



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 08:58 PM BST

PDB ID : 2HHI  
Title : The solution structure of antigen MPT64 from Mycobacterium tuberculosis defines a novel class of beta-grasp proteins  
Authors : Wang, Z.; Potter, B.M.; Gray, A.M.; Sacksteder, K.A.; Geisbrecht, B.V.; Laity, J.H.  
Deposited on : 2006-06-28

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

---

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

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

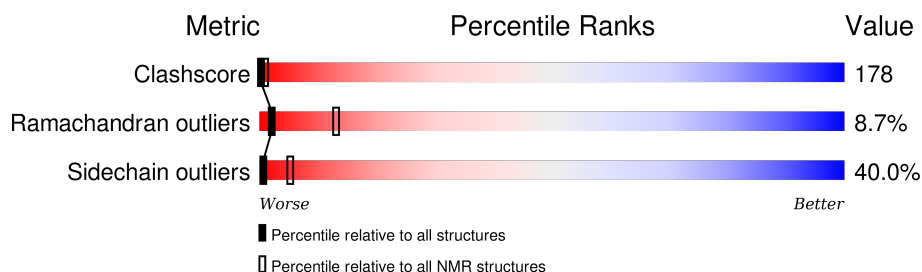
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	204	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 24 models. Model 16 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:3-A:35, A:40-A:162, A:169-A:206 (194)	0.15	16

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 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	4, 6, 9, 11, 14, 16, 19, 22, 23
2	1, 2, 3, 7, 12, 13, 20, 21, 24
3	10, 18
4	8, 17
Single-model clusters	5; 15

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3106 atoms, of which 1527 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Immunogenic protein MPT64.

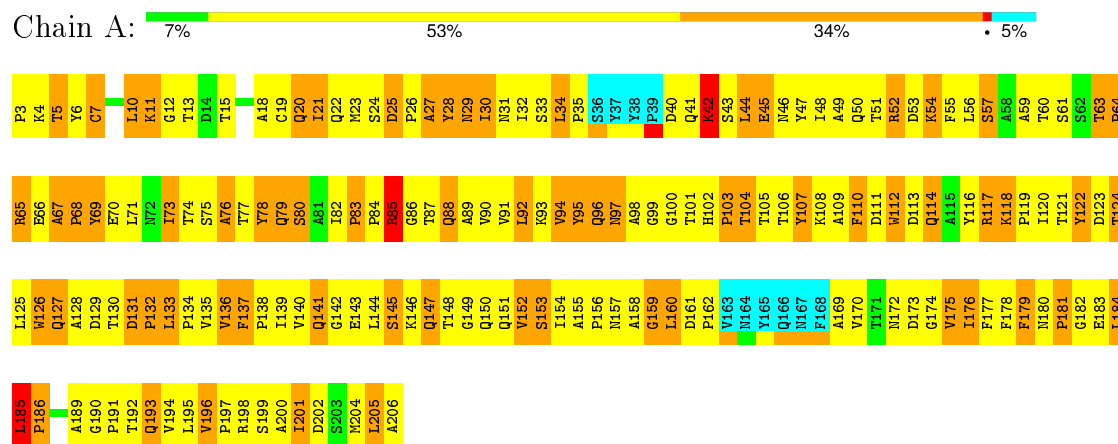
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	204	Total	C	H	N	O	S	0
			3106	1003	1527	257	315	4	

