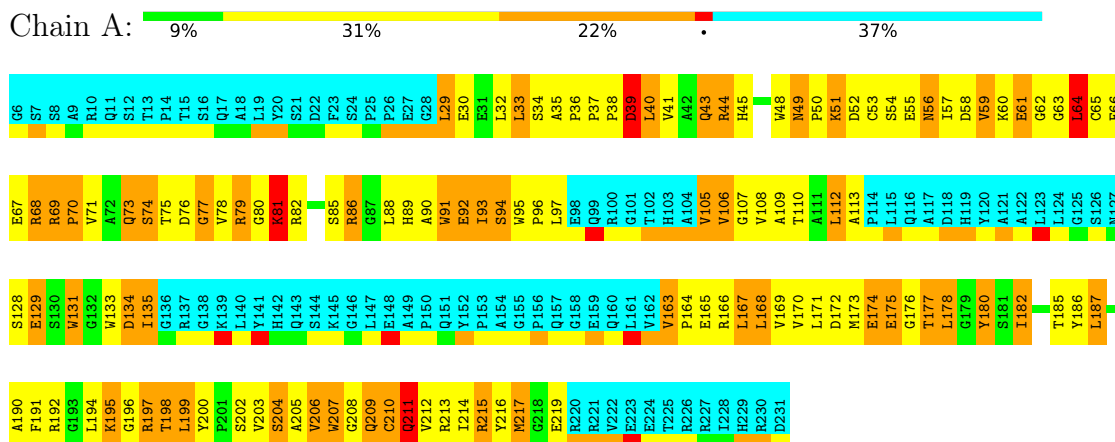
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





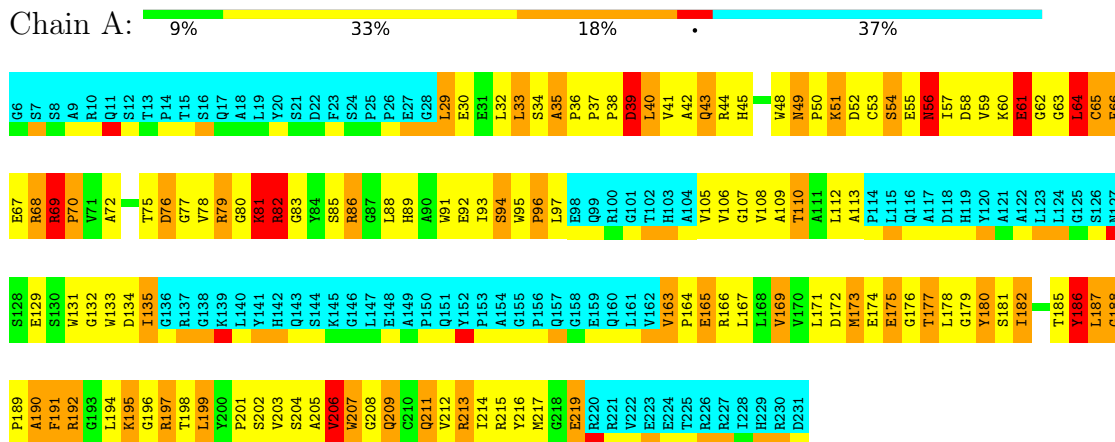
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



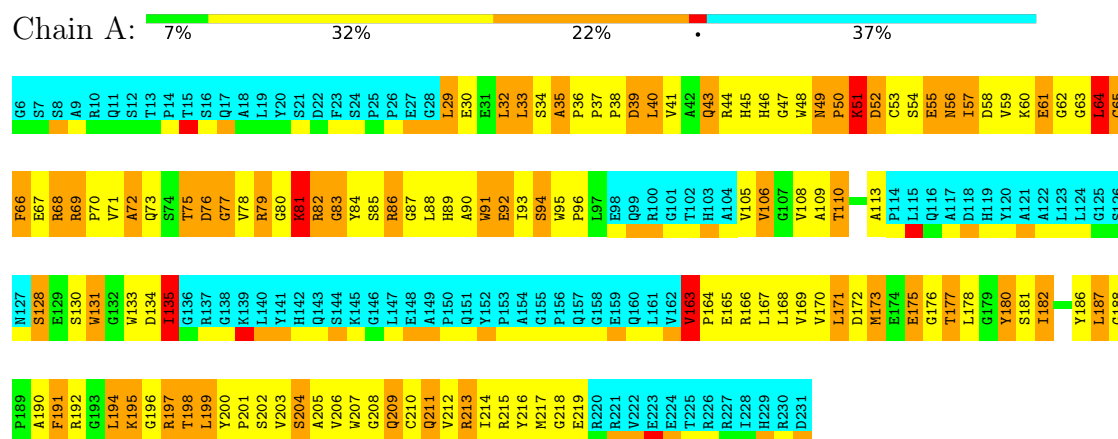
4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



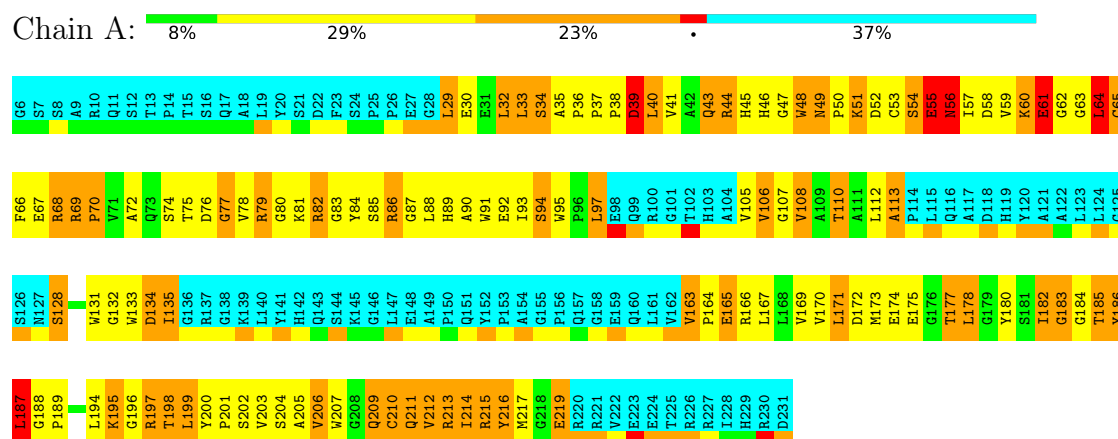
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



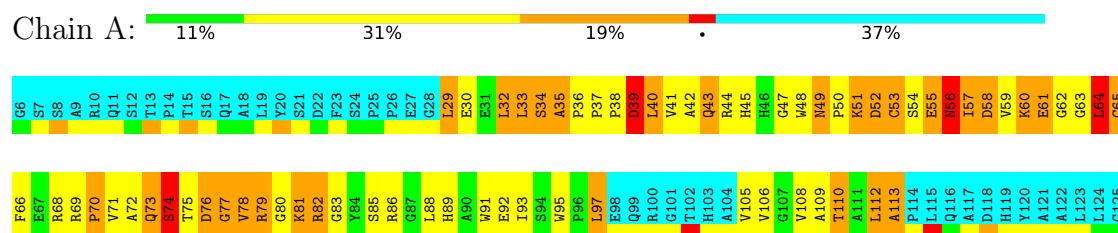
4.2.16 Score per residue for model 16

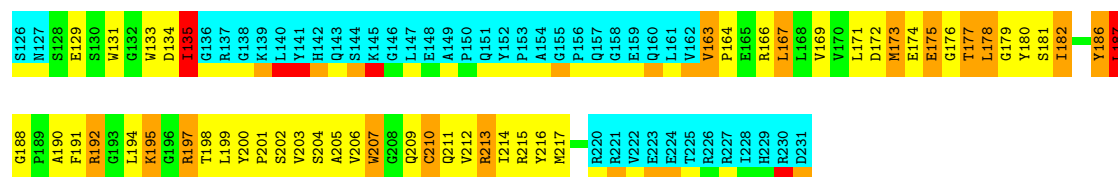
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.17 Score per residue for model 17

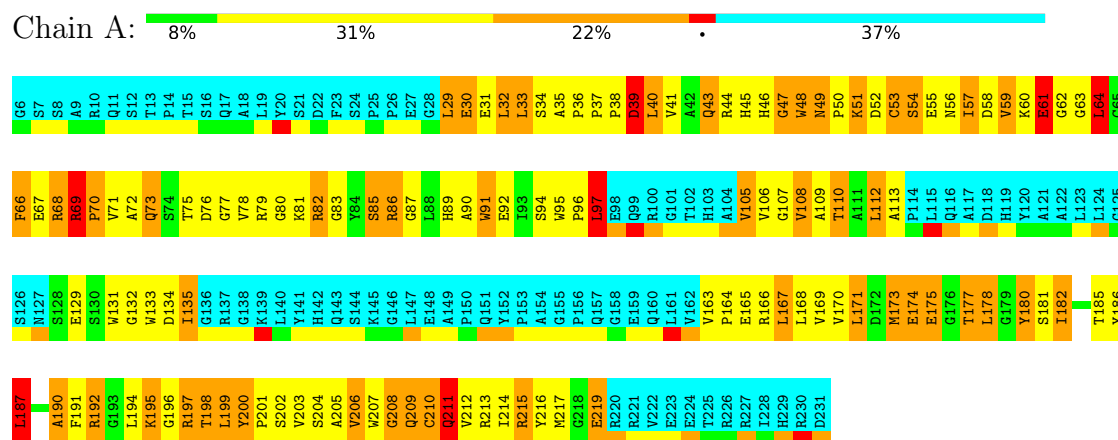
- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene





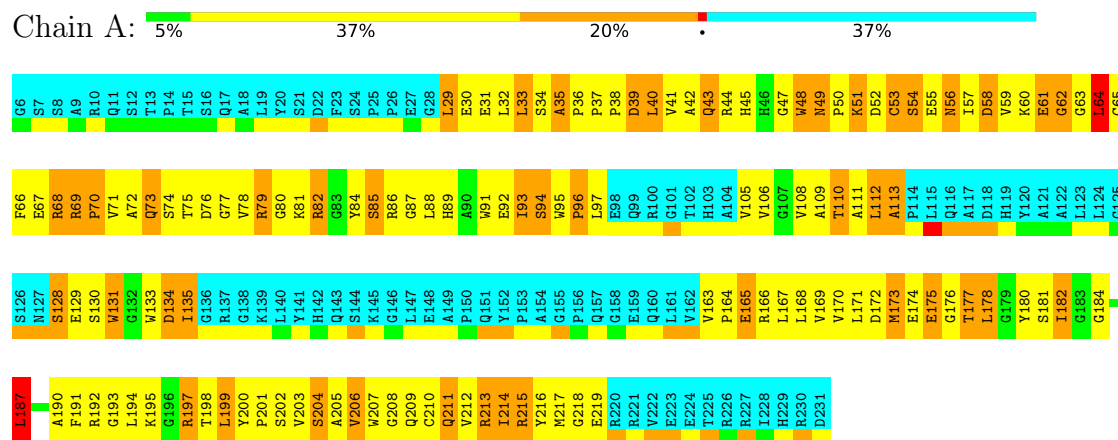
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: gene rich cluster, C9 gene



L187	G188	P189	A190	F191	R192	G193	L194	K195	G196	R197	T198	L199	Y200	P201	S202	V203	S204	A205	V206	W207	G208	Q209	C210	Q211	V212	R213	L214	R215	Y216	M217	G218	E219	R220	R221	V222	E223	T224	R225	R226	R227	L228	H229	R230	D231															
M127	S128	E129	S130	W131	G132	W133	D134	I135	G136	R137	G138	K139	L140	Y141	H142	Q143	S144	K145	G146	L147	E148	A149	P150	Q151	Y152	P153	A154	G155	P156	Q157	G158	E159	Q160	L161	V162	V163	P164	E165	R166	L167	L168	V169	W170	L171	D172	M173	E174	E175	G176	T177	L178	G179	Y180	S181	I182	G183	G184	T185	Y186
F66	E67	R68	R69	P70	Q73	S74	T75	D76	G77	V78	R79	G80	K81	R82	G83	Y84	S85	R86	G87	L88	H89	A90	Q91	E92	I93	S94	W95	P96	L97	E98	Q99	R100	G101	T102	H103	A104	V105	V106	G107	V108	A109	T110	A111	L112	A113	P114	L115	Q116	A117	D118	H119	Y120	A121	A122	L123	L124	G125	S126	
G6	S7	S8	A9	R10	Q11	S12	T13	P14	T15	S16	Q17	A18	L19	Y20	S21	D22	F23	S24	P25	P26	E27	G28	L29	E30	E31	L32	L33	S34	A35	P36	P37	P38	D39	L40	V41	A42	Q43	R44	H45	H46	G47	W48	M49	P50	R51	D52	C53	S54	E55	R56	I57	D58	V59	K60	E61	G62	G63	L64	C65

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 194 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.6
X-PLOR	structure solution	2.9.3
X-PLOR	refinement	2.9.3

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1112	1090	1090	359±23
All	All	22240	21800	21800	7173

