



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 07:09 AM UTC

PDB ID : 1JZU / pdb_00001jzu
Title : Cell transformation by the myc oncogene activates expression of a lipocalin:
analysis of the gene (Q83) and solution structure of its protein product
Authors : Hartl, M.; Matt, T.; Schueler, W.; Siemeister, G.; Kontaxis, G.; Kloiber, K.;
Konrat, R.; Bister, K.
Deposited on : 2001-09-17

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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

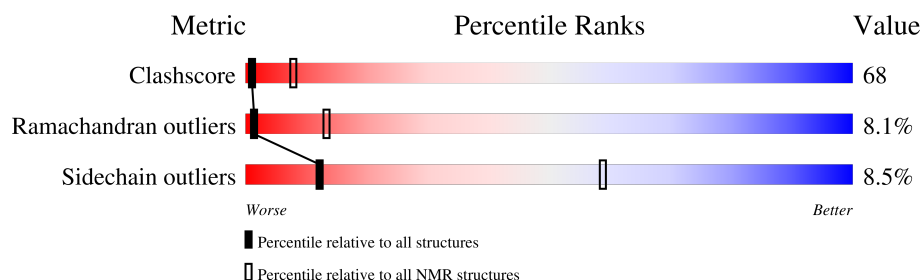
MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

1 Overall quality at a glance

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

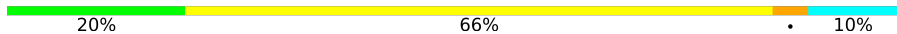
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	157	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 15 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:5-A:54, A:59-A:147, A:152-A:154 (142)	1.62	3

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 4 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2528 atoms, of which 1262 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called lipocalin Q83.

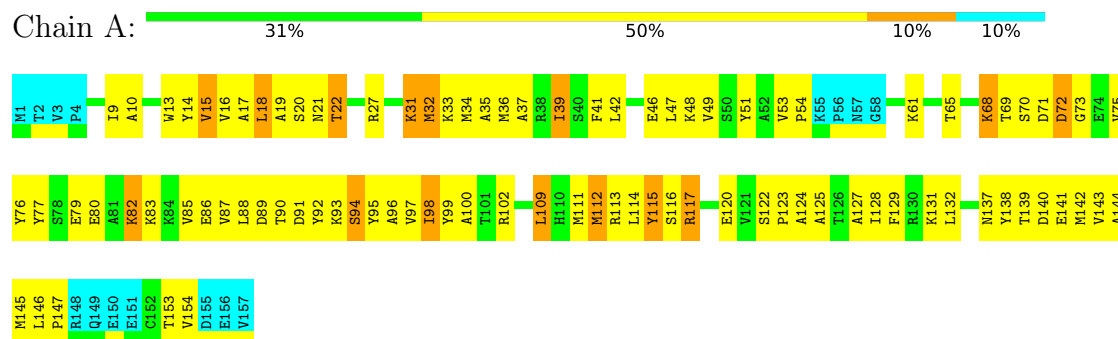
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	157	Total	C	H	N	O	S	0
			2528	799	1262	213	244	10	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	ALA	engineered mutation	UNP Q9I9P7

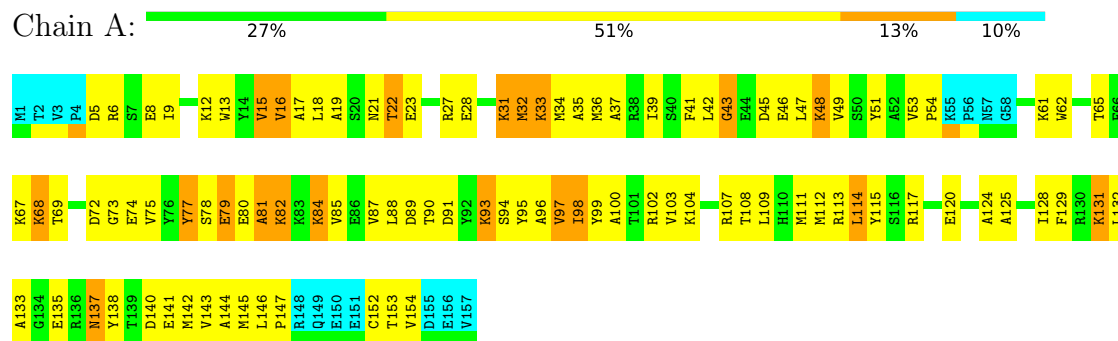
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: lipocalin Q83



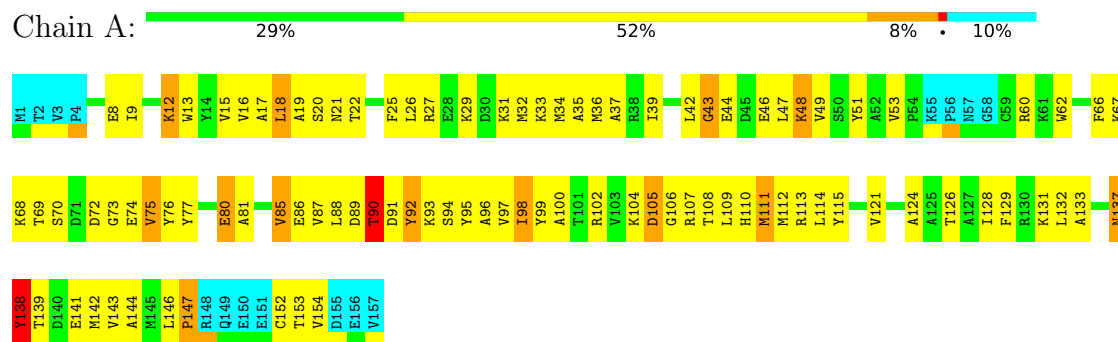
4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: lipocalin Q83



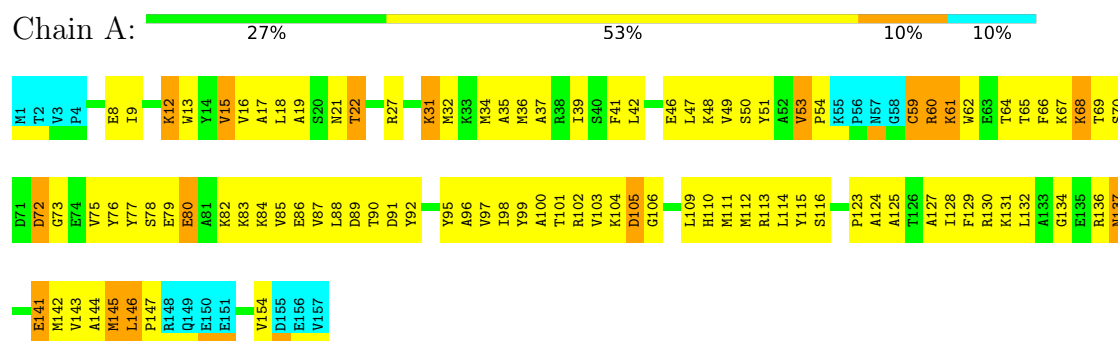
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: lipocalin Q83



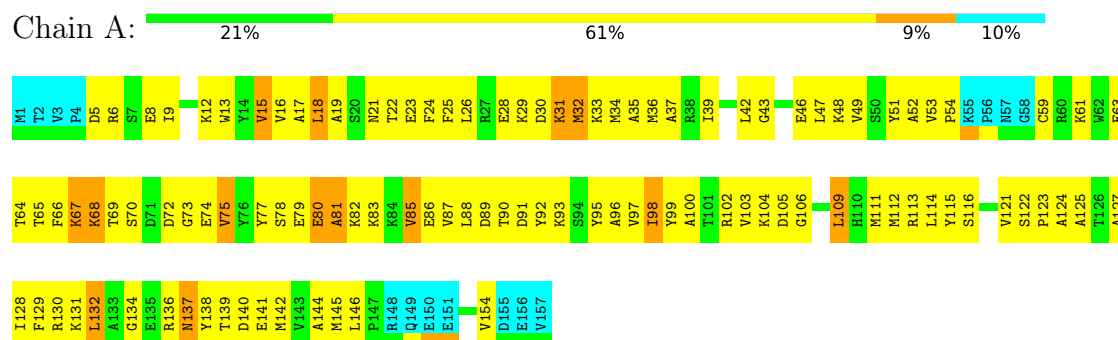
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: lipocalin Q83



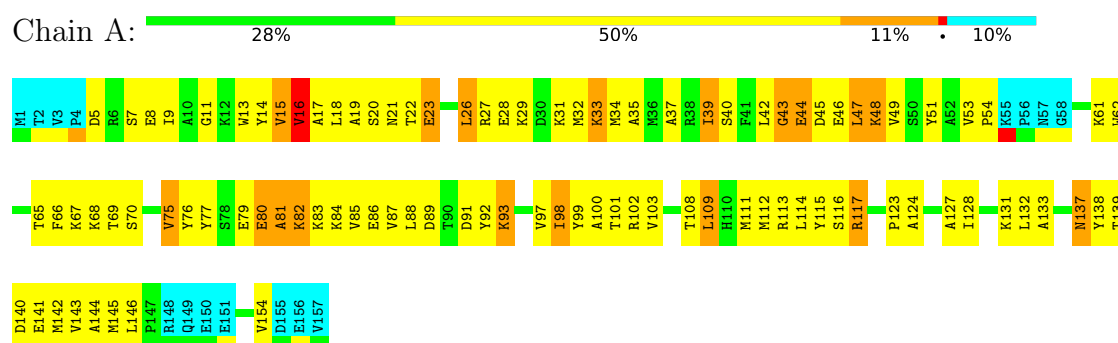
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: lipocalin Q83



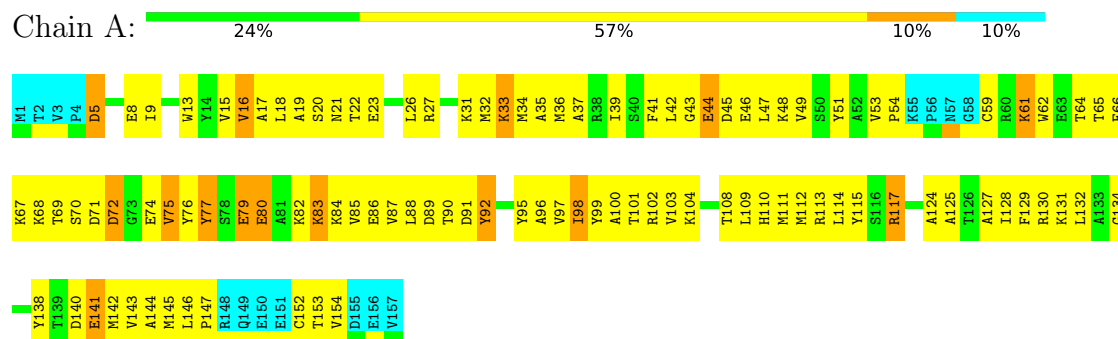
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: lipocalin Q83



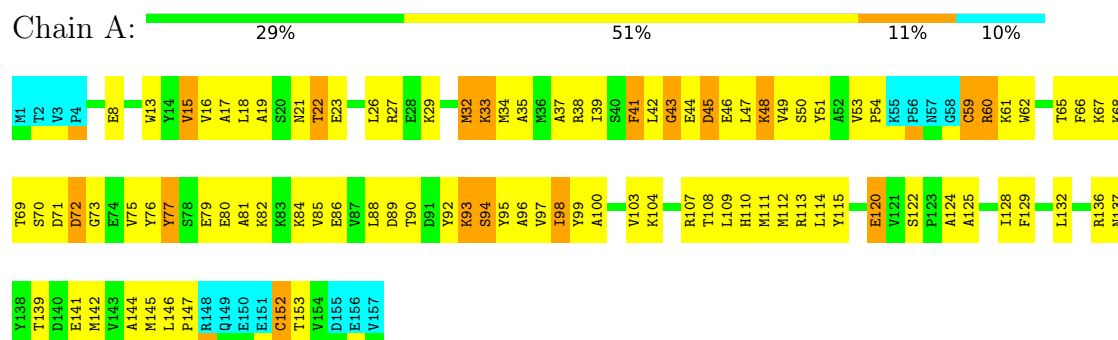
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: lipocalin Q83



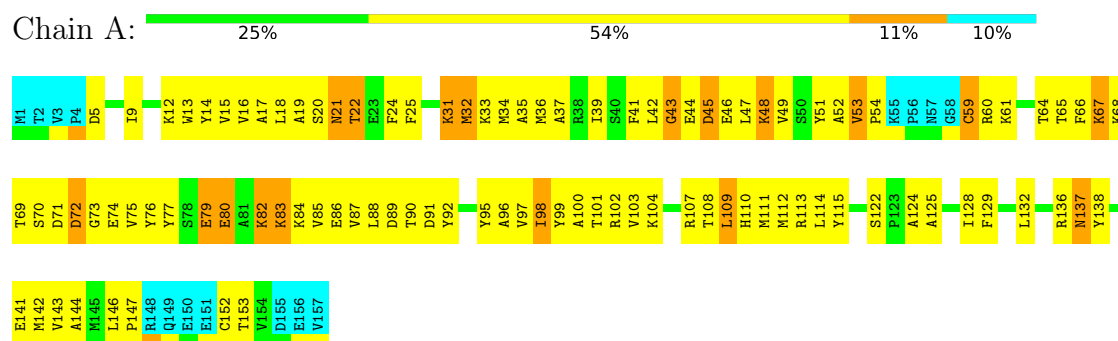
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: lipocalin Q83



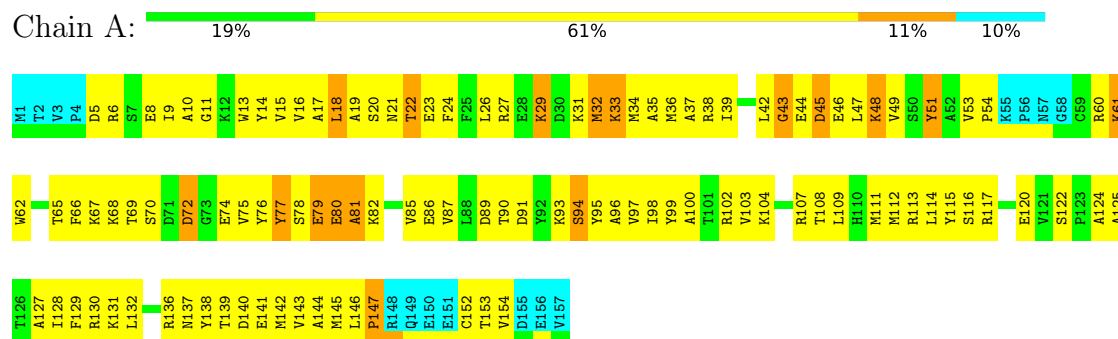
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: lipocalin Q83



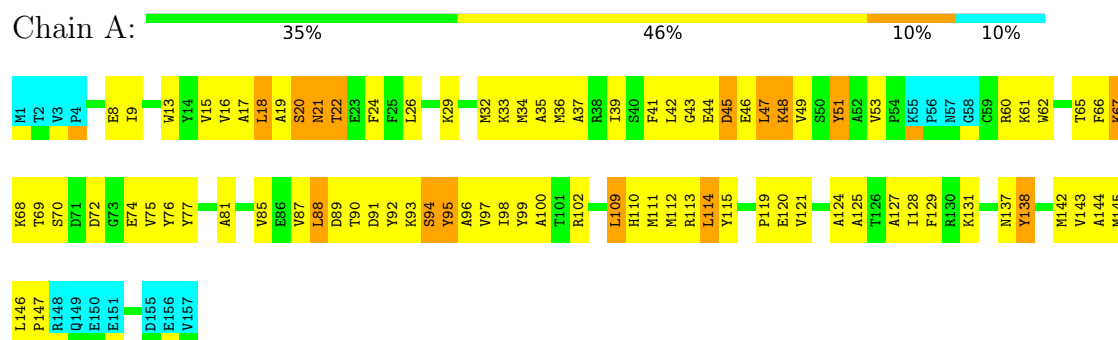
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: lipocalin Q83



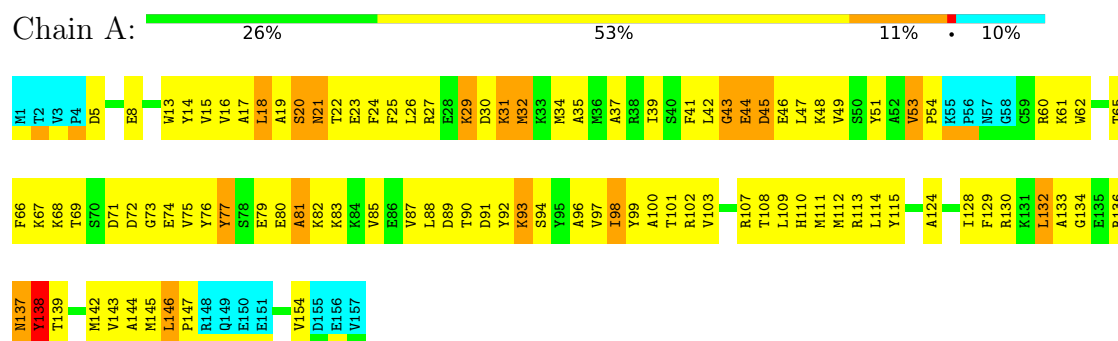
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: lipocalin Q83