## 4 Residue-property plots

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

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

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

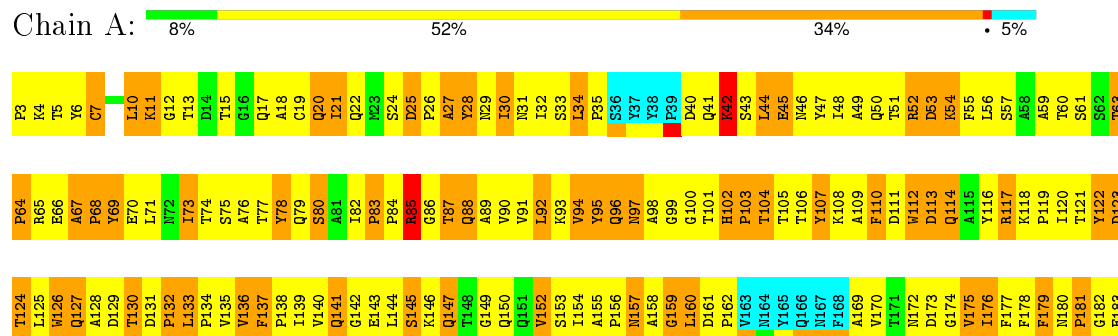


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

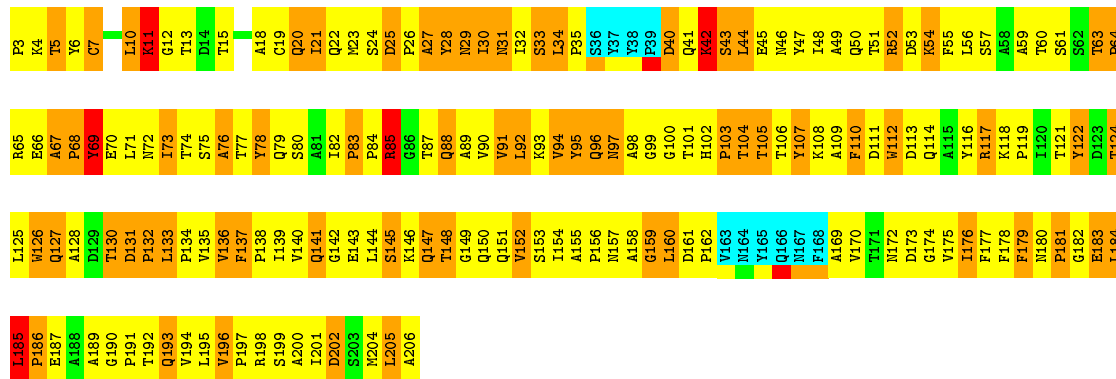




#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

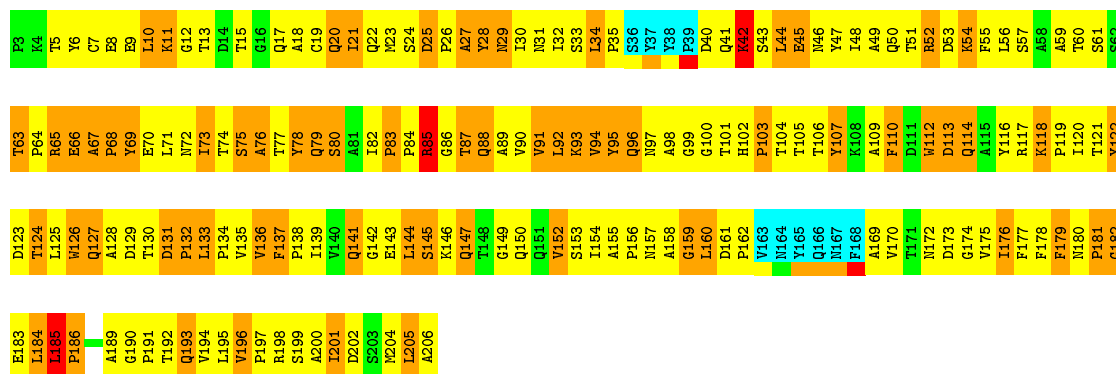
Chain A: 8% 52% 33% 5%



#### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

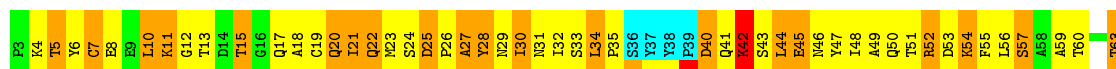
Chain A: 8% 52% 33% 5%

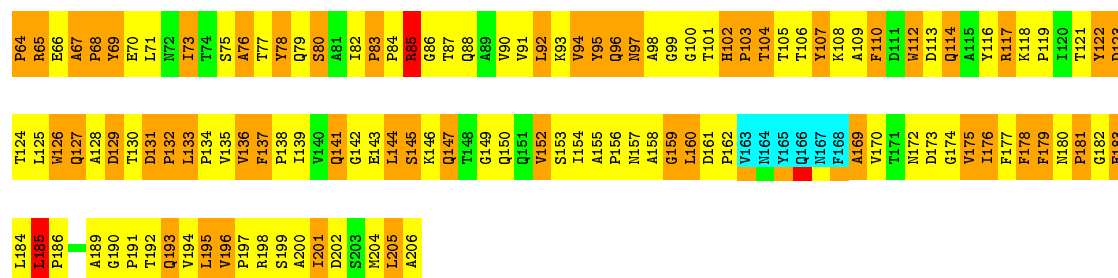


#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

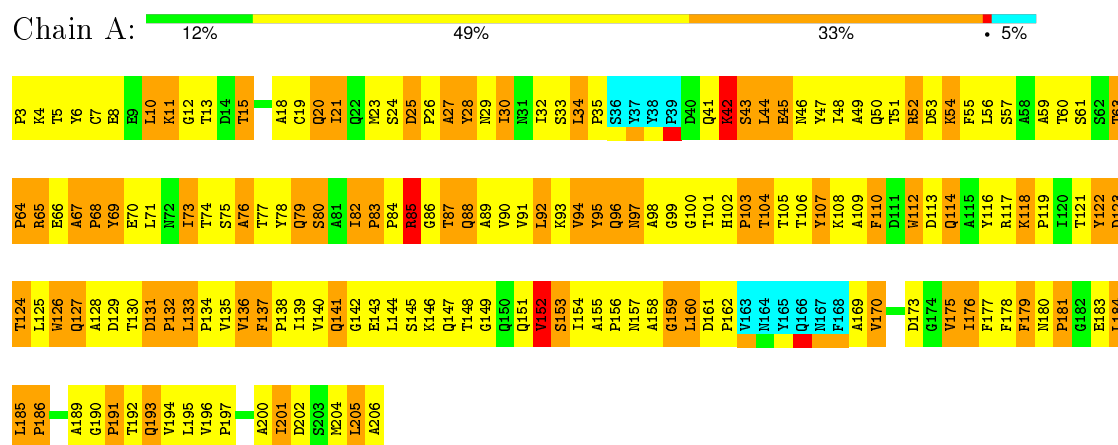
Chain A: 10% 48% 35% 5%





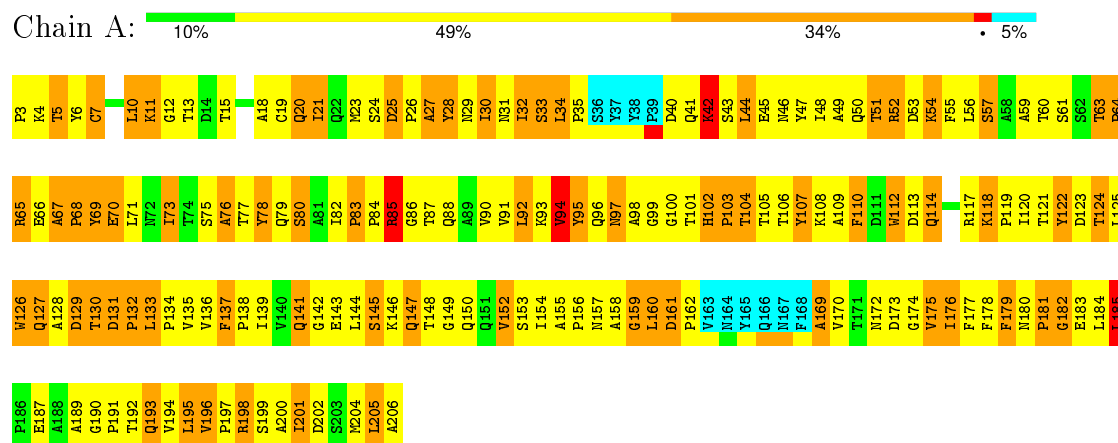
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