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 163.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:HB3	1.15	1.39	6	20
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:HG23	1.13	1.20	18	5
1:A:105:VAL:HG13	1:A:204:SER:O	1.13	1.42	20	4
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:HD13	1.12	1.21	8	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:O	1.11	1.44	6	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:169:VAL:HG11	1.11	1.81	5	9
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:HG11	1.10	1.81	19	7
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:HD22	1.09	1.47	17	16
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:HB3	1.09	1.78	15	8
1:A:167:LEU:HD22	1:A:168:LEU:N	1.09	1.61	18	2
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HD22	1.08	1.13	19	17
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:O	1.08	1.47	19	8
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HD12	1.07	1.20	1	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD22	1.06	1.84	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:HD2	1.06	1.28	19	9
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:HG22	1.04	1.22	14	5
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HD23	1.04	1.24	3	4
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HG22	1.04	1.86	16	4
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HD13	1.04	1.83	10	5
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:HA	1.03	1.81	8	13
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:C	1.03	1.71	6	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:N	1.02	1.68	4	14
1:A:167:LEU:HD22	1:A:182:ILE:HG22	1.02	1.05	16	2
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:CG	1.02	1.84	5	7
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HD13	1.02	1.83	8	2
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD13	1.02	1.52	13	3
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:N	1.02	1.93	8	18
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CE3	1.01	1.90	10	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:CD2	1.01	1.85	14	16
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HG23	1.01	1.51	9	8
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HD22	1.01	1.86	17	15
1:A:106:VAL:HG13	1:A:202:SER:O	1.01	1.56	12	6
1:A:105:VAL:HG23	1:A:205:ALA:HA	1.00	1.32	9	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:203:VAL:HG23	1.00	1.86	10	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:HA	1.00	1.91	20	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:CA	0.99	1.87	13	8
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:HD11	0.99	1.57	6	13
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CD2	0.99	1.92	9	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD22	0.98	1.77	14	3
1:A:214:ILE:HD13	1:A:214:ILE:O	0.98	1.57	16	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CE1	0.97	1.94	14	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:202:SER:O	0.97	1.60	15	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:199:LEU:HD23	0.97	1.60	15	10
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:HG23	0.96	1.90	2	10
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:HD12	0.96	1.90	9	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CE1	0.96	1.95	4	14
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HB	0.96	1.95	20	4
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:HA	0.96	1.32	18	2
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:CE1	0.95	1.96	8	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:180:TYR:OH	0.95	1.61	5	3
1:A:167:LEU:HD13	1:A:167:LEU:O	0.95	1.61	18	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:C	0.95	1.81	10	20
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:C	0.94	1.82	13	16
1:A:167:LEU:HD12	1:A:182:ILE:HG22	0.94	1.39	13	2
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:HG23	0.94	1.33	2	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:LEU:HD11	1:A:199:LEU:O	0.94	1.60	1	10
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD22	0.94	1.79	19	2
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD22	0.93	1.98	2	6
1:A:36:PRO:O	1:A:40:LEU:HD12	0.93	1.62	18	2
1:A:35:ALA:HB3	1:A:36:PRO:HD3	0.93	1.40	13	10
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:CB	0.93	1.93	20	2
1:A:108:VAL:HG23	1:A:200:TYR:C	0.93	1.84	4	4
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:CE1	0.93	1.98	18	1
1:A:85:SER:OG	1:A:171:LEU:HD21	0.92	1.63	15	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HB	0.92	2.00	20	4
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG21	0.92	1.99	11	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:HD3	0.92	1.38	15	5
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD12	0.92	1.36	19	2
1:A:191:PHE:CE1	1:A:194:LEU:HD23	0.92	2.00	12	1
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD23	0.92	1.65	16	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CD1	0.91	2.00	19	12
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CE	0.91	2.33	19	10
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:HG21	0.91	2.00	14	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HD12	0.91	1.96	19	4
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:O	0.91	1.64	19	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CB	0.91	1.95	17	19
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:HG	0.91	1.66	6	18
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:CD	0.91	1.94	15	5
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:O	0.91	1.65	2	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:CB	0.91	1.95	19	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HB3	0.91	1.42	11	19
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CG1	0.91	2.53	17	6
1:A:108:VAL:HG11	1:A:199:LEU:HD13	0.91	1.43	14	4
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:CD2	0.90	2.01	6	5
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:HG21	0.90	1.96	14	2
1:A:30:GLU:HA	1:A:33:LEU:HD23	0.90	1.41	6	16
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:CB	0.90	1.97	1	8
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CD2	0.90	2.24	3	10
1:A:92:GLU:OE2	1:A:168:LEU:HD12	0.90	1.67	18	3
1:A:78:VAL:CG1	1:A:205:ALA:HB3	0.89	1.97	11	1
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HG3	0.89	1.45	10	2
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:HD12	0.89	1.98	1	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:HB2	0.89	1.44	1	4
1:A:92:GLU:CD	1:A:168:LEU:HD12	0.89	1.87	2	2
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:HD21	0.89	1.43	6	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:HG11	0.89	2.03	9	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD21	0.89	1.88	11	2
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CZ3	0.88	2.03	10	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:O	0.88	1.68	5	10
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CZ	0.88	2.03	6	2
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CD1	0.88	2.03	19	3
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:CD	0.88	1.98	12	9
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:CE1	0.88	2.04	5	6
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:N	0.88	2.06	2	7
1:A:163:VAL:HG11	1:A:182:ILE:HG21	0.88	1.44	4	2
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD22	0.87	1.83	13	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:HD2	0.87	1.47	7	1
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD13	0.87	1.84	7	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG21	0.87	1.47	2	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:HB2	0.87	1.45	9	4
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HB2	0.87	1.42	20	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:HG11	0.87	2.05	10	8
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CG	0.87	2.00	9	11
1:A:59:VAL:HB	1:A:65:CYS:C	0.87	1.90	17	1
1:A:35:ALA:HB3	1:A:36:PRO:CD	0.87	1.99	13	10
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD11	0.87	1.90	7	2
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:CD	0.86	2.38	16	3
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HB2	0.86	1.45	20	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CE1	0.86	2.64	10	5
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HG11	0.86	2.05	14	5
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD13	0.86	1.90	20	3
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:CD	0.86	1.90	8	2
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:CB	0.86	2.01	20	2
1:A:48:TRP:HZ2	1:A:66:PHE:HA	0.86	1.30	20	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:180:TYR:OH	0.86	1.71	9	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:HG21	0.85	2.06	14	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD23	0.85	1.46	14	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:214:ILE:O	0.85	1.70	13	4
1:A:194:LEU:O	1:A:194:LEU:HD23	0.85	1.70	10	11
1:A:106:VAL:HA	1:A:203:VAL:HG23	0.85	1.48	8	3
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:HD12	0.85	1.71	16	2
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:HB2	0.85	1.47	8	4
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:CD1	0.85	2.01	20	2
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:CB	0.85	2.24	6	20
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:O	0.85	1.70	10	2
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:CE1	0.85	2.07	11	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:HB3	0.85	1.48	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:ASP:O	1:A:135:ILE:HG23	0.85	1.72	17	5
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CD2	0.84	2.59	17	2
1:A:167:LEU:HD13	1:A:167:LEU:C	0.84	1.92	18	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG23	0.84	1.48	17	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HG23	0.84	2.08	5	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:167:LEU:HD11	0.84	2.01	6	2
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CD2	0.84	2.08	2	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:HB2	0.84	1.49	4	3
1:A:57:ILE:HG22	1:A:59:VAL:HG13	0.84	1.49	15	2
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:CE1	0.84	2.07	20	4
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CG2	0.84	2.60	16	6
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:HA	0.84	1.50	17	6
1:A:55:GLU:O	1:A:57:ILE:N	0.84	2.11	5	18
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	0.84	1.49	11	2
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:HB2	0.84	1.50	13	2
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:CG2	0.83	2.03	14	4
1:A:82:ARG:HD3	1:A:83:GLY:N	0.83	1.87	14	7
1:A:108:VAL:HG23	1:A:200:TYR:O	0.83	1.72	4	4
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:OE2	0.83	1.74	10	1
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HG11	0.83	1.89	14	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD22	0.83	2.07	17	1
1:A:133:TRP:HB3	1:A:163:VAL:HG11	0.83	1.49	9	2
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:HD12	0.83	1.88	14	5
1:A:205:ALA:HB1	1:A:212:VAL:HG21	0.83	1.48	6	2
1:A:93:ILE:HG22	1:A:180:TYR:OH	0.83	1.74	14	1
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:HD13	0.83	1.74	15	4
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HG21	0.82	1.73	3	3
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:CG	0.82	2.03	6	6
1:A:43:GLN:H	1:A:43:GLN:NE2	0.82	1.72	17	1
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:HE3	0.82	1.89	14	7
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CD1	0.82	2.09	4	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:HG22	0.82	1.98	16	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:HG13	0.82	2.09	10	2
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LYS:O	0.82	1.97	7	1
1:A:169:VAL:HG23	1:A:179:GLY:O	0.82	1.74	14	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG3	0.82	1.47	5	6
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:CD1	0.82	2.05	3	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG22	0.82	2.10	17	2
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE1	0.82	2.09	6	5
1:A:80:GLY:C	1:A:203:VAL:HG12	0.82	1.95	7	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:44:ARG:NH2	0.82	1.88	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HG21	0.82	1.89	17	4
1:A:182:ILE:O	1:A:185:THR:N	0.82	2.12	16	2
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:HD2	0.81	2.05	12	8
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:N	0.81	1.89	20	2
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HG	0.81	1.50	7	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:HA2	0.81	1.75	14	5
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:HD13	0.81	1.76	19	1
1:A:187:LEU:HD23	1:A:191:PHE:CZ	0.81	2.09	5	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CE3	0.81	2.09	6	3
1:A:167:LEU:HD22	1:A:182:ILE:CG2	0.81	2.00	16	2
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:HG11	0.81	1.76	4	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG2	0.81	1.50	16	4
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG22	0.81	2.10	5	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:66:PHE:CD1	0.81	2.48	18	4
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HG12	0.81	2.16	12	8
1:A:78:VAL:HG21	1:A:205:ALA:HB3	0.81	1.50	16	6
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG23	0.81	1.49	9	1
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:HD13	0.81	1.96	13	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CG	0.81	2.10	14	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:48:TRP:N	0.80	2.49	6	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:O	0.80	2.28	20	4
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD2	0.80	2.10	17	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG13	0.80	2.10	17	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:CA	0.80	2.07	17	2
1:A:72:ALA:HB3	1:A:76:ASP:HB3	0.80	1.53	18	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:CG	0.80	2.07	8	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:CD2	0.80	2.07	7	3
1:A:206:VAL:HG12	1:A:210:CYS:SG	0.80	2.17	10	3
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:CA	0.80	2.57	10	16
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:CG2	0.80	2.06	9	1
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:HD3	0.80	1.92	10	2
1:A:48:TRP:HE1	1:A:59:VAL:HG21	0.80	1.35	17	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CD2	0.79	2.08	6	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:75:THR:HG22	0.79	1.50	1	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:TRP:N	0.79	1.91	10	14
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:CD1	0.79	2.08	3	1
1:A:163:VAL:HG13	1:A:164:PRO:HD2	0.79	1.55	5	4
1:A:68:ARG:NE	1:A:72:ALA:HB2	0.79	1.92	17	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:CD1	0.79	2.06	1	3
1:A:209:GLN:O	1:A:210:CYS:O	0.79	2.00	11	5
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:HB	0.79	1.51	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LEU:HD22	1:A:213:ARG:HA	0.79	1.55	9	2
1:A:178:LEU:HD21	1:A:199:LEU:O	0.79	1.77	8	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:61:GLU:N	0.79	2.51	9	4
1:A:64:LEU:HD13	1:A:214:ILE:N	0.79	1.93	8	1
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CD2	0.79	2.50	7	4
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:CD	0.79	2.45	9	5
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:HG23	0.78	1.77	4	9
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HB3	0.78	1.54	16	5
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HG3	0.78	1.54	8	2
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:HA	0.78	1.55	12	2
1:A:78:VAL:HG11	1:A:205:ALA:HB3	0.78	1.55	11	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD22	0.78	1.55	17	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HD13	0.78	1.98	18	2
1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:HE2	0.78	2.07	10	6
1:A:108:VAL:HG21	1:A:133:TRP:CZ3	0.78	2.13	19	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:200:TYR:C	0.78	1.99	11	6
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:O	0.78	2.01	3	8
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HB2	0.78	1.56	15	1
1:A:48:TRP:CA	1:A:214:ILE:HD13	0.78	2.08	10	3
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD11	0.77	1.55	13	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG12	0.77	2.15	12	4
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:HB3	0.77	1.56	5	4
1:A:93:ILE:HD13	1:A:214:ILE:HG13	0.77	1.56	12	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:CB	0.77	2.08	20	3
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:HD12	0.77	1.94	13	7
1:A:167:LEU:HD12	1:A:167:LEU:N	0.77	1.95	4	4
1:A:180:TYR:C	1:A:187:LEU:HD22	0.77	2.00	13	1
1:A:89:HIS:HB2	1:A:171:LEU:HD23	0.77	1.57	9	4
1:A:108:VAL:HG21	1:A:178:LEU:HD11	0.77	1.56	4	3
1:A:54:SER:CB	1:A:75:THR:HG23	0.77	2.08	9	1
1:A:48:TRP:HA	1:A:214:ILE:HG21	0.77	1.54	20	3
1:A:167:LEU:HD12	1:A:167:LEU:O	0.77	1.79	10	2
1:A:135:ILE:HD11	1:A:163:VAL:HB	0.77	1.56	14	2
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CG2	0.77	2.66	16	2
1:A:53:CYS:HA	1:A:79:ARG:N	0.77	1.94	20	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:O	0.77	2.38	5	4
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD2	0.77	2.47	6	2
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:HB3	0.77	1.55	20	1
1:A:43:GLN:C	1:A:43:GLN:CD	0.77	2.44	3	5
1:A:95:TRP:HH2	1:A:204:SER:O	0.77	1.61	20	6
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CD1	0.77	2.15	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:HG2	0.76	1.80	8	4
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HG	0.76	1.57	9	5
1:A:167:LEU:HD12	1:A:182:ILE:CG2	0.76	2.09	13	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:59:VAL:HG13	0.76	2.11	15	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD23	0.76	2.15	9	2
1:A:171:LEU:HD21	1:A:173:MET:HE1	0.76	1.55	8	1
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:HG23	0.76	1.81	15	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CD1	0.76	2.73	8	7
1:A:197:ARG:NH2	1:A:199:LEU:HD21	0.76	1.95	8	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:CD2	0.76	2.09	14	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:HA	0.76	1.81	12	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:HA	0.76	2.10	9	2
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:CB	0.76	2.11	7	2
1:A:180:TYR:N	1:A:187:LEU:HD11	0.76	1.96	8	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HG	0.76	1.55	17	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:214:ILE:HG22	0.76	1.58	9	1
1:A:91:TRP:HB2	1:A:93:ILE:HD11	0.76	1.57	13	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:HG22	0.76	2.15	17	4
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HG12	0.76	1.58	5	1
1:A:213:ARG:HA	1:A:213:ARG:NE	0.76	1.96	5	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:172:ASP:N	0.76	1.96	20	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:HD3	0.76	1.56	20	3
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD11	0.76	2.10	7	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:HG22	0.76	2.16	12	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:187:LEU:HD22	0.76	2.16	20	1
1:A:182:ILE:N	1:A:182:ILE:HD13	0.75	1.95	6	4
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:HA	0.75	1.81	4	9
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD13	0.75	1.82	2	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:HG22	0.75	2.07	14	4
1:A:135:ILE:HD13	1:A:135:ILE:N	0.75	1.96	13	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:C	0.75	2.00	18	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:44:ARG:HH21	0.75	1.41	18	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CE1	0.75	2.74	8	3
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:HD22	0.75	1.80	7	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG22	0.75	2.17	16	2
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:CD	0.75	2.65	19	19
1:A:81:LYS:C	1:A:202:SER:HA	0.75	2.01	7	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:HD22	0.75	2.17	11	2
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:HD12	0.75	1.82	2	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HB2	0.75	1.57	9	2
1:A:164:PRO:HD2	1:A:182:ILE:HG21	0.75	1.59	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CG	0.75	2.70	17	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:CD1	0.75	2.08	8	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HE2	0.75	1.82	9	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CZ	0.75	2.75	2	9
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CG1	0.75	2.69	8	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:CB	0.75	2.11	15	1
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:CE2	0.74	2.17	6	4
1:A:106:VAL:HG23	1:A:135:ILE:HD11	0.74	1.58	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CG	0.74	2.75	10	3
1:A:167:LEU:CB	1:A:182:ILE:HG22	0.74	2.12	6	5
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:CD	0.74	2.65	15	2
1:A:63:GLY:O	1:A:64:LEU:C	0.74	2.25	16	20
1:A:199:LEU:HD12	1:A:199:LEU:H	0.74	1.39	10	12
1:A:48:TRP:HH2	1:A:212:VAL:HG12	0.74	1.42	12	3
1:A:51:LYS:O	1:A:79:ARG:O	0.74	2.05	15	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:182:ILE:HD12	0.74	2.18	20	1
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:HD3	0.74	2.12	20	4
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:HD12	0.74	1.59	3	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:134:ASP:HA	0.74	1.57	8	2
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:HD23	0.74	1.83	11	1
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:CD2	0.74	2.55	13	15
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HB3	0.74	1.59	3	2
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:HG22	0.74	1.60	5	4
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:CB	0.74	2.12	9	2
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CE1	0.74	2.76	4	9
1:A:82:ARG:HD3	1:A:83:GLY:H	0.74	1.43	1	6
1:A:51:LYS:C	1:A:80:GLY:HA3	0.74	2.02	20	2
1:A:167:LEU:CD1	1:A:182:ILE:HG22	0.74	2.12	14	2
1:A:35:ALA:O	1:A:37:PRO:HD3	0.74	1.83	8	7
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:HE2	0.74	1.96	19	8
1:A:47:GLY:O	1:A:49:ASN:N	0.74	2.21	6	2
1:A:205:ALA:CB	1:A:212:VAL:HG11	0.74	2.13	3	2
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CD2	0.74	2.18	14	2
1:A:163:VAL:N	1:A:164:PRO:HD2	0.73	1.98	9	4
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CB	0.73	2.70	16	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:CG	0.73	2.11	17	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:CB	0.73	2.11	8	3
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:CG2	0.73	2.13	13	13
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:HD2	0.73	1.99	5	2
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:HD21	0.73	2.13	15	2
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CD1	0.73	2.57	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ASP:O	1:A:77:GLY:C	0.73	2.27	8	10
1:A:93:ILE:HG21	1:A:180:TYR:OH	0.73	1.83	6	4
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HG	0.73	1.60	12	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HD21	0.73	2.13	19	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:C	0.73	2.04	19	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CG	0.73	2.77	10	7
1:A:95:TRP:HE1	1:A:97:LEU:HD23	0.73	1.44	16	2
1:A:66:PHE:CZ	1:A:78:VAL:HG11	0.73	2.18	16	2
1:A:91:TRP:CE3	1:A:216:TYR:CE2	0.73	2.76	13	2
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:HG12	0.73	1.59	8	1
1:A:91:TRP:HZ2	1:A:171:LEU:HD22	0.73	1.43	2	7
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HG23	0.73	2.19	10	3
1:A:82:ARG:CD	1:A:83:GLY:N	0.73	2.51	15	1
1:A:59:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CD1	0.73	2.71	19	4
1:A:187:LEU:HD21	1:A:191:PHE:CZ	0.73	2.17	12	1
1:A:85:SER:CB	1:A:171:LEU:HD21	0.73	2.13	15	2
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:N	0.73	2.22	19	1
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:ND2	0.73	2.52	12	11
1:A:108:VAL:HG21	1:A:178:LEU:CD1	0.73	2.13	4	2
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:NE	0.73	1.98	3	3
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:CD1	0.73	2.18	11	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:HA	0.73	1.60	17	4
1:A:56:ASN:ND2	1:A:56:ASN:H	0.73	1.81	20	13
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG23	0.73	2.19	5	1
1:A:177:THR:HB	1:A:194:LEU:HD22	0.73	1.61	10	2
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:HG2	0.72	1.60	10	7
1:A:66:PHE:HE2	1:A:212:VAL:HG22	0.72	1.41	5	1
1:A:213:ARG:HA	1:A:213:ARG:HE	0.72	1.43	5	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:44:ARG:NH2	0.72	1.99	18	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:CE	0.72	2.37	9	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:39:ASP:O	0.72	2.27	1	4
1:A:187:LEU:HD22	1:A:191:PHE:CE1	0.72	2.19	3	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:76:ASP:HA	0.72	1.59	8	2
1:A:186:TYR:O	1:A:186:TYR:CG	0.72	2.41	12	3
1:A:187:LEU:HD11	1:A:194:LEU:HD12	0.72	1.60	14	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:HD13	0.72	1.58	18	4
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:OE1	0.72	2.27	2	6
1:A:40:LEU:HD13	1:A:40:LEU:C	0.72	2.05	8	7
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CD2	0.72	2.72	17	8
1:A:178:LEU:HD23	1:A:178:LEU:N	0.72	1.99	9	6
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:CD	0.72	2.53	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CG	0.72	2.43	12	11
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CE2	0.72	2.77	15	7
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CZ	0.72	2.78	17	3
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:CZ3	0.72	2.20	6	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:HG22	0.72	1.83	14	2
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CD2	0.72	2.78	17	4
1:A:37:PRO:CA	1:A:41:VAL:HG21	0.72	2.14	14	2
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:HD2	0.72	1.85	12	10
1:A:197:ARG:NH1	1:A:199:LEU:HD11	0.72	2.00	4	3
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:HD13	0.72	2.15	10	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CD1	0.72	2.78	7	4
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CZ	0.72	2.77	8	5
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CE1	0.72	2.20	6	4
1:A:106:VAL:CA	1:A:203:VAL:HG23	0.72	2.14	8	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:66:PHE:CE2	0.72	2.78	10	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:H	0.71	1.44	10	4
1:A:44:ARG:NE	1:A:57:ILE:O	0.71	2.24	5	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:71:VAL:HG21	0.71	1.62	15	1
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:N	0.71	2.23	5	4
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:CB	0.71	2.69	3	7
1:A:81:LYS:CE	1:A:109:ALA:HB3	0.71	2.16	2	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:HE	0.71	1.46	4	2
1:A:54:SER:H	1:A:78:VAL:HA	0.71	1.45	9	4
1:A:50:PRO:HG2	1:A:53:CYS:HB2	0.71	1.63	1	1
1:A:49:ASN:O	1:A:53:CYS:HB3	0.71	1.86	9	8
1:A:168:LEU:HD23	1:A:168:LEU:C	0.71	2.06	10	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:O	0.71	2.38	12	9
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:HG22	0.71	2.21	4	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:NE	0.71	2.01	5	2
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HD11	0.71	2.15	5	1
1:A:50:PRO:O	1:A:52:ASP:N	0.71	2.23	7	2
1:A:44:ARG:CB	1:A:59:VAL:HG13	0.71	2.16	20	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:HB2	0.71	2.20	16	3
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:CG	0.71	2.14	10	3
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:HD2	0.71	1.61	15	8
1:A:39:ASP:OD1	1:A:40:LEU:N	0.71	2.24	20	4
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:HD12	0.71	2.15	11	1
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:N	0.70	2.23	20	16
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:CZ	0.70	2.16	5	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:CD1	0.70	2.56	10	20
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG21	0.70	2.22	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HA	0.70	1.61	13	6
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:N	0.70	2.01	5	3
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:CD1	0.70	2.21	18	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CD1	0.70	2.75	13	8
1:A:108:VAL:HG11	1:A:199:LEU:CD1	0.70	2.17	10	4
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:HG23	0.70	2.21	7	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:186:TYR:O	0.70	2.44	16	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD13	0.70	2.21	18	3
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:CA	0.70	2.17	19	7
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CG	0.70	2.17	6	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:CD1	0.70	2.16	10	1
1:A:70:PRO:HD2	1:A:75:THR:HG21	0.70	1.62	1	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CD2	0.70	2.79	1	4
1:A:38:PRO:O	1:A:39:ASP:C	0.69	2.31	14	20
1:A:112:LEU:O	1:A:113:ALA:C	0.69	2.30	16	11
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:HD3	0.69	2.07	9	11
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:C	0.69	2.29	5	2
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CD1	0.69	2.80	7	2
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HB2	0.69	1.63	12	1
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:HD21	0.69	1.64	19	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:53:CYS:SG	0.69	2.65	8	2
1:A:48:TRP:HD1	1:A:66:PHE:CE2	0.69	2.05	9	1
1:A:40:LEU:C	1:A:43:GLN:OE1	0.69	2.30	18	1
1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CD	0.69	2.54	1	5
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:HA2	0.69	1.63	8	4
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:CB	0.69	2.75	20	2
1:A:95:TRP:CG	1:A:135:ILE:HD12	0.69	2.22	9	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:167:LEU:C	0.69	2.07	9	2
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:CD	0.69	2.40	15	10
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:CG	0.69	2.80	20	3
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG22	0.69	1.64	20	3
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:CB	0.69	2.61	19	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:44:ARG:N	0.69	2.41	8	5
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:HB3	0.69	1.64	6	1
1:A:48:TRP:N	1:A:48:TRP:CE3	0.69	2.61	6	4
1:A:48:TRP:CH2	1:A:66:PHE:CD2	0.69	2.80	10	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:164:PRO:HB2	0.69	2.22	10	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:N	0.69	2.03	17	1
1:A:207:TRP:CG	1:A:208:GLY:N	0.69	2.60	6	3
1:A:80:GLY:O	1:A:81:LYS:C	0.69	2.27	7	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:201:PRO:HG3	0.69	1.61	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:HD12	0.69	2.07	11	2
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:ND2	0.69	2.02	16	4
1:A:76:ASP:O	1:A:78:VAL:N	0.69	2.26	12	3
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE2	0.69	2.23	11	2
1:A:191:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HD23	0.69	2.21	12	1
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CD2	0.69	2.23	1	12
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CE2	0.69	2.81	2	3
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:O	0.69	1.88	7	4
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:HD12	0.69	1.64	20	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG11	0.69	2.22	6	3
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CD2	0.69	2.80	10	2
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:ND2	0.69	2.03	9	4
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD23	0.69	1.46	9	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:HD12	0.69	1.64	11	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:202:SER:O	0.69	2.39	15	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HB	0.69	2.23	20	1
1:A:54:SER:CB	1:A:78:VAL:HG11	0.69	2.18	1	1
1:A:184:GLY:O	1:A:186:TYR:CD1	0.69	2.46	16	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG2	0.69	2.18	2	5
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:H	0.69	1.48	4	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HG21	0.69	1.63	17	1
1:A:109:ALA:CA	1:A:199:LEU:HD12	0.69	2.17	17	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:167:LEU:HD21	0.68	1.64	8	3
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:HA	0.68	1.64	15	3
1:A:48:TRP:HZ2	1:A:212:VAL:O	0.68	1.72	5	2
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:CG2	0.68	2.76	13	3
1:A:51:LYS:HE3	1:A:51:LYS:CA	0.68	2.19	8	3
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:C	0.68	2.32	10	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CE2	0.68	2.77	16	3
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD2	0.68	2.56	13	3
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:NE2	0.68	2.47	4	7
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:HD13	0.68	2.18	10	4
1:A:54:SER:HB2	1:A:76:ASP:O	0.68	1.88	13	2
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:H	0.68	1.49	17	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:197:ARG:HD2	0.68	1.64	15	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:CG2	0.68	2.77	19	2
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HB2	0.68	1.66	2	7
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:C	0.68	2.32	16	5
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:CD	0.68	2.62	11	11
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:C	0.68	2.08	12	5
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CE1	0.68	2.23	14	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:HG21	0.68	2.04	17	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CG	0.68	2.81	18	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HD22	0.68	2.19	8	5
1:A:199:LEU:HD12	1:A:199:LEU:N	0.68	2.04	10	6
1:A:37:PRO:O	1:A:42:ALA:HB2	0.68	1.87	12	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:CA	0.68	2.41	7	1
1:A:45:HIS:N	1:A:45:HIS:CD2	0.68	2.62	5	8
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:HG23	0.68	2.18	5	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:NE	0.68	2.57	10	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:HG13	0.68	2.19	20	2
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:HD3	0.67	2.19	16	15
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:HD21	0.67	2.02	2	6
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:CG2	0.67	2.76	2	3
1:A:91:TRP:NE1	1:A:216:TYR:CZ	0.67	2.62	2	6
1:A:95:TRP:CH2	1:A:204:SER:O	0.67	2.44	20	9
1:A:108:VAL:HG22	1:A:201:PRO:HA	0.67	1.63	11	2
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:O	0.67	1.88	16	2
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HA	0.67	1.65	18	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:O	0.67	1.88	6	3
1:A:48:TRP:CE2	1:A:214:ILE:HG22	0.67	2.24	12	5
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:NE	0.67	2.28	20	9
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD13	0.67	2.24	15	4
1:A:34:SER:O	1:A:35:ALA:O	0.67	2.12	12	6
1:A:56:ASN:CB	1:A:71:VAL:HG21	0.67	2.19	15	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CE1	0.67	2.77	10	15
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CZ	0.67	2.24	15	3
1:A:163:VAL:HG11	1:A:182:ILE:HB	0.67	1.66	16	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:211:GLN:HA	0.67	1.65	17	1
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:N	0.67	2.26	8	8
1:A:171:LEU:CG	1:A:178:LEU:HD23	0.67	2.20	7	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:N	0.67	2.04	15	7
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CG1	0.67	2.83	15	7
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:HG3	0.67	1.64	11	1
1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CD1	0.67	2.62	12	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:CA	0.67	2.20	15	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:168:LEU:O	0.67	1.89	18	1
1:A:50:PRO:HG3	1:A:203:VAL:HG13	0.67	1.66	1	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HA	0.67	1.66	2	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD12	0.67	2.10	4	2
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:HG23	0.67	1.67	6	2
1:A:59:VAL:HA	1:A:65:CYS:O	0.67	1.89	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HG11	0.67	2.25	10	2
1:A:64:LEU:O	1:A:64:LEU:HD23	0.67	1.89	8	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG12	0.67	1.66	1	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:203:VAL:O	0.67	2.42	1	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:45:HIS:CE1	0.67	2.78	13	8
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:CD1	0.67	2.70	10	5
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:CA	0.67	2.15	18	1
1:A:92:GLU:N	1:A:215:ARG:O	0.67	2.28	18	20
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:HG13	0.67	1.90	16	4
1:A:64:LEU:HD13	1:A:214:ILE:H	0.67	1.48	8	2
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:105:VAL:N	0.67	1.88	18	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:214:ILE:CD1	0.67	2.73	8	4
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:HD12	0.67	2.25	2	1
1:A:80:GLY:N	1:A:203:VAL:O	0.67	2.28	19	3
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:N	0.67	2.27	5	9
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HG3	0.67	1.90	5	1
1:A:187:LEU:HD23	1:A:191:PHE:HZ	0.67	1.49	5	1
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:CZ3	0.67	2.48	9	2
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CG	0.67	2.25	17	1
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD23	0.66	1.89	9	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:197:ARG:CD	0.66	2.21	15	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:58:ASP:OD1	0.66	1.90	17	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:59:VAL:HG13	0.66	2.20	20	2
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HB2	0.66	2.10	2	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:HG13	0.66	2.25	14	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:O	0.66	1.89	18	4
1:A:54:SER:CA	1:A:78:VAL:HG11	0.66	2.21	1	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG21	0.66	1.65	4	3
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CG1	0.66	2.78	8	2
1:A:56:ASN:ND2	1:A:75:THR:HG21	0.66	2.06	20	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:CD	0.66	2.72	13	18
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD13	0.66	2.04	1	2
1:A:35:ALA:O	1:A:37:PRO:CD	0.66	2.44	10	3
1:A:177:THR:HG22	1:A:198:THR:HB	0.66	1.66	10	2
1:A:59:VAL:CB	1:A:66:PHE:HA	0.66	2.19	9	4
1:A:36:PRO:HB2	1:A:37:PRO:CD	0.66	2.21	20	3
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:HD2	0.66	2.20	15	1
1:A:68:ARG:CZ	1:A:207:TRP:CZ3	0.66	2.79	18	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CE2	0.66	2.25	2	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:169:VAL:CG1	0.66	2.76	17	6
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HD23	0.66	2.20	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:C	0.66	2.10	13	2
1:A:206:VAL:HG12	1:A:211:GLN:OE1	0.66	1.91	17	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:CE1	0.66	2.84	20	5
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:HD2	0.66	2.21	7	6
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HG23	0.66	1.68	7	1
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:HD2	0.66	2.04	12	3
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:CD2	0.66	2.40	13	2
1:A:57:ILE:HG23	1:A:67:GLU:O	0.66	1.91	16	4
1:A:167:LEU:CD2	1:A:180:TYR:CE1	0.66	2.78	18	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:C	0.66	2.12	1	10
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:CG	0.66	2.21	8	2
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:CG2	0.66	2.58	8	2
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:HD12	0.66	1.68	9	1
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:CD	0.66	2.74	5	2
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:HA	0.66	1.68	6	1
1:A:163:VAL:HG13	1:A:163:VAL:O	0.66	1.90	10	1
1:A:51:LYS:CE	1:A:51:LYS:H	0.66	2.04	4	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG23	0.66	1.68	5	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:O	0.66	1.90	12	4
1:A:105:VAL:HG22	1:A:105:VAL:O	0.66	1.90	20	1
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:CA	0.65	2.44	2	2
1:A:64:LEU:CG	1:A:214:ILE:HG22	0.65	2.21	10	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:CD2	0.65	2.78	7	3
1:A:163:VAL:CB	1:A:164:PRO:CD	0.65	2.74	15	5
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:HB3	0.65	1.91	3	6
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:HA	0.65	1.67	7	2
1:A:51:LYS:CE	1:A:80:GLY:HA2	0.65	2.21	15	1
1:A:197:ARG:C	1:A:197:ARG:CD	0.65	2.64	11	16
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:N	0.65	2.59	5	3
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:HB3	0.65	1.67	19	4
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:CD1	0.65	2.20	17	2
1:A:76:ASP:CB	1:A:207:TRP:CD1	0.65	2.80	19	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:HB2	0.65	2.20	1	4
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CA	0.65	2.22	4	8
1:A:213:ARG:O	1:A:213:ARG:NE	0.65	2.29	2	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:213:ARG:O	0.65	1.91	10	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:207:TRP:CE3	0.65	2.26	17	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:CG2	0.65	2.80	20	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:201:PRO:N	0.65	2.07	3	6
1:A:49:ASN:O	1:A:49:ASN:ND2	0.65	2.29	18	6
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:NE	0.65	2.29	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:VAL:HG11	1:A:167:LEU:CG	0.65	2.21	7	1
1:A:185:THR:O	1:A:187:LEU:N	0.65	2.30	16	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:CZ	0.65	2.85	20	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:214:ILE:HG22	0.65	1.66	3	2
1:A:169:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CZ	0.65	2.26	11	2
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:HG23	0.65	1.90	12	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:55:GLU:CB	0.65	2.21	3	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG11	0.65	2.27	12	4
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:CG1	0.65	2.80	9	5
1:A:57:ILE:HD13	1:A:57:ILE:N	0.65	2.04	7	1
1:A:177:THR:C	1:A:178:LEU:HD12	0.65	2.13	7	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:O	0.65	2.49	8	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:N	0.65	2.65	16	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:182:ILE:CD1	0.65	2.80	20	2
1:A:191:PHE:CE1	1:A:194:LEU:CD2	0.65	2.80	12	1
1:A:64:LEU:HD11	1:A:212:VAL:O	0.65	1.92	19	2
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:169:VAL:CG1	0.65	2.79	1	5
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:CG2	0.65	2.60	4	1
1:A:209:GLN:O	1:A:210:CYS:C	0.65	2.34	18	5
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HG21	0.65	2.27	20	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:HD13	0.65	1.68	2	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:180:TYR:CZ	0.65	2.80	11	7