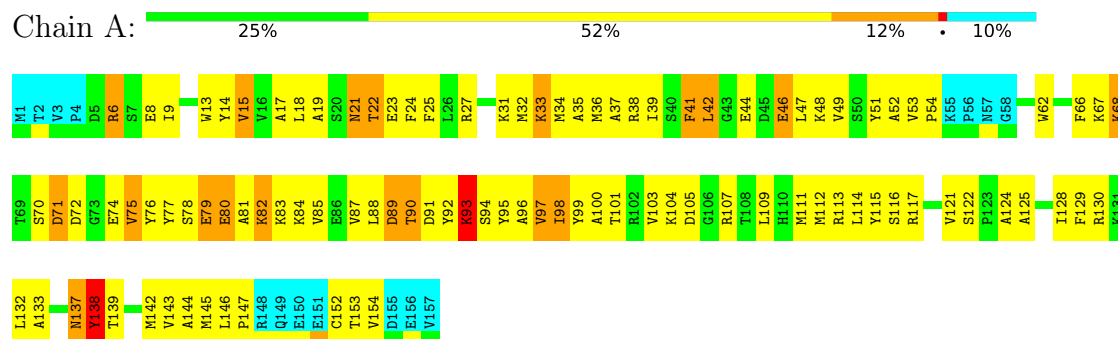
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: lipocalin Q83



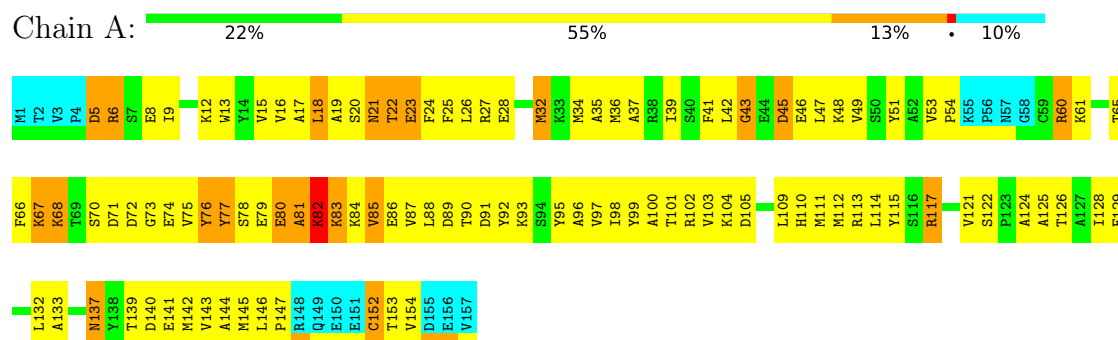
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: lipocalin Q83



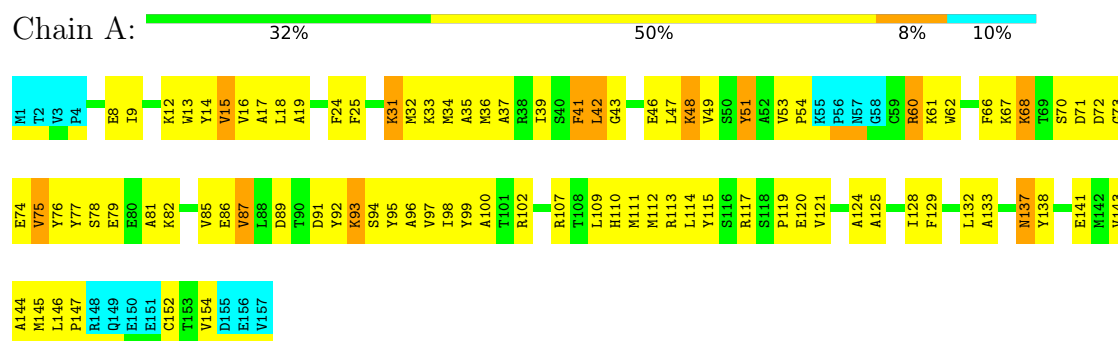
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: lipocalin Q83



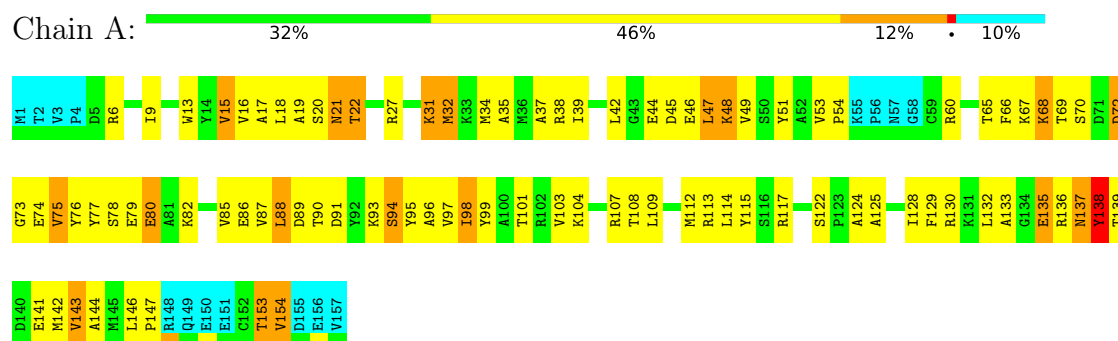
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: lipocalin Q83



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: lipocalin Q83



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: lipocalin Q83



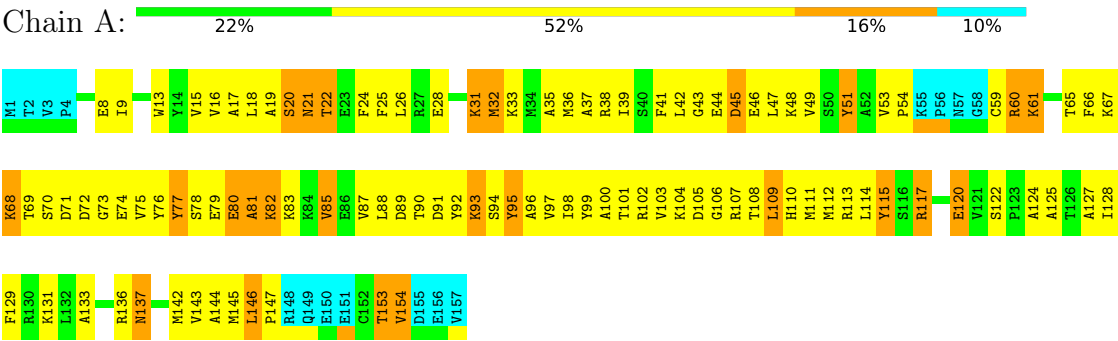
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: lipocalin Q83



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: lipocalin Q83



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *ARIA/CNS automated refinement using also ambiguous NOE distance constraints; simulated annealing (torsion angle dynamics)*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA/CNS	structure solution	1.0
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.36±0.01	0±0/1169 (0.0± 0.0%)	0.72±0.02	0±0/1574 (0.0± 0.0%)
All	All	0.36	0/23380 (0.0%)	0.72	3/31480 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	53	VAL	N-CA-C	6.81	114.30	107.55	13	3

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1146	1147	1146	155±16
All	All	22920	22940	22920	3094