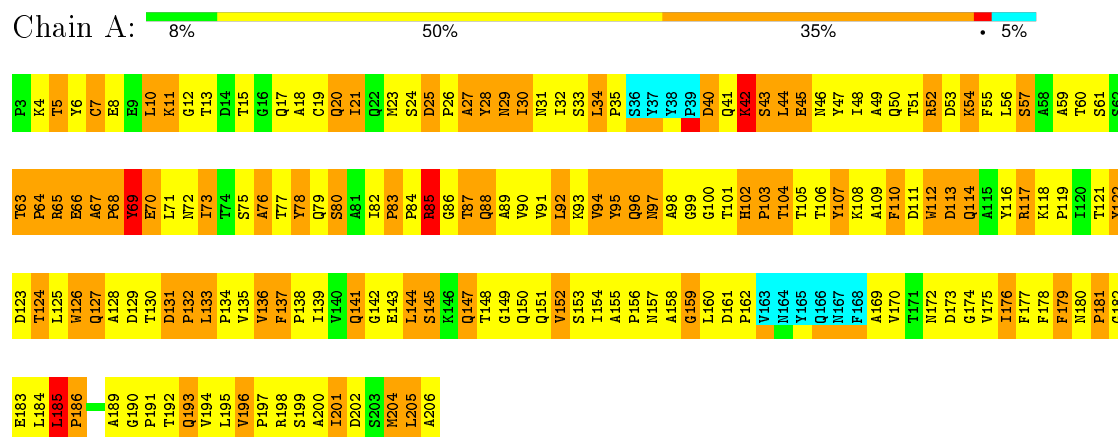
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



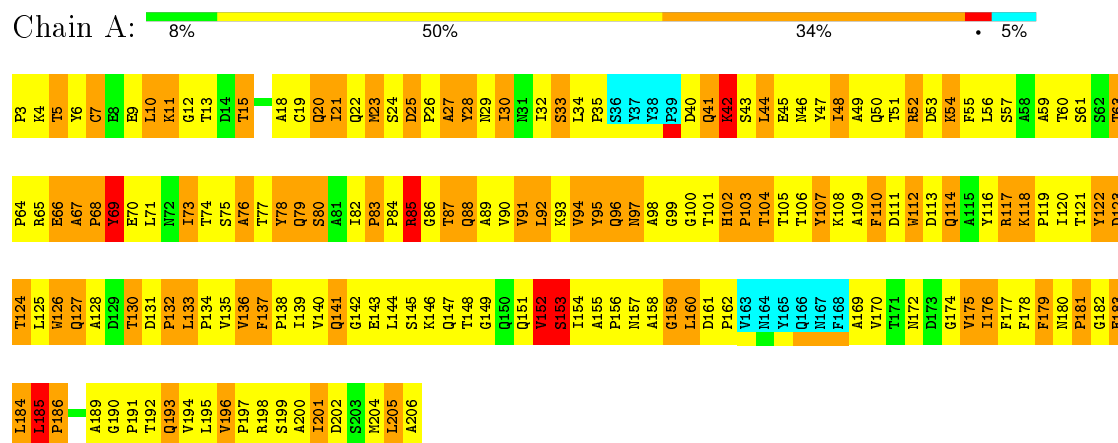
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



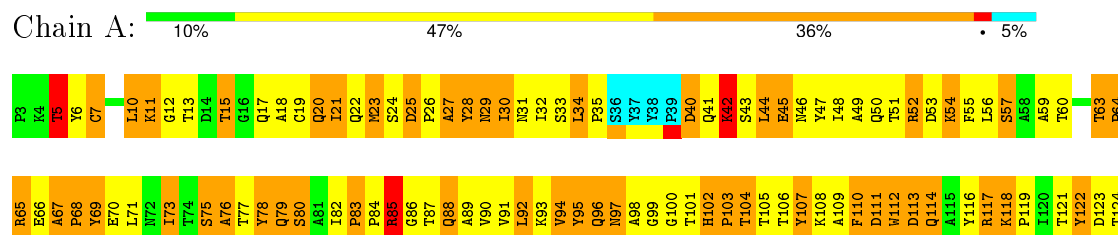
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