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:O	0.65	2.50	15	3
1:A:47:GLY:C	1:A:48:TRP:CE3	0.65	2.70	7	1
1:A:105:VAL:N	1:A:204:SER:O	0.65	2.29	9	2
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:N	0.65	2.30	18	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE1	0.64	2.28	3	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HG23	0.64	2.22	3	1
1:A:94:SER:CB	1:A:165:GLU:O	0.64	2.45	14	4
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:78:VAL:HG11	0.64	2.27	10	2
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:HA3	0.64	1.70	13	5
1:A:178:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HD3	0.64	1.68	11	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:N	0.64	2.07	19	1
1:A:51:LYS:O	1:A:53:CYS:N	0.64	2.30	15	4
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CG1	0.64	2.80	13	1
1:A:214:ILE:HD13	1:A:214:ILE:C	0.64	2.13	16	1
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:HD23	0.64	2.12	20	2
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HB3	0.64	2.28	4	2
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:CD1	0.64	2.80	15	2
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:HB3	0.64	1.70	11	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:C	0.64	2.12	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:CD2	0.64	2.50	3	4
1:A:94:SER:C	1:A:212:VAL:HG23	0.64	2.13	4	3
1:A:56:ASN:ND2	1:A:56:ASN:N	0.64	2.45	15	8
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:NE	0.64	2.08	5	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:C	0.64	2.12	6	2
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:HA	0.64	1.68	17	2
1:A:88:LEU:HD12	1:A:172:ASP:OD2	0.64	1.92	10	2
1:A:95:TRP:CG	1:A:212:VAL:HG23	0.64	2.27	14	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CB	0.64	2.45	2	1
1:A:56:ASN:N	1:A:56:ASN:ND2	0.64	2.46	3	2
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:CB	0.64	2.81	9	4
1:A:167:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG1	0.64	2.22	5	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:207:TRP:CZ3	0.64	2.81	7	2
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:CB	0.64	2.45	1	11
1:A:206:VAL:HG11	1:A:209:GLN:HB3	0.64	1.69	10	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:44:ARG:N	0.64	2.30	18	1
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:ND2	0.64	2.30	7	6
1:A:214:ILE:HG23	1:A:214:ILE:O	0.64	1.92	4	3
1:A:187:LEU:HD23	1:A:187:LEU:O	0.64	1.93	12	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:HB3	0.64	1.70	19	1
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:ND1	0.64	2.31	15	12
1:A:190:ALA:O	1:A:194:LEU:HB2	0.64	1.93	15	19
1:A:38:PRO:O	1:A:41:VAL:N	0.64	2.31	13	6
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:CB	0.64	2.76	9	5
1:A:91:TRP:HB2	1:A:216:TYR:CD2	0.64	2.27	4	6
1:A:135:ILE:H	1:A:135:ILE:HD12	0.64	1.51	5	1
1:A:178:LEU:HD21	1:A:198:THR:CG2	0.64	2.22	5	2
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CE1	0.64	2.80	6	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:HD1	0.64	1.53	20	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HB2	0.63	1.68	8	4
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CB	0.63	2.23	8	4
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CE2	0.63	2.51	3	8
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HG23	0.63	1.68	18	2
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:HB2	0.63	2.22	19	3
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CG	0.63	2.45	9	6
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:CB	0.63	2.24	11	3
1:A:54:SER:HB2	1:A:75:THR:HG21	0.63	1.70	7	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CB	0.63	2.80	20	3
1:A:52:ASP:N	1:A:80:GLY:HA3	0.63	2.07	9	3
1:A:169:VAL:HG23	1:A:180:TYR:CZ	0.63	2.28	20	1
1:A:186:TYR:O	1:A:186:TYR:CD2	0.63	2.51	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HG21	0.63	1.93	2	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HD11	0.63	2.07	11	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CE1	0.63	2.86	16	1
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CE2	0.63	2.82	2	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD13	0.63	2.14	4	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:207:TRP:CZ2	0.63	2.27	18	2
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:N	0.63	2.30	15	18
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:C	0.63	2.13	2	3
1:A:175:GLU:HB3	1:A:177:THR:OG1	0.63	1.93	17	19
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:HG23	0.63	2.29	10	3
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CD2	0.63	2.46	19	4
1:A:43:GLN:NE2	1:A:43:GLN:C	0.63	2.52	6	3
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD21	0.63	1.69	7	1
1:A:77:GLY:O	1:A:78:VAL:CG1	0.63	2.46	9	3
1:A:82:ARG:HD2	1:A:83:GLY:N	0.63	2.08	5	3
1:A:93:ILE:HB	1:A:167:LEU:HD12	0.63	1.67	9	1
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:HG22	0.63	1.70	9	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:59:VAL:HB	0.63	2.28	20	1
1:A:94:SER:O	1:A:96:PRO:HD3	0.63	1.93	9	8
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HB3	0.63	2.29	13	3
1:A:49:ASN:C	1:A:49:ASN:ND2	0.63	2.51	5	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:HG22	0.63	2.28	11	4
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ILE:H	0.63	1.96	7	5
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG22	0.63	1.69	8	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:105:VAL:HG22	0.63	2.29	9	1
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:HE22	0.63	1.97	14	2
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD12	0.63	2.14	15	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:HD2	0.63	1.71	15	1
1:A:41:VAL:O	1:A:45:HIS:CE1	0.63	2.52	7	8
1:A:39:ASP:O	1:A:42:ALA:N	0.63	2.31	8	5
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:HB2	0.63	2.28	7	1
1:A:169:VAL:HG13	1:A:180:TYR:CD2	0.63	2.28	16	2
1:A:45:HIS:HA	1:A:49:ASN:HA	0.63	1.70	16	7
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:HE	0.63	2.07	3	1
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:CD1	0.63	2.29	14	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:214:ILE:CG2	0.63	2.81	17	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HG3	0.63	1.71	2	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:O	0.63	1.94	13	9
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:HB	0.63	2.29	5	7
1:A:110:THR:N	1:A:129:GLU:O	0.63	2.31	19	4
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CG	0.63	2.07	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLY:CA	1:A:203:VAL:CG1	0.63	2.76	7	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:133:TRP:O	0.63	2.51	12	1
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD22	0.63	1.52	17	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HB	0.62	2.29	2	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HD22	0.62	1.69	2	2
1:A:105:VAL:CB	1:A:204:SER:O	0.62	2.47	9	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:66:PHE:CE2	0.62	2.87	10	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:197:ARG:CD	0.62	2.23	12	1
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:HA	0.62	1.69	14	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:HG13	0.62	1.69	18	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:54:SER:O	0.62	2.32	1	2
1:A:37:PRO:N	1:A:38:PRO:HD3	0.62	2.09	2	2
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD22	0.62	1.71	10	5
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HG2	0.62	2.09	13	4
1:A:135:ILE:HD11	1:A:164:PRO:CD	0.62	2.24	17	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:75:THR:HG23	0.62	1.68	19	1
1:A:56:ASN:ND2	1:A:76:ASP:O	0.62	2.32	10	6
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:HG23	0.62	1.93	6	1
1:A:60:LYS:HG2	1:A:61:GLU:N	0.62	2.09	19	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HD11	0.62	2.30	8	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:CG1	0.62	2.78	11	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:HB3	0.62	1.70	15	1
1:A:56:ASN:C	1:A:57:ILE:HD13	0.62	2.15	7	1
1:A:81:LYS:N	1:A:203:VAL:HG12	0.62	2.09	7	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CG	0.62	2.25	2	4
1:A:50:PRO:HG3	1:A:203:VAL:CG1	0.62	2.25	1	3
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:CD	0.62	2.82	12	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:CD1	0.62	2.82	15	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:180:TYR:CE2	0.62	2.28	7	1
1:A:37:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HD2	0.62	1.70	8	1
1:A:164:PRO:HB2	1:A:167:LEU:HD11	0.62	1.69	20	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:O	0.62	2.53	15	8
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:OE1	0.62	2.18	20	3
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:C	0.62	2.68	2	4
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HB3	0.62	2.23	17	5
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:HG11	0.62	2.30	11	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:60:LYS:HA	0.62	1.70	17	1
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HA	0.62	2.24	20	2
1:A:45:HIS:CD2	1:A:45:HIS:N	0.62	2.68	12	3
1:A:187:LEU:HD22	1:A:191:PHE:CZ	0.62	2.30	4	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:48:TRP:N	0.62	2.68	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:CA	0.62	2.25	13	6
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HB	0.62	2.29	14	3
1:A:108:VAL:HG23	1:A:199:LEU:HD22	0.62	1.72	15	1
1:A:37:PRO:HB2	1:A:41:VAL:CG2	0.62	2.25	17	1
1:A:56:ASN:HD21	1:A:75:THR:HG21	0.62	1.53	20	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:O	0.62	1.94	17	20
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CD1	0.62	2.30	14	6
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:CB	0.62	2.48	13	5
1:A:178:LEU:CD1	1:A:198:THR:HG22	0.62	2.24	3	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:HG2	0.62	1.70	9	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:OH	0.62	1.94	10	1
1:A:47:GLY:O	1:A:214:ILE:CD1	0.62	2.48	20	2
1:A:57:ILE:HB	1:A:67:GLU:O	0.62	1.94	19	4
1:A:72:ALA:HB2	1:A:207:TRP:NE1	0.62	2.09	11	3
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HB3	0.62	2.15	9	9
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:NE	0.62	2.10	15	12
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:HB3	0.62	2.09	15	3
1:A:178:LEU:HD12	1:A:198:THR:CG2	0.61	2.25	3	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HB	0.61	1.72	4	4
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD12	0.61	2.29	15	2
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:HA	0.61	1.72	15	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:N	0.61	2.68	6	2
1:A:167:LEU:HB3	1:A:182:ILE:HG22	0.61	1.72	7	4
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:HG22	0.61	1.72	1	1
1:A:76:ASP:O	1:A:77:GLY:O	0.61	2.17	17	10
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HB	0.61	2.31	8	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD12	0.61	2.11	12	2
1:A:178:LEU:CD2	1:A:198:THR:HG22	0.61	2.25	13	1
1:A:96:PRO:HB3	1:A:211:GLN:O	0.61	1.94	18	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:91:TRP:N	0.61	2.67	5	6
1:A:48:TRP:CH2	1:A:214:ILE:HB	0.61	2.30	17	8
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:O	0.61	1.96	4	4
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:HB3	0.61	2.25	5	2
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:ARG:HD2	0.61	1.70	6	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:CG1	0.61	2.63	7	2
1:A:48:TRP:NE1	1:A:66:PHE:CE1	0.61	2.68	8	3
1:A:59:VAL:HG23	1:A:65:CYS:O	0.61	1.96	16	2
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD12	0.61	1.95	15	1
1:A:182:ILE:O	1:A:183:GLY:C	0.61	2.38	16	2
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:C	0.61	2.39	20	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:HG22	0.61	2.30	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD1	0.61	2.60	13	8
1:A:36:PRO:C	1:A:38:PRO:HD2	0.61	2.16	5	3
1:A:54:SER:O	1:A:56:ASN:ND2	0.61	2.34	8	6
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HD22	0.61	1.96	14	2
1:A:52:ASP:HB3	1:A:203:VAL:HG11	0.61	1.73	20	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:194:LEU:C	0.61	2.15	13	13
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:HD3	0.61	2.31	2	4
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:CG1	0.61	2.84	6	3
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:H	0.61	2.09	5	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CD1	0.61	2.54	15	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HB2	0.61	1.95	19	11
1:A:182:ILE:O	1:A:184:GLY:N	0.61	2.34	16	2
1:A:90:ALA:C	1:A:91:TRP:CD1	0.61	2.74	9	8
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:HB3	0.61	2.31	4	1
1:A:60:LYS:O	1:A:61:GLU:O	0.61	2.18	16	8
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB3	0.61	1.71	20	2
1:A:197:ARG:CD	1:A:197:ARG:C	0.61	2.68	15	3
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:186:TYR:CD2	0.61	2.89	9	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:OG	0.61	1.96	1	2
1:A:177:THR:HA	1:A:194:LEU:HD22	0.61	1.73	3	4
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:O	0.61	2.19	8	7
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:O	0.61	2.18	5	4
1:A:132:GLY:O	1:A:133:TRP:CD1	0.61	2.54	5	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:60:LYS:HA	0.61	2.31	6	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG23	0.61	2.30	6	1
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:CD	0.61	2.25	10	2
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:HG13	0.61	2.16	9	5
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:HD1	0.61	1.52	16	1
1:A:56:ASN:ND2	1:A:75:THR:O	0.61	2.34	18	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CG2	0.60	2.25	14	5
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:NE2	0.60	2.33	13	7
1:A:91:TRP:HB2	1:A:216:TYR:CG	0.60	2.31	19	4
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:CG2	0.60	2.49	6	1
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:CA	0.60	2.25	11	3
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:HA3	0.60	2.26	15	5
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:HD23	0.60	1.71	20	6
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CG1	0.60	2.81	14	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CB	0.60	2.84	16	1
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:HB3	0.60	1.96	7	3
1:A:44:ARG:CD	1:A:57:ILE:O	0.60	2.50	10	3
1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:HE3	0.60	2.26	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:O	0.60	2.40	10	5
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:CA	0.60	2.25	6	2
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:CD2	0.60	2.50	7	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:OE1	0.60	1.96	8	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:CA	0.60	2.79	9	2
1:A:206:VAL:CG2	1:A:207:TRP:CZ3	0.60	2.84	10	1
1:A:186:TYR:O	1:A:186:TYR:CD1	0.60	2.55	12	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CE1	0.60	2.79	14	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:211:GLN:HA	0.60	2.32	20	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:CG2	0.60	2.49	14	4
1:A:206:VAL:CG1	1:A:207:TRP:N	0.60	2.65	19	14
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:CA	0.60	2.49	12	2
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:CG2	0.60	2.84	7	1
1:A:171:LEU:CB	1:A:178:LEU:HD23	0.60	2.25	7	1
1:A:59:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CD2	0.60	2.79	9	1
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CZ3	0.60	2.31	10	1
1:A:187:LEU:HD12	1:A:191:PHE:CE1	0.60	2.31	14	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:201:PRO:CB	0.60	2.26	15	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG12	0.60	1.96	20	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:75:THR:O	0.60	1.96	1	1
1:A:177:THR:CB	1:A:194:LEU:HD22	0.60	2.26	16	14
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CD2	0.60	2.55	9	7
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:60:LYS:C	0.60	2.74	6	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:207:TRP:HB3	0.60	1.72	10	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HG11	0.60	2.32	13	1
1:A:177:THR:CA	1:A:194:LEU:HD22	0.60	2.26	3	8
1:A:36:PRO:HB2	1:A:38:PRO:CD	0.60	2.25	2	1
1:A:38:PRO:C	1:A:40:LEU:N	0.60	2.54	8	10
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CZ	0.60	2.90	10	3
1:A:52:ASP:HB2	1:A:79:ARG:O	0.60	1.97	8	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:CD2	0.60	2.78	14	3
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:HB	0.60	2.12	8	3
1:A:71:VAL:HG13	1:A:207:TRP:CH2	0.60	2.31	18	3
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HD3	0.60	1.97	13	1
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:CD1	0.60	2.60	14	5
1:A:84:TYR:CE1	1:A:171:LEU:HD11	0.60	2.31	5	1
1:A:113:ALA:HB3	1:A:129:GLU:HB2	0.60	1.72	7	2
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CE2	0.60	2.32	7	2
1:A:133:TRP:CB	1:A:163:VAL:HG11	0.60	2.25	9	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:CG2	0.60	2.84	17	1
1:A:110:THR:O	1:A:113:ALA:N	0.60	2.27	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HG3	0.60	1.73	4	3
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:CD	0.60	2.27	20	4
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CD2	0.60	2.30	7	2
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:O	0.60	2.50	8	2
1:A:95:TRP:CG	1:A:135:ILE:CD1	0.60	2.85	9	1
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:HD23	0.60	1.71	11	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:59:VAL:O	0.60	2.50	20	3
1:A:44:ARG:NH2	1:A:45:HIS:NE2	0.60	2.50	15	2
1:A:164:PRO:CB	1:A:167:LEU:HD11	0.60	2.27	20	1
1:A:181:SER:OG	1:A:186:TYR:N	0.60	2.35	14	7
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:CG2	0.60	2.49	19	10
1:A:187:LEU:CD2	1:A:191:PHE:CZ	0.60	2.83	5	2
1:A:81:LYS:O	1:A:82:ARG:C	0.60	2.40	8	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:164:PRO:CB	0.60	2.85	10	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:105:VAL:O	0.60	2.50	3	4
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD1	0.60	2.57	7	4
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:CD1	0.60	2.73	8	2
1:A:59:VAL:HG23	1:A:65:CYS:C	0.60	2.17	9	1
1:A:77:GLY:O	1:A:78:VAL:HG13	0.60	1.97	9	3
1:A:167:LEU:HD23	1:A:168:LEU:N	0.60	2.12	12	1
1:A:163:VAL:HA	1:A:167:LEU:HD21	0.60	1.74	14	1
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:CG2	0.60	2.64	20	3
1:A:33:LEU:HD13	1:A:44:ARG:HH21	0.60	1.53	20	1
1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CD	0.59	2.65	2	3
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CG	0.59	2.50	3	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CG	0.59	2.32	4	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CZ	0.59	2.31	14	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:CG2	0.59	2.79	10	4
1:A:91:TRP:C	1:A:91:TRP:CD1	0.59	2.75	7	7
1:A:178:LEU:HD22	1:A:201:PRO:HG3	0.59	1.72	7	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:O	0.59	1.97	8	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:CG	0.59	2.49	8	4
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD12	0.59	2.17	20	2
1:A:75:THR:OG1	1:A:76:ASP:N	0.59	2.35	9	4
1:A:44:ARG:HG3	1:A:48:TRP:O	0.59	1.96	9	3
1:A:40:LEU:HD12	1:A:41:VAL:HG23	0.59	1.72	11	1
1:A:187:LEU:C	1:A:189:PRO:HD2	0.59	2.16	16	2
1:A:43:GLN:CD	1:A:43:GLN:N	0.59	2.56	17	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:65:CYS:O	0.59	1.97	17	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CE2	0.59	2.90	20	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:198:THR:CG2	0.59	2.81	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:LEU:HD13	1:A:169:VAL:N	0.59	2.13	4	1
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:HG2	0.59	1.97	10	7
1:A:167:LEU:HD22	1:A:168:LEU:H	0.59	1.49	9	2
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG1	0.59	2.50	20	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:HG3	0.59	2.27	2	3
1:A:64:LEU:CD2	1:A:66:PHE:CE1	0.59	2.82	8	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:HB	0.59	2.31	8	1
1:A:53:CYS:CB	1:A:78:VAL:HB	0.59	2.27	15	4
1:A:168:LEU:HD23	1:A:169:VAL:N	0.59	2.11	10	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:CD1	0.59	2.66	11	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:204:SER:OG	0.59	1.97	19	1
1:A:43:GLN:O	1:A:59:VAL:O	0.59	2.20	5	5
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:CD1	0.59	2.63	18	6
1:A:51:LYS:O	1:A:80:GLY:HA3	0.59	1.97	20	2
1:A:57:ILE:HG22	1:A:71:VAL:HG11	0.59	1.75	3	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CD	0.59	2.65	5	1
1:A:214:ILE:CG2	1:A:214:ILE:O	0.59	2.50	10	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HG	0.59	2.27	12	1
1:A:39:ASP:HA	1:A:43:GLN:HG3	0.59	1.73	18	1
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:CB	0.59	2.51	19	1
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:HD3	0.59	1.74	10	12
1:A:135:ILE:HD12	1:A:135:ILE:N	0.59	2.13	5	3
1:A:200:TYR:O	1:A:200:TYR:CD1	0.59	2.56	3	2
1:A:167:LEU:CB	1:A:182:ILE:HG23	0.59	2.28	5	1
1:A:59:VAL:CG2	1:A:59:VAL:O	0.59	2.51	7	1
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:O	0.59	2.50	12	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:71:VAL:CG2	0.59	2.26	15	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:75:THR:CG2	0.59	2.25	1	1
1:A:91:TRP:HH2	1:A:171:LEU:HD13	0.59	1.57	2	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:HB2	0.59	2.33	5	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:198:THR:CG2	0.59	2.81	13	2
1:A:79:ARG:HD2	1:A:203:VAL:O	0.59	1.96	7	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:CB	0.59	2.51	8	2
1:A:43:GLN:HG2	1:A:60:LYS:HA	0.59	1.73	8	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:HD12	0.59	2.33	10	1
1:A:91:TRP:HE1	1:A:169:VAL:HG21	0.59	1.56	17	3
1:A:54:SER:CB	1:A:78:VAL:CG1	0.59	2.81	1	1
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:O	0.59	2.21	1	2
1:A:96:PRO:CG	1:A:211:GLN:O	0.59	2.51	6	3
1:A:110:THR:CG2	1:A:198:THR:O	0.59	2.51	4	10
1:A:167:LEU:HD12	1:A:180:TYR:CE1	0.59	2.33	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HB	0.59	2.32	3	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:GLY:C	0.59	2.41	15	7
1:A:197:ARG:HH11	1:A:199:LEU:HD11	0.59	1.56	4	2
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:HG12	0.59	2.31	8	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:HG23	0.59	1.72	10	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:O	0.59	2.51	12	2
1:A:33:LEU:HG	1:A:34:SER:N	0.59	2.13	13	18
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:CA	0.59	2.28	1	4
1:A:55:GLU:O	1:A:56:ASN:C	0.59	2.42	8	14
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HB2	0.59	2.12	12	3
1:A:94:SER:HG	1:A:213:ARG:HG2	0.59	1.57	6	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:HA	0.59	1.95	7	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:216:TYR:CZ	0.59	2.91	13	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:163:VAL:CG1	0.59	2.86	14	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:CG1	0.58	2.81	9	3
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CD2	0.58	2.56	16	4
1:A:40:LEU:HD22	1:A:44:ARG:HB2	0.58	1.74	19	3
1:A:76:ASP:CB	1:A:207:TRP:NE1	0.58	2.65	4	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:NH2	0.58	2.36	5	3
1:A:105:VAL:HG13	1:A:134:ASP:HA	0.58	1.75	7	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:45:HIS:CD2	0.58	2.71	9	1
1:A:207:TRP:CG	1:A:207:TRP:O	0.58	2.55	12	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:214:ILE:O	0.58	2.51	14	3
1:A:44:ARG:HG3	1:A:58:ASP:OD2	0.58	1.98	17	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:167:LEU:HD11	0.58	2.28	20	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:CB	0.58	2.81	8	4
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:HB3	0.58	1.98	3	10
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:NH2	0.58	2.35	20	3
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:N	0.58	2.59	19	6
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:HB2	0.58	1.98	5	3
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:HD21	0.58	1.97	12	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:HG23	0.58	2.25	17	1
1:A:58:ASP:N	1:A:67:GLU:O	0.58	2.35	1	13
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:N	0.58	2.51	16	8
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CE1	0.58	2.90	5	4
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:NE1	0.58	2.67	4	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:C	0.58	2.72	20	3
1:A:64:LEU:HD23	1:A:213:ARG:NH2	0.58	2.13	8	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:CD1	0.58	2.87	15	3
1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:GLY:N	0.58	2.12	8	2
1:A:52:ASP:O	1:A:203:VAL:HG12	0.58	1.98	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:CB	0.58	2.52	15	4
1:A:194:LEU:CD2	1:A:197:ARG:CD	0.58	2.82	15	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:200:TYR:O	0.58	1.98	15	7
1:A:36:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HD3	0.58	1.74	11	2
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HD13	0.58	2.33	15	4
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:CG2	0.58	2.86	4	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HG22	0.58	1.75	6	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:133:TRP:O	0.58	2.51	7	1
1:A:198:THR:C	1:A:199:LEU:HD23	0.58	2.18	11	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:HD3	0.58	1.75	16	3
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:HG13	0.58	1.98	14	1
1:A:90:ALA:HB1	1:A:169:VAL:O	0.58	1.98	20	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:O	0.58	2.22	16	4
1:A:35:ALA:CB	1:A:36:PRO:HD3	0.58	2.22	13	7
1:A:110:THR:HG22	1:A:198:THR:O	0.58	1.99	13	5
1:A:53:CYS:SG	1:A:54:SER:N	0.58	2.75	3	2
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HB	0.58	2.38	8	6
1:A:88:LEU:O	1:A:89:HIS:CD2	0.58	2.56	4	2
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:CG2	0.58	2.86	20	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:167:LEU:CD2	0.58	2.27	15	2
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:CB	0.58	2.87	1	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:N	0.58	2.66	2	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:HG22	0.58	2.18	4	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:106:VAL:HG21	0.58	2.32	11	3
1:A:44:ARG:NH1	1:A:45:HIS:NE2	0.58	2.51	9	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:O	0.58	1.98	11	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:CD1	0.58	2.66	1	6
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:CE1	0.58	2.57	10	5
1:A:93:ILE:O	1:A:180:TYR:OH	0.58	2.21	17	3
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HB	0.58	2.33	7	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:CG2	0.58	2.28	8	3
1:A:187:LEU:O	1:A:187:LEU:CG	0.58	2.51	12	1
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:CG2	0.58	2.50	15	1
1:A:135:ILE:CD1	1:A:135:ILE:C	0.58	2.71	7	2
1:A:40:LEU:HA	1:A:43:GLN:NE2	0.58	2.13	18	4
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CG	0.58	2.57	3	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:58:ASP:CB	0.58	2.28	6	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:41:VAL:HG23	0.58	1.73	7	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:203:VAL:HG23	0.58	2.28	8	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:HA	0.58	1.75	9	3
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:HD11	0.58	2.34	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:HIS:HA	1:A:49:ASN:CB	0.58	2.29	1	1
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:N	0.58	2.36	19	5
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:CG2	0.58	2.82	15	7
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:CB	0.58	2.82	13	3
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:CE1	0.58	2.34	17	3
1:A:178:LEU:HD21	1:A:198:THR:HG22	0.58	1.74	5	2
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:CB	0.58	2.72	8	4
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HB	0.58	1.99	12	4
1:A:49:ASN:ND2	1:A:53:CYS:HB3	0.58	2.14	11	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:134:ASP:CB	0.58	2.82	9	1
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CE1	0.58	2.56	2	2
1:A:79:ARG:CG	1:A:80:GLY:N	0.58	2.67	3	6
1:A:163:VAL:HB	1:A:167:LEU:HD21	0.58	1.75	4	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG11	0.58	1.76	5	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:CE	0.58	2.52	8	3
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:N	0.57	2.36	17	6
1:A:178:LEU:CD1	1:A:199:LEU:O	0.57	2.52	13	5
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HG3	0.57	2.18	4	6
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:O	0.57	2.22	4	1
1:A:178:LEU:C	1:A:194:LEU:HD11	0.57	2.18	9	3
1:A:49:ASN:O	1:A:78:VAL:CG2	0.57	2.52	5	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:84:TYR:C	0.57	2.78	10	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:CG	0.57	2.57	16	5
1:A:187:LEU:CD1	1:A:194:LEU:HD12	0.57	2.27	14	1
1:A:107:GLY:CA	1:A:132:GLY:HA3	0.57	2.28	18	8
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CB	0.57	2.67	7	5
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HD12	0.57	1.99	15	3
1:A:106:VAL:CG1	1:A:202:SER:O	0.57	2.52	3	2
1:A:96:PRO:HD2	1:A:211:GLN:O	0.57	2.00	6	2
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:CD2	0.57	2.34	7	1
1:A:187:LEU:HD11	1:A:194:LEU:CD1	0.57	2.29	14	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:HB2	0.57	1.98	1	2
1:A:39:ASP:O	1:A:40:LEU:C	0.57	2.40	8	6
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CE2	0.57	2.34	10	5
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:HG21	0.57	2.29	7	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:CB	0.57	2.83	1	4
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:CD2	0.57	2.67	1	6
1:A:85:SER:CB	1:A:171:LEU:HD11	0.57	2.29	7	1
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HD12	0.57	2.20	17	1
1:A:164:PRO:HA	1:A:167:LEU:HD11	0.57	1.75	17	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HG21	0.57	2.29	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PRO:CB	1:A:203:VAL:CG1	0.57	2.83	1	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HD12	0.57	2.29	20	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:212:VAL:O	0.57	2.52	19	2
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:CZ	0.57	2.30	10	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HD13	0.57	1.72	11	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:HB2	0.57	2.29	18	2
1:A:69:ARG:CB	1:A:70:PRO:HD2	0.57	2.29	13	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:HG23	0.57	2.35	15	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:167:LEU:N	0.57	2.14	14	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:216:TYR:OH	0.57	2.57	16	1
1:A:48:TRP:H	1:A:59:VAL:HG21	0.57	1.58	18	2
1:A:133:TRP:CE2	1:A:187:LEU:HD22	0.57	2.34	20	1
1:A:177:THR:HA	1:A:194:LEU:CD2	0.57	2.29	11	10
1:A:44:ARG:CZ	1:A:44:ARG:O	0.57	2.52	8	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:HA	0.57	2.40	8	3
1:A:46:HIS:CG	1:A:61:GLU:OE1	0.57	2.57	12	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:HB3	0.57	1.77	13	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:135:ILE:HG13	0.57	2.34	18	1
1:A:61:GLU:O	1:A:62:GLY:C	0.57	2.42	19	20
1:A:168:LEU:O	1:A:181:SER:O	0.57	2.23	12	8
1:A:177:THR:C	1:A:178:LEU:HD23	0.57	2.20	1	4
1:A:64:LEU:HG	1:A:212:VAL:O	0.57	1.99	5	1
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:CD	0.57	2.53	16	5
1:A:50:PRO:HD2	1:A:78:VAL:HG23	0.57	1.75	8	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:HG2	0.57	2.30	11	3
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:CB	0.57	2.67	15	3
1:A:108:VAL:HG21	1:A:199:LEU:O	0.57	1.99	20	2
1:A:80:GLY:HA3	1:A:203:VAL:HG12	0.57	1.75	19	2
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CG2	0.57	2.53	2	1
1:A:186:TYR:CD1	1:A:186:TYR:N	0.57	2.71	13	2
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD21	0.57	2.30	8	2
1:A:206:VAL:CG2	1:A:207:TRP:CE3	0.57	2.79	10	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:191:PHE:CE2	0.57	2.35	12	1
1:A:89:HIS:CD2	1:A:171:LEU:O	0.57	2.58	1	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:182:ILE:H	0.57	1.59	18	2
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:CG	0.57	2.83	13	1
1:A:76:ASP:HB2	1:A:207:TRP:CD1	0.57	2.34	19	3
1:A:50:PRO:HA	1:A:78:VAL:HG23	0.57	1.77	6	1
1:A:169:VAL:HG13	1:A:180:TYR:CD1	0.57	2.35	9	2
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CD2	0.57	2.58	16	3
1:A:40:LEU:HA	1:A:60:LYS:HG2	0.57	1.75	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:CD2	1:A:58:ASP:HB3	0.57	2.30	17	1
1:A:39:ASP:O	1:A:58:ASP:OD2	0.56	2.23	1	2
1:A:85:SER:CB	1:A:89:HIS:CE1	0.56	2.88	2	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:HB3	0.56	2.29	20	4
1:A:94:SER:HB3	1:A:166:ARG:HA	0.56	1.76	12	3
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HB3	0.56	2.15	15	3
1:A:187:LEU:O	1:A:187:LEU:CD2	0.56	2.53	12	1
1:A:36:PRO:O	1:A:38:PRO:HD3	0.56	2.00	15	3
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:NE2	0.56	2.15	20	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:173:MET:SD	0.56	2.98	1	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:HB2	0.56	2.35	1	3
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:NE2	0.56	2.38	5	1
1:A:79:ARG:HD2	1:A:79:ARG:C	0.56	2.21	5	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:CB	0.56	2.53	7	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:72:ALA:CB	0.56	2.67	17	1
1:A:47:GLY:HA3	1:A:59:VAL:CG2	0.56	2.30	18	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:CB	0.56	2.53	19	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:O	0.56	1.98	12	6
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:ND2	0.56	2.59	10	6
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:N	0.56	2.16	4	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:207:TRP:HB3	0.56	1.77	5	1
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:O	0.56	2.24	11	5
1:A:187:LEU:HG	1:A:191:PHE:CE1	0.56	2.35	12	5
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:CG1	0.56	2.54	6	1
1:A:199:LEU:CD1	1:A:199:LEU:N	0.56	2.66	10	5
1:A:79:ARG:CD	1:A:203:VAL:O	0.56	2.53	7	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:201:PRO:O	0.56	2.53	7	2
1:A:75:THR:HG23	1:A:76:ASP:N	0.56	2.16	8	3
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:HD22	0.56	2.12	12	3
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:CD	0.56	2.54	20	2
1:A:167:LEU:CD2	1:A:181:SER:O	0.56	2.53	9	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:182:ILE:CG2	0.56	2.83	14	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:80:GLY:CA	0.56	2.30	15	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:207:TRP:CZ3	0.56	2.73	18	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:87:GLY:N	0.56	2.68	19	1
1:A:69:ARG:HB2	1:A:70:PRO:CD	0.56	2.30	19	11
1:A:86:ARG:O	1:A:89:HIS:NE2	0.56	2.39	20	10
1:A:40:LEU:CD2	1:A:58:ASP:HA	0.56	2.30	7	2
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:CE3	0.56	2.35	16	3
1:A:56:ASN:OD1	1:A:75:THR:HG21	0.56	1.99	13	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:OG	0.56	2.54	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG13	0.56	1.59	17	1
1:A:108:VAL:C	1:A:199:LEU:HD13	0.56	2.20	19	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CE1	0.56	2.35	1	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:CG	0.56	2.83	17	5
1:A:182:ILE:N	1:A:182:ILE:CD1	0.56	2.63	6	2
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:CG2	0.56	2.88	7	1
1:A:61:GLU:O	1:A:63:GLY:N	0.56	2.38	19	5
1:A:54:SER:O	1:A:56:ASN:N	0.56	2.39	2	3
1:A:50:PRO:CD	1:A:51:LYS:HE2	0.56	2.30	4	2
1:A:93:ILE:CG2	1:A:167:LEU:CD1	0.56	2.81	6	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:214:ILE:O	0.56	2.57	7	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:53:CYS:SG	0.56	2.94	11	2
1:A:51:LYS:NZ	1:A:82:ARG:CZ	0.56	2.69	10	1
1:A:29:LEU:H	1:A:29:LEU:HD23	0.56	1.60	13	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:68:ARG:NE	0.56	2.16	17	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG23	0.56	1.76	15	2
1:A:163:VAL:CB	1:A:167:LEU:HD21	0.56	2.31	15	2
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:H	0.56	1.58	5	2
1:A:91:TRP:HE3	1:A:169:VAL:HG11	0.56	1.57	18	4
1:A:56:ASN:OD1	1:A:73:GLN:N	0.56	2.39	12	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:HG22	0.56	2.36	20	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:CA	0.56	2.30	3	7
1:A:56:ASN:O	1:A:71:VAL:CG1	0.56	2.52	4	2
1:A:95:TRP:CE2	1:A:212:VAL:HG21	0.56	2.36	4	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HG2	0.56	1.76	10	4
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HB3	0.56	1.78	12	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE2	0.56	2.35	6	1
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:CB	0.56	2.54	14	6
1:A:48:TRP:HA	1:A:214:ILE:HD13	0.56	1.77	8	2
1:A:33:LEU:CD1	1:A:55:GLU:HG3	0.56	2.30	11	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:55:GLU:HG3	0.56	1.77	19	2
1:A:82:ARG:HD2	1:A:82:ARG:N	0.56	2.16	15	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CE2	0.56	2.35	16	2
1:A:91:TRP:NE1	1:A:216:TYR:CE2	0.56	2.74	16	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:43:GLN:N	0.56	2.52	17	1
1:A:91:TRP:CE3	1:A:169:VAL:HB	0.56	2.36	1	2
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:CB	0.56	2.31	18	3
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CB	0.56	2.54	18	3
1:A:105:VAL:HG23	1:A:134:ASP:CA	0.56	2.31	8	2
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:CE3	0.56	2.59	9	2
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CE2	0.56	2.93	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:CD1	0.56	2.65	18	2
1:A:29:LEU:CD2	1:A:71:VAL:HG22	0.56	2.31	15	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HG2	0.56	2.36	15	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:199:LEU:CD2	0.56	2.53	20	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:48:TRP:O	0.56	2.38	5	2
1:A:44:ARG:CZ	1:A:50:PRO:HG3	0.56	2.31	7	2
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:HB	0.56	2.36	17	2
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:HA	0.56	1.78	7	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:211:GLN:CA	0.56	2.31	17	1
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:HD13	0.55	1.60	16	3
1:A:45:HIS:CE1	1:A:50:PRO:HG2	0.55	2.36	3	1
1:A:56:ASN:ND2	1:A:77:GLY:O	0.55	2.39	11	2
1:A:64:LEU:HD11	1:A:214:ILE:O	0.55	2.02	6	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:133:TRP:O	0.55	1.99	7	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:CZ	0.55	2.36	10	1
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:N	0.55	2.16	17	2
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:CA	0.55	2.31	19	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:45:HIS:CD2	0.55	2.36	20	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:N	0.55	2.16	20	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CE1	0.55	2.36	2	5
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:CZ	0.55	2.55	2	3
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:CB	0.55	2.54	8	5
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:NE1	0.55	2.15	4	1
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:HG21	0.55	2.16	4	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:34:SER:N	0.55	2.14	10	2
1:A:50:PRO:C	1:A:52:ASP:H	0.55	2.04	20	2
1:A:167:LEU:HD11	1:A:180:TYR:HE1	0.55	1.62	18	1
1:A:50:PRO:CD	1:A:51:LYS:HE3	0.55	2.31	19	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:N	0.55	2.39	10	4
1:A:93:ILE:CG2	1:A:180:TYR:OH	0.55	2.55	1	5
1:A:43:GLN:OE1	1:A:61:GLU:N	0.55	2.39	3	4
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG12	0.55	2.37	12	3
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:CG	0.55	2.55	4	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CE2	0.55	2.36	9	2
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:N	0.55	2.40	8	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG13	0.55	2.36	10	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:167:LEU:HD11	0.55	1.76	11	1
1:A:68:ARG:CZ	1:A:207:TRP:CH2	0.55	2.89	18	1
1:A:73:GLN:CG	1:A:74:SER:N	0.55	2.69	9	2
1:A:216:TYR:CD1	1:A:217:MET:N	0.55	2.74	7	9
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:NE2	0.55	2.55	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HG12	0.55	2.37	6	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG22	0.55	1.77	7	2
1:A:106:VAL:O	1:A:133:TRP:N	0.55	2.39	19	4
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:H	0.55	1.61	7	2
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:CB	0.55	2.32	12	3
1:A:57:ILE:HB	1:A:68:ARG:HG2	0.55	1.78	10	1
1:A:94:SER:CA	1:A:165:GLU:O	0.55	2.55	11	3
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:OD1	0.55	2.54	16	1
1:A:167:LEU:CG	1:A:180:TYR:CE1	0.55	2.89	1	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:164:PRO:N	0.55	2.16	20	4
1:A:32:LEU:O	1:A:36:PRO:HD2	0.55	2.01	6	2
1:A:106:VAL:CG1	1:A:203:VAL:HG23	0.55	2.31	7	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:CG	0.55	2.55	16	3
1:A:54:SER:OG	1:A:76:ASP:O	0.55	2.25	20	2
1:A:68:ARG:HE	1:A:72:ALA:HB2	0.55	1.59	17	1
1:A:164:PRO:HA	1:A:167:LEU:CD1	0.55	2.31	17	1
1:A:73:GLN:O	1:A:75:THR:N	0.55	2.40	13	5
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CD1	0.55	2.59	3	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:210:CYS:SG	0.55	2.94	6	2
1:A:53:CYS:HB2	1:A:79:ARG:HB2	0.55	1.76	7	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:CA	0.55	2.31	17	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:78:VAL:HB	0.55	2.15	10	2
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:CG1	0.55	2.69	14	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:CB	0.55	2.55	15	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HG	0.55	2.31	17	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:72:ALA:N	0.55	2.70	3	3
1:A:110:THR:N	1:A:199:LEU:HB3	0.55	2.17	4	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HB	0.55	2.37	18	2
1:A:37:PRO:HB2	1:A:41:VAL:HB	0.55	1.78	7	1
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:CD1	0.55	2.66	7	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:CG2	0.55	2.32	18	2
1:A:110:THR:CG2	1:A:197:ARG:O	0.55	2.55	10	2
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:LEU:CB	0.55	2.31	9	1
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:O	0.55	2.60	10	1
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:CG	0.55	2.73	18	2
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:CA	0.55	2.32	19	1
1:A:167:LEU:HB3	1:A:180:TYR:CE1	0.55	2.37	4	4
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:109:ALA:O	1:A:200:TYR:N	0.55	2.40	11	4
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:163:VAL:HG21	0.55	2.37	8	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CA	0.55	2.30	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:C	0.55	2.45	19	8
1:A:43:GLN:HE21	1:A:44:ARG:N	0.55	1.99	2	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:57:ILE:O	0.55	2.39	19	4
1:A:63:GLY:O	1:A:65:CYS:N	0.55	2.40	20	7
1:A:59:VAL:O	1:A:59:VAL:HG23	0.55	2.01	7	2
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CE3	0.55	2.37	16	2