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 67.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:HD23	1.09	1.13	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD13	1.06	1.21	2	7
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD12	1.05	1.29	16	3
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HD22	1.00	1.27	2	2
1:A:112:MET:HE1	1:A:142:MET:HE3	0.99	1.29	5	1
1:A:145:MET:HB2	1:A:154:VAL:HG22	0.95	1.38	5	1
1:A:18:LEU:O	1:A:144:ALA:O	0.95	1.85	13	13
1:A:88:LEU:HD11	1:A:132:LEU:HD11	0.94	1.35	18	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:HD13	0.93	1.35	14	2
1:A:17:ALA:O	1:A:18:LEU:HD13	0.92	1.64	4	4
1:A:15:VAL:CG1	1:A:35:ALA:HB3	0.92	1.94	11	9
1:A:85:VAL:HG11	1:A:98:ILE:HD11	0.91	1.42	8	2
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:HD22	0.91	1.96	1	5
1:A:85:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	0.91	1.40	11	4
1:A:15:VAL:HG12	1:A:35:ALA:HB3	0.91	1.40	10	3
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:HD11	0.90	1.97	8	6
1:A:35:ALA:HB2	1:A:53:VAL:HG12	0.90	1.41	10	5
1:A:112:MET:HE2	1:A:133:ALA:HB1	0.89	1.44	13	1
1:A:13:TRP:CH2	1:A:49:VAL:HG21	0.89	2.01	11	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:CD1	0.89	1.97	18	4
1:A:75:VAL:HG13	1:A:87:VAL:HB	0.89	1.43	6	9
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:CD2	0.88	1.98	17	2
1:A:37:ALA:HB2	1:A:51:TYR:HB3	0.87	1.45	11	8
1:A:75:VAL:HG13	1:A:87:VAL:HG13	0.87	1.46	18	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:98:ILE:HD11	0.87	1.44	14	3
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:HD13	0.86	1.45	2	3
1:A:87:VAL:CG2	1:A:98:ILE:HD13	0.86	2.00	2	7
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HD13	0.86	1.45	3	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HG13	0.86	1.46	3	5
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:CB	0.86	2.00	13	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:98:ILE:HB	0.85	1.49	8	5
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:39:ILE:HD12	0.85	2.05	19	6
1:A:15:VAL:HG13	1:A:35:ALA:HB1	0.85	1.47	19	5
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:ALA:N	0.84	1.87	1	1
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:HD22	0.84	1.97	3	5
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:HD12	0.84	1.96	17	9
1:A:35:ALA:HB1	1:A:53:VAL:HG12	0.84	1.47	13	1
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HB3	0.84	1.48	13	1
1:A:69:THR:O	1:A:77:TYR:HA	0.84	1.73	10	14
1:A:85:VAL:HG12	1:A:100:ALA:HA	0.84	1.47	11	7
1:A:19:ALA:HB1	1:A:142:MET:O	0.83	1.72	1	11
1:A:79:GLU:O	1:A:80:GLU:O	0.83	1.97	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:VAL:HG13	1:A:35:ALA:CB	0.83	2.04	19	11
1:A:147:PRO:CB	1:A:153:THR:HG21	0.82	2.03	20	1
1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:HD12	0.82	2.00	9	4
1:A:85:VAL:CG2	1:A:98:ILE:HD11	0.81	2.04	19	7
1:A:32:MET:HA	1:A:32:MET:HE2	0.81	1.50	6	2
1:A:85:VAL:HB	1:A:98:ILE:HD11	0.81	1.52	6	4
1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:HD22	0.81	2.01	17	7
1:A:13:TRP:CE3	1:A:49:VAL:HG21	0.80	2.11	7	2
1:A:95:TYR:CG	1:A:125:ALA:HB2	0.80	2.12	14	13
1:A:97:VAL:HG11	1:A:129:PHE:HB2	0.80	1.53	12	18
1:A:112:MET:HE3	1:A:142:MET:CE	0.80	2.07	8	1
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:CB	0.80	2.07	18	15
1:A:69:THR:HG22	1:A:78:SER:O	0.79	1.77	11	2
1:A:75:VAL:HB	1:A:87:VAL:HG13	0.79	1.54	12	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:115:TYR:CE1	0.79	2.11	19	3
1:A:132:LEU:HD12	1:A:133:ALA:N	0.79	1.92	7	2
1:A:46:GLU:C	1:A:47:LEU:HD12	0.79	2.03	14	4
1:A:85:VAL:HG12	1:A:98:ILE:HD11	0.79	1.55	12	3
1:A:77:TYR:CE2	1:A:85:VAL:HG21	0.79	2.13	2	2
1:A:95:TYR:CD1	1:A:125:ALA:HB2	0.78	2.12	10	11
1:A:47:LEU:HD12	1:A:47:LEU:O	0.78	1.78	6	4
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:CG1	0.78	2.09	14	9
1:A:34:MET:O	1:A:53:VAL:HG13	0.78	1.79	6	5
1:A:22:THR:HG23	1:A:109:LEU:HD12	0.78	1.55	10	1
1:A:154:VAL:O	1:A:154:VAL:HG13	0.78	1.78	5	4
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:ARG:N	0.78	1.92	13	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:35:ALA:HB3	0.78	1.54	6	2
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:HD23	0.77	2.05	11	2
1:A:14:TYR:OH	1:A:34:MET:HE3	0.77	1.78	13	1
1:A:75:VAL:HG21	1:A:91:ASP:OD2	0.77	1.80	3	3
1:A:68:LYS:HB3	1:A:78:SER:O	0.77	1.80	19	7
1:A:35:ALA:CB	1:A:53:VAL:HG12	0.77	2.10	13	6
1:A:23:GLU:O	1:A:26:LEU:HD12	0.77	1.80	7	1
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HB2	0.76	1.57	15	4
1:A:146:LEU:HD12	1:A:147:PRO:HD2	0.76	1.58	15	7
1:A:34:MET:HA	1:A:34:MET:HE2	0.76	1.58	7	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:O	0.76	1.81	2	1
1:A:89:ASP:O	1:A:90:THR:HG22	0.76	1.80	4	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:91:ASP:OD1	0.76	1.80	10	2
1:A:22:THR:HG21	1:A:109:LEU:HD23	0.76	1.58	20	1
1:A:147:PRO:HB2	1:A:153:THR:HG21	0.75	1.57	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:HD13	0.75	2.10	3	1
1:A:112:MET:HE1	1:A:133:ALA:HB1	0.75	1.58	3	2
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:HD22	0.75	1.59	7	2
1:A:9:ILE:HD13	1:A:91:ASP:O	0.75	1.82	1	5
1:A:9:ILE:HG22	1:A:39:ILE:CD1	0.75	2.11	19	1
1:A:19:ALA:HB3	1:A:112:MET:HB2	0.75	1.57	18	15
1:A:16:VAL:HB	1:A:146:LEU:HD13	0.75	1.58	6	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:113:ARG:HA	0.75	1.59	8	1
1:A:124:ALA:HB1	1:A:128:ILE:HD12	0.74	1.58	13	13
1:A:9:ILE:O	1:A:9:ILE:HG22	0.74	1.82	4	7
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HB3	0.74	1.58	16	17
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD22	0.74	1.82	12	2
1:A:145:MET:O	1:A:154:VAL:HG11	0.74	1.81	16	2
1:A:75:VAL:HG13	1:A:87:VAL:CB	0.74	2.12	6	7
1:A:109:LEU:HD23	1:A:110:HIS:N	0.74	1.96	5	2
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:HG	0.74	1.60	6	11
1:A:29:LYS:O	1:A:32:MET:HE3	0.73	1.83	6	2
1:A:114:LEU:HD23	1:A:115:TYR:N	0.73	1.99	16	9
1:A:124:ALA:HB1	1:A:128:ILE:CD1	0.73	2.13	3	18
1:A:53:VAL:O	1:A:61:LYS:HA	0.73	1.84	6	16
1:A:9:ILE:HG23	1:A:39:ILE:HD13	0.73	1.60	6	5
1:A:5:ASP:O	1:A:8:GLU:HG2	0.73	1.83	8	6
1:A:110:HIS:HE2	1:A:112:MET:HE1	0.73	1.43	4	1
1:A:19:ALA:O	1:A:111:MET:HA	0.73	1.83	2	12
1:A:88:LEU:HD23	1:A:89:ASP:N	0.73	1.99	4	1
1:A:8:GLU:O	1:A:9:ILE:HD13	0.73	1.84	12	1
1:A:136:ARG:NH1	1:A:139:THR:HG21	0.72	1.99	18	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:18:LEU:HD11	0.72	2.15	13	2
1:A:85:VAL:HG12	1:A:98:ILE:CG1	0.72	2.14	1	5
1:A:98:ILE:C	1:A:98:ILE:HD13	0.72	2.09	8	5
1:A:86:GLU:OE2	1:A:88:LEU:HD21	0.72	1.84	10	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:CD1	0.72	2.15	5	9
1:A:19:ALA:HB3	1:A:112:MET:HE3	0.72	1.60	11	1
1:A:143:VAL:HG22	1:A:144:ALA:N	0.71	1.99	4	5
1:A:112:MET:HE1	1:A:142:MET:CE	0.71	2.13	5	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:147:PRO:HD2	0.71	1.61	18	1
1:A:141:GLU:OE2	1:A:142:MET:HE2	0.71	1.85	5	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:132:LEU:HD22	0.71	2.15	15	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:91:ASP:O	0.71	1.85	12	2
1:A:18:LEU:C	1:A:144:ALA:HB3	0.71	2.10	1	10
1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ASP:HB2	0.71	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:132:LEU:HD22	1:A:132:LEU:O	0.71	1.86	13	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD23	0.70	2.11	3	14
1:A:98:ILE:HG23	1:A:113:ARG:HB3	0.70	1.64	19	5
1:A:143:VAL:HG22	1:A:144:ALA:H	0.70	1.45	4	3
1:A:112:MET:HE2	1:A:129:PHE:CD1	0.70	2.22	6	1
1:A:112:MET:HE3	1:A:142:MET:HE3	0.70	1.63	8	1
1:A:112:MET:HE1	1:A:133:ALA:CB	0.70	2.16	17	2
1:A:20:SER:HA	1:A:142:MET:CB	0.70	2.17	13	3
1:A:147:PRO:O	1:A:154:VAL:HG23	0.70	1.85	5	1
1:A:101:THR:HG22	1:A:110:HIS:HA	0.70	1.64	10	1
1:A:96:ALA:O	1:A:114:LEU:HD22	0.70	1.86	12	2
1:A:32:MET:HE1	1:A:153:THR:N	0.70	2.01	10	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:132:LEU:HD11	0.70	2.17	13	1
1:A:18:LEU:O	1:A:144:ALA:HB3	0.70	1.87	1	1
1:A:32:MET:HB2	1:A:154:VAL:HG11	0.70	1.63	6	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:39:ILE:HD13	0.70	1.64	20	6
1:A:98:ILE:HG21	1:A:115:TYR:CD2	0.70	2.21	17	3
1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:TYR:N	0.69	2.02	18	3
1:A:89:ASP:HB2	1:A:97:VAL:HG22	0.69	1.63	1	20
1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:TYR:N	0.69	2.01	7	4
1:A:112:MET:N	1:A:112:MET:HE3	0.69	2.02	2	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:91:ASP:OD2	0.69	1.87	3	2
1:A:146:LEU:O	1:A:147:PRO:O	0.69	2.08	18	2
1:A:37:ALA:HB1	1:A:49:VAL:HG22	0.69	1.64	11	6
1:A:91:ASP:N	1:A:96:ALA:HB2	0.69	2.02	4	1
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:HD22	0.69	2.12	7	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ASP:OD2	0.69	1.86	18	3
1:A:15:VAL:HA	1:A:114:LEU:O	0.69	1.87	3	10
1:A:22:THR:CG2	1:A:109:LEU:HD12	0.69	2.17	13	3
1:A:19:ALA:CB	1:A:112:MET:HE3	0.69	2.18	11	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:132:LEU:HD11	0.69	1.64	13	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:35:ALA:HB3	0.68	1.64	5	8
1:A:9:ILE:HG23	1:A:39:ILE:CD1	0.68	2.17	6	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:43:GLY:N	0.68	2.02	11	2
1:A:16:VAL:HG21	1:A:146:LEU:HD12	0.68	1.62	20	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:129:PHE:CD1	0.68	2.24	10	6
1:A:47:LEU:HD23	1:A:48:LYS:N	0.68	2.04	19	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:91:ASP:OD1	0.68	1.87	4	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:MET:HE2	0.68	1.88	3	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD13	0.68	2.14	12	2
1:A:48:LYS:HD3	1:A:65:THR:HG23	0.68	1.66	12	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:LEU:O	1:A:46:GLU:O	0.68	2.12	3	5
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:HD21	0.68	1.64	9	2
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HB2	0.67	1.65	2	6
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HG	0.67	1.66	8	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:29:LYS:HE2	0.67	1.66	9	1
1:A:102:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	0.67	1.66	16	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:111:MET:HE2	0.67	1.65	5	1
1:A:36:MET:O	1:A:51:TYR:HA	0.67	1.89	11	15
1:A:91:ASP:HA	1:A:96:ALA:HB2	0.67	1.64	19	9
1:A:89:ASP:CB	1:A:97:VAL:HG22	0.67	2.19	14	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:46:GLU:O	0.67	1.89	16	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:85:VAL:HG11	0.67	2.23	18	1
1:A:143:VAL:HG12	1:A:144:ALA:N	0.67	2.05	15	6
1:A:130:ARG:CG	1:A:139:THR:HG21	0.67	2.20	11	1
1:A:98:ILE:HG22	1:A:113:ARG:O	0.67	1.87	18	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:HD12	0.67	2.19	20	1
1:A:22:THR:HG22	1:A:111:MET:CE	0.67	2.19	20	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:115:TYR:CD2	0.67	2.24	2	2
1:A:19:ALA:HB1	1:A:142:MET:C	0.66	2.15	8	2
1:A:77:TYR:CZ	1:A:85:VAL:HG21	0.66	2.26	8	4
1:A:77:TYR:HB3	1:A:85:VAL:HG22	0.66	1.65	20	5
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:HD13	0.66	2.15	4	2
1:A:87:VAL:HG13	1:A:98:ILE:HG22	0.66	1.66	7	1
1:A:90:THR:O	1:A:96:ALA:HB2	0.66	1.91	17	8
1:A:9:ILE:HD12	1:A:91:ASP:OD1	0.66	1.91	18	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HB	0.66	1.67	4	2
1:A:32:MET:HE2	1:A:152:CYS:C	0.66	2.14	15	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:113:ARG:HA	0.66	1.66	2	4
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:PRO:N	0.66	2.05	20	3
1:A:146:LEU:HD22	1:A:147:PRO:HD2	0.66	1.66	8	1
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:HD22	0.65	2.16	17	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:67:LYS:HD3	0.65	1.67	18	2
1:A:37:ALA:HB1	1:A:49:VAL:CG2	0.65	2.22	11	2
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:HG3	0.65	1.91	3	1
1:A:132:LEU:HD12	1:A:135:GLU:OE1	0.65	1.91	3	1
1:A:85:VAL:HG11	1:A:98:ILE:HD13	0.65	1.67	7	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:53:VAL:HG22	0.65	2.21	2	2
1:A:34:MET:SD	1:A:146:LEU:HD21	0.65	2.31	1	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:70:SER:HB3	0.65	1.68	10	1
1:A:143:VAL:CG2	1:A:144:ALA:H	0.65	2.03	4	4
1:A:146:LEU:HB3	1:A:147:PRO:HD3	0.65	1.68	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ALA:HB3	1:A:115:TYR:CZ	0.65	2.26	16	1
1:A:77:TYR:O	1:A:85:VAL:HG22	0.65	1.91	2	2
1:A:88:LEU:HD11	1:A:132:LEU:CD1	0.65	2.20	18	2
1:A:110:HIS:NE2	1:A:112:MET:HE1	0.65	2.06	4	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:CD2	0.64	2.21	4	2
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:N	0.64	2.07	17	3
1:A:95:TYR:CB	1:A:125:ALA:HB2	0.64	2.22	5	3
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:N	0.64	2.07	15	2
1:A:16:VAL:HG23	1:A:146:LEU:HD22	0.64	1.70	12	3
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD23	0.64	2.06	6	3
1:A:90:THR:O	1:A:95:TYR:O	0.64	2.16	4	8
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:HD22	0.64	2.07	12	3
1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ASP:CB	0.64	2.22	7	2
1:A:147:PRO:HG3	1:A:154:VAL:HG12	0.64	1.69	4	1
1:A:15:VAL:HG23	1:A:113:ARG:HG3	0.64	1.70	8	1
1:A:13:TRP:CG	1:A:115:TYR:CE1	0.64	2.86	5	1
1:A:75:VAL:HG22	1:A:87:VAL:CG2	0.64	2.22	16	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:98:ILE:HD12	0.64	2.22	1	3
1:A:43:GLY:O	1:A:45:ASP:N	0.64	2.31	7	5
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:HD13	0.64	2.23	7	1
1:A:34:MET:SD	1:A:146:LEU:HD11	0.64	2.33	1	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:CD1	0.64	2.22	10	2
1:A:70:SER:HA	1:A:76:TYR:O	0.64	1.93	16	10
1:A:27:ARG:HB3	1:A:32:MET:HE3	0.64	1.68	5	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:HD13	0.64	2.17	7	1
1:A:136:ARG:NH2	1:A:142:MET:HE2	0.64	2.08	11	1
1:A:71:ASP:O	1:A:72:ASP:CB	0.63	2.47	9	3
1:A:16:VAL:HG12	1:A:146:LEU:HD22	0.63	1.69	5	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:39:ILE:HD13	0.63	2.24	3	5
1:A:85:VAL:HG22	1:A:100:ALA:HB1	0.63	1.70	18	2
1:A:95:TYR:CZ	1:A:124:ALA:HB3	0.63	2.29	6	1
1:A:132:LEU:O	1:A:132:LEU:HD23	0.63	1.94	16	5
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:H	0.63	1.52	5	2
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:C	0.63	2.17	16	2
1:A:130:ARG:HG3	1:A:139:THR:HG21	0.63	1.70	11	1
1:A:139:THR:O	1:A:143:VAL:HG23	0.63	1.94	2	4
1:A:79:GLU:O	1:A:81:ALA:N	0.63	2.32	15	6
1:A:143:VAL:HG12	1:A:144:ALA:H	0.63	1.54	15	5
1:A:75:VAL:HG22	1:A:87:VAL:HB	0.63	1.69	8	2
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:C	0.63	2.18	9	2
1:A:32:MET:HE3	1:A:154:VAL:CG1	0.63	2.24	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:VAL:CB	1:A:98:ILE:HD11	0.62	2.24	6	7
1:A:14:TYR:O	1:A:115:TYR:HA	0.62	1.94	16	4
1:A:85:VAL:HG12	1:A:98:ILE:CD1	0.62	2.23	12	3
1:A:27:ARG:CB	1:A:32:MET:HE3	0.62	2.24	5	1
1:A:89:ASP:OD2	1:A:97:VAL:HG13	0.62	1.95	18	8
1:A:15:VAL:HG12	1:A:35:ALA:CB	0.62	2.22	10	2
1:A:41:PHE:CD2	1:A:47:LEU:HD22	0.62	2.29	13	1
1:A:116:SER:HB2	1:A:121:VAL:HG22	0.62	1.70	14	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:CG1	0.62	2.47	18	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:77:TYR:OH	0.62	1.95	3	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:N	0.62	2.10	16	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:N	0.62	2.10	10	7
1:A:13:TRP:HB2	1:A:37:ALA:HB3	0.62	1.68	18	4
1:A:77:TYR:O	1:A:85:VAL:O	0.62	2.18	5	4
1:A:91:ASP:HB3	1:A:96:ALA:HB2	0.62	1.70	18	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:100:ALA:CB	0.62	2.24	18	5
1:A:89:ASP:HB3	1:A:96:ALA:HA	0.62	1.72	18	4
1:A:146:LEU:HD13	1:A:147:PRO:N	0.62	2.10	8	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:91:ASP:OD2	0.62	1.95	16	2