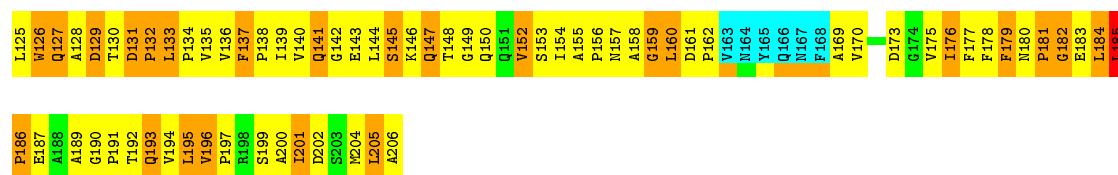


### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



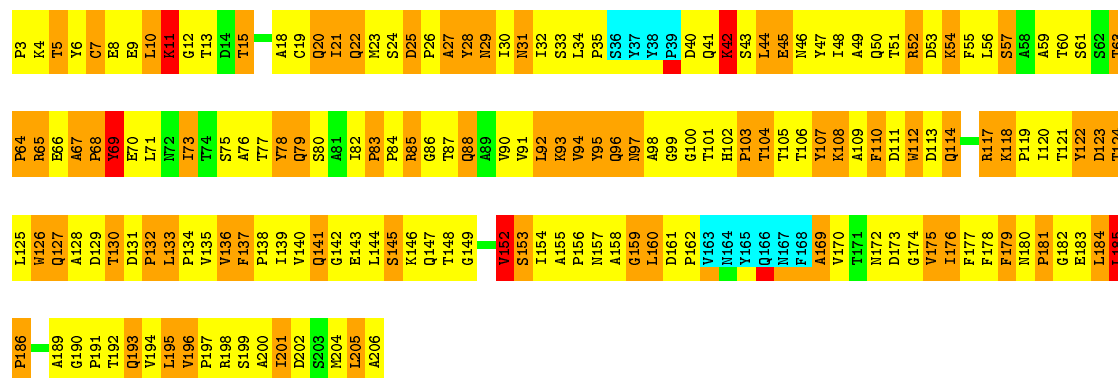




#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

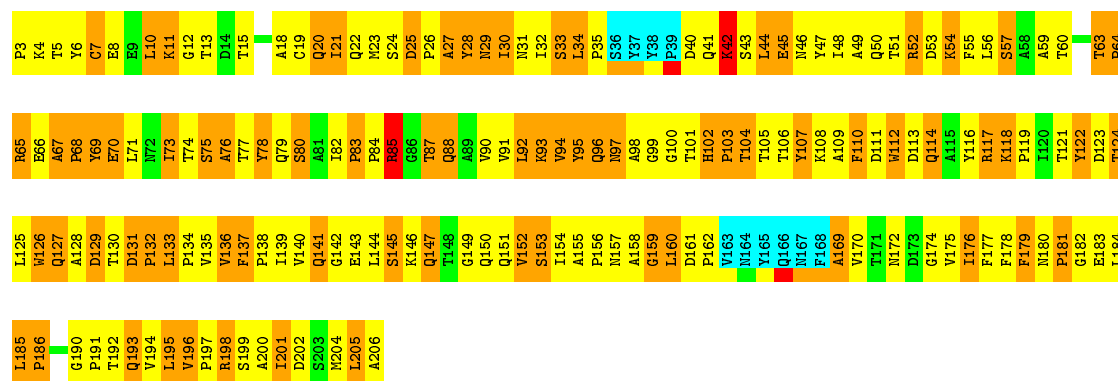
Chain A: 8% 50% 34% 5%



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

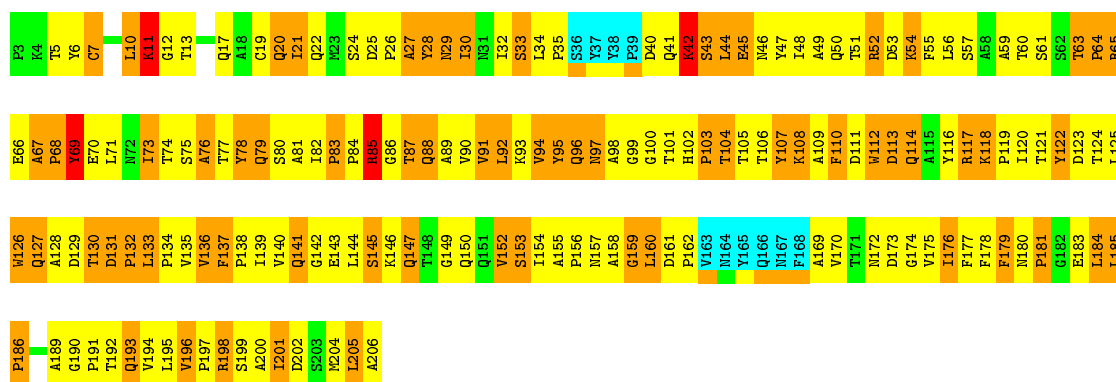
Chain A: 10% 47% 37% 5%



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

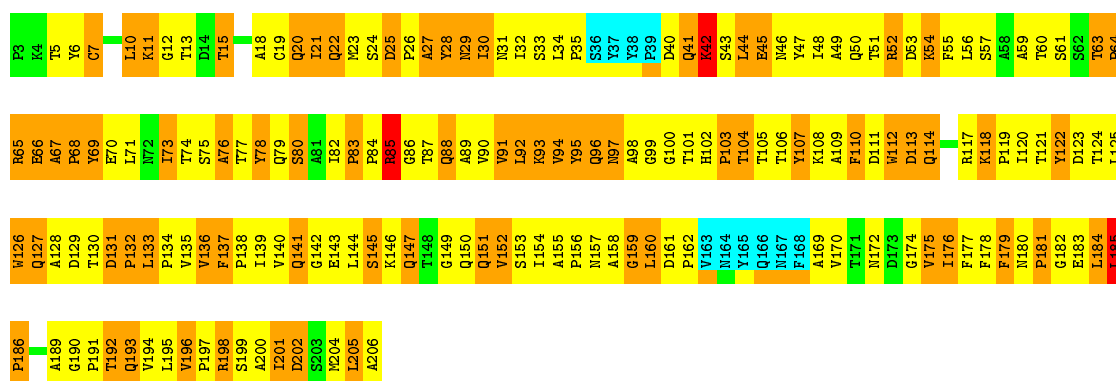