1:A:57:ILE:HG13	1:A:78:VAL:CG1	0.55	2.32	7	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:211:GLN:NE2	0.55	2.17	12	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:O	0.55	2.25	15	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:183:GLY:N	0.55	2.70	16	1
1:A:95:TRP:NE1	1:A:212:VAL:HG21	0.55	2.17	4	3
1:A:68:ARG:NE	1:A:207:TRP:NE1	0.55	2.54	5	1
1:A:164:PRO:HD2	1:A:167:LEU:HD21	0.55	1.79	5	1
1:A:207:TRP:CH2	1:A:209:GLN:OE1	0.55	2.60	6	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:CB	0.55	2.54	7	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:80:GLY:CA	0.55	2.32	10	2
1:A:75:THR:HG22	1:A:76:ASP:N	0.55	2.17	10	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:71:VAL:O	0.55	2.40	17	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.24	2	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CG	0.54	2.55	11	2
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:CB	0.54	2.90	2	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:164:PRO:CD	0.54	2.30	2	2
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CD	0.54	2.55	3	1
1:A:41:VAL:HA	1:A:45:HIS:NE2	0.54	2.16	6	2
1:A:95:TRP:CE3	1:A:106:VAL:CB	0.54	2.90	8	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CB	0.54	2.89	20	3
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.54	14	1
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:CE	0.54	2.54	17	1
1:A:187:LEU:O	1:A:191:PHE:CE1	0.54	2.60	17	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:112:LEU:H	0.54	2.15	19	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:TRP:C	0.54	2.44	19	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:207:TRP:NE1	0.54	2.71	1	2
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:CD2	0.54	2.55	11	3
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:HD12	0.54	1.79	20	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:180:TYR:HE2	0.54	1.61	7	1
1:A:54:SER:OG	1:A:75:THR:CG2	0.54	2.56	12	1
1:A:93:ILE:CB	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.55	12	2
1:A:91:TRP:CE2	1:A:216:TYR:CZ	0.54	2.96	16	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:163:VAL:CG2	0.54	2.33	18	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HG3	0.54	2.03	10	2
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:HG22	0.54	2.02	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ARG:HD2	1:A:82:ARG:C	0.54	2.23	5	1
1:A:54:SER:OG	1:A:77:GLY:O	0.54	2.15	7	1
1:A:43:GLN:HG2	1:A:60:LYS:CA	0.54	2.33	8	2
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:CE	0.54	2.55	9	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HG13	0.54	1.79	9	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:HB	0.54	1.79	13	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:O	0.54	2.56	2	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:32:LEU:HB3	0.54	1.78	5	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:HA	0.54	1.79	14	3
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HD13	0.54	1.79	11	1
1:A:45:HIS:NE2	1:A:50:PRO:HG3	0.54	2.17	12	1
1:A:93:ILE:N	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.40	14	1
1:A:187:LEU:HD12	1:A:191:PHE:HE1	0.54	1.61	14	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:N	0.54	2.17	15	1
1:A:59:VAL:HG11	1:A:66:PHE:CG	0.54	2.36	17	1
1:A:166:ARG:O	1:A:167:LEU:HG	0.54	2.03	17	1
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:HD3	0.54	2.33	5	3
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:CD1	0.54	2.84	3	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:CG2	0.54	2.33	8	3
1:A:90:ALA:C	1:A:91:TRP:CE3	0.54	2.81	13	1
1:A:167:LEU:HD11	1:A:180:TYR:CE1	0.54	2.38	18	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:CE2	0.54	2.96	20	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:67:GLU:CB	0.54	2.56	1	1
1:A:178:LEU:H	1:A:194:LEU:HD21	0.54	1.63	6	9
1:A:64:LEU:CG	1:A:214:ILE:O	0.54	2.56	18	4
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CG	0.54	2.90	19	3
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:HG22	0.54	2.36	9	1
1:A:105:VAL:HB	1:A:204:SER:O	0.54	2.02	9	1
1:A:186:TYR:O	1:A:188:GLY:N	0.54	2.40	17	4
1:A:43:GLN:OE1	1:A:48:TRP:CZ3	0.54	2.61	16	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:71:VAL:CG1	0.54	2.33	3	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:HD11	0.54	1.80	6	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:55:GLU:OE1	0.54	2.02	8	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:NZ	0.54	2.40	9	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:173:MET:CE	0.54	2.91	10	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:198:THR:HB	0.54	1.78	11	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG2	0.54	2.32	12	2
1:A:44:ARG:HB2	1:A:59:VAL:O	0.54	2.03	14	2
1:A:52:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NH2	0.54	2.41	17	1
1:A:135:ILE:HD11	1:A:164:PRO:HD2	0.54	1.79	17	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:41:VAL:N	0.54	2.18	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:CE3	0.54	2.38	3	2
1:A:64:LEU:O	1:A:213:ARG:CZ	0.54	2.55	3	3
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:OE1	0.54	2.03	4	3
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:CB	0.54	2.76	19	3
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:CE2	0.54	2.91	6	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:CE2	0.54	2.37	6	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CG2	0.54	2.33	10	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:CB	0.54	2.80	17	1
1:A:167:LEU:CB	1:A:180:TYR:OH	0.54	2.56	19	1
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:CG2	0.54	2.86	1	3
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:HB2	0.54	2.33	10	4
1:A:79:ARG:CB	1:A:204:SER:OG	0.54	2.55	1	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:181:SER:O	0.54	2.56	1	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD22	0.54	2.36	16	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:81:LYS:N	0.54	2.40	17	3
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:CD1	0.54	2.33	20	2
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CZ	0.54	2.56	17	2
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CG	0.54	2.70	13	2
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:HD2	0.54	2.23	9	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CG	0.54	2.56	9	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:77:GLY:O	0.54	2.41	11	1
1:A:43:GLN:H	1:A:43:GLN:CD	0.54	2.06	17	2
1:A:109:ALA:N	1:A:199:LEU:HD12	0.54	2.17	17	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:43:GLN:CD	0.54	2.77	18	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG13	0.54	2.38	18	1
1:A:68:ARG:NH2	1:A:207:TRP:CH2	0.54	2.75	18	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:CG	0.54	2.69	1	2
1:A:51:LYS:C	1:A:53:CYS:H	0.54	2.07	1	4
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:OD1	0.54	2.25	3	2
1:A:205:ALA:HB1	1:A:212:VAL:HG11	0.54	1.78	3	3
1:A:207:TRP:CD1	1:A:207:TRP:C	0.54	2.81	3	1
1:A:68:ARG:C	1:A:68:ARG:CD	0.54	2.76	18	2
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:HB2	0.54	2.03	10	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:HB3	0.54	2.38	14	4
1:A:37:PRO:O	1:A:42:ALA:CB	0.54	2.56	12	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:59:VAL:CG1	0.54	2.86	15	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:CG1	0.54	2.33	16	1
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:CG	0.54	2.76	18	1
1:A:80:GLY:CA	1:A:203:VAL:HG12	0.54	2.33	18	1
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:CD1	0.53	2.16	19	3
1:A:134:ASP:O	1:A:135:ILE:CG2	0.53	2.57	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:GLN:CD	1:A:44:ARG:N	0.53	2.61	18	3
1:A:48:TRP:CD2	1:A:214:ILE:CG2	0.53	2.91	13	3
1:A:85:SER:C	1:A:89:HIS:CE1	0.53	2.81	12	2
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:CE3	0.53	2.61	6	1
1:A:207:TRP:CE2	1:A:209:GLN:HB2	0.53	2.38	10	1
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:CD	0.53	2.13	12	2
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:HG11	0.53	1.79	1	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HG23	0.53	2.24	2	4
1:A:172:ASP:OD1	1:A:173:MET:N	0.53	2.42	16	7
1:A:53:CYS:CA	1:A:78:VAL:HB	0.53	2.33	4	4
1:A:87:GLY:O	1:A:173:MET:N	0.53	2.40	19	3
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.91	12	2
1:A:186:TYR:CD1	1:A:186:TYR:C	0.53	2.81	12	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:215:ARG:O	0.53	2.03	13	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:209:GLN:CG	0.53	2.57	14	1
1:A:164:PRO:HG2	1:A:167:LEU:HD11	0.53	1.78	20	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:211:GLN:O	0.53	2.56	6	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HB3	0.53	2.33	13	7
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ILE:N	0.53	2.62	6	18
1:A:79:ARG:CD	1:A:79:ARG:O	0.53	2.56	2	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:30:GLU:N	0.53	2.15	19	9
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG11	0.53	2.33	3	3
1:A:52:ASP:CB	1:A:80:GLY:HA2	0.53	2.32	18	4
1:A:68:ARG:HD3	1:A:69:ARG:N	0.53	2.19	5	2
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CG	0.53	2.38	6	2
1:A:69:ARG:CG	1:A:70:PRO:HD3	0.53	2.34	10	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:NH2	0.53	2.42	7	3
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:NH2	0.53	2.42	8	2
1:A:48:TRP:HD1	1:A:64:LEU:HD12	0.53	1.63	10	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:213:ARG:HB2	0.53	2.32	12	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:HD12	0.53	2.03	13	1
1:A:184:GLY:O	1:A:186:TYR:N	0.53	2.41	16	1
1:A:59:VAL:CB	1:A:65:CYS:O	0.53	2.57	17	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:CB	0.53	2.33	19	1
1:A:69:ARG:N	1:A:70:PRO:HD2	0.53	2.17	15	4
1:A:39:ASP:CB	1:A:43:GLN:OE1	0.53	2.57	5	5
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:CA	0.53	2.54	4	1
1:A:82:ARG:CZ	1:A:83:GLY:N	0.53	2.72	9	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:134:ASP:OD1	0.53	2.04	16	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HD3	0.53	2.03	18	1
1:A:38:PRO:O	1:A:40:LEU:CB	0.53	2.56	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:OG1	0.53	2.56	2	2
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG3	0.53	2.34	18	7
1:A:109:ALA:N	1:A:200:TYR:O	0.53	2.41	5	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.53	2.75	13	2
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:HB2	0.53	2.33	7	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:55:GLU:OE1	0.53	2.57	12	1
1:A:96:PRO:O	1:A:211:GLN:NE2	0.53	2.39	15	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:131:TRP:O	0.53	2.04	15	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:C	0.53	2.24	5	6
1:A:40:LEU:CB	1:A:58:ASP:OD2	0.53	2.57	19	2
1:A:96:PRO:O	1:A:211:GLN:O	0.53	2.26	3	1
1:A:178:LEU:HD13	1:A:198:THR:HG22	0.53	1.80	3	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:H	0.53	1.63	4	1
1:A:49:ASN:O	1:A:79:ARG:O	0.53	2.27	17	2
1:A:105:VAL:HG21	1:A:134:ASP:HB2	0.53	1.81	8	1
1:A:59:VAL:CA	1:A:65:CYS:O	0.53	2.56	17	1
1:A:52:ASP:N	1:A:80:GLY:HA2	0.53	2.18	1	1
1:A:39:ASP:C	1:A:43:GLN:OE1	0.53	2.47	2	2
1:A:56:ASN:N	1:A:56:ASN:HD22	0.53	2.01	15	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:CD1	0.53	2.89	4	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:N	0.53	2.19	10	2
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:NE1	0.53	2.19	4	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:180:TYR:CZ	0.53	2.39	5	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:167:LEU:CD1	0.53	2.34	6	1
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:209:GLN:OE1	0.53	2.62	6	1
1:A:45:HIS:CE1	1:A:51:LYS:NZ	0.53	2.77	7	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:43:GLN:NE2	0.53	2.72	8	2
1:A:48:TRP:HZ3	1:A:78:VAL:HG11	0.53	1.60	10	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:204:SER:OG	0.53	2.02	17	3
1:A:167:LEU:HD13	1:A:180:TYR:HE1	0.53	1.59	11	1
1:A:66:PHE:CD2	1:A:208:GLY:HA2	0.53	2.39	13	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:129:GLU:CA	0.53	2.56	19	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:CG1	0.53	2.86	20	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:57:ILE:O	0.53	2.03	1	2
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:CG2	0.53	2.87	2	2
1:A:55:GLU:N	1:A:55:GLU:OE1	0.53	2.41	2	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:CB	0.53	2.91	4	1
1:A:108:VAL:O	1:A:131:TRP:O	0.53	2.26	4	5
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:203:VAL:HG22	0.53	2.39	5	2
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:HB2	0.53	1.81	11	2
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:CB	0.53	2.92	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:CB	0.53	2.57	10	2
1:A:109:ALA:HB1	1:A:130:SER:HA	0.53	1.80	19	1
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:HB3	0.53	2.23	19	1
1:A:113:ALA:HB2	1:A:129:GLU:O	0.53	2.03	19	1
1:A:94:SER:HA	1:A:167:LEU:HD12	0.53	1.81	2	1
1:A:79:ARG:HG2	1:A:80:GLY:N	0.53	2.19	3	2
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:CA	0.53	2.57	4	2
1:A:84:TYR:O	1:A:84:TYR:CD2	0.53	2.62	6	2
1:A:209:GLN:O	1:A:211:GLN:N	0.53	2.41	8	2
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:CA	0.53	2.57	10	3
1:A:208:GLY:O	1:A:211:GLN:NE2	0.53	2.42	10	1
1:A:91:TRP:HE1	1:A:171:LEU:HD22	0.53	1.64	11	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:CD1	0.53	2.87	12	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD12	0.53	2.38	14	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HD23	0.53	1.81	13	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.92	14	1
1:A:188:GLY:N	1:A:189:PRO:HD3	0.53	2.16	16	2
1:A:206:VAL:CG1	1:A:211:GLN:OE1	0.53	2.57	17	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:CE	0.53	2.57	13	3
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:HA	0.53	1.79	13	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:CG2	0.53	2.92	5	2
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HB2	0.53	2.39	3	1
1:A:203:VAL:HG22	1:A:204:SER:N	0.53	2.19	15	2
1:A:207:TRP:CD1	1:A:208:GLY:N	0.53	2.77	10	2
1:A:37:PRO:CB	1:A:38:PRO:HD2	0.53	2.34	8	1
1:A:88:LEU:O	1:A:89:HIS:ND1	0.53	2.42	19	4
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:OH	0.53	2.58	10	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:O	0.53	2.57	20	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:O	0.52	2.27	1	3
1:A:53:CYS:SG	1:A:54:SER:O	0.52	2.67	3	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:CD1	0.52	2.58	3	2
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CB	0.52	2.34	18	3
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:CB	0.52	2.57	8	1
1:A:197:ARG:O	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.56	9	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:CG	0.52	2.56	11	2
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:N	0.52	2.40	16	2
1:A:66:PHE:CZ	1:A:205:ALA:HB1	0.52	2.40	17	1
1:A:86:ARG:HG2	1:A:87:GLY:N	0.52	2.19	19	1
1:A:88:LEU:CB	1:A:172:ASP:OD2	0.52	2.57	19	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:HG3	0.52	2.20	8	2
1:A:41:VAL:HG13	1:A:45:HIS:HE1	0.52	1.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:207:TRP:CD2	1:A:208:GLY:N	0.52	2.78	2	1
1:A:94:SER:N	1:A:213:ARG:O	0.52	2.43	9	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:200:TYR:OH	0.52	2.05	6	2
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:CD	0.52	2.34	5	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:213:ARG:HA	0.52	1.81	6	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HG13	0.52	2.20	7	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:167:LEU:C	0.52	2.77	7	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:NE	0.52	2.18	10	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:37:PRO:CD	0.52	2.86	20	3
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:HD22	0.52	2.03	13	1
1:A:68:ARG:CG	1:A:207:TRP:HB2	0.52	2.34	16	1
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:HB	0.52	1.81	20	1
1:A:53:CYS:HA	1:A:78:VAL:C	0.52	2.23	20	1
1:A:58:ASP:O	1:A:58:ASP:OD1	0.52	2.27	19	2
1:A:68:ARG:NH1	1:A:76:ASP:OD2	0.52	2.42	1	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CG	0.52	2.71	5	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:76:ASP:O	0.52	2.04	7	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:68:ARG:CG	0.52	2.35	9	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:80:GLY:HA2	0.52	1.79	12	4
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:CYS:CB	0.52	2.34	1	1
1:A:197:ARG:CD	1:A:197:ARG:O	0.52	2.58	2	6
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:PRO:HD3	0.52	2.33	2	5
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:CB	0.52	2.35	20	2
1:A:91:TRP:HZ2	1:A:171:LEU:HD13	0.52	1.61	3	3
1:A:40:LEU:CG	1:A:58:ASP:OD1	0.52	2.58	9	2
1:A:39:ASP:CB	1:A:43:GLN:HB3	0.52	2.35	8	1
1:A:95:TRP:CB	1:A:135:ILE:CD1	0.52	2.79	9	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HG23	0.52	2.34	10	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	0.52	2.16	10	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:203:VAL:CG2	0.52	2.77	10	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CD1	0.52	2.63	13	1
1:A:182:ILE:N	1:A:185:THR:OG1	0.52	2.43	16	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:OD2	0.52	2.42	20	1
1:A:213:ARG:CD	1:A:213:ARG:C	0.52	2.77	20	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:203:VAL:CG1	0.52	2.34	1	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:HB2	0.52	2.34	5	5
1:A:57:ILE:CG2	1:A:58:ASP:N	0.52	2.71	2	4
1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD23	0.52	1.64	19	2
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:CD1	0.52	2.75	8	5
1:A:68:ARG:CD	1:A:207:TRP:HB3	0.52	2.33	10	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:80:GLY:HA3	0.52	2.25	12	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HD23	0.52	2.40	13	1
1:A:163:VAL:H	1:A:164:PRO:HD2	0.52	1.65	17	3
1:A:131:TRP:CD1	1:A:131:TRP:N	0.52	2.76	14	1
1:A:66:PHE:CB	1:A:211:GLN:HA	0.52	2.34	16	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:O	0.52	2.03	18	4
1:A:213:ARG:NE	1:A:213:ARG:CA	0.52	2.70	5	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:55:GLU:HA	0.52	1.81	8	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:78:VAL:HG11	0.52	2.40	8	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HG	0.52	2.20	9	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:CG	0.52	2.57	10	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:C	0.52	2.48	12	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:40:LEU:HD11	0.52	1.81	13	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HE22	0.52	2.07	13	2
1:A:50:PRO:C	1:A:52:ASP:N	0.52	2.62	20	2
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:HG22	0.52	2.04	17	1
1:A:51:LYS:C	1:A:53:CYS:N	0.52	2.60	6	5
1:A:167:LEU:CD2	1:A:182:ILE:CG2	0.52	2.86	1	2
1:A:86:ARG:C	1:A:89:HIS:NE2	0.52	2.63	13	7
1:A:194:LEU:O	1:A:198:THR:OG1	0.52	2.28	5	3
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:CE1	0.52	2.98	7	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HE3	0.52	2.05	8	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:40:LEU:HD12	0.52	2.35	10	1
1:A:176:GLY:O	1:A:198:THR:OG1	0.52	2.26	10	4
1:A:108:VAL:HB	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.34	11	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:201:PRO:HG3	0.52	2.34	11	1
1:A:214:ILE:HG22	1:A:214:ILE:O	0.52	2.04	11	1
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:HE2	0.52	2.04	17	1
1:A:173:MET:O	1:A:174:GLU:C	0.52	2.47	12	18
1:A:107:GLY:O	1:A:202:SER:O	0.52	2.28	4	3
1:A:79:ARG:HA	1:A:203:VAL:O	0.52	2.05	12	7
1:A:109:ALA:CA	1:A:129:GLU:O	0.52	2.58	9	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CD1	0.52	2.97	10	1
1:A:179:GLY:O	1:A:187:LEU:HD21	0.52	2.03	11	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:HD22	0.52	1.63	13	2
1:A:51:LYS:NZ	1:A:81:LYS:N	0.52	2.57	15	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:CB	0.52	2.35	18	1
1:A:41:VAL:HA	1:A:45:HIS:CD2	0.52	2.39	20	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:NE	0.52	2.43	11	2
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:CD	0.52	2.35	17	12
1:A:88:LEU:C	1:A:89:HIS:CD2	0.52	2.83	20	4
1:A:90:ALA:O	1:A:91:TRP:CD1	0.52	2.62	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:CD1	1:A:93:ILE:HG13	0.52	2.40	4	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:NE	0.52	2.42	8	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:66:PHE:N	0.52	2.78	9	2
1:A:82:ARG:CZ	1:A:83:GLY:CA	0.52	2.87	9	1
1:A:106:VAL:CG1	1:A:107:GLY:N	0.52	2.73	10	2
1:A:38:PRO:HD2	1:A:41:VAL:HG21	0.52	1.82	13	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:52:ASP:N	0.52	2.03	16	3
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:CD2	0.52	2.35	13	1
1:A:37:PRO:HG3	1:A:41:VAL:HG21	0.52	1.80	1	1
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:CD	0.52	2.48	2	2
1:A:105:VAL:C	1:A:106:VAL:CG2	0.52	2.78	13	7
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HA	0.52	2.05	19	8
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HB	0.52	1.81	8	2
1:A:79:ARG:HD2	1:A:80:GLY:N	0.52	2.20	7	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:210:CYS:SG	0.52	2.45	9	1
1:A:105:VAL:CA	1:A:204:SER:O	0.52	2.58	9	1
1:A:170:VAL:CG1	1:A:187:LEU:HD23	0.52	2.35	11	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:67:GLU:O	0.52	2.57	16	1
1:A:94:SER:O	1:A:213:ARG:N	0.51	2.43	8	6
1:A:173:MET:O	1:A:175:GLU:N	0.51	2.43	4	17
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HB	0.51	2.40	2	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:78:VAL:O	0.51	2.03	2	3
1:A:44:ARG:HD3	1:A:59:VAL:O	0.51	2.04	3	2
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.20	4	3
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.35	20	2
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:CD	0.51	2.57	20	8
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:CB	0.51	2.36	5	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:NE	0.51	2.73	5	1
1:A:106:VAL:HG23	1:A:203:VAL:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:68:ARG:HD2	1:A:207:TRP:CB	0.51	2.35	7	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:NE	0.51	2.43	7	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:49:ASN:C	0.51	2.63	9	7
1:A:50:PRO:HB2	1:A:80:GLY:HA3	0.51	1.81	11	2
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:CG	0.51	2.25	9	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.35	12	1
1:A:181:SER:HA	1:A:186:TYR:CD2	0.51	2.40	12	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:CG	0.51	2.58	14	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:57:ILE:HG13	0.51	2.39	18	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:206:VAL:CG2	0.51	2.58	4	1
1:A:84:TYR:HE1	1:A:171:LEU:HD11	0.51	1.62	5	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:204:SER:OG	0.51	2.05	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLY:H	1:A:203:VAL:HG13	0.51	1.65	7	1
1:A:81:LYS:O	1:A:83:GLY:N	0.51	2.43	8	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:61:GLU:CA	0.51	2.92	9	2
1:A:52:ASP:O	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.58	9	1
1:A:35:ALA:HB1	1:A:36:PRO:HD3	0.51	1.80	10	1
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.51	2.05	20	3
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CD1	0.51	2.41	16	2
1:A:52:ASP:C	1:A:80:GLY:HA2	0.51	2.25	1	1
1:A:92:GLU:OE2	1:A:166:ARG:NH1	0.51	2.43	1	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CG	0.51	2.58	15	3
1:A:177:THR:HA	1:A:198:THR:HG22	0.51	1.82	9	3
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:HG12	0.51	2.24	7	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:HG12	0.51	2.36	10	2
1:A:95:TRP:CD2	1:A:106:VAL:HG21	0.51	2.40	13	2
1:A:164:PRO:O	1:A:166:ARG:N	0.51	2.43	12	3
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:O	0.51	2.28	2	5
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:THR:HB	0.51	1.82	4	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:HG23	0.51	1.81	5	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:CG2	0.51	2.35	16	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:53:CYS:SG	0.51	2.83	10	1
1:A:54:SER:CB	1:A:76:ASP:O	0.51	2.58	16	2
1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CD	0.51	2.74	17	1
1:A:47:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD22	0.51	1.82	18	1
1:A:47:GLY:HA2	1:A:64:LEU:CD2	0.51	2.36	18	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:80:GLY:CA	0.51	2.35	19	1
1:A:79:ARG:HG2	1:A:203:VAL:O	0.51	2.04	1	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:HA	0.51	2.41	14	8
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:HB3	0.51	2.36	2	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CZ	0.51	2.98	4	1
1:A:59:VAL:C	1:A:60:LYS:HG3	0.51	2.25	16	2
1:A:81:LYS:O	1:A:203:VAL:N	0.51	2.43	7	1
1:A:95:TRP:HE1	1:A:106:VAL:HG21	0.51	1.64	7	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:59:VAL:N	0.51	2.43	8	2
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HB3	0.51	1.83	8	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:CD2	0.51	2.93	9	1
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:HD13	0.51	1.76	10	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:58:ASP:OD2	0.51	2.28	11	1
1:A:107:GLY:HA2	1:A:132:GLY:HA3	0.51	1.83	18	8
1:A:43:GLN:HE21	1:A:44:ARG:CA	0.51	2.19	2	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:109:ALA:HB3	0.51	1.80	2	1
1:A:205:ALA:HB2	1:A:212:VAL:HG11	0.51	1.82	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:CB	0.51	2.94	9	2
1:A:82:ARG:NE	1:A:83:GLY:N	0.51	2.59	9	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG11	0.51	1.64	11	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CG	0.51	2.64	15	2
1:A:46:HIS:CD2	1:A:61:GLU:OE1	0.51	2.63	12	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:HD12	0.51	1.81	12	1
1:A:182:ILE:HD13	1:A:186:TYR:HD2	0.51	1.66	12	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:201:PRO:HG2	0.51	2.41	15	1
1:A:180:TYR:H	1:A:187:LEU:HD13	0.51	1.66	17	1
1:A:133:TRP:HB2	1:A:180:TYR:CD2	0.51	2.41	18	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NE	0.51	2.43	19	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.89	1	1
1:A:52:ASP:O	1:A:78:VAL:C	0.51	2.49	2	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:41:VAL:HG22	0.51	2.35	12	7
1:A:39:ASP:O	1:A:39:ASP:OD1	0.51	2.29	5	2
1:A:96:PRO:O	1:A:97:LEU:C	0.51	2.48	18	2
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:CG	0.51	2.79	7	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:HA	0.51	1.81	7	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:201:PRO:N	0.51	2.20	9	2
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:CD2	0.51	2.78	9	2
1:A:33:LEU:HD11	1:A:55:GLU:CG	0.51	2.35	11	1
1:A:38:PRO:HD2	1:A:41:VAL:CG2	0.51	2.36	13	3
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:CG2	0.51	2.36	15	2
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:CA	0.51	2.78	16	4
1:A:58:ASP:OD1	1:A:60:LYS:NZ	0.51	2.44	13	1
1:A:91:TRP:HZ3	1:A:171:LEU:HD22	0.51	1.66	17	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:HB2	0.51	2.41	17	1
1:A:180:TYR:N	1:A:187:LEU:HD13	0.51	2.21	17	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:HB2	0.51	2.19	18	1
1:A:135:ILE:CD1	1:A:163:VAL:CG2	0.51	2.88	18	1
1:A:113:ALA:CA	1:A:128:SER:HB2	0.51	2.36	19	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG2	0.51	2.58	8	5
1:A:34:SER:O	1:A:35:ALA:C	0.51	2.49	18	3
1:A:33:LEU:O	1:A:40:LEU:HD11	0.51	2.06	5	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD13	0.51	1.76	6	2
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CB	0.51	2.36	13	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HB	0.51	2.41	13	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:CE	0.51	2.78	14	5
1:A:88:LEU:C	1:A:89:HIS:CG	0.51	2.85	14	12
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HE2	0.51	2.21	5	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:CG2	0.51	2.36	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HG12	0.51	2.40	6	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:C	0.51	2.49	9	2
1:A:80:GLY:HA3	1:A:203:VAL:CG1	0.51	2.36	19	2
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:CZ	0.51	2.59	16	2
1:A:106:VAL:HG22	1:A:107:GLY:N	0.51	2.21	9	1
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:CD2	0.51	2.36	11	1
1:A:169:VAL:HB	1:A:180:TYR:CG	0.51	2.40	14	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:212:VAL:HG22	0.51	1.82	18	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG22	0.51	2.40	20	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:OH	0.51	2.06	19	3
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:TYR:CD2	0.51	2.89	2	1
1:A:109:ALA:O	1:A:200:TYR:CE2	0.51	2.64	3	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:CD2	0.51	2.79	9	6
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HB	0.51	1.66	5	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:59:VAL:CB	0.51	2.74	8	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CD2	0.51	2.94	11	2
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:CB	0.51	2.59	14	1
1:A:169:VAL:CB	1:A:180:TYR:CD1	0.51	2.93	14	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:212:VAL:HG12	0.51	2.40	17	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:HH11	0.50	2.20	1	1
1:A:177:THR:HG23	1:A:195:LYS:HA	0.50	1.83	11	4
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:HE3	0.50	1.82	16	6
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:CG	0.50	2.40	2	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:HD2	0.50	1.82	3	2
1:A:78:VAL:HG22	1:A:78:VAL:O	0.50	2.06	3	1
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:C	0.50	2.50	19	4
1:A:64:LEU:CD2	1:A:214:ILE:HG22	0.50	2.35	9	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:80:GLY:HA3	0.50	2.36	10	2
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:CB	0.50	2.59	12	4
1:A:106:VAL:HA	1:A:202:SER:O	0.50	2.06	10	2
1:A:164:PRO:HG2	1:A:182:ILE:HG21	0.50	1.82	11	1
1:A:51:LYS:HZ3	1:A:81:LYS:N	0.50	2.04	15	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:HG13	0.50	2.41	18	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:N	0.50	2.59	20	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:200:TYR:C	0.50	2.79	13	8
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:HG3	0.50	2.41	12	2
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:CA	0.50	2.59	13	5
1:A:108:VAL:HG22	1:A:199:LEU:CB	0.50	2.32	4	2
1:A:86:ARG:O	1:A:86:ARG:NH1	0.50	2.43	5	1
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:HB3	0.50	2.36	11	2
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CB	0.50	2.35	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLY:C	1:A:203:VAL:CG1	0.50	2.75	7	1
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:CG1	0.50	2.58	11	3
1:A:82:ARG:O	1:A:84:TYR:N	0.50	2.43	15	1
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:O	0.50	2.06	12	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:CB	0.50	2.74	18	2
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG21	0.50	2.36	14	3
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:CG2	0.50	2.37	5	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:211:GLN:O	0.50	2.07	13	3
1:A:73:GLN:HG3	1:A:74:SER:N	0.50	2.20	9	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:194:LEU:O	0.50	2.06	11	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:NE2	0.50	2.44	13	1
1:A:189:PRO:O	1:A:191:PHE:N	0.50	2.43	14	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:HB3	0.50	2.41	15	2
1:A:48:TRP:HE3	1:A:53:CYS:HG	0.50	1.47	18	1
1:A:133:TRP:HB2	1:A:180:TYR:CE2	0.50	2.42	18	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:CG	0.50	2.60	19	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:HA	0.50	1.84	1	2
1:A:106:VAL:HG12	1:A:107:GLY:N	0.50	2.20	10	3
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:CD1	0.50	2.57	2	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:58:ASP:OD2	0.50	2.05	19	2
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:HA	0.50	1.82	5	3
1:A:69:ARG:HB2	1:A:70:PRO:HD3	0.50	1.82	16	6
1:A:179:GLY:CA	1:A:187:LEU:HD12	0.50	2.36	12	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:68:ARG:O	0.50	2.44	14	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:78:VAL:HG11	0.50	2.41	16	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CD2	0.50	2.41	20	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:180:TYR:CE1	0.50	2.94	1	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:72:ALA:N	0.50	2.20	3	3
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HG2	0.50	2.06	5	3
1:A:105:VAL:HG13	1:A:134:ASP:CA	0.50	2.36	7	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:HA	0.50	2.33	8	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:CG2	0.50	2.91	14	1
1:A:178:LEU:O	1:A:194:LEU:CD1	0.50	2.52	20	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:54:SER:O	0.50	2.06	5	1
1:A:194:LEU:C	1:A:194:LEU:HD23	0.50	2.27	5	3
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:HG13	0.50	2.06	6	1
1:A:57:ILE:HG23	1:A:68:ARG:HB2	0.50	1.84	7	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG22	0.50	2.06	8	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:200:TYR:O	0.50	2.05	11	1
1:A:65:CYS:O	1:A:65:CYS:SG	0.50	2.70	13	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:OG	0.50	2.59	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:HG3	1:A:93:ILE:N	0.50	2.20	14	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:CD	0.50	2.59	18	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:106:VAL:CG2	0.50	2.95	20	1
1:A:43:GLN:O	1:A:47:GLY:N	0.50	2.42	4	2
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:HD3	0.50	2.07	17	4
1:A:54:SER:CB	1:A:56:ASN:OD1	0.50	2.59	15	2
1:A:32:LEU:O	1:A:36:PRO:CD	0.50	2.59	6	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:CG	0.50	2.49	7	1
1:A:40:LEU:HA	1:A:43:GLN:HE22	0.50	1.67	8	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:HB2	0.50	2.36	8	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:HB2	0.50	2.07	11	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:180:TYR:CZ	0.50	2.42	13	2
1:A:163:VAL:H	1:A:164:PRO:CD	0.50	2.18	14	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:CB	0.50	2.37	11	8
1:A:216:TYR:CZ	1:A:219:GLU:OE2	0.50	2.65	3	1
1:A:197:ARG:CZ	1:A:199:LEU:HD21	0.50	2.36	8	1
1:A:165:GLU:O	1:A:213:ARG:NH2	0.50	2.44	9	1
1:A:96:PRO:CG	1:A:213:ARG:HB2	0.50	2.37	12	1
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HB3	0.50	1.80	15	2
1:A:66:PHE:HZ	1:A:212:VAL:HG22	0.50	1.67	19	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:HA	0.50	2.07	6	3
1:A:43:GLN:CG	1:A:60:LYS:CG	0.50	2.88	2	2
1:A:110:THR:HB	1:A:113:ALA:HB3	0.50	1.83	15	3
1:A:95:TRP:NE1	1:A:106:VAL:HG22	0.50	2.22	4	1
1:A:206:VAL:O	1:A:210:CYS:O	0.50	2.29	4	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:186:TYR:CD2	0.50	2.94	9	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HA	0.50	2.07	15	3
1:A:29:LEU:CD2	1:A:71:VAL:CG2	0.50	2.90	15	1
1:A:197:ARG:CG	1:A:197:ARG:NH1	0.50	2.74	17	2
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD13	0.49	2.26	1	3
1:A:72:ALA:O	1:A:73:GLN:C	0.49	2.50	1	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CD2	0.49	2.41	12	6
1:A:95:TRP:HH2	1:A:105:VAL:HG13	0.49	1.61	10	2
1:A:37:PRO:HA	1:A:41:VAL:HG21	0.49	1.83	5	2
1:A:95:TRP:HZ3	1:A:203:VAL:HG22	0.49	1.67	5	2
1:A:207:TRP:O	1:A:208:GLY:O	0.49	2.30	8	2
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HG23	0.49	2.07	13	4
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CE2	0.49	2.42	14	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:82:ARG:NH1	0.49	2.75	14	2
1:A:57:ILE:CD1	1:A:68:ARG:HB3	0.49	2.37	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CD2	0.49	2.42	16	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:72:ALA:HB2	0.49	2.37	17	1
1:A:54:SER:N	1:A:78:VAL:HA	0.49	2.20	20	1
1:A:59:VAL:HG23	1:A:66:PHE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:213:ARG:HA	0.49	1.82	1	2
1:A:181:SER:OG	1:A:185:THR:N	0.49	2.46	8	2
1:A:93:ILE:HB	1:A:180:TYR:OH	0.49	2.07	12	4
1:A:48:TRP:HB2	1:A:59:VAL:CG1	0.49	2.37	3	3
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:CD1	0.49	2.55	4	1
1:A:187:LEU:CG	1:A:191:PHE:CZ	0.49	2.95	5	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:58:ASP:HB2	0.49	1.84	6	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HA	0.49	2.36	7	1
1:A:177:THR:CB	1:A:194:LEU:HG	0.49	2.37	12	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:CG2	0.49	2.94	14	2
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD1	0.49	2.79	14	9
1:A:54:SER:HB2	1:A:78:VAL:CG1	0.49	2.37	1	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:HB3	0.49	2.38	1	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:CG	0.49	2.42	2	3
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HB3	0.49	2.37	19	4
1:A:37:PRO:HD2	1:A:38:PRO:CD	0.49	2.37	5	2
1:A:54:SER:O	1:A:77:GLY:O	0.49	2.29	5	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:70:PRO:HG3	0.49	1.84	7	1
1:A:170:VAL:HB	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.84	7	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:105:VAL:C	0.49	2.86	8	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:57:ILE:O	0.49	2.07	10	1
1:A:95:TRP:O	1:A:165:GLU:N	0.49	2.45	10	1
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:H	0.49	2.10	15	1
1:A:48:TRP:CG	1:A:59:VAL:HG21	0.49	2.42	19	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:64:LEU:CD1	0.49	2.96	20	1
1:A:39:ASP:O	1:A:39:ASP:OD2	0.49	2.31	18	2
1:A:79:ARG:HG3	1:A:203:VAL:C	0.49	2.28	1	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:105:VAL:O	0.49	2.06	2	6
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:HB2	0.49	2.07	11	4
1:A:49:ASN:O	1:A:53:CYS:CB	0.49	2.60	9	2
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:CE2	0.49	2.43	4	1
1:A:169:VAL:HG23	1:A:180:TYR:CE1	0.49	2.42	20	2
1:A:51:LYS:HE2	1:A:51:LYS:C	0.49	2.27	10	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:CZ	0.49	2.90	10	1
1:A:191:PHE:HA	1:A:194:LEU:CB	0.49	2.37	12	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:59:VAL:CG1	0.49	2.38	20	2
1:A:50:PRO:CG	1:A:51:LYS:HE3	0.49	2.37	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HG2	0.49	2.38	6	2
1:A:97:LEU:HB2	1:A:135:ILE:CG2	0.49	2.37	5	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:60:LYS:HE3	0.49	2.06	19	2
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:O	0.49	2.07	12	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:HB3	0.49	2.08	14	2
1:A:163:VAL:CA	1:A:167:LEU:HD21	0.49	2.37	14	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:133:TRP:CZ3	0.49	2.93	19	1
1:A:133:TRP:HE1	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.66	20	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HG12	0.49	2.08	20	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:204:SER:O	0.49	2.66	1	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:106:VAL:HG21	0.49	2.42	4	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:204:SER:N	0.49	2.75	4	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:202:SER:CB	0.49	2.38	7	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:CG2	0.49	2.96	8	1
1:A:74:SER:OG	1:A:75:THR:N	0.49	2.45	8	1
1:A:85:SER:HB2	1:A:89:HIS:CE1	0.49	2.43	16	2
1:A:94:SER:HA	1:A:165:GLU:O	0.49	2.07	19	3
1:A:168:LEU:HD23	1:A:184:GLY:CA	0.49	2.38	12	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:214:ILE:HG21	0.49	2.43	13	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:ALA:O	0.49	2.31	19	2
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HD23	0.49	2.28	16	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:CG2	0.49	2.96	20	1
1:A:72:ALA:O	1:A:76:ASP:O	0.49	2.30	1	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:180:TYR:CZ	0.49	2.42	1	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:135:ILE:HD11	0.49	1.82	3	1
1:A:53:CYS:HB3	1:A:79:ARG:N	0.49	2.22	7	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HG21	0.49	1.85	7	1
1:A:51:LYS:O	1:A:82:ARG:NE	0.49	2.45	8	2
1:A:77:GLY:C	1:A:78:VAL:CG1	0.49	2.80	15	5
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:HD12	0.49	2.07	11	2
1:A:86:ARG:N	1:A:89:HIS:CE1	0.49	2.81	12	1
1:A:43:GLN:CB	1:A:60:LYS:HB3	0.49	2.38	17	2
1:A:54:SER:HB2	1:A:77:GLY:O	0.49	2.08	14	2
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:CE	0.49	2.32	15	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:71:VAL:HG11	0.49	2.38	3	2
1:A:195:LYS:O	1:A:198:THR:OG1	0.49	2.31	3	2
1:A:44:ARG:O	1:A:49:ASN:HA	0.49	2.07	5	1
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:CG2	0.49	2.91	17	2
1:A:107:GLY:HA3	1:A:132:GLY:HA2	0.49	1.84	7	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:59:VAL:HG21	0.49	2.42	8	1
1:A:73:GLN:O	1:A:74:SER:O	0.49	2.30	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:VAL:CG2	1:A:199:LEU:HB2	0.49	2.38	8	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:212:VAL:CG2	0.49	2.90	10	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:CD2	0.49	2.79	10	2
1:A:45:HIS:CD2	1:A:50:PRO:CG	0.49	2.96	12	2
1:A:29:LEU:HD22	1:A:71:VAL:HG22	0.49	1.83	15	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:59:VAL:HG13	0.49	1.84	18	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:76:ASP:CB	0.49	2.33	18	1
1:A:45:HIS:HA	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.38	18	4
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:CG	0.49	2.28	19	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:HG13	0.49	2.43	4	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:75:THR:CG2	0.49	2.38	4	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:CD	0.49	2.81	5	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:OG	0.49	2.30	7	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:214:ILE:HB	0.49	1.83	10	2
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:HD21	0.49	1.68	20	2
1:A:82:ARG:CD	1:A:82:ARG:C	0.49	2.77	15	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:70:PRO:O	0.49	2.46	18	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:HG21	0.49	1.83	20	1
1:A:89:HIS:O	1:A:171:LEU:O	0.49	2.30	20	5
1:A:105:VAL:C	1:A:106:VAL:HG23	0.49	2.28	3	4
1:A:92:GLU:O	1:A:93:ILE:CD1	0.49	2.56	2	2
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:OG1	0.49	2.07	20	2
1:A:178:LEU:N	1:A:194:LEU:HD21	0.49	2.22	9	3
1:A:49:ASN:O	1:A:78:VAL:HG23	0.49	2.08	5	1
1:A:110:THR:HB	1:A:113:ALA:HB2	0.49	1.84	7	4
1:A:54:SER:HB2	1:A:75:THR:CG2	0.49	2.38	7	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:92:GLU:N	0.49	2.81	7	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HB2	0.49	2.27	8	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:OD1	0.49	2.31	11	3
1:A:187:LEU:CG	1:A:191:PHE:CE1	0.49	2.96	12	1
1:A:57:ILE:HD11	1:A:66:PHE:CD1	0.48	2.43	1	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:204:SER:OG	0.48	2.60	1	1
1:A:197:ARG:C	1:A:197:ARG:HD2	0.48	2.28	11	4
1:A:182:ILE:HG12	1:A:182:ILE:O	0.48	2.08	13	4
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:C	0.48	2.51	19	2
1:A:185:THR:O	1:A:186:TYR:C	0.48	2.52	16	4
1:A:44:ARG:CD	1:A:50:PRO:HG3	0.48	2.37	6	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:HD21	0.48	2.43	7	1
1:A:81:LYS:O	1:A:202:SER:HB2	0.48	2.08	7	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:CB	0.48	2.38	8	1
1:A:181:SER:CB	1:A:186:TYR:HB2	0.48	2.38	8	1