1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:C	0.62	2.20	7	2
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HD13	0.61	1.70	13	6
1:A:22:THR:HG23	1:A:111:MET:HB3	0.61	1.72	19	1
1:A:143:VAL:CG2	1:A:144:ALA:N	0.61	2.63	4	5
1:A:46:GLU:HA	1:A:68:LYS:O	0.61	1.95	5	6
1:A:16:VAL:HB	1:A:146:LEU:HD12	0.61	1.72	9	1
1:A:28:GLU:OE1	1:A:111:MET:HE1	0.61	1.95	19	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:48:LYS:HG2	0.61	1.72	19	2
1:A:102:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD22	0.61	1.70	11	1
1:A:20:SER:HA	1:A:142:MET:HB2	0.61	1.71	13	1
1:A:48:LYS:CB	1:A:67:LYS:HB3	0.61	2.25	6	3
1:A:47:LEU:HD12	1:A:47:LEU:C	0.61	2.21	15	5
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:HG23	0.61	1.96	10	13
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:CD1	0.61	2.25	3	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:C	0.61	2.21	7	2
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:N	0.61	2.11	20	4
1:A:71:ASP:OD1	1:A:76:TYR:N	0.61	2.33	15	3
1:A:81:ALA:O	1:A:83:LYS:N	0.61	2.34	14	4
1:A:22:THR:HG23	1:A:109:LEU:CD1	0.61	2.26	10	1
1:A:99:TYR:CD1	1:A:112:MET:HE3	0.61	2.31	7	1
1:A:89:ASP:HB3	1:A:97:VAL:HG22	0.61	1.72	14	1
1:A:20:SER:OG	1:A:142:MET:HA	0.61	1.96	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:LEU:HD12	1:A:146:LEU:N	0.61	2.11	16	2
1:A:86:GLU:C	1:A:98:ILE:HD12	0.60	2.20	19	3
1:A:42:LEU:HD12	1:A:67:LYS:CD	0.60	2.26	18	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:GLY:N	0.60	2.11	4	3
1:A:8:GLU:C	1:A:9:ILE:HD13	0.60	2.21	12	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:67:LYS:CE	0.60	2.26	15	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:51:TYR:CZ	0.60	2.31	16	2
1:A:132:LEU:HD23	1:A:132:LEU:C	0.60	2.22	16	5
1:A:90:THR:C	1:A:96:ALA:HB2	0.60	2.22	4	1
1:A:77:TYR:OH	1:A:85:VAL:HG21	0.60	1.95	7	2
1:A:76:TYR:C	1:A:76:TYR:CD1	0.60	2.78	15	4
1:A:19:ALA:HB3	1:A:112:MET:SD	0.60	2.36	7	7
1:A:88:LEU:HD23	1:A:132:LEU:HD13	0.60	1.74	5	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:112:MET:HE3	0.60	2.31	7	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:139:THR:CB	0.60	2.26	15	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:70:SER:CB	0.60	2.27	15	3
1:A:85:VAL:HG12	1:A:100:ALA:CB	0.60	2.27	19	3
1:A:18:LEU:HG	1:A:112:MET:O	0.60	1.97	1	1
1:A:80:GLU:O	1:A:81:ALA:C	0.60	2.44	7	3
1:A:47:LEU:HD12	1:A:47:LEU:N	0.60	2.11	2	4
1:A:85:VAL:HG22	1:A:100:ALA:HA	0.60	1.73	12	4
1:A:79:GLU:HG3	1:A:83:LYS:HB2	0.60	1.73	6	2
1:A:32:MET:SD	1:A:154:VAL:HG11	0.60	2.37	3	2
1:A:75:VAL:HB	1:A:87:VAL:CG1	0.60	2.25	12	1
1:A:82:LYS:O	1:A:102:ARG:HA	0.60	1.96	15	5
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:HD23	0.60	2.22	6	1
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD23	0.60	2.22	10	1
1:A:42:LEU:HB3	1:A:46:GLU:O	0.59	1.97	11	10
1:A:47:LEU:HD12	1:A:70:SER:CB	0.59	2.26	1	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:C	0.59	2.21	2	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:40:SER:N	0.59	2.12	7	1
1:A:21:ASN:O	1:A:22:THR:OG1	0.59	2.19	18	4
1:A:99:TYR:CD1	1:A:99:TYR:O	0.59	2.55	8	10
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:N	0.59	2.13	13	4
1:A:22:THR:HG22	1:A:109:LEU:HD12	0.59	1.73	13	2
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:C	0.59	2.22	18	1
1:A:134:GLY:CA	1:A:139:THR:HG23	0.59	2.27	13	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:99:TYR:O	0.59	1.98	1	3
1:A:20:SER:HA	1:A:141:GLU:O	0.59	1.97	19	1
1:A:146:LEU:HD12	1:A:147:PRO:CD	0.59	2.27	4	2
1:A:147:PRO:HB3	1:A:153:THR:HG21	0.59	1.74	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LYS:CE	1:A:111:MET:HE1	0.59	2.27	5	1
1:A:22:THR:CB	1:A:109:LEU:HD12	0.59	2.27	13	1
1:A:21:ASN:O	1:A:22:THR:CB	0.59	2.50	15	1
1:A:82:LYS:HB2	1:A:103:VAL:HG13	0.59	1.74	17	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:114:LEU:HD23	0.59	2.08	12	1
1:A:21:ASN:O	1:A:22:THR:HG23	0.59	1.98	1	2
1:A:154:VAL:O	1:A:154:VAL:CG1	0.59	2.49	5	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:35:ALA:CB	0.59	2.27	15	4
1:A:102:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD22	0.59	1.73	20	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:HB	0.59	1.98	17	10
1:A:102:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD11	0.58	1.74	1	2
1:A:33:LYS:HD3	1:A:53:VAL:HG11	0.58	1.73	4	1
1:A:67:LYS:C	1:A:68:LYS:HD2	0.58	2.23	7	1
1:A:102:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD23	0.58	1.73	19	4
1:A:77:TYR:CE1	1:A:85:VAL:HG11	0.58	2.33	18	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:70:SER:OG	0.58	1.97	20	1
1:A:19:ALA:O	1:A:112:MET:N	0.58	2.35	1	18
1:A:91:ASP:CA	1:A:96:ALA:HB2	0.58	2.27	16	5
1:A:26:LEU:HD12	1:A:29:LYS:CE	0.58	2.29	9	1
1:A:15:VAL:HG22	1:A:18:LEU:HD11	0.58	1.73	13	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:132:LEU:HD22	0.58	1.73	15	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ARG:N	0.58	2.13	7	1
1:A:20:SER:HB2	1:A:111:MET:HA	0.58	1.75	19	4
1:A:22:THR:HB	1:A:109:LEU:HD12	0.58	1.75	13	1
1:A:101:THR:HG23	1:A:109:LEU:O	0.58	1.98	14	1
1:A:102:ARG:O	1:A:109:LEU:HD23	0.58	1.98	18	1
1:A:79:GLU:HB3	1:A:83:LYS:HB2	0.58	1.74	14	1
1:A:75:VAL:HG22	1:A:87:VAL:HG21	0.58	1.74	16	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:35:ALA:HB1	0.58	2.27	7	5
1:A:22:THR:HG21	1:A:25:PHE:CD2	0.58	2.33	6	1
1:A:22:THR:HG21	1:A:109:LEU:CD2	0.58	2.27	20	1
1:A:32:MET:HE1	1:A:59:CYS:SG	0.58	2.38	20	1
1:A:112:MET:HE1	1:A:133:ALA:HB2	0.58	1.75	20	1
1:A:98:ILE:HG21	1:A:115:TYR:CE2	0.58	2.33	17	2
1:A:26:LEU:HD12	1:A:26:LEU:N	0.58	2.14	12	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:100:ALA:HB1	0.58	2.29	2	1
1:A:85:VAL:HG11	1:A:100:ALA:HB1	0.58	1.75	2	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:100:ALA:CA	0.58	2.28	19	3
1:A:13:TRP:CE2	1:A:39:ILE:HG21	0.58	2.33	15	4
1:A:81:ALA:O	1:A:103:VAL:HG12	0.58	1.98	6	2
1:A:146:LEU:HD13	1:A:146:LEU:C	0.58	2.24	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ALA:O	1:A:20:SER:CB	0.58	2.52	13	4
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:H	0.58	1.59	16	1
1:A:82:LYS:O	1:A:103:VAL:HG12	0.58	1.98	18	2
1:A:13:TRP:HZ2	1:A:39:ILE:HD12	0.58	1.57	19	1
1:A:39:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD13	0.58	1.75	4	1
1:A:95:TYR:HB3	1:A:125:ALA:HB2	0.58	1.75	5	1
1:A:21:ASN:HB3	1:A:141:GLU:O	0.58	1.98	6	2
1:A:37:ALA:CB	1:A:51:TYR:HB3	0.57	2.29	6	2
1:A:112:MET:HE2	1:A:129:PHE:CE1	0.57	2.34	6	1
1:A:32:MET:HE2	1:A:153:THR:N	0.57	2.14	15	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:LYS:N	0.57	2.38	6	10
1:A:88:LEU:H	1:A:88:LEU:HD23	0.57	1.59	14	4
1:A:32:MET:SD	1:A:144:ALA:HB1	0.57	2.38	6	1
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LYS:HD2	0.57	1.75	6	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:32:MET:SD	0.57	2.39	11	1
1:A:146:LEU:N	1:A:147:PRO:CD	0.57	2.66	18	2
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:ALA:H	0.57	1.56	1	1
1:A:34:MET:HG3	1:A:54:PRO:HD2	0.57	1.77	9	1
1:A:35:ALA:HB2	1:A:53:VAL:HG22	0.57	1.76	2	3
1:A:32:MET:CB	1:A:154:VAL:HG11	0.57	2.29	6	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:18:LEU:HD21	0.57	2.30	8	1
1:A:21:ASN:OD1	1:A:142:MET:HB2	0.57	2.00	4	1
1:A:32:MET:HE1	1:A:152:CYS:C	0.57	2.23	10	1
1:A:16:VAL:O	1:A:18:LEU:CD2	0.57	2.53	6	2
1:A:95:TYR:CE2	1:A:122:SER:HB3	0.57	2.34	17	8
1:A:103:VAL:HG13	1:A:103:VAL:O	0.57	2.00	10	1
1:A:13:TRP:NE1	1:A:39:ILE:HD12	0.57	2.15	2	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:96:ALA:HB1	0.57	2.30	12	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:139:THR:HB	0.57	1.76	15	1
1:A:16:VAL:HG22	1:A:146:LEU:CD2	0.57	2.19	2	1
1:A:34:MET:HA	1:A:146:LEU:HD12	0.57	1.76	17	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:CB	0.56	2.53	16	3
1:A:26:LEU:HD22	1:A:26:LEU:N	0.56	2.15	20	3
1:A:16:VAL:HG13	1:A:146:LEU:HD13	0.56	1.76	7	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:ARG:H	0.56	1.59	7	1
1:A:23:GLU:OE1	1:A:26:LEU:HD12	0.56	2.01	8	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:42:LEU:C	0.56	2.25	11	1
1:A:17:ALA:CB	1:A:114:LEU:HD13	0.56	2.30	3	5
1:A:77:TYR:HB3	1:A:85:VAL:HB	0.56	1.76	10	1
1:A:116:SER:CB	1:A:121:VAL:HG22	0.56	2.30	14	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:132:LEU:HD22	0.56	1.77	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:LEU:HD12	1:A:132:LEU:C	0.56	2.26	7	2
1:A:102:ARG:HB3	1:A:109:LEU:HD13	0.56	1.77	8	1
1:A:34:MET:O	1:A:54:PRO:HD2	0.56	2.00	13	14
1:A:13:TRP:O	1:A:37:ALA:HB3	0.56	2.01	2	2
1:A:21:ASN:HA	1:A:111:MET:HG2	0.56	1.78	20	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:85:VAL:HG11	0.56	2.36	8	1
1:A:8:GLU:HG3	1:A:9:ILE:HG12	0.56	1.75	12	1
1:A:82:LYS:N	1:A:103:VAL:O	0.56	2.39	20	13
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:N	0.56	2.16	18	4
1:A:21:ASN:HB2	1:A:141:GLU:O	0.56	2.00	11	4
1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:TYR:H	0.56	1.61	2	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:111:MET:HE2	0.56	2.30	5	1
1:A:132:LEU:HD13	1:A:132:LEU:C	0.56	2.26	13	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:LEU:HD13	0.55	2.01	11	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:47:LEU:HD12	0.55	2.36	19	1
1:A:77:TYR:HB3	1:A:85:VAL:CG2	0.55	2.31	4	2
1:A:89:ASP:O	1:A:90:THR:CG2	0.55	2.52	4	1
1:A:111:MET:HE2	1:A:113:ARG:NH2	0.55	2.16	15	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:48:LYS:CG	0.55	2.31	20	1
1:A:70:SER:HB2	1:A:75:VAL:HG13	0.55	1.78	2	2
1:A:47:LEU:HD13	1:A:68:LYS:O	0.55	2.01	7	1
1:A:32:MET:HE2	1:A:60:ARG:NH1	0.55	2.17	10	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:146:LEU:HD22	0.55	2.32	17	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:115:TYR:CZ	0.55	2.94	5	2
1:A:13:TRP:CZ3	1:A:49:VAL:HG11	0.55	2.37	19	1
1:A:13:TRP:HB3	1:A:115:TYR:HB3	0.55	1.78	20	4
1:A:13:TRP:CZ3	1:A:115:TYR:CE2	0.55	2.95	14	3
1:A:95:TYR:HB2	1:A:125:ALA:HB2	0.55	1.79	6	2
1:A:104:LYS:O	1:A:105:ASP:C	0.55	2.50	5	3
1:A:84:LYS:HG3	1:A:103:VAL:HG21	0.55	1.77	5	1
1:A:77:TYR:C	1:A:77:TYR:CD1	0.55	2.85	13	2
1:A:143:VAL:CG1	1:A:145:MET:HE2	0.55	2.32	13	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:47:LEU:HD22	0.55	2.37	16	2
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:O	0.55	2.01	17	1
1:A:68:LYS:CB	1:A:78:SER:O	0.55	2.54	18	4
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:CB	0.55	2.31	4	1
1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:HD3	0.55	2.17	13	2
1:A:75:VAL:CG1	1:A:87:VAL:HG13	0.55	2.29	18	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:26:LEU:C	0.54	2.26	13	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:117:ARG:NH2	0.54	2.17	20	2
1:A:75:VAL:HG12	1:A:87:VAL:CG2	0.54	2.32	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ILE:C	1:A:98:ILE:CD1	0.54	2.80	8	7
1:A:6:ARG:NE	1:A:6:ARG:N	0.54	2.55	15	1
1:A:145:MET:O	1:A:146:LEU:C	0.54	2.49	20	9
1:A:74:GLU:OE1	1:A:74:GLU:N	0.54	2.40	17	5
1:A:97:VAL:HB	1:A:129:PHE:CG	0.54	2.37	4	2
1:A:11:GLY:N	1:A:39:ILE:HG23	0.54	2.17	7	2
1:A:13:TRP:CH2	1:A:39:ILE:HD12	0.54	2.38	20	9
1:A:98:ILE:HG23	1:A:113:ARG:O	0.54	2.03	2	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:N	0.54	2.16	15	4
1:A:49:VAL:HG13	1:A:49:VAL:O	0.54	2.03	9	16
1:A:18:LEU:HD12	1:A:113:ARG:HA	0.54	1.79	4	2
1:A:24:PHE:CD1	1:A:25:PHE:N	0.54	2.75	6	6
1:A:26:LEU:CD2	1:A:142:MET:HE3	0.54	2.33	13	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:51:TYR:O	0.54	2.61	8	10
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:CD1	0.54	2.33	3	5
1:A:104:LYS:O	1:A:106:GLY:N	0.54	2.41	5	5
1:A:70:SER:OG	1:A:75:VAL:HG13	0.54	2.02	10	1
1:A:147:PRO:HA	1:A:154:VAL:HA	0.54	1.80	1	2
1:A:54:PRO:HA	1:A:61:LYS:HA	0.54	1.80	2	4
1:A:48:LYS:HB3	1:A:67:LYS:HB2	0.54	1.80	18	5
1:A:13:TRP:CE3	1:A:115:TYR:CG	0.54	2.95	11	1
1:A:98:ILE:HG21	1:A:115:TYR:CE1	0.54	2.38	20	3
1:A:72:ASP:O	1:A:74:GLU:N	0.54	2.40	15	12
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:H	0.54	1.62	12	1
1:A:42:LEU:HB2	1:A:46:GLU:O	0.54	2.03	9	4
1:A:34:MET:HE2	1:A:34:MET:CA	0.54	2.32	7	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:100:ALA:HA	0.54	1.78	8	3
1:A:137:ASN:HD21	1:A:142:MET:HE2	0.54	1.63	7	1
1:A:123:PRO:O	1:A:127:ALA:CB	0.53	2.56	5	5
1:A:147:PRO:CG	1:A:154:VAL:HG12	0.53	2.33	4	1
1:A:79:GLU:CB	1:A:83:LYS:O	0.53	2.56	14	1
1:A:114:LEU:HD23	1:A:114:LEU:C	0.53	2.27	16	1
1:A:136:ARG:HH12	1:A:139:THR:HG21	0.53	1.63	18	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:CG1	0.53	2.86	1	3
1:A:93:LYS:C	1:A:93:LYS:HD3	0.53	2.28	17	3
1:A:27:ARG:HD3	1:A:32:MET:HE1	0.53	1.80	14	1
1:A:23:GLU:H	1:A:109:LEU:HD12	0.53	1.62	19	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:85:VAL:CG2	0.53	2.91	19	4
1:A:154:VAL:HG23	1:A:154:VAL:O	0.53	2.03	18	2
1:A:13:TRP:CE3	1:A:115:TYR:CD2	0.53	2.97	7	8
1:A:77:TYR:O	1:A:77:TYR:CD1	0.53	2.62	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:HG23	0.53	2.04	6	1
1:A:116:SER:OG	1:A:121:VAL:HG22	0.53	2.03	6	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ASP:CG	0.53	2.28	17	2
1:A:35:ALA:HA	1:A:53:VAL:HG12	0.53	1.80	19	2
1:A:79:GLU:O	1:A:80:GLU:HG2	0.53	2.04	19	1
1:A:22:THR:HG22	1:A:111:MET:HE2	0.53	1.80	20	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:62:TRP:O	0.53	2.03	11	2
1:A:98:ILE:O	1:A:113:ARG:HB3	0.53	2.03	16	6
1:A:16:VAL:O	1:A:146:LEU:HB2	0.53	2.04	5	1
1:A:43:GLY:O	1:A:44:GLU:CB	0.53	2.57	19	2
1:A:93:LYS:HD2	1:A:93:LYS:C	0.53	2.28	9	2
1:A:24:PHE:CZ	1:A:25:PHE:CE1	0.53	2.97	10	1
1:A:130:ARG:O	1:A:139:THR:HG21	0.53	2.04	13	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:115:TYR:CD2	0.53	2.97	2	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:54:PRO:CG	0.53	2.34	3	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:O	0.53	2.04	6	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:N	0.53	2.19	20	3
1:A:15:VAL:N	1:A:115:TYR:CD2	0.53	2.77	11	1
1:A:32:MET:HB3	1:A:154:VAL:HG21	0.53	1.80	17	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:115:TYR:CE1	0.53	2.97	2	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:H	0.53	1.63	2	1
1:A:77:TYR:O	1:A:85:VAL:HB	0.53	2.04	14	2
1:A:79:GLU:HB2	1:A:83:LYS:CB	0.53	2.34	20	2
1:A:103:VAL:O	1:A:103:VAL:HG23	0.53	2.04	8	2
1:A:145:MET:O	1:A:154:VAL:HG21	0.53	2.04	15	3
1:A:85:VAL:CG1	1:A:100:ALA:CB	0.52	2.86	2	3
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:CD2	0.52	2.82	9	3
1:A:15:VAL:HG23	1:A:18:LEU:HD11	0.52	1.81	2	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:35:ALA:CB	0.52	2.87	8	4
1:A:51:TYR:OH	1:A:66:PHE:CG	0.52	2.62	12	1
1:A:22:THR:HG21	1:A:109:LEU:HB3	0.52	1.80	18	1
1:A:123:PRO:O	1:A:127:ALA:HB3	0.52	2.03	5	3
1:A:81:ALA:O	1:A:82:LYS:C	0.52	2.52	14	6
1:A:143:VAL:CG1	1:A:144:ALA:N	0.52	2.71	15	5
1:A:11:GLY:H	1:A:39:ILE:HG23	0.52	1.63	19	1
1:A:89:ASP:O	1:A:90:THR:CB	0.52	2.58	18	2
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:N	0.52	2.83	5	1
1:A:13:TRP:CE3	1:A:115:TYR:CE2	0.52	2.98	16	4
1:A:16:VAL:CG1	1:A:146:LEU:HD13	0.52	2.35	7	1
1:A:102:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	0.52	1.80	11	1
1:A:87:VAL:HB	1:A:98:ILE:HB	0.52	1.80	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:O	1:A:9:ILE:CG2	0.52	2.54	4	4
1:A:49:VAL:HG13	1:A:51:TYR:CE1	0.52	2.40	5	1
1:A:21:ASN:ND2	1:A:110:HIS:HB2	0.52	2.19	9	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:85:VAL:HG22	0.52	2.35	20	2
1:A:20:SER:O	1:A:142:MET:HB3	0.52	2.04	15	3
1:A:143:VAL:CG1	1:A:144:ALA:H	0.52	2.17	15	4
1:A:115:TYR:CD1	1:A:115:TYR:O	0.52	2.63	19	3
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:N	0.52	2.19	2	1