Chain A: 10% 49% 34% 5%



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

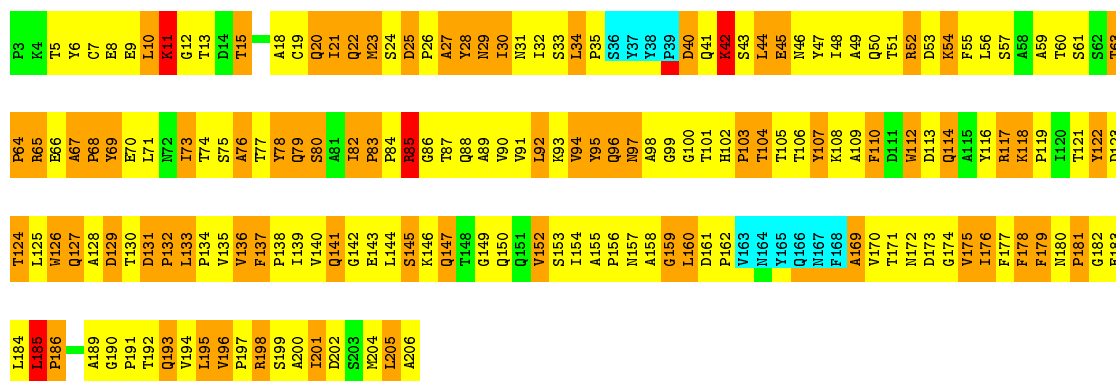
Chain A: 9% 49% 36% 5%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

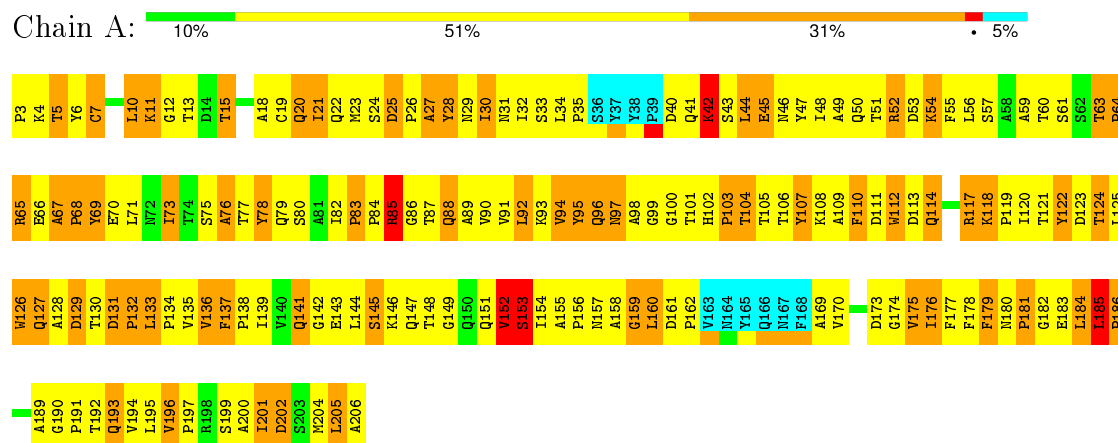
- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

Chain A: 8% 50% 35% 5%



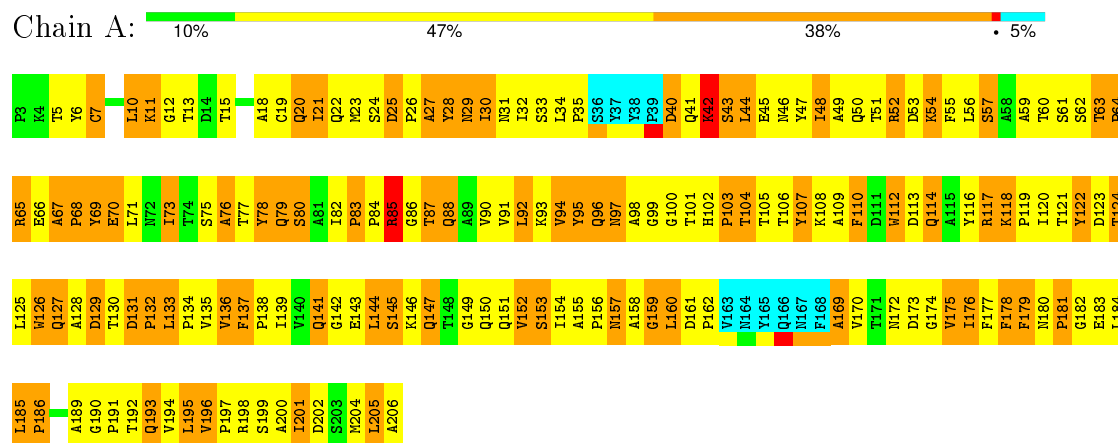
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



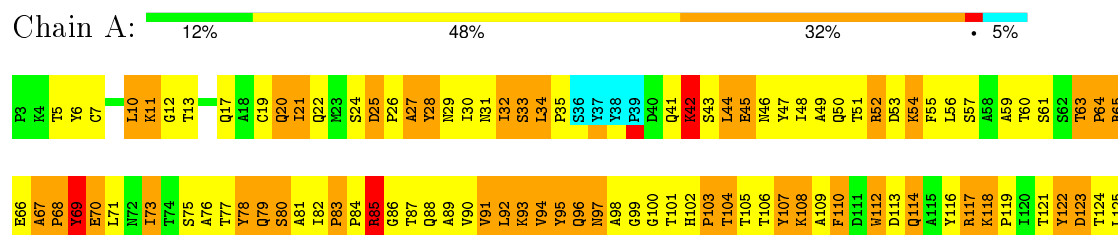
### 4.2.16 Score per residue for model 16 (medoid)