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:75:THR:CG2	0.48	2.88	9	2
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:CD1	0.48	2.81	20	2
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CA	0.48	2.82	20	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:HB2	0.48	1.67	2	2
1:A:205:ALA:O	1:A:206:VAL:O	0.48	2.31	2	3
1:A:37:PRO:CD	1:A:38:PRO:HD2	0.48	2.38	5	2
1:A:64:LEU:CG	1:A:212:VAL:O	0.48	2.61	5	1
1:A:72:ALA:O	1:A:73:GLN:O	0.48	2.30	18	2
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CD1	0.48	2.96	6	3
1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:OD1	0.48	2.44	9	1
1:A:91:TRP:CE2	1:A:169:VAL:HB	0.48	2.42	10	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:187:LEU:CD1	0.48	2.38	12	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CD1	0.48	2.60	16	1
1:A:92:GLU:CG	1:A:167:LEU:O	0.48	2.61	17	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD1	0.48	2.08	4	2
1:A:73:GLN:O	1:A:75:THR:OG1	0.48	2.32	13	2
1:A:57:ILE:CD1	1:A:207:TRP:HA	0.48	2.37	6	1
1:A:39:ASP:O	1:A:43:GLN:OE1	0.48	2.31	14	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:O	0.48	2.42	19	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:180:TYR:CG	0.48	2.44	20	1
1:A:73:GLN:O	1:A:74:SER:C	0.48	2.52	7	6
1:A:180:TYR:O	1:A:187:LEU:CD1	0.48	2.58	2	1
1:A:197:ARG:O	1:A:197:ARG:CG	0.48	2.61	17	17
1:A:40:LEU:O	1:A:44:ARG:HB2	0.48	2.08	19	6
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:CZ	0.48	2.38	3	1
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CD	0.48	2.38	4	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:CD1	0.48	2.82	4	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:HE	0.48	1.68	6	3
1:A:48:TRP:CH2	1:A:64:LEU:CD2	0.48	2.93	11	2
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:HB2	0.48	1.86	8	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:CA	0.48	2.76	9	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HG	0.48	2.44	9	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:O	0.48	2.08	11	1
1:A:171:LEU:HA	1:A:178:LEU:CB	0.48	2.39	13	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:HG21	0.48	2.43	17	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:205:ALA:HB2	0.48	2.43	2	2
1:A:56:ASN:CG	1:A:76:ASP:O	0.48	2.52	3	3
1:A:86:ARG:O	1:A:86:ARG:CZ	0.48	2.62	5	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:CA	0.48	2.38	7	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HD13	0.48	2.39	7	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:66:PHE:CG	0.48	3.02	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:182:ILE:CG2	0.48	2.96	10	1
1:A:45:HIS:CA	1:A:50:PRO:HD3	0.48	2.38	16	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:C	0.48	2.82	16	2
1:A:97:LEU:CD2	1:A:211:GLN:HG3	0.48	2.39	17	1
1:A:109:ALA:C	1:A:199:LEU:HB2	0.48	2.29	19	1
1:A:187:LEU:HB2	1:A:191:PHE:CE1	0.48	2.43	19	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:59:VAL:C	0.48	2.52	8	4
1:A:79:ARG:HG3	1:A:204:SER:OG	0.48	2.08	1	1
1:A:167:LEU:HA	1:A:182:ILE:HG22	0.48	1.85	4	4
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:203:VAL:CG2	0.48	2.96	13	3
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HG	0.48	2.09	11	2
1:A:94:SER:HB3	1:A:165:GLU:O	0.48	2.08	15	6
1:A:96:PRO:HD3	1:A:213:ARG:CD	0.48	2.38	6	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.38	7	1
1:A:177:THR:CA	1:A:194:LEU:CD2	0.48	2.92	11	2
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HG	0.48	2.39	13	3
1:A:48:TRP:HB2	1:A:214:ILE:HD12	0.48	1.82	10	1
1:A:94:SER:CB	1:A:166:ARG:HA	0.48	2.38	12	1
1:A:194:LEU:HD12	1:A:194:LEU:O	0.48	2.08	12	1
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:HD2	0.48	2.09	16	3
1:A:207:TRP:CD2	1:A:207:TRP:C	0.48	2.86	14	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:199:LEU:HA	0.48	1.85	1	4
1:A:79:ARG:C	1:A:79:ARG:CD	0.48	2.82	5	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:202:SER:CB	0.48	2.38	15	4
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:HE3	0.48	1.68	19	2
1:A:48:TRP:HE1	1:A:64:LEU:HG	0.48	1.68	9	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:45:HIS:H	0.48	2.27	12	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HE2	0.48	2.08	13	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:HG23	0.48	2.38	13	1
1:A:164:PRO:C	1:A:167:LEU:HD11	0.48	2.29	17	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:GLN:OE1	0.48	2.32	18	1
1:A:108:VAL:O	1:A:131:TRP:CB	0.48	2.61	19	1
1:A:82:ARG:NH1	1:A:82:ARG:HG2	0.48	2.24	1	2
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD2	0.48	2.08	19	2
1:A:48:TRP:CG	1:A:66:PHE:HE1	0.48	2.27	4	1
1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HE3	0.48	1.68	18	2
1:A:68:ARG:O	1:A:68:ARG:HD3	0.48	2.09	6	3
1:A:86:ARG:C	1:A:86:ARG:NE	0.48	2.67	5	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:214:ILE:HG13	0.48	2.38	9	3
1:A:44:ARG:HG2	1:A:45:HIS:N	0.48	2.23	17	2
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:CA	0.48	2.38	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:N	0.48	2.67	15	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HB3	0.48	2.37	16	1
1:A:54:SER:CB	1:A:75:THR:OG1	0.48	2.62	2	1
1:A:216:TYR:CD1	1:A:219:GLU:HB2	0.48	2.43	5	4
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:CD1	0.48	2.43	3	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:207:TRP:CE3	0.48	2.44	3	1
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:CD	0.48	2.87	3	1
1:A:167:LEU:CB	1:A:180:TYR:CE1	0.48	2.97	4	1
1:A:187:LEU:HB3	1:A:191:PHE:CE2	0.48	2.44	5	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:40:LEU:C	0.48	2.80	11	2
1:A:95:TRP:CE2	1:A:106:VAL:HG23	0.48	2.44	7	1
1:A:48:TRP:C	1:A:214:ILE:HD13	0.48	2.29	11	2
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:OD1	0.48	2.31	10	2
1:A:163:VAL:O	1:A:163:VAL:CG1	0.48	2.62	10	1
1:A:194:LEU:CD1	1:A:198:THR:HA	0.48	2.39	12	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:215:ARG:O	0.48	2.62	13	1
1:A:216:TYR:CD2	1:A:219:GLU:HB2	0.48	2.44	13	1
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:CZ	0.48	2.38	17	1
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:N	0.48	2.43	18	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:163:VAL:HG23	0.48	1.86	18	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:NE2	0.48	2.66	20	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:CD1	0.48	2.82	4	3
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:HB3	0.48	2.09	10	7
1:A:164:PRO:O	1:A:165:GLU:C	0.48	2.50	12	3
1:A:39:ASP:CG	1:A:43:GLN:HB3	0.48	2.28	11	3
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:CG2	0.48	2.91	10	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG23	0.48	1.85	13	1
1:A:207:TRP:O	1:A:207:TRP:CE3	0.48	2.67	16	2
1:A:64:LEU:HD23	1:A:214:ILE:O	0.48	2.08	18	1
1:A:173:MET:C	1:A:175:GLU:N	0.47	2.67	8	15
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HB2	0.47	2.09	16	5
1:A:87:GLY:N	1:A:173:MET:HB3	0.47	2.24	15	3
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:HG2	0.47	2.23	18	2
1:A:60:LYS:NZ	1:A:60:LYS:HB2	0.47	2.23	5	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:135:ILE:CG1	0.47	2.96	7	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:178:LEU:HD11	0.47	2.38	8	1
1:A:109:ALA:HA	1:A:129:GLU:O	0.47	2.09	9	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:55:GLU:OE1	0.47	2.08	12	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:59:VAL:O	0.47	2.62	15	1
1:A:51:LYS:HE2	1:A:80:GLY:HA2	0.47	1.83	15	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:212:VAL:O	0.47	2.67	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:HB	0.47	2.38	20	1
1:A:44:ARG:NE	1:A:59:VAL:CG1	0.47	2.77	1	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:75:THR:O	0.47	2.62	1	1
1:A:170:VAL:HG21	1:A:187:LEU:HD22	0.47	1.86	1	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:NE	0.47	2.76	3	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:CG	0.47	2.62	3	1
1:A:91:TRP:HB3	1:A:216:TYR:CZ	0.47	2.44	4	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:210:CYS:HB3	0.47	2.39	4	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:83:GLY:N	0.47	2.77	8	1
1:A:43:GLN:O	1:A:48:TRP:HZ3	0.47	1.88	9	2
1:A:48:TRP:HB3	1:A:59:VAL:HG11	0.47	1.86	9	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:212:VAL:HG21	0.47	2.44	11	1
1:A:197:ARG:NH1	1:A:197:ARG:HG3	0.47	2.24	17	2
1:A:39:ASP:CA	1:A:43:GLN:HG3	0.47	2.39	18	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:207:TRP:HA	0.47	2.10	1	1
1:A:52:ASP:O	1:A:79:ARG:HB3	0.47	2.08	10	4
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:HE	0.47	2.13	6	1
1:A:197:ARG:HH21	1:A:199:LEU:HD21	0.47	1.68	8	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:HG22	0.47	2.41	9	3
1:A:187:LEU:O	1:A:187:LEU:HG	0.47	2.09	12	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:CG1	0.47	2.97	17	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:HA	0.47	2.39	1	3
1:A:89:HIS:CD2	1:A:89:HIS:N	0.47	2.82	20	3
1:A:95:TRP:HH2	1:A:205:ALA:CB	0.47	2.20	2	1
1:A:105:VAL:O	1:A:204:SER:O	0.47	2.32	9	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:200:TYR:O	0.47	2.63	13	3
1:A:44:ARG:HG2	1:A:50:PRO:HD3	0.47	1.85	3	2
1:A:29:LEU:HD12	1:A:32:LEU:CB	0.47	2.40	4	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HG21	0.47	2.44	4	1
1:A:166:ARG:HG3	1:A:167:LEU:N	0.47	2.24	4	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:78:VAL:HG11	0.47	1.84	7	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:O	0.47	2.62	12	4
1:A:30:GLU:OE2	1:A:56:ASN:OD1	0.47	2.33	13	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:OD1	0.47	2.48	14	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:44:ARG:NH1	0.47	2.24	17	1
1:A:33:LEU:CG	1:A:34:SER:N	0.47	2.76	18	20
1:A:78:VAL:CG2	1:A:78:VAL:O	0.47	2.63	2	2
1:A:44:ARG:C	1:A:46:HIS:N	0.47	2.67	3	1
1:A:61:GLU:C	1:A:63:GLY:N	0.47	2.67	19	3
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HG3	0.47	1.85	4	1
1:A:170:VAL:CG1	1:A:187:LEU:HD11	0.47	2.39	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ARG:HA	1:A:202:SER:HB3	0.47	1.86	7	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:199:LEU:HD13	0.47	1.85	9	1
1:A:166:ARG:NH1	1:A:166:ARG:HB2	0.47	2.25	9	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:169:VAL:CG1	0.47	2.97	11	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:CB	0.47	2.77	12	2
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:CG	0.47	2.62	13	1
1:A:68:ARG:HB3	1:A:207:TRP:HB2	0.47	1.85	16	1
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:HD3	0.47	1.69	20	2
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:HG3	0.47	2.39	17	1
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:HB2	0.47	2.08	19	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:CD	0.47	2.39	1	4
1:A:50:PRO:CG	1:A:53:CYS:HB2	0.47	2.37	1	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:HG3	0.47	2.08	2	3
1:A:49:ASN:OD1	1:A:49:ASN:C	0.47	2.53	6	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:68:ARG:HB3	0.47	2.40	12	4
1:A:109:ALA:CB	1:A:130:SER:HA	0.47	2.39	19	4
1:A:86:ARG:C	1:A:89:HIS:CE1	0.47	2.88	12	1
1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.88	12	1
1:A:59:VAL:CA	1:A:66:PHE:HA	0.47	2.40	17	2
1:A:72:ALA:O	1:A:74:SER:N	0.47	2.48	1	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:SD	0.47	2.73	1	6
1:A:113:ALA:CB	1:A:129:GLU:HB2	0.47	2.38	1	6
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:CYS:HB3	0.47	1.87	3	2
1:A:69:ARG:H	1:A:70:PRO:HD2	0.47	1.69	15	3
1:A:85:SER:CB	1:A:89:HIS:CD2	0.47	2.97	3	1
1:A:129:GLU:OE2	1:A:131:TRP:CD2	0.47	2.68	3	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:207:TRP:CE2	0.47	2.97	4	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:59:VAL:CG2	0.47	2.78	5	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HB3	0.47	2.50	5	1
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:HE3	0.47	1.91	6	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:CB	0.47	2.98	7	1
1:A:48:TRP:HE3	1:A:214:ILE:CG2	0.47	2.21	7	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:73:GLN:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:55:GLU:HG3	0.47	1.86	8	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:59:VAL:O	0.47	2.53	10	3
1:A:177:THR:CG2	1:A:198:THR:HB	0.47	2.39	8	2
1:A:133:TRP:HE3	1:A:163:VAL:HG13	0.47	1.66	9	1
1:A:51:LYS:CG	1:A:83:GLY:O	0.47	2.63	11	1
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:CD	0.47	2.63	13	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:59:VAL:CB	0.47	2.98	13	1
1:A:82:ARG:O	1:A:200:TYR:CD2	0.47	2.67	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ILE:CG2	1:A:214:ILE:HG13	0.47	2.38	13	1
1:A:43:GLN:O	1:A:43:GLN:HG2	0.47	2.09	15	1
1:A:54:SER:HB2	1:A:56:ASN:OD1	0.47	2.09	15	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:HG3	0.47	2.44	16	1
1:A:164:PRO:CA	1:A:167:LEU:HD11	0.47	2.40	17	1
1:A:207:TRP:O	1:A:211:GLN:NE2	0.47	2.48	17	1
1:A:112:LEU:O	1:A:128:SER:HB3	0.47	2.09	19	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:199:LEU:O	0.47	2.60	19	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:OD2	0.47	2.33	1	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:44:ARG:HB2	0.47	2.25	2	1
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:CG	0.47	2.62	11	3
1:A:33:LEU:CD1	1:A:40:LEU:HD21	0.47	2.40	5	1
1:A:43:GLN:C	1:A:59:VAL:O	0.47	2.54	5	1
1:A:194:LEU:HG	1:A:197:ARG:HD2	0.47	1.87	7	3
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:TRP:H	0.47	1.65	7	2
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD23	0.47	2.29	10	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CG	0.47	2.40	11	2
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HB	0.47	2.40	11	1
1:A:167:LEU:CG	1:A:182:ILE:HG22	0.47	2.39	13	2
1:A:40:LEU:HB2	1:A:60:LYS:CE	0.47	2.40	14	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:THR:OG1	0.47	2.09	19	1
1:A:108:VAL:CB	1:A:199:LEU:CD1	0.47	2.93	19	1
1:A:48:TRP:HH2	1:A:57:ILE:CG2	0.47	2.20	20	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:NH2	0.47	2.24	1	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:CB	0.47	2.98	3	2
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:CG	0.47	2.40	5	2
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:CG	0.47	2.40	6	2
1:A:92:GLU:CB	1:A:215:ARG:HB2	0.47	2.40	9	1
1:A:69:ARG:HB3	1:A:70:PRO:HD2	0.47	1.86	13	1
1:A:208:GLY:O	1:A:210:CYS:N	0.47	2.48	15	1
1:A:110:THR:CA	1:A:199:LEU:HB2	0.47	2.40	17	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:75:THR:C	0.47	2.30	1	1
1:A:54:SER:OG	1:A:56:ASN:CG	0.47	2.54	10	3
1:A:33:LEU:O	1:A:36:PRO:HD2	0.47	2.10	5	1
1:A:86:ARG:CB	1:A:173:MET:HG2	0.47	2.40	5	1
1:A:163:VAL:HG13	1:A:167:LEU:HD21	0.47	1.87	5	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:43:GLN:O	0.47	2.53	7	2
1:A:213:ARG:CD	1:A:213:ARG:N	0.47	2.78	6	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:41:VAL:HB	0.47	2.40	7	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:80:GLY:HA3	0.47	1.85	11	3
1:A:110:THR:CB	1:A:199:LEU:HD23	0.47	2.40	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:GLY:O	1:A:211:GLN:OE1	0.47	2.31	10	2
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:O	0.47	2.68	13	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:ARG:HD3	0.47	2.40	16	2
1:A:56:ASN:OD1	1:A:76:ASP:HB3	0.47	2.10	15	1
1:A:182:ILE:C	1:A:184:GLY:N	0.47	2.67	16	2
1:A:44:ARG:CZ	1:A:55:GLU:HB2	0.47	2.40	18	2
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HG2	0.47	2.10	18	1
1:A:59:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CE1	0.47	2.45	19	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:HA	0.47	2.45	20	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:TRP:O	0.46	2.33	1	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:202:SER:CB	0.46	2.40	8	3
1:A:86:ARG:NH2	1:A:87:GLY:CA	0.46	2.77	5	1
1:A:82:ARG:CA	1:A:202:SER:HB3	0.46	2.40	7	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:HB3	0.46	1.86	9	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:CG2	0.46	2.40	20	2
1:A:46:HIS:O	1:A:47:GLY:O	0.46	2.33	10	2
1:A:94:SER:CB	1:A:213:ARG:HB2	0.46	2.40	10	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:HD12	0.46	2.40	12	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:CG	0.46	2.36	12	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:CD1	0.46	2.62	13	1
1:A:37:PRO:HB3	1:A:41:VAL:HG21	0.46	1.83	14	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:67:GLU:H	0.46	1.71	15	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:HB3	0.46	2.45	18	1
1:A:73:GLN:O	1:A:76:ASP:OD1	0.46	2.33	19	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:66:PHE:CE1	0.46	3.03	15	2
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:HD11	0.46	2.40	3	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:HD13	0.46	1.86	3	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:50:PRO:HG3	0.46	2.25	4	1
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:N	0.46	2.26	6	2
1:A:91:TRP:NE1	1:A:169:VAL:HB	0.46	2.25	6	1
1:A:37:PRO:CB	1:A:41:VAL:HB	0.46	2.40	7	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HD12	0.46	1.78	9	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:55:GLU:OE2	0.46	2.55	10	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:55:GLU:OE2	0.46	2.10	10	1
1:A:52:ASP:HB2	1:A:79:ARG:C	0.46	2.31	11	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:37:PRO:HD2	0.46	1.83	20	3
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:HB2	0.46	1.71	14	2
1:A:194:LEU:HD13	1:A:197:ARG:HD2	0.46	1.85	12	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:HA	0.46	2.25	19	2
1:A:87:GLY:O	1:A:172:ASP:OD1	0.46	2.34	16	2
1:A:93:ILE:HD13	1:A:214:ILE:CG1	0.46	2.40	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:THR:O	1:A:111:ALA:C	0.46	2.52	19	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:185:THR:CB	0.46	2.93	20	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:HG13	0.46	2.45	2	1
1:A:44:ARG:O	1:A:46:HIS:N	0.46	2.49	3	2
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CE2	0.46	2.45	4	1
1:A:39:ASP:C	1:A:39:ASP:OD1	0.46	2.54	11	2
1:A:81:LYS:HB3	1:A:203:VAL:N	0.46	2.25	7	1
1:A:109:ALA:O	1:A:199:LEU:HB2	0.46	2.09	8	1
1:A:95:TRP:CB	1:A:164:PRO:HA	0.46	2.40	9	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:164:PRO:HB2	0.46	2.46	10	1
1:A:30:GLU:OE1	1:A:75:THR:CG2	0.46	2.64	11	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:194:LEU:HB3	0.46	2.41	15	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CD1	0.46	2.47	16	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:CG1	0.46	2.97	17	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:81:LYS:O	0.46	2.63	17	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:59:VAL:HG22	0.46	2.45	19	1
1:A:111:ALA:C	1:A:113:ALA:N	0.46	2.68	19	1
1:A:187:LEU:O	1:A:187:LEU:HD12	0.46	2.10	19	1
1:A:171:LEU:C	1:A:171:LEU:CD1	0.46	2.78	20	1
1:A:173:MET:HA	1:A:173:MET:CE	0.46	2.41	1	1
1:A:33:LEU:O	1:A:41:VAL:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:O	0.46	2.64	3	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:50:PRO:HD2	0.46	2.10	9	2
1:A:81:LYS:HA	1:A:201:PRO:O	0.46	2.10	14	1
1:A:71:VAL:HA	1:A:207:TRP:CH2	0.46	2.45	18	1
1:A:112:LEU:C	1:A:128:SER:HB2	0.46	2.29	19	1
1:A:188:GLY:H	1:A:189:PRO:HD2	0.46	1.70	10	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:50:PRO:HB3	0.46	2.26	13	4
1:A:53:CYS:HB2	1:A:78:VAL:HG23	0.46	1.86	8	1
1:A:68:ARG:HD2	1:A:68:ARG:O	0.46	2.11	15	3
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:OG1	0.46	2.33	10	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:CA	0.46	2.63	10	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:167:LEU:C	0.46	2.31	10	1
1:A:191:PHE:HA	1:A:194:LEU:HB3	0.46	1.87	12	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:HD22	0.46	1.71	14	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:211:GLN:O	0.46	2.32	15	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:H	0.46	1.64	19	1
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ALA:N	0.46	2.49	19	1
1:A:94:SER:HA	1:A:167:LEU:CD2	0.46	2.40	20	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HA	0.46	2.51	1	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HB	0.46	2.08	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:TRP:CE3	1:A:212:VAL:CG1	0.46	2.98	2	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:194:LEU:HD12	0.46	1.85	3	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:186:TYR:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:CD1	0.46	2.40	9	1
1:A:32:LEU:O	1:A:32:LEU:CD1	0.46	2.63	11	1
1:A:48:TRP:CD2	1:A:66:PHE:HE1	0.46	2.29	15	2
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:167:LEU:HG	0.46	2.46	13	1
1:A:83:GLY:HA2	1:A:216:TYR:OH	0.46	2.11	16	1
1:A:163:VAL:HB	1:A:167:LEU:HD23	0.46	1.88	1	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:HD1	0.46	2.24	3	3
1:A:78:VAL:O	1:A:204:SER:OG	0.46	2.32	4	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CB	0.46	2.24	5	1
1:A:68:ARG:HG3	1:A:207:TRP:CE2	0.46	2.46	5	1
1:A:92:GLU:O	1:A:215:ARG:HB3	0.46	2.10	5	2
1:A:165:GLU:OE1	1:A:165:GLU:HA	0.46	2.10	10	1
1:A:164:PRO:HD2	1:A:182:ILE:CG2	0.46	2.41	12	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:HG3	0.46	2.10	14	1
1:A:86:ARG:HD2	1:A:89:HIS:NE2	0.46	2.24	15	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:HB2	0.46	2.10	19	1
1:A:82:ARG:NH1	1:A:82:ARG:CG	0.46	2.74	1	1
1:A:44:ARG:O	1:A:47:GLY:N	0.46	2.48	15	2
1:A:216:TYR:CE1	1:A:219:GLU:OE2	0.46	2.69	3	1
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:O	0.46	2.33	5	1
1:A:77:GLY:CA	1:A:207:TRP:CB	0.46	2.94	6	1
1:A:92:GLU:O	1:A:214:ILE:CA	0.46	2.64	6	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:201:PRO:O	0.46	2.11	7	1
1:A:92:GLU:HB3	1:A:215:ARG:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:53:CYS:HB2	1:A:78:VAL:HB	0.46	1.88	15	2
1:A:33:LEU:CG	1:A:55:GLU:HG3	0.46	2.41	11	1
1:A:106:VAL:CA	1:A:202:SER:O	0.46	2.64	15	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CB	0.46	2.63	19	1
1:A:55:GLU:HG3	1:A:56:ASN:N	0.46	2.26	1	2
1:A:81:LYS:CG	1:A:202:SER:HB3	0.46	2.41	2	2
1:A:173:MET:O	1:A:173:MET:SD	0.46	2.74	5	1
1:A:44:ARG:NE	1:A:50:PRO:HG3	0.46	2.26	6	1
1:A:107:GLY:HA2	1:A:133:TRP:CE3	0.46	2.46	7	1
1:A:210:CYS:O	1:A:210:CYS:SG	0.46	2.73	7	1
1:A:53:CYS:CB	1:A:78:VAL:HA	0.46	2.41	8	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:169:VAL:CG2	0.46	2.93	8	1
1:A:193:GLY:O	1:A:197:ARG:HB3	0.46	2.11	8	4
1:A:97:LEU:HD22	1:A:210:CYS:SG	0.46	2.50	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:GLU:O	1:A:57:ILE:O	0.46	2.33	12	2
1:A:69:ARG:CG	1:A:70:PRO:HD2	0.46	2.40	13	1
1:A:184:GLY:O	1:A:185:THR:C	0.46	2.54	16	1
1:A:173:MET:HA	1:A:173:MET:HE2	0.46	1.86	1	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:212:VAL:HG21	0.46	2.46	4	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD1	0.46	2.45	5	1
1:A:214:ILE:HG12	1:A:215:ARG:N	0.46	2.25	6	1
1:A:85:SER:OG	1:A:171:LEU:HD11	0.46	2.11	7	1
1:A:94:SER:HB3	1:A:213:ARG:HB2	0.46	1.87	7	1
1:A:174:GLU:HG2	1:A:175:GLU:N	0.46	2.25	8	1
1:A:64:LEU:HD22	1:A:213:ARG:CA	0.46	2.34	9	1
1:A:106:VAL:HG22	1:A:203:VAL:CB	0.46	2.40	10	1
1:A:187:LEU:CG	1:A:187:LEU:O	0.46	2.64	10	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:NH2	0.46	2.26	11	1
1:A:89:HIS:HB2	1:A:91:TRP:CH2	0.46	2.47	13	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:198:THR:HA	0.46	2.41	15	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:211:GLN:N	0.46	2.48	15	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:61:GLU:OE1	0.46	2.34	16	1
1:A:68:ARG:CZ	1:A:72:ALA:HA	0.46	2.41	17	1
1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:HD3	0.46	2.26	18	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:59:VAL:CA	0.46	2.98	20	1
1:A:66:PHE:HE2	1:A:78:VAL:HG11	0.46	1.71	20	1
1:A:79:ARG:CD	1:A:79:ARG:C	0.46	2.84	20	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:67:GLU:HB3	0.45	2.11	1	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:HG3	0.45	1.87	16	2
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:CZ	0.45	2.41	1	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:207:TRP:CZ3	0.45	2.46	3	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:182:ILE:HG21	0.45	2.41	5	2
1:A:93:ILE:HG13	1:A:180:TYR:OH	0.45	2.11	9	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:HD2	0.45	2.29	9	1
1:A:85:SER:HB2	1:A:89:HIS:ND1	0.45	2.26	12	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:HD1	0.45	1.93	13	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:CG	0.45	2.40	14	1
1:A:167:LEU:HB3	1:A:182:ILE:CG2	0.45	2.41	15	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:N	0.45	2.79	15	1
1:A:43:GLN:CG	1:A:61:GLU:CD	0.45	2.83	16	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:CG	0.45	2.83	17	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:HB	0.45	1.87	18	1
1:A:72:ALA:O	1:A:76:ASP:OD2	0.45	2.34	19	1
1:A:164:PRO:CG	1:A:182:ILE:HB	0.45	2.41	19	1
1:A:213:ARG:C	1:A:213:ARG:HD2	0.45	2.31	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:O	1:A:30:GLU:C	0.45	2.54	15	5
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:HA2	0.45	1.88	1	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:205:ALA:CA	0.45	2.23	2	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:HG3	0.45	2.11	3	1
1:A:37:PRO:HD2	1:A:38:PRO:HD3	0.45	1.89	18	2
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HB2	0.45	2.12	14	4
1:A:95:TRP:O	1:A:164:PRO:HA	0.45	2.11	9	1
1:A:96:PRO:HB3	1:A:165:GLU:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:CB	0.45	2.23	14	3
1:A:95:TRP:CA	1:A:212:VAL:HG23	0.45	2.41	14	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CE2	0.45	2.99	17	1
1:A:76:ASP:HB3	1:A:207:TRP:CD1	0.45	2.46	19	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:82:ARG:N	0.45	2.26	1	1
1:A:78:VAL:HG22	1:A:205:ALA:N	0.45	2.26	2	1
1:A:92:GLU:HB3	1:A:215:ARG:HB3	0.45	1.88	12	3
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:THR:CB	0.45	2.41	4	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:43:GLN:HB2	0.45	2.11	15	3
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HB2	0.45	2.12	10	2
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HG2	0.45	2.11	13	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:O	0.45	2.55	14	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:NE	0.45	2.27	16	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:O	0.45	2.34	16	1
1:A:133:TRP:C	1:A:134:ASP:OD1	0.45	2.55	16	1
1:A:57:ILE:CD1	1:A:66:PHE:HB3	0.45	2.42	19	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HG3	0.45	2.42	2	1
1:A:182:ILE:HG12	1:A:185:THR:HB	0.45	1.89	20	2
1:A:106:VAL:HG11	1:A:180:TYR:CE2	0.45	2.46	3	2
1:A:49:ASN:OD1	1:A:51:LYS:HE3	0.45	2.11	18	2
1:A:213:ARG:CZ	1:A:213:ARG:HB3	0.45	2.41	4	1
1:A:195:LYS:HE3	1:A:196:GLY:N	0.45	2.26	13	5
1:A:106:VAL:CG2	1:A:107:GLY:N	0.45	2.79	9	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:34:SER:N	0.45	2.78	10	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CB	0.45	3.00	13	1
1:A:60:LYS:N	1:A:65:CYS:O	0.45	2.50	15	1
1:A:58:ASP:O	1:A:67:GLU:HB2	0.45	2.11	19	1
1:A:68:ARG:HD3	1:A:68:ARG:N	0.45	2.27	2	1
1:A:178:LEU:HD12	1:A:201:PRO:HD3	0.45	1.88	2	1
1:A:82:ARG:CD	1:A:82:ARG:N	0.45	2.78	20	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:86:ARG:NH1	0.45	2.84	4	1
1:A:39:ASP:O	1:A:41:VAL:N	0.45	2.49	8	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:CB	0.45	2.65	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:ARG:HE	1:A:199:LEU:HD11	0.45	1.71	10	1
1:A:84:TYR:OH	1:A:91:TRP:NE1	0.45	2.40	11	1
1:A:46:HIS:C	1:A:61:GLU:OE1	0.45	2.55	12	1
1:A:194:LEU:CD1	1:A:197:ARG:HD2	0.45	2.42	12	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:55:GLU:CG	0.45	2.40	13	1
1:A:72:ALA:HA	1:A:76:ASP:CB	0.45	2.42	14	1
1:A:81:LYS:CA	1:A:202:SER:HB2	0.45	2.42	19	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:133:TRP:CE3	0.45	3.00	19	1
1:A:111:ALA:O	1:A:112:LEU:C	0.45	2.54	19	1
1:A:30:GLU:OE2	1:A:34:SER:OG	0.45	2.34	5	1
1:A:170:VAL:HG21	1:A:187:LEU:HD21	0.45	1.87	6	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:82:ARG:NH2	0.45	2.70	7	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:213:ARG:HA	0.45	2.41	7	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:GLN:C	0.45	2.54	15	3
1:A:59:VAL:HB	1:A:66:PHE:CB	0.45	2.41	9	1
1:A:93:ILE:HG21	1:A:180:TYR:HH	0.45	1.71	12	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:H	0.45	2.09	16	3
1:A:91:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD23	0.45	2.46	13	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:105:VAL:O	0.45	2.70	13	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:NE1	0.45	2.27	14	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:179:GLY:O	0.45	2.55	14	1
1:A:207:TRP:C	1:A:207:TRP:CE3	0.45	2.90	14	1
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD2	0.45	2.80	17	1
1:A:214:ILE:CD1	1:A:214:ILE:O	0.45	2.65	20	1
1:A:79:ARG:O	1:A:79:ARG:CZ	0.45	2.65	1	1
1:A:166:ARG:HG2	1:A:167:LEU:N	0.45	2.25	1	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:214:ILE:HB	0.45	2.46	2	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:31:GLU:N	0.45	2.26	11	2
1:A:213:ARG:N	1:A:213:ARG:HD2	0.45	2.26	6	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:213:ARG:CA	0.45	2.41	7	1
1:A:68:ARG:CB	1:A:207:TRP:HB2	0.45	2.41	7	3
1:A:166:ARG:CA	1:A:167:LEU:HD13	0.45	2.42	7	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:70:PRO:HG2	0.45	1.85	8	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:55:GLU:HA	0.45	2.27	13	3
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HE2	0.45	2.11	18	3
1:A:72:ALA:CB	1:A:76:ASP:HA	0.45	2.38	12	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:CD	0.45	2.41	14	1
1:A:39:ASP:O	1:A:60:LYS:HG2	0.45	2.12	17	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:64:LEU:HD11	0.45	1.70	18	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:HD12	0.45	2.47	20	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:207:TRP:O	0.45	2.12	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ARG:O	1:A:45:HIS:C	0.45	2.56	3	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:O	0.45	2.65	6	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:56:ASN:OD1	0.45	2.12	11	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:209:GLN:HG2	0.45	2.12	14	1
1:A:166:ARG:C	1:A:167:LEU:HG	0.45	2.32	17	1
1:A:48:TRP:CD1	1:A:66:PHE:CD1	0.45	3.04	18	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:CB	0.45	2.41	1	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:82:ARG:CZ	0.45	2.64	8	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:CD1	0.45	2.44	8	1
1:A:92:GLU:HG3	1:A:167:LEU:O	0.45	2.12	17	2
1:A:50:PRO:O	1:A:53:CYS:C	0.45	2.55	15	1
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HB3	0.45	2.12	18	4
1:A:40:LEU:HD11	1:A:44:ARG:CZ	0.45	2.42	17	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:CB	0.45	2.42	18	1
1:A:171:LEU:CB	1:A:178:LEU:HB3	0.45	2.42	18	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:C	0.45	2.55	10	3
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:HG11	0.45	2.13	2	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:50:PRO:HG3	0.45	1.89	3	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:172:ASP:C	0.45	2.55	8	6
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:H	0.45	1.72	7	7
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:CD2	0.45	2.85	20	2
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HG	0.45	2.46	9	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:202:SER:O	0.45	2.65	15	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:CE	0.45	2.41	19	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:57:ILE:HG21	0.45	2.46	20	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:ARG:CD	0.44	2.85	4	2
1:A:81:LYS:HG3	1:A:202:SER:CB	0.44	2.42	3	2
1:A:195:LYS:C	1:A:198:THR:HG23	0.44	2.32	6	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	8	1
1:A:45:HIS:NE2	1:A:55:GLU:HB3	0.44	2.27	8	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:OE1	0.44	2.34	8	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:134:ASP:CB	0.44	2.95	8	1
1:A:75:THR:HB	1:A:207:TRP:CH2	0.44	2.46	13	1
1:A:113:ALA:O	1:A:129:GLU:OE1	0.44	2.34	13	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:199:LEU:HD11	0.44	1.87	17	1
1:A:167:LEU:HB2	1:A:182:ILE:CG2	0.44	2.42	18	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:HB2	0.44	2.11	19	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:58:ASP:OD2	0.44	2.56	1	1
1:A:96:PRO:HG3	1:A:213:ARG:NE	0.44	2.27	1	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:129:GLU:CB	0.44	2.41	1	1
1:A:54:SER:HB3	1:A:75:THR:CB	0.44	2.42	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:TRP:CH2	1:A:180:TYR:C	0.44	2.90	18	2
1:A:36:PRO:O	1:A:40:LEU:CD1	0.44	2.59	5	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:64:LEU:HD21	0.44	2.48	5	1
1:A:86:ARG:O	1:A:86:ARG:HD3	0.44	2.12	5	1
1:A:106:VAL:CG1	1:A:180:TYR:OH	0.44	2.58	9	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:HG12	0.44	2.33	9	3