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:HG23	0.52	2.05	15	6
1:A:82:LYS:HA	1:A:103:VAL:O	0.52	2.05	15	8
1:A:108:THR:O	1:A:109:LEU:HD13	0.52	2.05	7	5
1:A:68:LYS:HD3	1:A:77:TYR:CD1	0.52	2.40	7	1
1:A:16:VAL:HG23	1:A:146:LEU:HD13	0.52	1.81	15	1
1:A:98:ILE:CG2	1:A:115:TYR:CD1	0.52	2.93	15	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:C	0.52	2.29	19	1
1:A:13:TRP:CD2	1:A:115:TYR:CE2	0.52	2.97	5	1
1:A:79:GLU:O	1:A:83:LYS:HB2	0.52	2.04	7	1
1:A:68:LYS:HG3	1:A:77:TYR:CD1	0.52	2.39	13	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:132:LEU:HD11	0.52	1.82	17	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:91:ASP:O	0.52	2.04	19	1
1:A:68:LYS:HG3	1:A:79:GLU:CG	0.52	2.34	20	1
1:A:77:TYR:CE1	1:A:85:VAL:CG2	0.52	2.93	8	2
1:A:112:MET:HE2	1:A:142:MET:HE3	0.52	1.82	11	1
1:A:146:LEU:O	1:A:154:VAL:HG13	0.52	2.05	18	1
1:A:137:ASN:O	1:A:138:TYR:CD1	0.52	2.63	4	6
1:A:91:ASP:C	1:A:92:TYR:CD1	0.52	2.88	8	5
1:A:77:TYR:CE2	1:A:85:VAL:CG2	0.52	2.93	13	3
1:A:98:ILE:CG2	1:A:115:TYR:CE1	0.52	2.93	20	3
1:A:9:ILE:HG23	1:A:91:ASP:OD1	0.52	2.05	18	1
1:A:115:TYR:C	1:A:115:TYR:CD1	0.51	2.87	2	2
1:A:95:TYR:CE2	1:A:125:ALA:CA	0.51	2.93	3	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:112:MET:O	0.51	2.58	15	6
1:A:37:ALA:HA	1:A:51:TYR:HA	0.51	1.82	15	7
1:A:66:PHE:CE2	1:A:77:TYR:CE2	0.51	2.98	9	1
1:A:104:LYS:O	1:A:107:ARG:HG2	0.51	2.05	11	8
1:A:21:ASN:ND2	1:A:140:ASP:O	0.51	2.44	2	3
1:A:13:TRP:CE2	1:A:115:TYR:CE1	0.51	2.99	19	2
1:A:32:MET:HE2	1:A:32:MET:CA	0.51	2.34	1	1
1:A:34:MET:HE2	1:A:146:LEU:HD12	0.51	1.81	4	1
1:A:41:PHE:C	1:A:42:LEU:HD22	0.51	2.30	9	2
1:A:16:VAL:HG23	1:A:146:LEU:HG	0.51	1.83	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:TRP:CE2	1:A:115:TYR:CE2	0.51	2.99	5	2
1:A:75:VAL:CG1	1:A:87:VAL:CG1	0.51	2.89	12	2
1:A:66:PHE:O	1:A:66:PHE:CD1	0.51	2.63	8	1
1:A:13:TRP:HB3	1:A:115:TYR:CD2	0.51	2.40	13	2
1:A:107:ARG:HH12	1:A:109:LEU:HD11	0.51	1.65	14	1
1:A:14:TYR:CB	1:A:36:MET:HA	0.51	2.35	11	1
1:A:70:SER:OG	1:A:77:TYR:CB	0.51	2.58	19	1
1:A:15:VAL:O	1:A:35:ALA:O	0.51	2.28	16	4
1:A:13:TRP:CZ3	1:A:115:TYR:CZ	0.51	2.99	14	1
1:A:27:ARG:HD3	1:A:28:GLU:N	0.51	2.20	15	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:70:SER:HB2	0.51	1.83	1	1
1:A:98:ILE:O	1:A:113:ARG:O	0.51	2.29	15	6
1:A:71:ASP:O	1:A:72:ASP:HB3	0.51	2.05	2	2
1:A:68:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CD2	0.51	2.40	3	2
1:A:75:VAL:HG22	1:A:87:VAL:CB	0.51	2.36	8	1
1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:HD2	0.51	2.20	9	2
1:A:75:VAL:HG23	1:A:91:ASP:OD2	0.51	2.05	12	1
1:A:32:MET:HE3	1:A:154:VAL:HG12	0.51	1.83	14	1
1:A:146:LEU:HB3	1:A:147:PRO:HD2	0.51	1.83	19	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:N	0.51	2.43	1	10
1:A:13:TRP:CD2	1:A:115:TYR:CZ	0.51	2.98	5	1
1:A:137:ASN:O	1:A:139:THR:N	0.51	2.44	6	3
1:A:82:LYS:HA	1:A:104:LYS:HB3	0.51	1.82	10	2
1:A:87:VAL:HG11	1:A:115:TYR:OH	0.51	2.05	14	1
1:A:20:SER:O	1:A:21:ASN:CG	0.51	2.54	2	1
1:A:32:MET:HG2	1:A:154:VAL:HG12	0.51	1.82	2	2
1:A:72:ASP:O	1:A:73:GLY:C	0.51	2.53	17	5
1:A:124:ALA:HB1	1:A:128:ILE:HD11	0.51	1.83	3	4
1:A:9:ILE:O	1:A:39:ILE:HD13	0.51	2.06	19	1
1:A:20:SER:HB3	1:A:111:MET:HA	0.51	1.81	8	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:70:SER:OG	0.50	2.07	11	2
1:A:48:LYS:C	1:A:48:LYS:HD2	0.50	2.31	19	16
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:HG12	0.50	2.36	1	3
1:A:77:TYR:CD2	1:A:85:VAL:HG21	0.50	2.40	2	2
1:A:95:TYR:CD2	1:A:125:ALA:HB1	0.50	2.41	3	1
1:A:136:ARG:N	1:A:136:ARG:HD2	0.50	2.22	9	1
1:A:74:GLU:O	1:A:75:VAL:CG2	0.50	2.59	19	2
1:A:108:THR:HG22	1:A:110:HIS:CE1	0.50	2.40	19	1
1:A:48:LYS:HA	1:A:66:PHE:O	0.50	2.06	5	8
1:A:146:LEU:HD12	1:A:147:PRO:HD3	0.50	1.81	4	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:100:ALA:CA	0.50	2.36	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ALA:HB3	1:A:112:MET:CB	0.50	2.35	6	2
1:A:88:LEU:HD13	1:A:132:LEU:HD11	0.50	1.82	10	1
1:A:19:ALA:CB	1:A:112:MET:HB2	0.50	2.35	18	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:O	0.50	2.29	8	3
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:CD2	0.50	2.84	11	15
1:A:28:GLU:O	1:A:31:LYS:HG2	0.50	2.06	7	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:116:SER:OG	0.50	2.64	11	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:CD1	0.50	2.84	17	2
1:A:15:VAL:HG13	1:A:113:ARG:CG	0.50	2.36	18	1
1:A:136:ARG:O	1:A:137:ASN:CB	0.50	2.59	6	1
1:A:84:LYS:O	1:A:101:THR:O	0.50	2.30	10	3
1:A:136:ARG:HH22	1:A:142:MET:HE2	0.50	1.66	11	1
1:A:102:ARG:CG	1:A:109:LEU:HD23	0.50	2.37	15	1
1:A:44:GLU:O	1:A:46:GLU:OE1	0.50	2.29	14	2
1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CD	0.50	2.75	9	2
1:A:16:VAL:HA	1:A:146:LEU:HD22	0.50	1.81	5	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CZ	0.50	2.95	8	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:O	0.50	2.64	13	3
1:A:48:LYS:HD2	1:A:65:THR:HG23	0.50	1.82	15	1
1:A:21:ASN:O	1:A:22:THR:CG2	0.50	2.59	1	2
1:A:13:TRP:NE1	1:A:115:TYR:CE2	0.50	2.79	2	1
1:A:19:ALA:N	1:A:144:ALA:HB3	0.50	2.22	5	3
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:CD2	0.50	2.84	16	3
1:A:21:ASN:O	1:A:22:THR:HB	0.50	2.06	14	5
1:A:80:GLU:O	1:A:81:ALA:HB2	0.50	2.06	19	4
1:A:114:LEU:HD23	1:A:114:LEU:O	0.50	2.06	3	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:78:SER:OG	0.50	2.64	5	1
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:CD1	0.50	2.74	5	3
1:A:99:TYR:CZ	1:A:101:THR:CG2	0.50	2.95	20	4
1:A:112:MET:HE3	1:A:142:MET:HE1	0.50	1.81	8	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:146:LEU:HD12	0.50	2.36	9	1
1:A:21:ASN:CG	1:A:142:MET:HB2	0.50	2.32	15	1
1:A:99:TYR:O	1:A:99:TYR:CD1	0.50	2.64	16	1
1:A:20:SER:O	1:A:21:ASN:ND2	0.50	2.45	11	4
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.50	2.84	7	2
1:A:23:GLU:CD	1:A:26:LEU:HD12	0.50	2.31	8	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:35:ALA:HB1	0.50	1.84	15	1
1:A:89:ASP:O	1:A:90:THR:HB	0.50	2.07	18	1
1:A:98:ILE:CG2	1:A:113:ARG:HB3	0.50	2.37	18	1
1:A:15:VAL:O	1:A:35:ALA:HB3	0.50	2.07	19	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:68:LYS:O	0.50	2.06	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:TYR:CD1	1:A:51:TYR:N	0.50	2.80	16	2
1:A:135:GLU:OE1	1:A:136:ARG:N	0.50	2.44	17	1
1:A:38:ARG:C	1:A:49:VAL:HG23	0.50	2.32	19	1
1:A:95:TYR:CD2	1:A:122:SER:HB3	0.50	2.42	2	4
1:A:34:MET:O	1:A:53:VAL:HA	0.50	2.07	16	6
1:A:32:MET:HA	1:A:32:MET:CE	0.50	2.31	6	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:70:SER:OG	0.50	2.07	18	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:47:LEU:HD13	0.50	2.42	20	1
1:A:93:LYS:HD3	1:A:94:SER:N	0.49	2.22	1	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:115:TYR:CZ	0.49	3.00	2	2
1:A:79:GLU:O	1:A:83:LYS:HB3	0.49	2.06	18	2
1:A:47:LEU:O	1:A:77:TYR:OH	0.49	2.30	3	4
1:A:87:VAL:C	1:A:88:LEU:HD12	0.49	2.32	5	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:112:MET:CE	0.49	2.94	7	1
1:A:134:GLY:N	1:A:139:THR:HG23	0.49	2.21	13	1
1:A:66:PHE:CD2	1:A:79:GLU:OE2	0.49	2.64	19	3
1:A:24:PHE:CE1	1:A:25:PHE:CE1	0.49	2.99	10	1
1:A:72:ASP:OD1	1:A:73:GLY:N	0.49	2.45	4	1
1:A:136:ARG:O	1:A:137:ASN:HB3	0.49	2.07	6	2
1:A:75:VAL:CG1	1:A:87:VAL:HB	0.49	2.32	16	2
1:A:17:ALA:O	1:A:18:LEU:HD23	0.49	2.07	8	1
1:A:32:MET:O	1:A:147:PRO:CG	0.49	2.60	9	1
1:A:21:ASN:N	1:A:110:HIS:O	0.49	2.45	12	4
1:A:89:ASP:CG	1:A:97:VAL:HG13	0.49	2.32	14	2
1:A:15:VAL:HG22	1:A:115:TYR:CD1	0.49	2.42	20	2
1:A:13:TRP:HB3	1:A:115:TYR:CD1	0.49	2.43	6	7
1:A:77:TYR:CE1	1:A:85:VAL:HG21	0.49	2.42	8	1
1:A:45:ASP:O	1:A:46:GLU:CG	0.49	2.60	12	3
1:A:60:ARG:NH2	1:A:147:PRO:CG	0.49	2.75	10	1
1:A:71:ASP:CB	1:A:76:TYR:CZ	0.49	2.95	13	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:91:ASP:OD2	0.49	2.07	19	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:47:LEU:HD12	0.49	2.43	19	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:99:TYR:C	0.49	2.31	1	2
1:A:34:MET:HE3	1:A:54:PRO:CD	0.49	2.38	3	1
1:A:88:LEU:N	1:A:97:VAL:O	0.49	2.44	6	8
1:A:20:SER:O	1:A:142:MET:O	0.49	2.30	4	1
1:A:13:TRP:O	1:A:37:ALA:N	0.49	2.46	2	14
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:N	0.49	2.43	3	18
1:A:94:SER:HB2	1:A:117:ARG:NE	0.49	2.22	2	1
1:A:98:ILE:N	1:A:113:ARG:O	0.49	2.45	6	10
1:A:112:MET:CE	1:A:142:MET:HE3	0.49	2.20	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:HD3	1:A:142:MET:HE1	0.49	1.83	18	1
1:A:79:GLU:HB2	1:A:83:LYS:HB2	0.49	1.83	20	1
1:A:18:LEU:O	1:A:144:ALA:CB	0.49	2.60	1	1
1:A:48:LYS:HB3	1:A:67:LYS:HB3	0.49	1.83	12	7
1:A:95:TYR:CD2	1:A:125:ALA:CB	0.49	2.96	3	1
1:A:86:GLU:C	1:A:98:ILE:HD13	0.49	2.32	4	1
1:A:17:ALA:CB	1:A:114:LEU:HD23	0.49	2.37	14	1
1:A:41:PHE:C	1:A:42:LEU:HD12	0.49	2.33	15	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:77:TYR:CE1	0.49	2.42	15	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:115:TYR:O	0.49	2.06	17	1
1:A:41:PHE:CD1	1:A:47:LEU:HD13	0.49	2.43	20	1
1:A:128:ILE:HA	1:A:131:LYS:HG2	0.49	1.82	3	2
1:A:95:TYR:CD2	1:A:125:ALA:HB2	0.49	2.42	12	2
1:A:95:TYR:CD1	1:A:125:ALA:HB1	0.49	2.42	3	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:144:ALA:HB3	0.49	1.84	4	2
1:A:91:ASP:OD1	1:A:91:ASP:O	0.49	2.31	7	1
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD2	0.49	2.76	13	3
1:A:29:LYS:O	1:A:32:MET:HG3	0.49	2.08	7	1
1:A:32:MET:HG3	1:A:154:VAL:HG12	0.49	1.84	14	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:26:LEU:N	0.48	2.81	4	2
1:A:77:TYR:CB	1:A:85:VAL:O	0.48	2.61	11	2
1:A:99:TYR:C	1:A:99:TYR:CD1	0.48	2.90	9	1
1:A:61:LYS:C	1:A:62:TRP:CD1	0.48	2.91	16	2
1:A:16:VAL:HB	1:A:146:LEU:HD22	0.48	1.85	17	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:115:TYR:HD2	0.48	1.65	2	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:67:LYS:HD2	0.48	1.85	5	1
1:A:93:LYS:O	1:A:94:SER:OG	0.48	2.23	12	1
1:A:142:MET:HE3	1:A:143:VAL:O	0.48	2.07	12	1
1:A:107:ARG:O	1:A:107:ARG:CG	0.48	2.60	17	1
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ASP:CG	0.48	2.56	20	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:86:GLU:HG2	0.48	2.43	5	1
1:A:43:GLY:O	1:A:44:GLU:HB2	0.48	2.08	19	2
1:A:42:LEU:HD12	1:A:42:LEU:N	0.48	2.23	15	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:HG13	0.48	2.08	18	1
1:A:15:VAL:HG22	1:A:115:TYR:CE1	0.48	2.43	20	1
1:A:32:MET:SD	1:A:32:MET:O	0.48	2.72	20	1
1:A:42:LEU:N	1:A:42:LEU:HD22	0.48	2.23	20	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:HD23	0.48	2.34	1	1
1:A:68:LYS:HD2	1:A:77:TYR:CD2	0.48	2.43	10	2
1:A:121:VAL:CG1	1:A:126:THR:HG23	0.48	2.38	15	3
1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CD	0.48	2.77	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:MET:O	1:A:51:TYR:CA	0.48	2.61	15	2
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ASP:HB2	0.48	2.07	12	1
1:A:13:TRP:CD2	1:A:115:TYR:CE1	0.48	3.02	16	3
1:A:97:VAL:HG11	1:A:129:PHE:CB	0.48	2.36	15	1
1:A:98:ILE:CG2	1:A:115:TYR:CD2	0.48	2.96	17	3
1:A:95:TYR:CG	1:A:125:ALA:HB1	0.48	2.42	3	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:C	0.48	2.34	8	2
1:A:31:LYS:HE3	1:A:111:MET:HE1	0.48	1.84	5	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:68:LYS:O	0.48	2.61	7	1
1:A:32:MET:CE	1:A:154:VAL:HG12	0.48	2.38	14	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:HG2	0.48	2.09	20	1
1:A:91:ASP:OD1	1:A:117:ARG:NH2	0.48	2.47	11	2
1:A:19:ALA:O	1:A:20:SER:HB2	0.48	2.09	12	4
1:A:75:VAL:HG12	1:A:87:VAL:HG12	0.48	1.86	12	1
1:A:115:TYR:CD1	1:A:115:TYR:N	0.48	2.82	20	1
1:A:42:LEU:O	1:A:43:GLY:C	0.48	2.56	7	2
1:A:100:ALA:N	1:A:111:MET:O	0.48	2.47	20	13
1:A:10:ALA:HA	1:A:39:ILE:HG23	0.48	1.85	11	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:85:VAL:CG2	0.48	2.97	2	2
1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:HD2	0.48	2.23	4	3
1:A:95:TYR:CE2	1:A:125:ALA:HB1	0.48	2.44	3	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:CD1	0.48	2.86	7	1
1:A:145:MET:O	1:A:154:VAL:HG23	0.48	2.09	8	2
1:A:95:TYR:CE2	1:A:122:SER:CB	0.48	2.97	18	4
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:HG2	0.48	2.08	13	1
1:A:42:LEU:N	1:A:42:LEU:CD1	0.48	2.77	16	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:47:LEU:CD2	0.47	2.97	9	4
1:A:9:ILE:O	1:A:39:ILE:CG2	0.47	2.61	5	1
1:A:32:MET:HG2	1:A:152:CYS:HA	0.47	1.85	9	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:139:THR:CG2	0.47	2.39	14	1
1:A:10:ALA:HA	1:A:39:ILE:HG22	0.47	1.86	2	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:48:LYS:HG2	0.47	1.86	6	2
1:A:99:TYR:CD1	1:A:99:TYR:C	0.47	2.92	6	9
1:A:21:ASN:ND2	1:A:142:MET:HG2	0.47	2.23	9	1
1:A:87:VAL:CB	1:A:98:ILE:HB	0.47	2.39	12	1
1:A:38:ARG:C	1:A:38:ARG:HD3	0.47	2.33	14	1
1:A:99:TYR:HA	1:A:112:MET:HA	0.47	1.85	6	3
1:A:66:PHE:CE2	1:A:68:LYS:HE3	0.47	2.44	11	1
1:A:88:LEU:HD11	1:A:132:LEU:HD13	0.47	1.84	19	1
1:A:102:ARG:CG	1:A:109:LEU:HD21	0.47	2.39	1	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:87:VAL:CG1	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:146:LEU:C	1:A:146:LEU:CD1	0.47	2.88	8	1
1:A:41:PHE:HA	1:A:47:LEU:HD22	0.47	1.86	10	1
1:A:38:ARG:O	1:A:49:VAL:HA	0.47	2.09	14	2
1:A:67:LYS:HA	1:A:77:TYR:OH	0.47	2.10	15	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:HB2	0.47	2.09	17	2
1:A:66:PHE:O	1:A:77:TYR:OH	0.47	2.31	20	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD2	0.47	2.77	6	6
1:A:90:THR:HG21	1:A:93:LYS:HD3	0.47	1.86	2	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:17:ALA:N	0.47	2.77	3	1
1:A:95:TYR:CE1	1:A:125:ALA:HB1	0.47	2.45	3	1
1:A:15:VAL:HG23	1:A:18:LEU:HD21	0.47	1.87	8	1
1:A:16:VAL:CB	1:A:146:LEU:HD12	0.47	2.38	9	1
1:A:139:THR:O	1:A:142:MET:C	0.47	2.57	9	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:117:ARG:NH1	0.47	2.82	1	2
1:A:18:LEU:CB	1:A:144:ALA:HB3	0.47	2.39	3	2
1:A:41:PHE:CD2	1:A:47:LEU:HD21	0.47	2.45	3	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:70:SER:HB2	0.47	1.86	6	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:66:PHE:CE1	0.47	2.97	8	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:129:PHE:CD1	0.47	2.98	12	5
1:A:98:ILE:CG2	1:A:113:ARG:O	0.47	2.61	18	2
1:A:114:LEU:HD13	1:A:114:LEU:O	0.47	2.10	12	1
1:A:89:ASP:O	1:A:90:THR:O	0.47	2.33	14	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:CD1	0.47	2.91	20	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:GLU:CB	0.47	2.98	2	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:HB	0.47	2.10	3	15
1:A:80:GLU:O	1:A:82:LYS:N	0.47	2.48	10	3
1:A:98:ILE:HG13	1:A:113:ARG:O	0.47	2.10	7	1
1:A:91:ASP:OD1	1:A:92:TYR:CE1	0.47	2.68	10	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:115:TYR:CE2	0.47	2.97	12	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:47:LEU:HD22	0.47	2.44	13	1
1:A:71:ASP:HB3	1:A:76:TYR:CE2	0.47	2.45	15	2
1:A:145:MET:O	1:A:154:VAL:HG22	0.47	2.10	13	1
1:A:34:MET:HG3	1:A:146:LEU:HD11	0.47	1.85	17	1
1:A:32:MET:HG3	1:A:154:VAL:HG13	0.47	1.85	1	1
1:A:51:TYR:OH	1:A:66:PHE:CZ	0.47	2.67	6	2
1:A:87:VAL:HG13	1:A:98:ILE:CG2	0.47	2.38	7	1
1:A:51:TYR:OH	1:A:66:PHE:CE1	0.47	2.68	15	2
1:A:145:MET:HG3	1:A:154:VAL:HG21	0.47	1.86	19	1
1:A:147:PRO:HB2	1:A:153:THR:HB	0.47	1.86	19	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:79:GLU:OE2	0.47	2.68	20	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:39:ILE:HD13	0.47	2.45	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:ARG:HD3	1:A:115:TYR:OH	0.47	2.10	11	1
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:HG12	0.47	2.07	18	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:39:ILE:HD12	0.47	2.45	2	1
1:A:92:TYR:N	1:A:92:TYR:CD1	0.47	2.82	4	4
1:A:15:VAL:HB	1:A:115:TYR:CE2	0.47	2.45	11	1