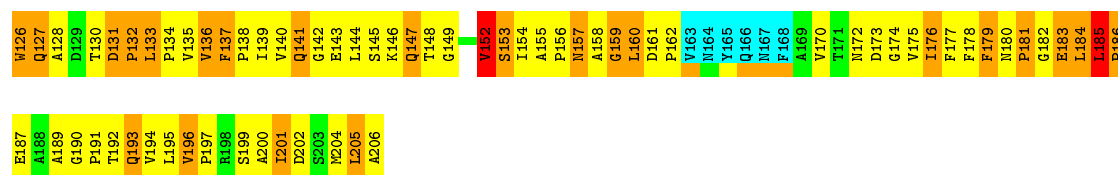
- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

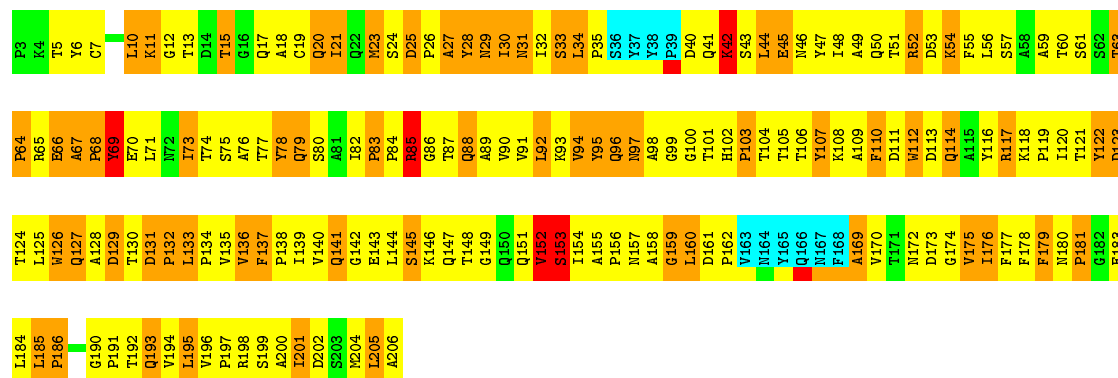




#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

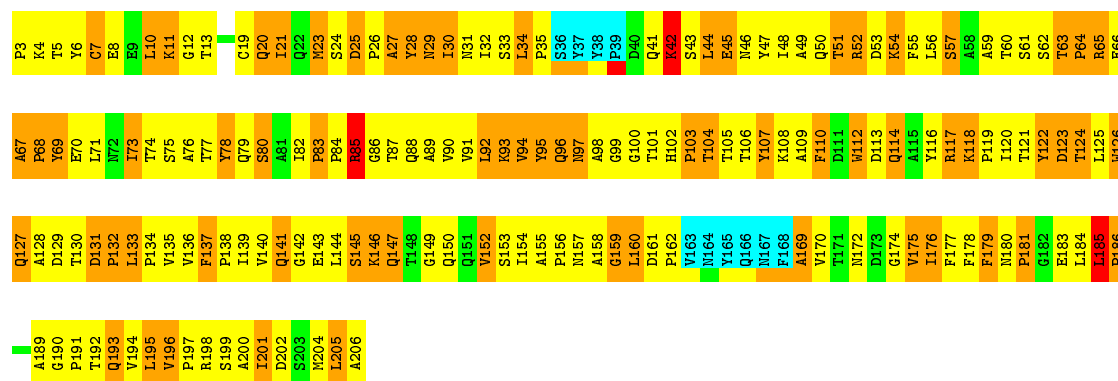
Chain A: 9% 52% 31% 5%



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

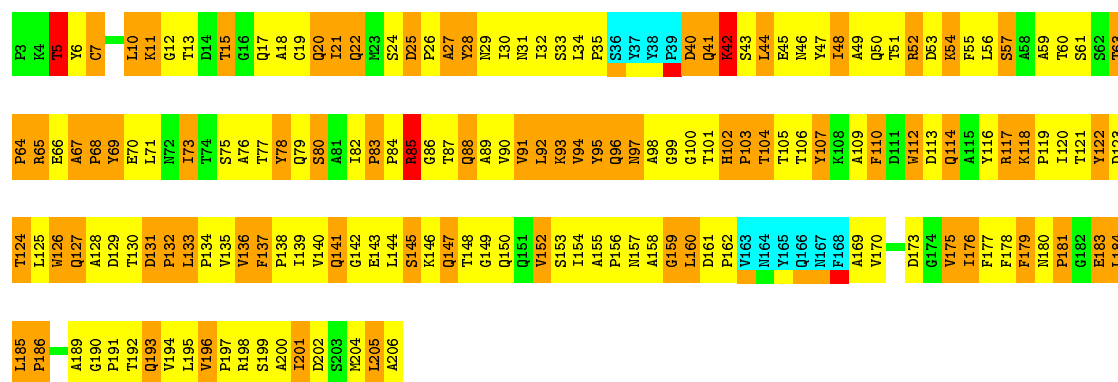
Chain A: 10% 50% 34% 5%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

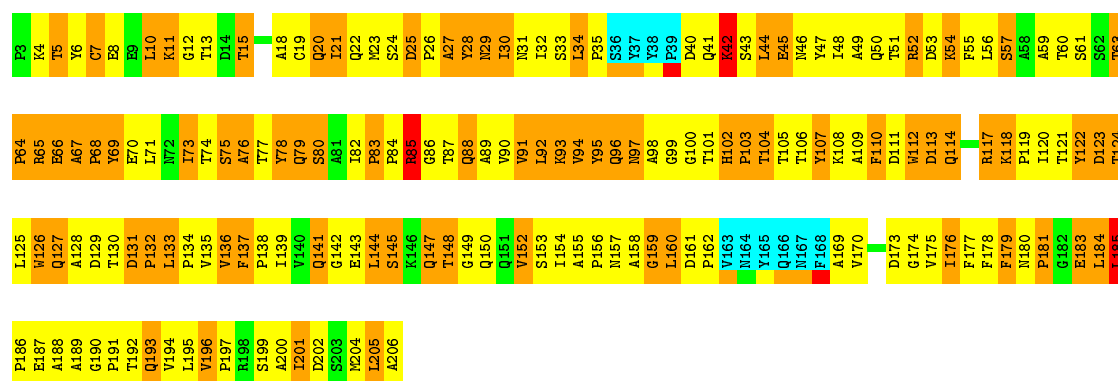
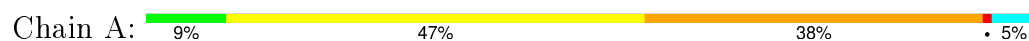
- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64