1:A:135:ILE:CD1	1:A:163:VAL:HB	0.44	2.39	9	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:HIS:HB3	0.44	2.13	10	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:213:ARG:CB	0.44	2.96	12	1
1:A:192:ARG:HA	1:A:192:ARG:NE	0.44	2.27	18	3
1:A:39:ASP:OD2	1:A:43:GLN:CD	0.44	2.56	15	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:HB2	0.44	2.13	15	1
1:A:51:LYS:HG3	1:A:83:GLY:CA	0.44	2.41	1	1
1:A:30:GLU:O	1:A:33:LEU:HG	0.44	2.12	16	8
1:A:107:GLY:HA3	1:A:132:GLY:HA3	0.44	1.89	16	4
1:A:178:LEU:CD2	1:A:201:PRO:HG3	0.44	2.41	7	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:HB2	0.44	1.89	12	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:213:ARG:NH2	0.44	2.27	14	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:56:ASN:HB3	0.44	1.87	19	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CA	0.44	2.26	20	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:CG1	0.44	2.85	20	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HB2	0.44	2.13	16	3
1:A:187:LEU:HB3	1:A:191:PHE:CZ	0.44	2.47	3	1
1:A:33:LEU:CB	1:A:55:GLU:HG2	0.44	2.42	6	1
1:A:53:CYS:CB	1:A:79:ARG:CB	0.44	2.92	7	1
1:A:187:LEU:HD13	1:A:190:ALA:HB3	0.44	1.88	9	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:HG22	0.44	1.89	10	1
1:A:197:ARG:HH21	1:A:199:LEU:HD11	0.44	1.71	10	1
1:A:167:LEU:HG	1:A:182:ILE:HG22	0.44	1.88	12	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:40:LEU:N	0.44	2.70	13	1
1:A:189:PRO:C	1:A:191:PHE:H	0.44	2.16	14	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:55:GLU:HB2	0.44	2.38	9	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:60:LYS:HD3	0.44	1.90	10	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:205:ALA:HB3	0.44	1.79	15	2
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	13	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:82:ARG:HH11	0.44	2.25	14	3
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.44	2.85	4	3
1:A:79:ARG:HA	1:A:204:SER:OG	0.44	2.13	3	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:HB3	0.44	2.33	6	3
1:A:59:VAL:HG13	1:A:66:PHE:HA	0.44	1.88	6	2
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.39	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:VAL:N	1:A:182:ILE:HG21	0.44	2.26	6	1
1:A:181:SER:CB	1:A:187:LEU:HB2	0.44	2.42	6	1
1:A:186:TYR:O	1:A:187:LEU:HB2	0.44	2.13	6	2
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HG22	0.44	2.47	7	1
1:A:81:LYS:HB3	1:A:202:SER:C	0.44	2.32	7	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:81:LYS:HB3	0.44	2.12	10	2
1:A:57:ILE:HG21	1:A:68:ARG:CD	0.44	2.43	10	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:164:PRO:HB2	0.44	1.90	10	1
1:A:194:LEU:C	1:A:194:LEU:CD2	0.44	2.86	10	2
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:TYR:N	0.44	2.28	11	1
1:A:61:GLU:HG3	1:A:62:GLY:N	0.44	2.27	13	1
1:A:95:TRP:HZ3	1:A:203:VAL:CG2	0.44	2.25	13	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HD13	0.44	1.89	1	1
1:A:76:ASP:CA	1:A:207:TRP:NE1	0.44	2.81	4	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:CE	0.44	2.81	5	1
1:A:91:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:HB2	0.44	2.48	5	1
1:A:96:PRO:HD3	1:A:213:ARG:HD2	0.44	1.90	6	1
1:A:105:VAL:O	1:A:105:VAL:HG23	0.44	2.13	10	1
1:A:207:TRP:CE3	1:A:207:TRP:O	0.44	2.71	14	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:210:CYS:O	0.44	2.12	17	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:135:ILE:CG1	0.44	3.01	18	1
1:A:77:GLY:CA	1:A:207:TRP:HB3	0.44	2.43	20	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HG3	0.44	2.13	2	1
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.44	2.65	18	3
1:A:130:SER:O	1:A:131:TRP:CD1	0.44	2.71	9	2
1:A:44:ARG:NH2	1:A:57:ILE:HG12	0.44	2.28	11	2
1:A:52:ASP:CG	1:A:82:ARG:CZ	0.44	2.86	8	1
1:A:53:CYS:N	1:A:79:ARG:O	0.44	2.51	10	1
1:A:97:LEU:HB2	1:A:164:PRO:HG2	0.44	1.90	10	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:OH	0.44	2.13	10	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD13	0.44	2.13	11	1
1:A:45:HIS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.44	2.42	16	1
1:A:200:TYR:N	1:A:200:TYR:CD1	0.44	2.81	17	2
1:A:43:GLN:HB3	1:A:60:LYS:CA	0.44	2.43	17	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:59:VAL:HB	0.44	2.48	20	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:54:SER:O	0.44	2.12	1	1
1:A:79:ARG:HB3	1:A:79:ARG:NH1	0.44	2.28	1	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:55:GLU:HG3	0.44	1.89	2	1
1:A:30:GLU:CD	1:A:31:GLU:N	0.44	2.72	2	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:40:LEU:HD11	0.44	1.89	5	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:181:SER:O	0.44	2.13	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:HD1	0.44	2.11	10	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:HE3	0.44	2.33	17	2
1:A:71:VAL:CG1	1:A:75:THR:HB	0.44	2.43	15	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:HA	0.44	2.48	16	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:82:ARG:HG2	0.44	2.12	19	1
1:A:79:ARG:HB2	1:A:204:SER:CA	0.43	2.42	1	1
1:A:182:ILE:HG13	1:A:185:THR:OG1	0.43	2.13	2	1
1:A:63:GLY:O	1:A:65:CYS:SG	0.43	2.75	3	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CB	0.43	3.06	4	2
1:A:30:GLU:HG3	1:A:55:GLU:CD	0.43	2.33	5	1
1:A:132:GLY:C	1:A:133:TRP:CG	0.43	2.91	16	2
1:A:29:LEU:O	1:A:33:LEU:N	0.43	2.48	8	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:105:VAL:C	0.43	2.92	8	1
1:A:167:LEU:HD11	1:A:169:VAL:HG23	0.43	1.84	9	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:66:PHE:CE2	0.43	3.06	10	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:211:GLN:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:51:LYS:CE	1:A:80:GLY:CA	0.43	2.93	15	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:169:VAL:CG2	0.43	3.01	17	1
1:A:133:TRP:CH2	1:A:182:ILE:CG2	0.43	3.00	20	1
1:A:178:LEU:CD1	1:A:201:PRO:HD3	0.43	2.43	2	2
1:A:50:PRO:HB2	1:A:53:CYS:O	0.43	2.13	5	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:202:SER:CB	0.43	2.43	5	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:135:ILE:HD11	0.43	2.36	5	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:200:TYR:C	0.43	2.34	5	1
1:A:80:GLY:O	1:A:202:SER:HB3	0.43	2.12	10	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD21	0.43	1.90	11	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:180:TYR:CZ	0.43	3.01	14	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:O	0.43	2.35	15	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:212:VAL:HG12	0.43	2.48	15	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:207:TRP:CH2	0.43	2.86	18	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:76:ASP:N	0.43	2.51	18	1
1:A:93:ILE:HA	1:A:213:ARG:O	0.43	2.14	1	1
1:A:168:LEU:CD2	1:A:170:VAL:HG22	0.43	2.42	2	1
1:A:211:GLN:NE2	1:A:213:ARG:NH2	0.43	2.67	3	1
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:TRP:N	0.43	2.28	7	1
1:A:87:GLY:O	1:A:173:MET:HB2	0.43	2.14	8	1
1:A:197:ARG:O	1:A:198:THR:C	0.43	2.55	17	2
1:A:171:LEU:HD13	1:A:201:PRO:HG3	0.43	1.90	9	1
1:A:37:PRO:HG2	1:A:41:VAL:HG23	0.43	1.90	10	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:48:TRP:O	0.43	2.72	10	1
1:A:48:TRP:HZ3	1:A:78:VAL:CG1	0.43	2.25	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LEU:CD1	1:A:32:LEU:C	0.43	2.87	11	1
1:A:52:ASP:HB2	1:A:80:GLY:N	0.43	2.28	11	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:199:LEU:CD2	0.43	2.44	11	1
1:A:51:LYS:HB3	1:A:82:ARG:CD	0.43	2.43	12	1
1:A:92:GLU:C	1:A:93:ILE:CD1	0.43	2.79	13	1
1:A:44:ARG:O	1:A:48:TRP:N	0.43	2.52	14	1
1:A:61:GLU:CG	1:A:62:GLY:N	0.43	2.80	14	2
1:A:45:HIS:CG	1:A:50:PRO:HD3	0.43	2.48	16	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HD2	0.43	2.28	20	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:H	0.43	2.12	5	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CD	0.43	2.22	5	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:208:GLY:CA	0.43	2.44	6	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:CB	0.43	3.02	6	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:79:ARG:HB2	0.43	2.53	7	1
1:A:56:ASN:HB2	1:A:68:ARG:CZ	0.43	2.43	7	1
1:A:195:LYS:CA	1:A:198:THR:HG23	0.43	2.44	20	5
1:A:110:THR:CA	1:A:199:LEU:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:167:LEU:CA	1:A:182:ILE:HG22	0.43	2.43	11	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:55:GLU:OE2	0.43	2.14	12	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:HA	0.43	1.91	13	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:HB3	0.43	2.42	13	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:45:HIS:CD2	0.43	2.86	15	1
1:A:45:HIS:CG	1:A:50:PRO:HG3	0.43	2.49	16	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CZ	0.43	3.05	16	1
1:A:44:ARG:CA	1:A:58:ASP:OD1	0.43	2.64	17	1
1:A:85:SER:OG	1:A:218:GLY:O	0.43	2.33	19	1
1:A:184:GLY:HA2	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.42	19	1
1:A:51:LYS:O	1:A:81:LYS:N	0.43	2.51	20	1
1:A:52:ASP:CA	1:A:80:GLY:HA2	0.43	2.43	1	1
1:A:50:PRO:C	1:A:51:LYS:HE2	0.43	2.34	2	5
1:A:182:ILE:O	1:A:185:THR:OG1	0.43	2.28	20	2
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:NE2	0.43	2.28	9	2
1:A:94:SER:OG	1:A:213:ARG:HG2	0.43	2.13	6	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:212:VAL:O	0.43	2.67	9	1
1:A:181:SER:HB2	1:A:187:LEU:CB	0.43	2.43	10	1
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:CB	0.43	2.43	13	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:207:TRP:O	0.43	2.12	13	1
1:A:90:ALA:O	1:A:217:MET:HB3	0.43	2.13	13	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:194:LEU:O	0.43	2.67	15	1
1:A:214:ILE:C	1:A:214:ILE:CD1	0.43	2.81	16	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:40:LEU:HD21	0.43	1.91	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CH2	1:A:60:LYS:CA	0.43	3.02	6	1
1:A:206:VAL:HB	1:A:210:CYS:SG	0.43	2.54	6	1
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.81	9	1
1:A:135:ILE:HD13	1:A:135:ILE:H	0.43	1.73	12	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:91:TRP:C	0.43	2.91	14	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:214:ILE:HA	0.43	1.91	14	1
1:A:85:SER:OG	1:A:89:HIS:CG	0.43	2.71	19	2
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.43	2.91	16	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:HE3	0.43	2.33	18	1
1:A:112:LEU:HD11	1:A:196:GLY:O	0.43	2.14	18	1
1:A:213:ARG:HD2	1:A:214:ILE:N	0.43	2.29	20	1
1:A:198:THR:C	1:A:199:LEU:HG	0.43	2.32	1	5
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:106:VAL:HG22	0.43	2.48	4	1
1:A:48:TRP:CH2	1:A:212:VAL:CG2	0.43	2.96	5	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:207:TRP:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:112:LEU:C	0.43	2.34	8	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:135:ILE:HG13	0.43	1.89	11	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:133:TRP:C	0.43	2.92	12	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:164:PRO:C	0.43	2.33	14	1
1:A:206:VAL:O	1:A:211:GLN:NE2	0.43	2.45	14	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:NE2	0.43	2.29	17	1
1:A:66:PHE:CE1	1:A:212:VAL:CG1	0.43	3.02	17	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:201:PRO:O	0.43	2.13	20	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:HB2	0.43	1.91	5	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:69:ARG:N	0.43	2.81	5	1
1:A:192:ARG:NH1	1:A:192:ARG:HG2	0.43	2.29	6	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:73:GLN:HB3	0.43	1.91	8	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LYS:HE3	0.43	2.14	8	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:169:VAL:HG21	0.43	2.43	8	1
1:A:173:MET:C	1:A:173:MET:SD	0.43	2.97	9	1
1:A:86:ARG:NH1	1:A:86:ARG:HG2	0.43	2.28	10	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:168:LEU:HG	0.43	2.14	13	1
1:A:208:GLY:N	1:A:211:GLN:OE1	0.43	2.52	14	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:CE	0.43	2.87	18	1
1:A:170:VAL:HG11	1:A:187:LEU:HD21	0.43	1.91	18	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:59:VAL:HG12	0.43	1.90	19	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:CD	0.43	2.35	9	2
1:A:53:CYS:HB3	1:A:78:VAL:HA	0.43	1.89	7	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:195:LYS:NZ	0.43	2.82	7	1
1:A:50:PRO:CD	1:A:78:VAL:CG2	0.43	2.97	8	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:79:ARG:C	0.43	2.34	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:CG	0.43	2.67	8	1
1:A:50:PRO:CB	1:A:80:GLY:HA3	0.43	2.42	11	1
1:A:133:TRP:CG	1:A:163:VAL:HG21	0.43	2.48	11	1
1:A:54:SER:OG	1:A:76:ASP:HB3	0.43	2.14	16	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:128:SER:HA	0.43	1.90	19	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:81:LYS:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:167:LEU:CD2	0.43	2.97	4	1
1:A:171:LEU:HD21	1:A:173:MET:CE	0.43	2.37	8	1
1:A:109:ALA:HB1	1:A:129:GLU:O	0.43	2.13	9	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:59:VAL:CG1	0.43	2.44	10	1
1:A:112:LEU:CD2	1:A:196:GLY:O	0.43	2.67	10	1
1:A:55:GLU:HG2	1:A:56:ASN:N	0.43	2.27	13	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:HG13	0.43	1.90	13	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:CG	0.43	2.93	13	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:GLN:HB2	0.43	2.13	13	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:56:ASN:HA	0.43	1.91	15	1
1:A:91:TRP:CH2	1:A:201:PRO:CG	0.43	3.01	15	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:81:LYS:HB3	0.43	2.33	17	1
1:A:50:PRO:CA	1:A:53:CYS:O	0.43	2.66	18	1
1:A:79:ARG:NE	1:A:79:ARG:C	0.43	2.72	20	1
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:48:TRP:HZ3	0.42	1.69	6	1
1:A:210:CYS:SG	1:A:211:GLN:N	0.42	2.92	11	3
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:106:VAL:CG2	0.42	2.27	7	1
1:A:181:SER:HA	1:A:186:TYR:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:44:ARG:O	1:A:44:ARG:NH2	0.42	2.52	8	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:CG2	0.42	2.44	8	1
1:A:51:LYS:HZ2	1:A:82:ARG:CD	0.42	2.27	9	1
1:A:54:SER:C	1:A:56:ASN:HD22	0.42	2.18	12	2
1:A:52:ASP:CA	1:A:79:ARG:C	0.42	2.87	13	1
1:A:91:TRP:CD1	1:A:216:TYR:CD2	0.42	3.07	16	2
1:A:92:GLU:HG2	1:A:93:ILE:N	0.42	2.28	15	1
1:A:43:GLN:HG3	1:A:61:GLU:OE2	0.42	2.14	16	1
1:A:48:TRP:HB3	1:A:59:VAL:HG21	0.42	1.90	2	1
1:A:187:LEU:HD13	1:A:191:PHE:CZ	0.42	2.49	3	1
1:A:37:PRO:HB2	1:A:38:PRO:CD	0.42	2.43	8	1
1:A:96:PRO:CD	1:A:212:VAL:HA	0.42	2.44	9	1
1:A:44:ARG:CZ	1:A:57:ILE:HD11	0.42	2.43	11	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:O	0.42	2.36	15	2
1:A:168:LEU:HD21	1:A:170:VAL:HG22	0.42	1.91	18	2
1:A:197:ARG:CG	1:A:197:ARG:HH11	0.42	2.26	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:HG3	0.42	2.35	15	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:HB	0.42	1.90	19	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:H	0.42	1.73	20	1
1:A:48:TRP:CE3	1:A:214:ILE:HD12	0.42	2.49	2	1
1:A:94:SER:HB2	1:A:213:ARG:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:210:CYS:O	1:A:211:GLN:HB2	0.42	2.15	3	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:206:VAL:HG23	0.42	2.15	4	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:76:ASP:C	0.42	2.57	4	1
1:A:64:LEU:CG	1:A:213:ARG:HA	0.42	2.44	7	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:45:HIS:N	0.42	2.26	8	1
1:A:194:LEU:O	1:A:194:LEU:CD2	0.42	2.57	8	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:134:ASP:OD1	0.42	2.13	9	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:134:ASP:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:178:LEU:HD11	0.42	1.90	10	1
1:A:192:ARG:HD2	1:A:192:ARG:N	0.42	2.30	17	2
1:A:195:LYS:HD2	1:A:196:GLY:N	0.42	2.29	18	2
1:A:56:ASN:O	1:A:70:PRO:HG2	0.42	2.14	15	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:199:LEU:CG	0.42	2.90	17	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:128:SER:HB2	0.42	1.90	19	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:208:GLY:N	0.42	2.52	1	1
1:A:39:ASP:HA	1:A:43:GLN:HB3	0.42	1.90	2	1
1:A:205:ALA:O	1:A:206:VAL:C	0.42	2.56	9	1
1:A:194:LEU:HA	1:A:197:ARG:HD3	0.42	1.88	10	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:180:TYR:CE2	0.42	2.50	12	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:212:VAL:CG2	0.42	3.02	14	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:H	0.42	2.26	15	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:135:ILE:H	0.42	2.27	18	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:167:LEU:HB2	0.42	1.91	18	1
1:A:112:LEU:CB	1:A:128:SER:HA	0.42	2.44	19	1
1:A:86:ARG:CZ	1:A:86:ARG:C	0.42	2.87	5	1
1:A:110:THR:O	1:A:129:GLU:O	0.42	2.38	5	1
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:CG2	0.42	2.64	6	1
1:A:199:LEU:CD2	1:A:199:LEU:N	0.42	2.79	11	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:194:LEU:C	0.42	2.34	12	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:51:LYS:NZ	0.42	2.30	19	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD13	0.42	2.49	1	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CE2	0.42	3.08	1	1
1:A:177:THR:CG2	1:A:195:LYS:HA	0.42	2.44	1	3
1:A:49:ASN:ND2	1:A:52:ASP:HB2	0.42	2.29	4	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:214:ILE:C	0.42	2.35	4	1
1:A:48:TRP:CB	1:A:59:VAL:HG13	0.42	2.40	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:TRP:CH2	1:A:186:TYR:HD2	0.42	2.33	9	1
1:A:52:ASP:N	1:A:79:ARG:O	0.42	2.53	11	2
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:HB3	0.42	2.14	12	1
1:A:57:ILE:HD11	1:A:207:TRP:HA	0.42	1.90	13	1
1:A:68:ARG:HD2	1:A:69:ARG:O	0.42	2.15	13	1
1:A:51:LYS:C	1:A:52:ASP:OD1	0.42	2.58	16	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:HG3	0.42	2.44	16	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:58:ASP:CG	0.42	2.35	17	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:51:LYS:HG3	0.42	2.35	5	1
1:A:171:LEU:CD2	1:A:201:PRO:HG3	0.42	2.44	8	1
1:A:50:PRO:CB	1:A:203:VAL:HG12	0.42	2.45	10	1
1:A:187:LEU:HG	1:A:187:LEU:O	0.42	2.14	10	1
1:A:68:ARG:HG2	1:A:208:GLY:N	0.42	2.30	15	1
1:A:133:TRP:CZ3	1:A:180:TYR:C	0.42	2.93	18	1
1:A:71:VAL:C	1:A:73:GLN:N	0.42	2.73	1	1
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:HB2	0.42	2.15	2	1
1:A:36:PRO:O	1:A:41:VAL:CG1	0.42	2.68	2	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:170:VAL:CG2	0.42	2.45	2	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:60:LYS:HD2	0.42	2.14	5	1
1:A:39:ASP:HB2	1:A:43:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:79:ARG:NH2	1:A:82:ARG:HB2	0.42	2.30	7	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:169:VAL:HG23	0.42	1.92	8	1
1:A:164:PRO:O	1:A:165:GLU:HB2	0.42	2.13	10	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:60:LYS:NZ	0.42	2.53	13	1
1:A:110:THR:HG1	1:A:199:LEU:HD23	0.42	1.65	15	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:56:ASN:CB	0.42	2.45	19	1
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	0.42	1.90	20	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:58:ASP:CG	0.42	2.58	1	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD12	0.42	2.15	2	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:70:PRO:HB2	0.42	1.92	3	1
1:A:92:GLU:HG2	1:A:215:ARG:CB	0.42	2.45	3	1
1:A:45:HIS:N	1:A:45:HIS:HD2	0.42	2.11	5	1
1:A:53:CYS:SG	1:A:78:VAL:CA	0.42	3.08	8	1
1:A:133:TRP:HZ3	1:A:167:LEU:HD21	0.42	1.74	8	1
1:A:95:TRP:HZ2	1:A:105:VAL:CA	0.42	2.28	9	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:HG2	0.42	1.92	14	1
1:A:49:ASN:HD22	1:A:52:ASP:CG	0.42	2.18	14	1
1:A:172:ASP:OD2	1:A:174:GLU:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:105:VAL:O	1:A:203:VAL:HG23	0.42	2.15	16	1
1:A:96:PRO:CG	1:A:212:VAL:HG22	0.42	2.43	18	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:HD13	0.42	2.35	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HG3	0.42	2.15	20	1
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:HD13	0.42	2.15	20	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:HE	0.42	2.26	3	1
1:A:48:TRP:NE1	1:A:64:LEU:HD11	0.42	2.30	5	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:CG1	0.42	2.45	7	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:201:PRO:CG	0.42	2.38	7	1
1:A:181:SER:CB	1:A:186:TYR:HB3	0.42	2.45	7	1
1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:OD1	0.42	2.50	8	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:203:VAL:CG2	0.42	2.97	8	1
1:A:195:LYS:CE	1:A:195:LYS:HA	0.42	2.45	8	1
1:A:133:TRP:HB3	1:A:163:VAL:CG1	0.42	2.34	9	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:NE2	0.42	2.30	10	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:85:SER:N	0.42	2.88	12	1
1:A:94:SER:O	1:A:212:VAL:HG22	0.42	2.15	14	1
1:A:165:GLU:HG3	1:A:166:ARG:N	0.42	2.29	14	1
1:A:174:GLU:HG3	1:A:175:GLU:N	0.42	2.30	14	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:45:HIS:CE1	0.42	2.49	17	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:80:GLY:HA2	0.42	1.91	18	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:39:ASP:C	0.42	2.57	20	1
1:A:211:GLN:OE1	1:A:213:ARG:NH2	0.41	2.49	1	1
1:A:111:ALA:HB3	1:A:200:TYR:CE2	0.41	2.50	4	1
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HD3	0.41	2.29	5	1
1:A:30:GLU:OE2	1:A:74:SER:N	0.41	2.53	8	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:169:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:35:ALA:C	1:A:37:PRO:HD3	0.41	2.35	10	1
1:A:182:ILE:HD11	1:A:186:TYR:HB2	0.41	1.91	10	1
1:A:64:LEU:HB3	1:A:213:ARG:HG3	0.41	1.92	14	1
1:A:187:LEU:CD1	1:A:194:LEU:CD1	0.41	2.97	14	1
1:A:47:GLY:CA	1:A:61:GLU:HG3	0.41	2.45	15	1
1:A:68:ARG:C	1:A:68:ARG:HD3	0.41	2.35	16	2
1:A:93:ILE:CD1	1:A:214:ILE:CG1	0.41	2.98	17	1
1:A:88:LEU:HB2	1:A:172:ASP:OD2	0.41	2.15	19	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:CD1	0.41	2.96	5	1
1:A:95:TRP:O	1:A:165:GLU:HA	0.41	2.15	6	1
1:A:37:PRO:CB	1:A:38:PRO:CD	0.41	2.98	8	1
1:A:49:ASN:HD21	1:A:51:LYS:CE	0.41	2.28	9	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:78:VAL:CG1	0.41	3.02	10	1
1:A:43:GLN:HE21	1:A:60:LYS:CG	0.41	2.28	14	1
1:A:68:ARG:O	1:A:69:ARG:HD2	0.41	2.15	15	1
1:A:69:ARG:N	1:A:70:PRO:CD	0.41	2.82	15	1
1:A:108:VAL:O	1:A:130:SER:HA	0.41	2.15	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:TRP:O	1:A:169:VAL:HB	0.41	2.15	16	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:58:ASP:CB	0.41	2.45	17	1
1:A:52:ASP:CG	1:A:81:LYS:N	0.41	2.74	19	1
1:A:44:ARG:CD	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.98	20	1
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:CD1	0.41	2.88	20	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:105:VAL:O	0.41	2.73	4	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD11	0.41	2.50	7	2
1:A:49:ASN:ND2	1:A:51:LYS:HG3	0.41	2.30	5	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:70:PRO:HG3	0.41	2.45	7	1
1:A:95:TRP:HB2	1:A:135:ILE:HG21	0.41	1.91	7	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:213:ARG:CZ	0.41	2.98	8	1
1:A:43:GLN:CD	1:A:60:LYS:CB	0.41	2.88	12	1
1:A:60:LYS:HB2	1:A:65:CYS:SG	0.41	2.55	13	1
1:A:85:SER:HB3	1:A:89:HIS:ND1	0.41	2.31	14	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:166:ARG:CD	0.41	2.89	15	1
1:A:81:LYS:HB2	1:A:202:SER:HA	0.41	1.92	17	1
1:A:129:GLU:O	1:A:129:GLU:OE1	0.41	2.39	17	1
1:A:194:LEU:O	1:A:195:LYS:C	0.41	2.59	18	2
1:A:44:ARG:NH1	1:A:55:GLU:CA	0.41	2.83	19	1
1:A:52:ASP:HA	1:A:79:ARG:HE	0.41	1.75	19	1
1:A:173:MET:O	1:A:176:GLY:N	0.41	2.53	19	1
1:A:44:ARG:HA	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.45	20	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:213:ARG:O	0.41	2.16	5	1
1:A:182:ILE:H	1:A:182:ILE:HD13	0.41	1.75	9	2
1:A:59:VAL:HG23	1:A:66:PHE:CA	0.41	2.45	9	1
1:A:43:GLN:HB2	1:A:60:LYS:HB3	0.41	1.93	13	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:N	0.41	2.45	15	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:166:ARG:HD2	0.41	2.16	15	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:203:VAL:HA	0.41	1.92	15	1
1:A:203:VAL:CG2	1:A:204:SER:N	0.41	2.83	15	1
1:A:170:VAL:HB	1:A:187:LEU:HD11	0.41	1.92	18	1
1:A:77:GLY:HA2	1:A:205:ALA:O	0.41	2.16	19	1
1:A:43:GLN:HB3	1:A:61:GLU:H	0.41	1.76	20	1
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:HB3	0.41	2.51	20	1
1:A:48:TRP:HD1	1:A:59:VAL:HG21	0.41	1.73	1	1
1:A:53:CYS:CA	1:A:78:VAL:HG22	0.41	2.44	1	1
1:A:171:LEU:HA	1:A:178:LEU:HB3	0.41	1.92	1	1
1:A:164:PRO:HG3	1:A:182:ILE:HG21	0.41	1.91	5	2
1:A:89:HIS:HB2	1:A:171:LEU:CD2	0.41	2.46	15	2
1:A:29:LEU:CD1	1:A:32:LEU:HB3	0.41	2.46	4	1
1:A:35:ALA:N	1:A:36:PRO:HD2	0.41	2.31	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PRO:HB3	1:A:78:VAL:HG21	0.41	1.93	7	1
1:A:30:GLU:HA	1:A:33:LEU:CD2	0.41	2.45	15	2
1:A:38:PRO:C	1:A:40:LEU:H	0.41	2.17	8	1
1:A:59:VAL:HG13	1:A:59:VAL:O	0.41	2.15	9	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:77:GLY:C	0.41	2.74	11	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:43:GLN:O	0.41	2.39	12	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:169:VAL:HG21	0.41	1.92	12	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:211:GLN:HB3	0.41	2.45	12	1
1:A:60:LYS:O	1:A:65:CYS:SG	0.41	2.72	13	1
1:A:93:ILE:HG22	1:A:180:TYR:CZ	0.41	2.49	14	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:109:ALA:HB3	0.41	1.89	2	1
1:A:48:TRP:CE2	1:A:64:LEU:HD21	0.41	2.50	5	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:HA	0.41	2.31	7	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:214:ILE:HB	0.41	2.45	8	1
1:A:203:VAL:HG13	1:A:204:SER:N	0.41	2.31	9	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:40:LEU:HD11	0.41	2.45	11	1
1:A:179:GLY:C	1:A:187:LEU:HD12	0.41	2.36	12	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:55:GLU:HG3	0.41	2.46	13	1
1:A:30:GLU:HG2	1:A:55:GLU:OE2	0.41	2.15	13	1
1:A:186:TYR:N	1:A:186:TYR:CD1	0.41	2.89	17	1
1:A:194:LEU:O	1:A:197:ARG:N	0.41	2.53	17	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:44:ARG:CD	0.41	2.44	4	1
1:A:181:SER:OG	1:A:187:LEU:HB2	0.41	2.16	6	1
1:A:30:GLU:O	1:A:34:SER:N	0.41	2.34	8	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:129:GLU:O	0.41	2.69	9	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:205:ALA:CB	0.41	2.42	11	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:CG	0.41	2.45	11	1
1:A:43:GLN:NE2	1:A:60:LYS:CD	0.41	2.84	13	1
1:A:95:TRP:HD1	1:A:95:TRP:N	0.41	2.11	15	1
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:CD	0.41	2.74	18	1
1:A:166:ARG:NH1	1:A:166:ARG:HG2	0.41	2.30	18	1
1:A:54:SER:OG	1:A:78:VAL:HG12	0.41	2.16	19	1
1:A:68:ARG:N	1:A:68:ARG:CD	0.41	2.84	2	1
1:A:44:ARG:HD3	1:A:55:GLU:CA	0.41	2.45	5	1
1:A:44:ARG:HD2	1:A:59:VAL:HG13	0.41	1.91	16	2
1:A:77:GLY:HA3	1:A:206:VAL:O	0.41	2.16	9	1
1:A:82:ARG:NH1	1:A:219:GLU:HG3	0.41	2.31	9	1
1:A:43:GLN:OE1	1:A:44:ARG:HA	0.41	2.15	12	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:214:ILE:HA	0.41	2.46	13	1
1:A:93:ILE:O	1:A:167:LEU:N	0.41	2.54	16	1
1:A:42:ALA:HB3	1:A:43:GLN:OE1	0.41	2.16	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:NH1	0.41	2.81	20	1
1:A:95:TRP:HH2	1:A:204:SER:C	0.41	2.17	20	1
1:A:92:GLU:HB2	1:A:215:ARG:HB2	0.41	1.92	2	2
1:A:39:ASP:OD2	1:A:60:LYS:HD2	0.41	2.16	2	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:205:ALA:HA	0.41	1.93	2	1
1:A:134:ASP:C	1:A:135:ILE:CG2	0.41	2.88	2	1
1:A:86:ARG:HA	1:A:173:MET:HB3	0.41	1.91	3	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:172:ASP:OD2	0.41	2.68	3	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:204:SER:CB	0.41	2.41	3	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:59:VAL:HG13	0.41	1.91	4	1
1:A:105:VAL:CG1	1:A:204:SER:HB2	0.41	2.46	5	1
1:A:180:TYR:O	1:A:186:TYR:HB3	0.41	2.16	5	1
1:A:181:SER:OG	1:A:186:TYR:C	0.41	2.59	6	1
1:A:206:VAL:HG11	1:A:210:CYS:SG	0.41	2.55	6	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLN:HG2	0.41	2.16	7	1
1:A:80:GLY:N	1:A:203:VAL:HG13	0.41	2.30	7	1
1:A:95:TRP:HB3	1:A:135:ILE:HG12	0.41	1.91	7	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:43:GLN:HB3	0.41	1.93	8	1
1:A:216:TYR:CZ	1:A:219:GLU:HG3	0.41	2.51	8	1
1:A:49:ASN:CG	1:A:50:PRO:CD	0.41	2.88	9	1
1:A:164:PRO:CD	1:A:182:ILE:HG21	0.41	2.42	12	1
1:A:91:TRP:CG	1:A:216:TYR:CD2	0.41	3.08	15	1
1:A:92:GLU:HG2	1:A:167:LEU:O	0.41	2.16	15	1
1:A:184:GLY:C	1:A:186:TYR:N	0.41	2.74	16	1
1:A:171:LEU:HB2	1:A:178:LEU:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:HD3	0.41	1.93	20	1
1:A:44:ARG:HE	1:A:59:VAL:CG1	0.41	2.29	1	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:212:VAL:CG1	0.41	3.04	2	1
1:A:44:ARG:CG	1:A:50:PRO:HG3	0.41	2.46	6	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:58:ASP:OD1	0.41	2.16	9	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:57:ILE:HG12	0.41	2.30	10	1
1:A:177:THR:HG21	1:A:195:LYS:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:31:GLU:N	0.41	2.83	11	1
1:A:54:SER:CB	1:A:77:GLY:O	0.41	2.69	14	1
1:A:81:LYS:CB	1:A:202:SER:HB2	0.41	2.46	14	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:180:TYR:CD1	0.41	2.48	14	1
1:A:197:ARG:C	1:A:197:ARG:HD3	0.41	2.34	15	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:80:GLY:HA3	0.41	2.46	16	1
1:A:37:PRO:CG	1:A:38:PRO:HD3	0.41	2.46	18	1
1:A:167:LEU:HD21	1:A:180:TYR:HE1	0.41	1.64	18	1
1:A:74:SER:O	1:A:75:THR:C	0.41	2.59	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:59:VAL:HB	0.41	2.51	20	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:199:LEU:HA	0.40	2.45	4	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:129:GLU:OE1	0.40	2.16	9	2
1:A:57:ILE:HD13	1:A:207:TRP:HE3	0.40	1.76	5	1
1:A:64:LEU:O	1:A:211:GLN:CD	0.40	2.59	9	1
1:A:52:ASP:HB3	1:A:79:ARG:CG	0.40	2.39	10	1
1:A:133:TRP:N	1:A:133:TRP:CD1	0.40	2.86	11	1
1:A:39:ASP:CG	1:A:60:LYS:HE2	0.40	2.37	13	1
1:A:172:ASP:OD2	1:A:174:GLU:CG	0.40	2.69	14	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HD2	0.40	2.16	15	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG11	0.40	2.51	17	1
1:A:164:PRO:C	1:A:166:ARG:N	0.40	2.74	19	1
1:A:82:ARG:CD	1:A:83:GLY:H	0.40	2.24	1	1
1:A:47:GLY:HA3	1:A:61:GLU:HB2	0.40	1.93	2	1
1:A:48:TRP:CZ3	1:A:66:PHE:CZ	0.40	3.09	3	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:207:TRP:CD2	0.40	2.51	4	1
1:A:91:TRP:CB	1:A:216:TYR:CE2	0.40	3.04	19	2
1:A:69:ARG:HG2	1:A:70:PRO:CD	0.40	2.46	6	1
1:A:85:SER:O	1:A:173:MET:HG2	0.40	2.16	6	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:69:ARG:NH1	0.40	2.31	7	1
1:A:171:LEU:HB2	1:A:178:LEU:HD23	0.40	1.93	7	1
1:A:30:GLU:CG	1:A:73:GLN:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:92:GLU:OE1	1:A:215:ARG:HG2	0.40	2.16	8	1
1:A:81:LYS:HG3	1:A:202:SER:HB3	0.40	1.93	13	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:214:ILE:CG1	0.40	2.46	13	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:166:ARG:HD2	0.40	2.37	15	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:180:TYR:CB	0.40	3.05	18	1
1:A:210:CYS:C	1:A:211:GLN:HG2	0.40	2.36	18	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:212:VAL:HG21	0.40	2.52	2	1
1:A:197:ARG:HD3	1:A:197:ARG:O	0.40	2.16	2	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:HA	0.40	1.76	5	1
1:A:163:VAL:CG1	1:A:167:LEU:CG	0.40	2.96	7	1
1:A:172:ASP:OD1	1:A:174:GLU:HG2	0.40	2.16	8	1
1:A:97:LEU:HG	1:A:210:CYS:O	0.40	2.16	12	1
1:A:40:LEU:N	1:A:43:GLN:HE22	0.40	2.13	14	1
1:A:51:LYS:C	1:A:80:GLY:CA	0.40	2.90	15	1
1:A:71:VAL:HG12	1:A:72:ALA:N	0.40	2.31	15	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:46:HIS:C	0.40	2.94	16	1
1:A:48:TRP:CZ2	1:A:61:GLU:CA	0.40	3.05	16	1
1:A:48:TRP:O	1:A:78:VAL:HG21	0.40	2.17	17	1
1:A:56:ASN:CG	1:A:75:THR:HA	0.40	2.35	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:CYS:HB3	0.40	1.92	1	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:185:THR:O	0.40	2.16	8	2
1:A:170:VAL:HG12	1:A:187:LEU:HD11	0.40	1.93	4	1
1:A:45:HIS:O	1:A:49:ASN:HB2	0.40	2.15	6	1
1:A:91:TRP:CZ3	1:A:171:LEU:HB3	0.40	2.52	6	1
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:180:TYR:CG	0.40	3.10	7	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:66:PHE:HE1	0.40	1.64	8	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:ASP:OD2	0.40	2.39	11	1
1:A:43:GLN:HE21	1:A:60:LYS:HB3	0.40	1.77	14	1
1:A:172:ASP:CG	1:A:174:GLU:HG2	0.40	2.37	14	1
1:A:56:ASN:HB3	1:A:71:VAL:CG2	0.40	2.41	15	1
1:A:43:GLN:N	1:A:43:GLN:CD	0.40	2.72	18	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:58:ASP:CB	0.40	2.46	19	1
1:A:112:LEU:HB2	1:A:128:SER:HA	0.40	1.92	19	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:205:ALA:H	0.40	2.29	2	1
1:A:78:VAL:HG23	1:A:79:ARG:N	0.40	2.32	7	1
1:A:51:LYS:O	1:A:79:ARG:C	0.40	2.60	9	1
1:A:52:ASP:CB	1:A:79:ARG:C	0.40	2.90	10	1
1:A:177:THR:HB	1:A:194:LEU:CD2	0.40	2.41	10	1
1:A:59:VAL:HG13	1:A:66:PHE:HD1	0.40	1.76	12	1
1:A:180:TYR:O	1:A:186:TYR:CE2	0.40	2.75	12	1
1:A:41:VAL:HG12	1:A:45:HIS:HE1	0.40	1.66	13	1
1:A:52:ASP:C	1:A:79:ARG:C	0.40	2.80	13	1
1:A:59:VAL:CG1	1:A:66:PHE:HA	0.40	2.46	13	1
1:A:93:ILE:HG12	1:A:169:VAL:HG23	0.40	1.93	13	1
1:A:106:VAL:HG13	1:A:203:VAL:HG21	0.40	1.93	16	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:178:LEU:CD1	0.40	2.46	16	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	143/226 (63%)	106±4 (74±3%)	21±3 (15±2%)	16±2 (11±2%)	1	8
All	All	2860/4520 (63%)	2129 (74%)	417 (15%)	314 (11%)	1	8