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:CD2	0.47	2.87	15	2
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:CG	0.47	2.62	13	1
1:A:99:TYR:CE2	1:A:101:THR:CG2	0.47	2.98	19	4
1:A:36:MET:HE2	1:A:54:PRO:HG3	0.47	1.88	14	2
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD1	0.47	2.78	19	2
1:A:117:ARG:N	1:A:117:ARG:CD	0.46	2.79	2	1
1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:HD3	0.46	2.25	3	2
1:A:95:TYR:CE2	1:A:125:ALA:HA	0.46	2.45	3	1
1:A:17:ALA:C	1:A:18:LEU:CD1	0.46	2.83	10	4
1:A:66:PHE:CE2	1:A:83:LYS:CG	0.46	2.97	6	1
1:A:100:ALA:HB3	1:A:111:MET:HE3	0.46	1.86	16	2
1:A:112:MET:HE2	1:A:133:ALA:CB	0.46	2.28	13	1
1:A:145:MET:O	1:A:146:LEU:O	0.46	2.32	20	2
1:A:84:LYS:HD2	1:A:85:VAL:N	0.46	2.25	14	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:139:THR:OG1	0.46	2.10	15	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CD2	0.46	2.78	15	4
1:A:82:LYS:HE3	1:A:82:LYS:HA	0.46	1.86	2	1
1:A:95:TYR:CZ	1:A:125:ALA:HB1	0.46	2.45	3	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:92:TYR:CE1	0.46	2.45	4	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:85:VAL:HG22	0.46	2.44	6	1
1:A:88:LEU:HB2	1:A:97:VAL:HG23	0.46	1.87	6	2
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:CD2	0.46	2.88	17	3
1:A:24:PHE:CE2	1:A:27:ARG:NH2	0.46	2.83	11	1
1:A:19:ALA:N	1:A:112:MET:HB2	0.46	2.24	19	3
1:A:82:LYS:CB	1:A:103:VAL:HG13	0.46	2.40	17	1
1:A:33:LYS:HD3	1:A:53:VAL:HG23	0.46	1.87	19	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:77:TYR:C	0.46	2.93	7	5
1:A:99:TYR:CD1	1:A:112:MET:HG3	0.46	2.45	2	1
1:A:41:PHE:CD1	1:A:41:PHE:O	0.46	2.68	15	2
1:A:88:LEU:CD2	1:A:132:LEU:HD22	0.46	2.40	6	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:98:ILE:HG22	0.46	2.37	7	1
1:A:15:VAL:N	1:A:35:ALA:O	0.46	2.48	11	1
1:A:22:THR:HG22	1:A:109:LEU:HB3	0.46	1.87	13	2
1:A:85:VAL:CG1	1:A:100:ALA:HA	0.46	2.40	13	3
1:A:42:LEU:HD22	1:A:44:GLU:HB2	0.46	1.86	1	1
1:A:80:GLU:N	1:A:80:GLU:OE1	0.46	2.48	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:THR:OG1	1:A:92:TYR:CD1	0.46	2.68	4	1
1:A:34:MET:HA	1:A:146:LEU:CD2	0.46	2.40	5	1
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:64:THR:OG1	0.46	2.69	5	2
1:A:15:VAL:CG2	1:A:115:TYR:CZ	0.46	2.99	6	2
1:A:68:LYS:HE3	1:A:77:TYR:CG	0.46	2.45	8	1
1:A:77:TYR:O	1:A:85:VAL:N	0.46	2.48	10	2
1:A:6:ARG:N	1:A:6:ARG:HD2	0.46	2.26	11	1
1:A:32:MET:CG	1:A:154:VAL:HG12	0.46	2.40	14	1
1:A:49:VAL:O	1:A:51:TYR:CE1	0.46	2.69	19	2
1:A:14:TYR:CB	1:A:116:SER:O	0.46	2.64	18	1
1:A:19:ALA:O	1:A:112:MET:SD	0.46	2.74	14	3
1:A:85:VAL:HG11	1:A:100:ALA:CB	0.46	2.41	2	1
1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:OE1	0.46	2.49	3	2
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HD23	0.46	1.87	14	1
1:A:107:ARG:NH1	1:A:109:LEU:HD11	0.46	2.26	14	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:39:ILE:HG21	0.46	2.45	15	1
1:A:94:SER:O	1:A:117:ARG:HD2	0.46	2.10	2	1
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:HD12	0.46	2.26	6	1
1:A:92:TYR:CD1	1:A:92:TYR:N	0.46	2.84	8	1
1:A:112:MET:HB3	1:A:129:PHE:CZ	0.46	2.46	4	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:114:LEU:CG	0.46	2.39	16	5
1:A:37:ALA:HB2	1:A:51:TYR:CB	0.46	2.37	10	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:114:LEU:HD13	0.46	2.25	14	1
1:A:67:LYS:C	1:A:67:LYS:HD2	0.46	2.36	19	1
1:A:68:LYS:CG	1:A:78:SER:O	0.46	2.64	14	6
1:A:95:TYR:CD1	1:A:95:TYR:O	0.46	2.69	8	2
1:A:99:TYR:CD1	1:A:112:MET:SD	0.46	3.09	13	3
1:A:59:CYS:O	1:A:60:ARG:HB2	0.46	2.10	5	1
1:A:15:VAL:O	1:A:16:VAL:HG13	0.46	2.10	19	1
1:A:17:ALA:O	1:A:18:LEU:HD12	0.46	2.10	19	1
1:A:147:PRO:O	1:A:154:VAL:HG12	0.46	2.10	19	1
1:A:152:CYS:O	1:A:153:THR:CG2	0.46	2.64	19	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:CB	0.45	2.64	5	8
1:A:145:MET:O	1:A:154:VAL:CG2	0.45	2.64	3	3
1:A:93:LYS:O	1:A:94:SER:HB3	0.45	2.12	9	3
1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:OE1	0.45	2.48	13	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:67:LYS:HE2	0.45	1.86	15	1
1:A:82:LYS:HG2	1:A:83:LYS:HD3	0.45	1.88	15	1
1:A:82:LYS:N	1:A:82:LYS:HD2	0.45	2.26	15	2
1:A:85:VAL:HG23	1:A:98:ILE:CD1	0.45	2.33	20	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:116:SER:O	0.45	2.70	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:ASN:O	1:A:138:TYR:CB	0.45	2.65	17	2
1:A:75:VAL:O	1:A:87:VAL:CG2	0.45	2.64	6	1
1:A:77:TYR:CE1	1:A:85:VAL:HB	0.45	2.47	7	2
1:A:20:SER:HB2	1:A:110:HIS:O	0.45	2.11	8	1
1:A:59:CYS:O	1:A:60:ARG:CB	0.45	2.64	9	1
1:A:112:MET:HE2	1:A:139:THR:HG22	0.45	1.87	14	1
1:A:25:PHE:C	1:A:25:PHE:CD1	0.45	2.94	16	1
1:A:21:ASN:HB3	1:A:142:MET:HB2	0.45	1.88	17	1
1:A:82:LYS:O	1:A:103:VAL:CG1	0.45	2.65	18	1
1:A:13:TRP:N	1:A:37:ALA:O	0.45	2.47	13	4
1:A:137:ASN:ND2	1:A:142:MET:HE2	0.45	2.25	7	1
1:A:113:ARG:CD	1:A:115:TYR:CZ	0.45	3.00	8	3
1:A:14:TYR:HB2	1:A:116:SER:OG	0.45	2.11	2	2
1:A:88:LEU:HB2	1:A:97:VAL:CG2	0.45	2.40	2	1
1:A:19:ALA:HA	1:A:144:ALA:N	0.45	2.26	14	6
1:A:102:ARG:CD	1:A:109:LEU:HD13	0.45	2.42	5	1
1:A:86:GLU:HB3	1:A:99:TYR:CZ	0.45	2.47	6	1
1:A:42:LEU:O	1:A:43:GLY:O	0.45	2.35	11	4
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:CG2	0.45	2.65	11	6
1:A:93:LYS:NZ	1:A:93:LYS:HB3	0.45	2.27	9	1
1:A:93:LYS:C	1:A:93:LYS:CD	0.45	2.90	17	3
1:A:26:LEU:HD22	1:A:142:MET:CE	0.45	2.41	13	1
1:A:48:LYS:HB3	1:A:67:LYS:CB	0.45	2.42	16	2
1:A:48:LYS:HB2	1:A:66:PHE:O	0.45	2.10	19	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:35:ALA:C	0.45	2.36	17	5
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:HD23	0.45	2.27	1	1
1:A:89:ASP:CB	1:A:97:VAL:HG13	0.45	2.41	16	2
1:A:47:LEU:HD21	1:A:70:SER:HB3	0.45	1.87	4	1
1:A:11:GLY:O	1:A:38:ARG:HG3	0.45	2.12	11	1
1:A:14:TYR:HB3	1:A:36:MET:HA	0.45	1.89	11	1
1:A:105:ASP:O	1:A:105:ASP:OD1	0.45	2.35	15	2
1:A:133:ALA:O	1:A:137:ASN:O	0.45	2.35	15	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.45	2.79	2	3
1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CD	0.45	2.79	10	3
1:A:98:ILE:O	1:A:113:ARG:N	0.45	2.49	12	3
1:A:103:VAL:HA	1:A:107:ARG:O	0.45	2.11	14	1
1:A:93:LYS:HD2	1:A:93:LYS:N	0.45	2.26	2	2
1:A:97:VAL:HB	1:A:129:PHE:CD1	0.45	2.47	13	2
1:A:39:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD12	0.45	1.87	5	1
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ASP:HB3	0.45	2.12	10	4
1:A:77:TYR:CE1	1:A:85:VAL:CG1	0.45	2.99	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ALA:HB3	1:A:111:MET:HG3	0.45	1.86	19	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD1	0.45	2.80	2	4
1:A:77:TYR:N	1:A:85:VAL:O	0.45	2.50	5	2
1:A:16:VAL:CB	1:A:146:LEU:HD13	0.45	2.36	6	1
1:A:51:TYR:CE1	1:A:64:THR:HB	0.45	2.47	10	1
1:A:132:LEU:C	1:A:132:LEU:CD2	0.45	2.88	16	4
1:A:66:PHE:CZ	1:A:68:LYS:CE	0.45	2.99	11	1
1:A:36:MET:O	1:A:51:TYR:CB	0.45	2.65	20	2
1:A:76:TYR:O	1:A:76:TYR:CD1	0.45	2.70	12	1
1:A:140:ASP:O	1:A:141:GLU:C	0.45	2.59	15	2
1:A:98:ILE:O	1:A:113:ARG:CB	0.45	2.65	10	1
1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HE2	0.45	1.89	12	1
1:A:68:LYS:CG	1:A:77:TYR:CD1	0.45	3.00	12	1
1:A:33:LYS:HB2	1:A:53:VAL:CG1	0.45	2.42	14	1
1:A:70:SER:OG	1:A:77:TYR:HB2	0.45	2.12	19	1
1:A:13:TRP:NE1	1:A:39:ILE:CG2	0.45	2.80	5	2
1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ASP:HB3	0.45	1.87	5	1
1:A:15:VAL:HG23	1:A:115:TYR:CD1	0.45	2.47	6	1
1:A:45:ASP:C	1:A:46:GLU:HG3	0.45	2.37	12	1
1:A:119:PRO:O	1:A:121:VAL:N	0.45	2.48	12	3
1:A:52:ALA:HA	1:A:62:TRP:O	0.45	2.12	14	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:47:LEU:CD2	0.45	3.00	16	1
1:A:76:TYR:CE2	1:A:86:GLU:HB2	0.44	2.48	2	1
1:A:138:TYR:O	1:A:138:TYR:CG	0.44	2.70	7	2
1:A:22:THR:OG1	1:A:23:GLU:N	0.44	2.50	11	3
1:A:8:GLU:OE2	1:A:92:TYR:CD2	0.44	2.70	9	4
1:A:8:GLU:OE2	1:A:92:TYR:CE2	0.44	2.70	7	2
1:A:39:ILE:HD12	1:A:40:SER:H	0.44	1.71	7	1
1:A:86:GLU:CD	1:A:86:GLU:C	0.44	2.85	7	1
1:A:68:LYS:CD	1:A:77:TYR:CE1	0.44	3.00	12	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:CG1	0.44	2.65	15	3
1:A:137:ASN:C	1:A:138:TYR:CD1	0.44	2.95	16	1
1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:HG23	0.44	2.37	19	1
1:A:79:GLU:OE1	1:A:83:LYS:HB3	0.44	2.12	20	1
1:A:130:ARG:HD3	1:A:130:ARG:C	0.44	2.37	1	1
1:A:13:TRP:CE2	1:A:39:ILE:CD1	0.44	3.01	2	1
1:A:130:ARG:O	1:A:134:GLY:N	0.44	2.49	5	3
1:A:95:TYR:O	1:A:95:TYR:CD1	0.44	2.70	6	1
1:A:77:TYR:HB2	1:A:85:VAL:O	0.44	2.13	9	1
1:A:66:PHE:CG	1:A:79:GLU:OE2	0.44	2.70	19	1
1:A:41:PHE:CD1	1:A:41:PHE:N	0.44	2.84	16	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:LEU:CD1	1:A:132:LEU:HD13	0.44	2.31	2	2
1:A:115:TYR:CD1	1:A:116:SER:N	0.44	2.85	5	1
1:A:51:TYR:CE1	1:A:64:THR:HG22	0.44	2.47	6	1
1:A:99:TYR:CB	1:A:112:MET:HG2	0.44	2.42	9	3
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	0.44	1.72	6	1
1:A:19:ALA:HA	1:A:143:VAL:C	0.44	2.37	8	2
1:A:69:THR:O	1:A:76:TYR:O	0.44	2.36	9	2
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:GLU:N	0.44	2.27	10	1
1:A:71:ASP:OD1	1:A:76:TYR:CD2	0.44	2.70	15	1
1:A:13:TRP:CG	1:A:115:TYR:CD1	0.44	3.05	16	1
1:A:37:ALA:HA	1:A:50:SER:O	0.44	2.13	5	3
1:A:22:THR:OG1	1:A:109:LEU:CB	0.44	2.65	18	3
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:39:ILE:CD1	0.44	3.01	8	5
1:A:51:TYR:CE1	1:A:64:THR:CG2	0.44	3.01	6	1
1:A:113:ARG:HD3	1:A:115:TYR:CZ	0.44	2.48	8	1
1:A:20:SER:HA	1:A:142:MET:HB3	0.44	1.89	20	2
1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CD1	0.44	2.80	12	1
1:A:68:LYS:CG	1:A:77:TYR:HB2	0.44	2.43	13	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:100:ALA:HB2	0.44	1.88	18	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.44	2.11	6	4
1:A:15:VAL:CG1	1:A:35:ALA:O	0.44	2.66	13	2
1:A:33:LYS:HE3	1:A:53:VAL:HG11	0.44	1.87	10	1
1:A:72:ASP:OD2	1:A:76:TYR:CE1	0.44	2.70	10	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:29:LYS:HA	0.44	1.90	13	1
1:A:30:ASP:O	1:A:32:MET:N	0.44	2.50	13	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:97:VAL:O	0.44	2.13	18	1
1:A:86:GLU:O	1:A:98:ILE:HD12	0.44	2.12	19	1
1:A:21:ASN:HD22	1:A:110:HIS:HB2	0.44	1.73	1	1
1:A:84:LYS:N	1:A:101:THR:O	0.44	2.50	5	1
1:A:18:LEU:HA	1:A:112:MET:O	0.44	2.13	6	1
1:A:93:LYS:HE2	1:A:95:TYR:CZ	0.44	2.47	18	1
1:A:34:MET:O	1:A:54:PRO:CD	0.44	2.66	3	6
1:A:102:ARG:NH1	1:A:111:MET:CE	0.44	2.81	4	1
1:A:42:LEU:N	1:A:46:GLU:O	0.44	2.50	20	3
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ARG:N	0.44	2.28	7	1
1:A:128:ILE:O	1:A:131:LYS:HB3	0.44	2.13	8	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:87:VAL:HG12	0.44	2.42	12	1
1:A:69:THR:O	1:A:77:TYR:CA	0.44	2.63	2	3
1:A:15:VAL:HG23	1:A:115:TYR:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:15:VAL:HG22	1:A:35:ALA:HB3	0.44	1.89	7	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:47:LEU:HD23	0.44	2.48	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:TYR:CD1	1:A:86:GLU:OE2	0.44	2.70	9	1
1:A:75:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	0.44	2.96	12	1
1:A:20:SER:C	1:A:21:ASN:CG	0.44	2.85	13	1
1:A:38:ARG:C	1:A:38:ARG:CD	0.44	2.90	14	1
1:A:42:LEU:HB3	1:A:46:GLU:HG2	0.44	1.88	14	1
1:A:49:VAL:O	1:A:49:VAL:HG13	0.44	2.13	18	1
1:A:59:CYS:O	1:A:60:ARG:CG	0.44	2.66	18	1
1:A:152:CYS:C	1:A:153:THR:HG23	0.44	2.38	19	1
1:A:13:TRP:O	1:A:37:ALA:O	0.44	2.36	1	1
1:A:12:LYS:HB3	1:A:12:LYS:NZ	0.44	2.28	4	3
1:A:13:TRP:CE2	1:A:39:ILE:HB	0.44	2.48	7	1
1:A:53:VAL:N	1:A:62:TRP:O	0.44	2.50	16	4
1:A:45:ASP:O	1:A:46:GLU:HG3	0.44	2.13	9	4
1:A:133:ALA:O	1:A:137:ASN:N	0.44	2.51	16	1
1:A:32:MET:HB3	1:A:154:VAL:HG11	0.44	1.88	17	1
1:A:54:PRO:HA	1:A:60:ARG:O	0.44	2.13	17	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:C	0.43	2.96	13	3
1:A:13:TRP:CG	1:A:115:TYR:CZ	0.43	3.06	5	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:39:ILE:CG2	0.43	3.01	7	1
1:A:15:VAL:HA	1:A:115:TYR:HA	0.43	1.88	11	1
1:A:42:LEU:CB	1:A:46:GLU:O	0.43	2.65	12	1
1:A:96:ALA:O	1:A:114:LEU:HD12	0.43	2.13	14	1
1:A:71:ASP:CG	1:A:76:TYR:CD2	0.43	2.96	15	1
1:A:93:LYS:CD	1:A:93:LYS:O	0.43	2.65	3	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:132:LEU:CD1	0.43	2.41	5	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:146:LEU:HB2	0.43	1.89	8	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:85:VAL:O	0.43	2.71	14	1
1:A:86:GLU:C	1:A:98:ILE:CD1	0.43	2.91	15	1
1:A:85:VAL:HG13	1:A:100:ALA:CA	0.43	2.44	7	3
1:A:95:TYR:OH	1:A:114:LEU:CD1	0.43	2.66	3	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:91:ASP:CG	0.43	2.96	4	1
1:A:53:VAL:O	1:A:62:TRP:N	0.43	2.49	4	1
1:A:147:PRO:CB	1:A:154:VAL:HG12	0.43	2.44	4	1
1:A:13:TRP:NE1	1:A:39:ILE:HG21	0.43	2.28	5	1
1:A:39:ILE:HA	1:A:49:VAL:HA	0.43	1.90	5	1
1:A:88:LEU:CD2	1:A:132:LEU:HD13	0.43	2.42	5	1
1:A:71:ASP:OD1	1:A:72:ASP:N	0.43	2.51	16	2
1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:HD3	0.43	2.28	8	1
1:A:16:VAL:HG13	1:A:17:ALA:N	0.43	2.28	10	2
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:CG	0.43	2.43	12	1
1:A:20:SER:C	1:A:21:ASN:OD1	0.43	2.61	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:HB3	1:A:136:ARG:NH1	0.43	2.28	13	1
1:A:21:ASN:HB2	1:A:110:HIS:HB2	0.43	1.91	15	1
1:A:100:ALA:HB2	1:A:113:ARG:HH12	0.43	1.73	15	1
1:A:48:LYS:C	1:A:48:LYS:CD	0.43	2.92	16	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:62:TRP:HB2	0.43	2.43	16	1
1:A:27:ARG:NE	1:A:27:ARG:HA	0.43	2.28	17	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:MET:CG	0.43	2.66	20	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:CD2	0.43	2.91	11	2
1:A:27:ARG:NH1	1:A:27:ARG:HB3	0.43	2.27	3	1
1:A:102:ARG:N	1:A:102:ARG:HD2	0.43	2.28	3	1
1:A:16:VAL:O	1:A:18:LEU:HD22	0.43	2.14	4	2
1:A:16:VAL:HA	1:A:34:MET:HE1	0.43	1.91	4	1
1:A:67:LYS:N	1:A:77:TYR:OH	0.43	2.51	5	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:91:ASP:OD1	0.43	2.71	6	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:MET:CG	0.43	2.66	10	1
1:A:60:ARG:NH2	1:A:147:PRO:HG3	0.43	2.28	10	1
1:A:82:LYS:O	1:A:82:LYS:HD3	0.43	2.14	10	1
1:A:66:PHE:HB3	1:A:77:TYR:CE2	0.43	2.48	14	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:GLU:OE2	0.43	2.71	16	1
1:A:7:SER:O	1:A:10:ALA:O	0.43	2.36	18	1
1:A:31:LYS:HE2	1:A:111:MET:HE1	0.43	1.90	5	1
1:A:42:LEU:O	1:A:44:GLU:N	0.43	2.52	12	3
1:A:66:PHE:CD2	1:A:68:LYS:NZ	0.43	2.86	7	1
1:A:131:LYS:HB3	1:A:131:LYS:NZ	0.43	2.29	3	1
1:A:143:VAL:CG1	1:A:145:MET:HE3	0.43	2.43	5	1
1:A:143:VAL:HG12	1:A:145:MET:HE3	0.43	1.90	5	1
1:A:67:LYS:O	1:A:68:LYS:CG	0.43	2.66	20	3
1:A:21:ASN:N	1:A:21:ASN:ND2	0.43	2.66	1	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:86:GLU:HB3	0.43	2.48	1	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:91:ASP:OD2	0.43	2.72	8	2
1:A:66:PHE:CE2	1:A:83:LYS:HG2	0.43	2.49	6	1
1:A:51:TYR:CD2	1:A:113:ARG:NH1	0.43	2.87	9	1
1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:CE	0.43	2.44	12	2
1:A:102:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	0.43	1.91	12	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:HB2	0.43	2.38	15	1
1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CD2	0.43	2.82	20	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:147:PRO:O	0.43	2.67	20	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:54:PRO:HG2	0.43	1.91	5	1
1:A:25:PHE:CE1	1:A:28:GLU:HB2	0.43	2.49	6	1
1:A:68:LYS:HG2	1:A:78:SER:O	0.43	2.13	6	4
1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:HD2	0.43	2.29	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:ARG:HB2	1:A:6:ARG:NH1	0.43	2.29	14	1
1:A:104:LYS:C	1:A:104:LYS:HD3	0.43	2.39	18	1
1:A:68:LYS:HE3	1:A:77:TYR:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:93:LYS:HE3	1:A:95:TYR:CE1	0.43	2.49	4	1
1:A:32:MET:O	1:A:147:PRO:HG3	0.43	2.13	9	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:91:ASP:CG	0.43	2.39	11	1