Chain A: 11% 48% 35% 5%



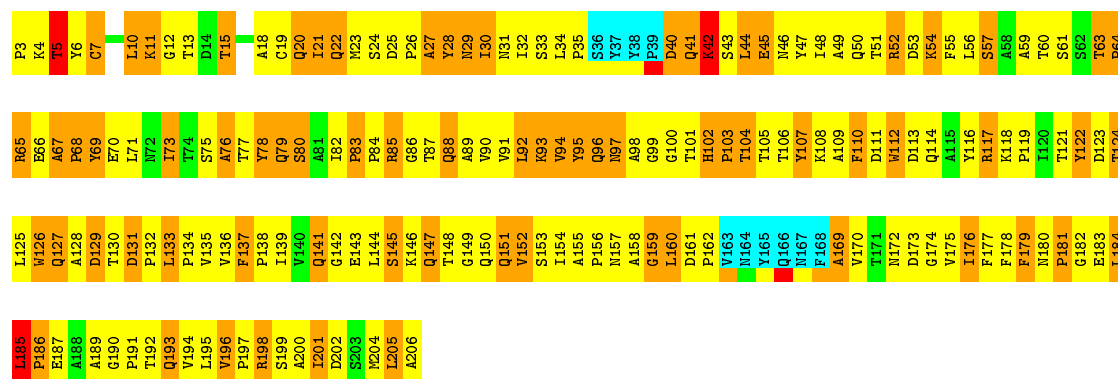
#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



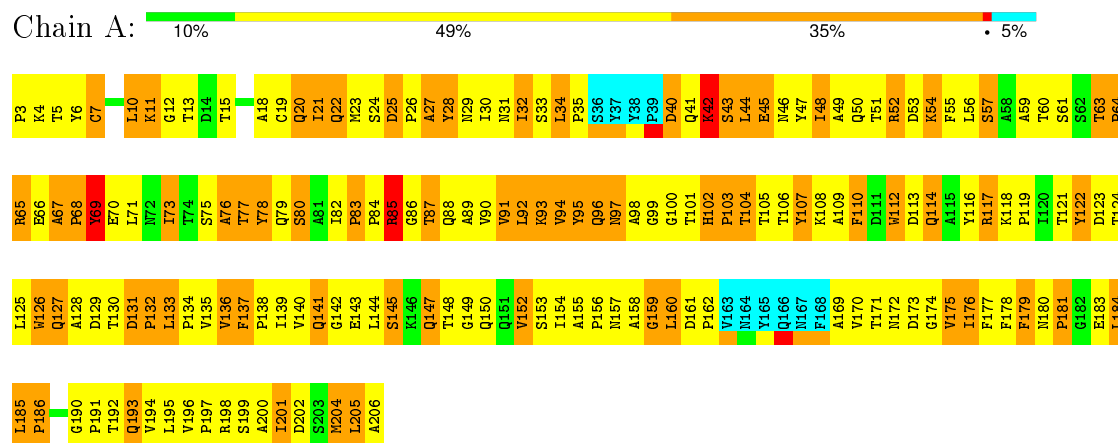
#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



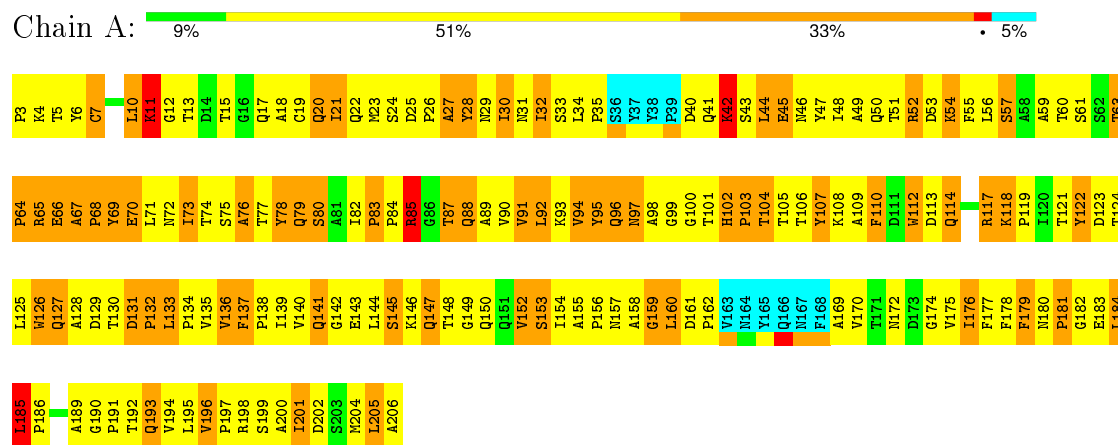
### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT64



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *Torsion Angle Dynamics followed by RDC refinement using CNS 1.1.*

Of the 50 calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy.*

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.1

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

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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	0.59±0.01	0±0/1524 (0.0±0.0%)	1.06±0.01	5±1/2087 (0.2±0.0%)
All	All	0.59	0/36576 (0.0%)	1.06	119/50088 (0.2%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.0±0.0
All	All	0	24