All 46 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	61	GLU	20
1	A	64	LEU	20
1	A	39	ASP	18
1	A	70	PRO	16
1	A	77	GLY	15
1	A	69	ARG	15
1	A	187	LEU	14
1	A	56	ASN	14
1	A	165	GLU	12
1	A	74	SER	10
1	A	51	LYS	9
1	A	72	ALA	9
1	A	206	VAL	9
1	A	73	GLN	9
1	A	210	CYS	8
1	A	35	ALA	8
1	A	52	ASP	7
1	A	211	GLN	7
1	A	37	PRO	7
1	A	81	LYS	7
1	A	82	ARG	6
1	A	113	ALA	6
1	A	135	ILE	6
1	A	190	ALA	6
1	A	163	VAL	6
1	A	47	GLY	5
1	A	50	PRO	5
1	A	209	GLN	5
1	A	75	THR	5
1	A	186	TYR	5
1	A	55	GLU	3
1	A	96	PRO	3
1	A	128	SER	3
1	A	207	TRP	2
1	A	208	GLY	2
1	A	183	GLY	2
1	A	54	SER	1
1	A	40	LEU	1
1	A	48	TRP	1
1	A	188	GLY	1
1	A	83	GLY	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	218	GLY	1
1	A	185	THR	1
1	A	97	LEU	1
1	A	62	GLY	1
1	A	36	PRO	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	116/182 (64%)	69±5 (60±4%)	47±5 (40±4%)	0 5
All	All	2320/3640 (64%)	1384 (60%)	936 (40%)	0 5