1:A:24:PHE:CZ	1:A:27:ARG:NH2	0.43	2.87	11	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:132:LEU:HD13	0.43	1.90	11	1
1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:CG2	0.43	2.91	19	1
1:A:75:VAL:HG12	1:A:76:TYR:CD2	0.43	2.49	19	1
1:A:29:LYS:NZ	1:A:29:LYS:HB3	0.43	2.29	11	2
1:A:68:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CE1	0.43	2.49	4	1
1:A:133:ALA:HB3	1:A:139:THR:HG22	0.43	1.90	4	1
1:A:16:VAL:HA	1:A:146:LEU:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:112:MET:O	0.43	2.66	6	1
1:A:61:LYS:NZ	1:A:61:LYS:HB2	0.43	2.29	8	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:144:ALA:O	0.43	2.13	16	2
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:39:ILE:HB	0.43	2.49	11	1
1:A:132:LEU:HD22	1:A:132:LEU:C	0.43	2.38	13	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:98:ILE:HG13	0.43	1.89	15	1
1:A:31:LYS:C	1:A:32:MET:HG3	0.43	2.39	20	1
1:A:8:GLU:CD	1:A:92:TYR:CD2	0.42	2.97	1	1
1:A:18:LEU:O	1:A:144:ALA:C	0.42	2.62	1	1
1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:HD3	0.42	2.29	1	1
1:A:104:LYS:C	1:A:105:ASP:OD1	0.42	2.62	1	1
1:A:20:SER:OG	1:A:27:ARG:NH2	0.42	2.52	2	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:48:LYS:H	0.42	1.74	10	1
1:A:24:PHE:CE1	1:A:107:ARG:CZ	0.42	3.02	16	1
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:CD	0.42	2.62	20	1
1:A:67:LYS:HB3	1:A:67:LYS:NZ	0.42	2.29	20	2
1:A:113:ARG:CZ	1:A:115:TYR:OH	0.42	2.68	4	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:112:MET:O	0.42	2.14	6	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:GLU:OE1	0.42	2.72	8	1
1:A:68:LYS:HB2	1:A:77:TYR:CZ	0.42	2.49	10	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:92:TYR:CD1	0.42	2.49	12	1
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:CD1	0.42	2.92	18	2
1:A:84:LYS:C	1:A:85:VAL:CG2	0.42	2.92	15	1
1:A:130:ARG:O	1:A:139:THR:CG2	0.42	2.68	17	1
1:A:147:PRO:O	1:A:154:VAL:CG1	0.42	2.67	19	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:79:GLU:OE2	0.42	2.72	20	1
1:A:75:VAL:HB	1:A:87:VAL:HB	0.42	1.89	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LYS:N	1:A:147:PRO:HG3	0.42	2.29	1	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:112:MET:SD	0.42	3.13	14	2
1:A:98:ILE:HG23	1:A:98:ILE:O	0.42	2.13	3	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:77:TYR:CD2	0.42	3.06	9	2
1:A:8:GLU:OE1	1:A:92:TYR:CD2	0.42	2.72	16	2
1:A:87:VAL:N	1:A:98:ILE:HD13	0.42	2.30	13	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:126:THR:HG23	0.42	1.91	15	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:79:GLU:OE1	0.42	2.73	16	1
1:A:6:ARG:NE	1:A:6:ARG:HA	0.42	2.28	17	1
1:A:86:GLU:O	1:A:88:LEU:CD1	0.42	2.67	17	1
1:A:94:SER:O	1:A:117:ARG:HD3	0.42	2.14	1	1
1:A:136:ARG:O	1:A:137:ASN:O	0.42	2.38	5	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:63:GLU:OE2	0.42	2.66	6	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:CD1	0.42	2.98	15	2
1:A:27:ARG:CZ	1:A:111:MET:CE	0.42	2.98	9	1
1:A:48:LYS:HG3	1:A:65:THR:HG23	0.42	1.91	10	1
1:A:84:LYS:O	1:A:101:THR:N	0.42	2.49	14	1
1:A:90:THR:CG2	1:A:93:LYS:HB3	0.42	2.45	15	1
1:A:103:VAL:O	1:A:103:VAL:HG13	0.42	2.14	15	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:146:LEU:CG	0.42	2.97	20	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:92:TYR:CE2	0.42	2.49	8	1
1:A:66:PHE:CE2	1:A:68:LYS:CE	0.42	3.01	11	1
1:A:17:ALA:O	1:A:114:LEU:N	0.42	2.52	20	2
1:A:84:LYS:HB2	1:A:101:THR:O	0.42	2.14	15	1
1:A:76:TYR:CD2	1:A:86:GLU:CG	0.42	3.02	18	1
1:A:43:GLY:O	1:A:44:GLU:CG	0.42	2.68	7	4
1:A:42:LEU:HD11	1:A:48:LYS:HB3	0.42	1.92	2	1
1:A:70:SER:CB	1:A:75:VAL:HG13	0.42	2.45	2	1
1:A:82:LYS:CA	1:A:103:VAL:O	0.42	2.68	15	4
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:CG2	0.42	2.67	6	2
1:A:61:LYS:HB3	1:A:61:LYS:NZ	0.42	2.28	13	2
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:HG13	0.42	2.15	5	1
1:A:13:TRP:CH2	1:A:91:ASP:OD2	0.42	2.72	8	1
1:A:27:ARG:O	1:A:31:LYS:N	0.42	2.52	14	1
1:A:36:MET:O	1:A:51:TYR:HB2	0.42	2.13	18	2
1:A:66:PHE:CD2	1:A:79:GLU:OE1	0.42	2.73	15	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:47:LEU:CD1	0.42	3.03	19	1
1:A:147:PRO:HB2	1:A:153:THR:CB	0.42	2.44	19	1
1:A:21:ASN:ND2	1:A:141:GLU:C	0.42	2.77	7	2
1:A:68:LYS:HD3	1:A:77:TYR:CE1	0.42	2.49	12	1
1:A:91:ASP:O	1:A:92:TYR:CB	0.42	2.67	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:ARG:NH1	1:A:139:THR:OG1	0.42	2.53	14	1
1:A:32:MET:C	1:A:33:LYS:HD2	0.42	2.40	16	2
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:HG3	0.42	2.15	18	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:67:LYS:HG3	0.42	1.91	19	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:79:GLU:OE2	0.42	2.73	20	1
1:A:18:LEU:C	1:A:144:ALA:O	0.42	2.63	4	1
1:A:35:ALA:N	1:A:146:LEU:HD11	0.42	2.30	5	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:CG1	0.42	2.68	5	1
1:A:19:ALA:HB2	1:A:129:PHE:HZ	0.42	1.74	6	1
1:A:19:ALA:HB3	1:A:112:MET:CE	0.42	2.40	11	1
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD13	0.42	1.74	12	1
1:A:104:LYS:C	1:A:104:LYS:CD	0.42	2.93	18	1
1:A:136:ARG:NH1	1:A:142:MET:HE2	0.42	2.29	18	1
1:A:68:LYS:HG2	1:A:69:THR:N	0.42	2.30	19	1
1:A:68:LYS:HG3	1:A:79:GLU:HG2	0.42	1.90	20	1
1:A:68:LYS:N	1:A:77:TYR:OH	0.42	2.53	20	1
1:A:18:LEU:O	1:A:144:ALA:CA	0.42	2.68	1	1
1:A:68:LYS:HG2	1:A:79:GLU:HA	0.42	1.90	5	3
1:A:75:VAL:CG2	1:A:87:VAL:HB	0.42	2.43	8	1
1:A:38:ARG:N	1:A:50:SER:O	0.42	2.52	9	1
1:A:82:LYS:O	1:A:103:VAL:HB	0.42	2.15	9	1
1:A:136:ARG:N	1:A:136:ARG:CD	0.42	2.83	9	1
1:A:32:MET:HE1	1:A:62:TRP:CD2	0.42	2.50	12	1
1:A:20:SER:HB2	1:A:111:MET:CA	0.42	2.44	19	1
1:A:68:LYS:HG2	1:A:77:TYR:CD1	0.42	2.50	2	1
1:A:84:LYS:HB2	1:A:84:LYS:NZ	0.42	2.30	3	1
1:A:89:ASP:OD1	1:A:90:THR:N	0.42	2.53	6	4
1:A:32:MET:SD	1:A:144:ALA:CB	0.42	3.07	6	1
1:A:128:ILE:HA	1:A:131:LYS:HB3	0.42	1.91	8	1
1:A:48:LYS:HB3	1:A:48:LYS:NZ	0.42	2.30	10	1
1:A:91:ASP:HB2	1:A:95:TYR:CE1	0.42	2.50	14	1
1:A:34:MET:O	1:A:53:VAL:CA	0.42	2.67	16	1
1:A:90:THR:CG2	1:A:93:LYS:HD3	0.41	2.45	2	2
1:A:95:TYR:CE2	1:A:97:VAL:CG1	0.41	3.03	3	1
1:A:34:MET:HG3	1:A:147:PRO:CG	0.41	2.45	4	1
1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:HD3	0.41	2.30	6	1
1:A:129:PHE:O	1:A:132:LEU:HG	0.41	2.15	6	1
1:A:81:ALA:C	1:A:103:VAL:HG13	0.41	2.40	7	1
1:A:74:GLU:O	1:A:92:TYR:OH	0.41	2.38	10	1
1:A:8:GLU:OE2	1:A:92:TYR:CZ	0.41	2.73	14	1
1:A:84:LYS:NZ	1:A:84:LYS:HB3	0.41	2.29	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:GLU:HB2	1:A:83:LYS:O	0.41	2.15	20	1
1:A:79:GLU:C	1:A:83:LYS:O	0.41	2.63	1	1
1:A:33:LYS:CE	1:A:111:MET:HE1	0.41	2.45	6	1
1:A:82:LYS:O	1:A:102:ARG:CB	0.41	2.68	6	1
1:A:77:TYR:CD1	1:A:77:TYR:O	0.41	2.74	7	3
1:A:13:TRP:HE3	1:A:115:TYR:CD2	0.41	2.32	11	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HG12	0.41	1.87	14	1
1:A:113:ARG:HD2	1:A:115:TYR:CE1	0.41	2.50	15	1
1:A:16:VAL:CB	1:A:146:LEU:HD22	0.41	2.44	17	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:129:PHE:CD2	0.41	2.50	19	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:129:PHE:HB2	0.41	2.44	2	1
1:A:102:ARG:CZ	1:A:111:MET:CE	0.41	2.98	2	1
1:A:99:TYR:CB	1:A:112:MET:HA	0.41	2.45	5	1
1:A:100:ALA:CB	1:A:111:MET:HE3	0.41	2.44	11	1
1:A:34:MET:HB2	1:A:147:PRO:HG3	0.41	1.92	13	1
1:A:100:ALA:O	1:A:111:MET:O	0.41	2.38	13	1
1:A:95:TYR:CE1	1:A:125:ALA:HB2	0.41	2.49	16	1
1:A:145:MET:C	1:A:147:PRO:HD3	0.41	2.40	16	1
1:A:85:VAL:HA	1:A:100:ALA:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:71:ASP:HB2	1:A:75:VAL:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:136:ARG:O	1:A:137:ASN:HB2	0.41	2.15	20	1
1:A:23:GLU:O	1:A:28:GLU:N	0.41	2.51	3	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:53:VAL:CG2	0.41	3.03	4	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:78:SER:OG	0.41	2.73	5	1
1:A:145:MET:CB	1:A:154:VAL:HG22	0.41	2.27	5	1
1:A:93:LYS:HB2	1:A:93:LYS:NZ	0.41	2.30	7	1
1:A:21:ASN:OD1	1:A:140:ASP:O	0.41	2.38	8	1
1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:HD2	0.41	2.30	10	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:121:VAL:O	0.41	2.15	12	1
1:A:8:GLU:OE2	1:A:92:TYR:CE1	0.41	2.73	14	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:91:ASP:O	0.41	2.15	15	1
1:A:83:LYS:HB2	1:A:83:LYS:NZ	0.41	2.30	15	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:117:ARG:NH2	0.41	2.88	18	1
1:A:71:ASP:OD2	1:A:76:TYR:CZ	0.41	2.74	19	1
1:A:91:ASP:OD1	1:A:92:TYR:CD1	0.41	2.74	20	1
1:A:89:ASP:OD1	1:A:128:ILE:HD12	0.41	2.15	2	1
1:A:69:THR:O	1:A:77:TYR:CD1	0.41	2.73	3	2
1:A:16:VAL:HA	1:A:34:MET:CE	0.41	2.46	4	1
1:A:88:LEU:CD2	1:A:89:ASP:N	0.41	2.79	4	1
1:A:120:GLU:O	1:A:120:GLU:HG3	0.41	2.14	9	1
1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CD	0.41	2.83	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:CD1	1:A:113:ARG:HA	0.41	2.46	12	1
1:A:13:TRP:CH2	1:A:39:ILE:CD1	0.41	3.03	15	1
1:A:146:LEU:N	1:A:147:PRO:HD3	0.41	2.31	16	1
1:A:91:ASP:HB3	1:A:96:ALA:CB	0.41	2.45	18	1
1:A:48:LYS:CB	1:A:66:PHE:O	0.41	2.69	19	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:H	0.41	2.27	2	1
1:A:27:ARG:NH1	1:A:31:LYS:CE	0.41	2.83	3	1
1:A:32:MET:CG	1:A:154:VAL:HG11	0.41	2.45	6	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:91:ASP:O	0.41	2.15	7	1
1:A:117:ARG:N	1:A:117:ARG:HD2	0.41	2.29	7	1
1:A:76:TYR:CE2	1:A:86:GLU:OE1	0.41	2.74	10	1
1:A:22:THR:CG2	1:A:27:ARG:NH2	0.41	2.84	14	1
1:A:81:ALA:HA	1:A:103:VAL:CG2	0.41	2.46	14	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:144:ALA:O	0.41	2.16	15	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:98:ILE:HG13	0.41	2.45	15	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:113:ARG:HA	0.41	1.92	20	1
1:A:51:TYR:CZ	1:A:66:PHE:HB2	0.41	2.51	20	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:103:VAL:HB	0.41	1.91	1	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:132:LEU:HD13	0.41	1.93	1	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:MET:O	0.41	2.38	2	1
1:A:27:ARG:NH1	1:A:109:LEU:HD11	0.41	2.30	4	1
1:A:67:LYS:CA	1:A:77:TYR:OH	0.41	2.69	5	1
1:A:70:SER:OG	1:A:75:VAL:HG23	0.41	2.15	6	1
1:A:77:TYR:CB	1:A:85:VAL:CG2	0.41	2.99	9	1
1:A:59:CYS:C	1:A:60:ARG:HD3	0.41	2.41	10	1
1:A:84:LYS:N	1:A:103:VAL:HG12	0.41	2.31	10	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:142:MET:CE	0.41	2.99	13	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD13	0.41	1.90	15	1
1:A:102:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HB3	0.41	1.91	15	1
1:A:13:TRP:CZ2	1:A:115:TYR:CZ	0.41	3.09	19	1
1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:NZ	0.41	2.30	2	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:47:LEU:HD21	0.41	2.51	2	1
1:A:120:GLU:HG2	1:A:120:GLU:O	0.41	2.15	2	2
1:A:87:VAL:CG2	1:A:98:ILE:HB	0.41	2.44	4	1
1:A:21:ASN:C	1:A:22:THR:HG23	0.41	2.41	7	1
1:A:86:GLU:OE1	1:A:88:LEU:CD2	0.41	2.69	7	1
1:A:19:ALA:HA	1:A:143:VAL:HA	0.41	1.91	14	2
1:A:21:ASN:OD1	1:A:142:MET:CG	0.41	2.69	15	1
1:A:146:LEU:O	1:A:146:LEU:CD2	0.41	2.68	18	1
1:A:152:CYS:O	1:A:153:THR:HG23	0.41	2.15	19	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:78:SER:HB3	0.41	2.45	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:LYS:HB2	1:A:65:THR:HG23	0.41	1.92	3	1
1:A:86:GLU:O	1:A:86:GLU:OE1	0.41	2.39	4	1
1:A:128:ILE:HG23	1:A:131:LYS:HE2	0.41	1.93	4	1
1:A:82:LYS:H	1:A:82:LYS:CD	0.41	2.28	6	1
1:A:140:ASP:C	1:A:142:MET:N	0.41	2.79	8	2
1:A:22:THR:O	1:A:23:GLU:CG	0.41	2.69	9	1
1:A:61:LYS:HB2	1:A:61:LYS:NZ	0.41	2.31	11	1
1:A:138:TYR:CD2	1:A:140:ASP:HB3	0.41	2.49	11	1
1:A:67:LYS:CB	1:A:67:LYS:NZ	0.41	2.84	15	1
1:A:74:GLU:O	1:A:75:VAL:HG23	0.41	2.15	15	1
1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:NZ	0.41	2.31	16	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:91:ASP:O	0.41	2.68	17	1
1:A:22:THR:HG21	1:A:31:LYS:NZ	0.41	2.31	17	1
1:A:34:MET:HB3	1:A:54:PRO:HD2	0.41	1.93	17	1
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ASP:C	0.41	2.64	17	1
1:A:43:GLY:O	1:A:46:GLU:OE2	0.41	2.38	19	1
1:A:20:SER:CB	1:A:111:MET:HG2	0.41	2.46	2	1
1:A:75:VAL:C	1:A:76:TYR:CD1	0.41	2.99	2	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:91:ASP:OD2	0.41	2.69	6	1
1:A:7:SER:O	1:A:8:GLU:C	0.41	2.64	7	2
1:A:80:GLU:OE1	1:A:80:GLU:C	0.41	2.64	7	1
1:A:82:LYS:HB3	1:A:83:LYS:HD3	0.41	1.91	10	1
1:A:32:MET:N	1:A:32:MET:SD	0.41	2.94	13	1
1:A:17:ALA:HB3	1:A:114:LEU:CD2	0.41	2.45	14	1
1:A:146:LEU:N	1:A:147:PRO:HD2	0.41	2.30	18	1
1:A:107:ARG:HH12	1:A:109:LEU:HD21	0.41	1.76	20	1
1:A:6:ARG:N	1:A:6:ARG:HD3	0.40	2.31	3	1
1:A:13:TRP:CD1	1:A:13:TRP:N	0.40	2.89	5	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:39:ILE:CD1	0.40	2.95	6	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:86:GLU:CD	0.40	3.00	9	1
1:A:98:ILE:CG2	1:A:115:TYR:CE2	0.40	3.04	18	1
1:A:33:LYS:CG	1:A:53:VAL:CG1	0.40	2.98	2	1
1:A:68:LYS:CG	1:A:79:GLU:HB2	0.40	2.46	3	1
1:A:8:GLU:HB2	1:A:92:TYR:CD2	0.40	2.51	4	1
1:A:27:ARG:HH12	1:A:109:LEU:HD11	0.40	1.75	4	1
1:A:79:GLU:HG2	1:A:80:GLU:N	0.40	2.31	9	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:14:TYR:N	0.40	2.89	10	1
1:A:24:PHE:CD2	1:A:27:ARG:NH2	0.40	2.89	11	1
1:A:102:ARG:O	1:A:109:LEU:CD2	0.40	2.69	12	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:92:TYR:CD1	0.40	2.74	13	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:132:LEU:CD1	0.40	2.43	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LYS:HG2	1:A:83:LYS:CE	0.40	2.46	15	1
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:CD2	0.40	2.84	15	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:N	0.40	2.31	18	1
1:A:81:ALA:O	1:A:103:VAL:CG1	0.40	2.69	19	1
1:A:43:GLY:O	1:A:44:GLU:HG2	0.40	2.15	7	1
1:A:82:LYS:CD	1:A:82:LYS:C	0.40	2.94	10	1
1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:HD2	0.40	2.30	11	1
1:A:27:ARG:CD	1:A:31:LYS:NZ	0.40	2.85	13	1
1:A:35:ALA:HA	1:A:54:PRO:HD2	0.40	1.93	13	1
1:A:21:ASN:OD1	1:A:142:MET:HE3	0.40	2.17	14	1
1:A:45:ASP:O	1:A:45:ASP:OD1	0.40	2.39	17	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:62:TRP:HB3	0.40	2.46	18	1
1:A:69:THR:O	1:A:77:TYR:HB2	0.40	2.16	18	1
1:A:79:GLU:HB2	1:A:83:LYS:C	0.40	2.41	20	1
1:A:99:TYR:OH	1:A:110:HIS:ND1	0.40	2.54	1	1
1:A:29:LYS:C	1:A:32:MET:HE3	0.40	2.38	4	1
1:A:34:MET:HA	1:A:146:LEU:HD21	0.40	1.93	5	1
1:A:30:ASP:O	1:A:154:VAL:HG12	0.40	2.15	6	1
1:A:80:GLU:OE1	1:A:82:LYS:HB2	0.40	2.17	7	1
1:A:24:PHE:CD1	1:A:24:PHE:C	0.40	2.99	10	1
1:A:36:MET:O	1:A:52:ALA:N	0.40	2.52	10	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:92:TYR:CG	0.40	2.74	13	1
1:A:94:SER:O	1:A:117:ARG:N	0.40	2.53	14	1
1:A:22:THR:O	1:A:23:GLU:O	0.40	2.39	15	1
1:A:93:LYS:O	1:A:94:SER:CB	0.40	2.69	17	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:88:LEU:HA	0.40	2.47	19	1
1:A:120:GLU:HG3	1:A:120:GLU:O	0.40	2.16	19	1
1:A:13:TRP:NE1	1:A:115:TYR:CZ	0.40	2.90	2	1
1:A:102:ARG:N	1:A:102:ARG:CD	0.40	2.84	3	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:53:VAL:HG23	0.40	2.52	4	1
1:A:6:ARG:NH1	1:A:6:ARG:CB	0.40	2.85	6	1
1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CD	0.40	2.85	8	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:35:ALA:C	0.40	2.95	13	1
1:A:99:TYR:CZ	1:A:101:THR:HG22	0.40	2.51	13	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:95:TYR:CE2	0.40	2.74	14	1
1:A:104:LYS:HD3	1:A:105:ASP:N	0.40	2.32	15	1
1:A:74:GLU:OE2	1:A:88:LEU:C	0.40	2.65	19	1
1:A:88:LEU:CD2	1:A:97:VAL:HG23	0.40	2.47	19	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	142/157 (90%)	109±4 (77±3%)	21±4 (15±2%)	12±3 (8±2%)	1	13
All	All	2840/3140 (90%)	2180 (77%)	429 (15%)	231 (8%)	1	13