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	33	LEU	20
1	A	43	GLN	20
1	A	49	ASN	20
1	A	51	LYS	20
1	A	182	ILE	20
1	A	197	ARG	20
1	A	29	LEU	19
1	A	40	LEU	19
1	A	110	THR	19
1	A	192	ARG	19
1	A	195	LYS	19
1	A	199	LEU	19
1	A	82	ARG	18
1	A	68	ARG	17
1	A	177	THR	17
1	A	97	LEU	16
1	A	180	TYR	16
1	A	39	ASP	15
1	A	54	SER	15
1	A	178	LEU	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	213	ARG	15
1	A	86	ARG	15
1	A	64	LEU	14
1	A	79	ARG	14
1	A	94	SER	14
1	A	56	ASN	14
1	A	131	TRP	13
1	A	135	ILE	13
1	A	175	GLU	13
1	A	32	LEU	12
1	A	173	MET	12
1	A	198	THR	12
1	A	211	GLN	12
1	A	204	SER	12
1	A	167	LEU	11
1	A	209	GLN	11
1	A	217	MET	11
1	A	81	LYS	11
1	A	91	TRP	10
1	A	44	ARG	9
1	A	48	TRP	9
1	A	69	ARG	9
1	A	191	PHE	9
1	A	214	ILE	9
1	A	85	SER	9
1	A	112	LEU	9
1	A	171	LEU	9
1	A	105	VAL	9
1	A	53	CYS	8
1	A	66	PHE	8
1	A	206	VAL	8
1	A	187	LEU	8
1	A	78	VAL	8
1	A	92	GLU	7
1	A	163	VAL	7
1	A	52	ASP	7
1	A	55	GLU	7
1	A	174	GLU	7
1	A	186	TYR	7
1	A	65	CYS	7
1	A	215	ARG	7
1	A	31	GLU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	58	ASP	6
1	A	168	LEU	6
1	A	212	VAL	6
1	A	74	SER	6
1	A	134	ASP	6
1	A	106	VAL	6
1	A	165	GLU	6
1	A	129	GLU	6
1	A	73	GLN	6
1	A	219	GLU	6
1	A	34	SER	5
1	A	61	GLU	5
1	A	75	THR	5
1	A	93	ILE	5
1	A	207	TRP	5
1	A	128	SER	5
1	A	76	ASP	5
1	A	60	LYS	5
1	A	57	ILE	5
1	A	84	TYR	4
1	A	59	VAL	4
1	A	166	ARG	3
1	A	46	HIS	3
1	A	202	SER	3
1	A	67	GLU	3
1	A	210	CYS	3
1	A	181	SER	3
1	A	108	VAL	3
1	A	88	LEU	2
1	A	130	SER	2
1	A	30	GLU	2
1	A	170	VAL	2
1	A	194	LEU	2
1	A	89	HIS	1
1	A	185	THR	1
1	A	41	VAL	1
1	A	71	VAL	1
1	A	169	VAL	1
1	A	216	TYR	1
1	A	200	TYR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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

No chemical shift data were provided