All 35 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	137	ASN	19
1	A	22	THR	14
1	A	80	GLU	13
1	A	94	SER	13
1	A	43	GLY	13
1	A	81	ALA	13
1	A	68	LYS	10
1	A	45	ASP	10
1	A	32	MET	9
1	A	138	TYR	9
1	A	73	GLY	8
1	A	31	LYS	8
1	A	60	ARG	7
1	A	72	ASP	7
1	A	120	GLU	7
1	A	82	LYS	6
1	A	152	CYS	6
1	A	141	GLU	6
1	A	5	ASP	6
1	A	105	ASP	5
1	A	147	PRO	4
1	A	59	CYS	4
1	A	146	LEU	4
1	A	23	GLU	4
1	A	16	VAL	4
1	A	44	GLU	4
1	A	20	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	90	THR	3
1	A	21	ASN	3
1	A	153	THR	2
1	A	154	VAL	2
1	A	89	ASP	1
1	A	93	LYS	1
1	A	54	PRO	1
1	A	75	VAL	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	123/137 (90%)	113±2 (92±2%)	10±2 (8±2%)	12	59
All	All	2460/2740 (90%)	2252 (92%)	208 (8%)	12	59

All 58 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	48	LYS	12
1	A	98	ILE	12
1	A	15	VAL	11
1	A	117	ARG	10
1	A	93	LYS	9
1	A	67	LYS	8
1	A	18	LEU	8
1	A	75	VAL	8
1	A	109	LEU	7
1	A	33	LYS	7
1	A	77	TYR	7
1	A	21	ASN	5
1	A	79	GLU	5
1	A	12	LYS	5
1	A	138	TYR	5
1	A	61	LYS	5
1	A	83	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	TYR	5
1	A	16	VAL	4
1	A	85	VAL	4
1	A	29	LYS	3
1	A	88	LEU	3
1	A	82	LYS	3
1	A	80	GLU	3
1	A	92	TYR	3
1	A	107	ARG	3
1	A	31	LYS	3
1	A	47	LEU	3
1	A	41	PHE	3
1	A	39	ILE	2
1	A	68	LYS	2
1	A	115	TYR	2
1	A	84	LYS	2
1	A	97	VAL	2
1	A	114	LEU	2
1	A	132	LEU	2
1	A	95	TYR	2
1	A	6	ARG	2
1	A	42	LEU	2
1	A	139	THR	1
1	A	112	MET	1
1	A	131	LYS	1
1	A	60	ARG	1
1	A	90	THR	1
1	A	111	MET	1
1	A	145	MET	1
1	A	32	MET	1
1	A	26	LEU	1
1	A	46	GLU	1
1	A	71	ASP	1
1	A	76	TYR	1
1	A	87	VAL	1
1	A	38	ARG	1
1	A	135	GLU	1
1	A	143	VAL	1
1	A	154	VAL	1
1	A	104	LYS	1
1	A	70	SER	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides 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