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	76	ALA	CA-C-N	9.19	137.42	117.20	3	24
1	A	94	VAL	CA-C-N	-8.27	99.00	117.20	6	24
1	A	76	ALA	O-C-N	-5.74	113.51	122.70	3	24
1	A	76	ALA	CA-C-O	-5.44	108.68	120.10	3	24
1	A	69	TYR	CB-CG-CD1	5.29	124.18	121.00	10	8
1	A	153	SER	N-CA-C	-5.26	96.80	111.00	17	6
1	A	195	LEU	CA-C-N	5.24	128.72	117.20	18	9

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	126	TRP	Mainchain	24



## 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	1487	1450	1447	522±11
All	All	35688	34800	34728	12538

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 178.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:GLU:HB3	1:A:99:GLY:O	1.29	1.26	16	24
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HG	1.26	1.19	13	15
1:A:66:GLU:CB	1:A:99:GLY:O	1.25	1.84	15	24
1:A:94:VAL:O	1:A:106:THR:O	1.23	1.56	7	24
1:A:185:LEU:HD21	1:A:191:PRO:O	1.20	1.35	7	15
1:A:65:ARG:HA	1:A:98:ALA:O	1.19	1.38	8	24
1:A:185:LEU:HD13	1:A:185:LEU:O	1.17	1.34	21	5
1:A:155:ALA:HB3	1:A:158:ALA:HB3	1.14	1.15	17	24
1:A:44:LEU:HD22	1:A:92:LEU:HD21	1.12	1.16	7	24
1:A:30:ILE:HG22	1:A:32:ILE:HD11	1.12	1.12	14	16
1:A:156:PRO:HB3	1:A:160:LEU:HD12	1.11	1.14	24	24
1:A:160:LEU:HD13	1:A:194:VAL:HG12	1.11	1.21	7	24
1:A:42:LYS:O	1:A:46:ASN:HB2	1.08	1.48	12	24
1:A:178:PHE:CG	1:A:193:GLN:HB2	1.08	1.83	4	24
1:A:185:LEU:HD11	1:A:190:GLY:O	1.08	1.45	21	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:109:ALA:HB2	1.08	1.15	23	5
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:HG12	1.06	1.19	20	3
1:A:66:GLU:HB2	1:A:100:GLY:HA3	1.05	1.28	3	24
1:A:95:TYR:HB2	1:A:105:THR:HG23	1.05	1.26	18	22
1:A:196:VAL:HG13	1:A:201:ILE:HG21	1.04	1.24	13	3
1:A:196:VAL:HG12	1:A:201:ILE:HG21	1.04	1.29	23	21
1:A:185:LEU:HD11	1:A:191:PRO:C	1.04	1.73	10	14
1:A:69:TYR:HA	1:A:99:GLY:H	1.03	1.13	19	24
1:A:133:LEU:HD23	1:A:196:VAL:HG22	1.03	1.24	2	20
1:A:156:PRO:O	1:A:184:LEU:HD12	1.02	1.54	1	18
1:A:136:VAL:HG23	1:A:195:LEU:HD22	1.02	1.08	7	2
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:CG	1.01	2.07	13	15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:LEU:HD22	1:A:194:VAL:HG23	0.99	1.34	7	24
1:A:15:THR:CG2	1:A:18:ALA:HB3	0.98	1.88	24	19
1:A:185:LEU:HD21	1:A:190:GLY:N	0.98	1.73	21	1
1:A:155:ALA:O	1:A:159:GLY:N	0.98	1.97	14	24
1:A:91:VAL:CG2	1:A:109:ALA:HB2	0.96	1.90	23	13
1:A:197:PRO:HB2	1:A:200:ALA:HB3	0.96	1.37	17	24
1:A:127:GLN:CG	1:A:204:MET:O	0.96	2.14	8	24
1:A:44:LEU:CD2	1:A:92:LEU:HD21	0.96	1.90	12	24
1:A:155:ALA:HB3	1:A:158:ALA:CB	0.96	1.91	21	24
1:A:127:GLN:CB	1:A:204:MET:O	0.95	2.13	18	24
1:A:91:VAL:HG23	1:A:109:ALA:CB	0.95	1.91	23	3
1:A:53:ASP:O	1:A:57:SER:HB2	0.95	1.59	18	24
1:A:185:LEU:CD2	1:A:191:PRO:O	0.95	2.14	7	12
1:A:41:GLN:HE22	1:A:90:VAL:HG21	0.95	1.16	4	10
1:A:197:PRO:CB	1:A:200:ALA:HB3	0.95	1.90	19	24
1:A:127:GLN:HB3	1:A:204:MET:O	0.95	1.61	18	24
1:A:48:ILE:HD11	1:A:71:LEU:HD21	0.95	1.38	3	10
1:A:29:ASN:N	1:A:69:TYR:O	0.95	2.00	13	24
1:A:66:GLU:CA	1:A:99:GLY:O	0.95	2.14	3	24
1:A:178:PHE:CD1	1:A:193:GLN:HB2	0.95	1.97	5	24
1:A:91:VAL:HB	1:A:109:ALA:HB2	0.95	1.37	4	21
1:A:30:ILE:HG22	1:A:32:ILE:CD1	0.94	1.93	13	16
1:A:44:LEU:HD22	1:A:92:LEU:CD2	0.94	1.93	12	24
1:A:160:LEU:HD13	1:A:194:VAL:CG1	0.93	1.93	4	24
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:O	0.92	1.63	16	7
1:A:179:PHE:O	1:A:192:THR:N	0.92	2.01	15	24
1:A:67:ALA:HB3	1:A:68:PRO:HD3	0.92	1.39	21	24
1:A:176:ILE:HG23	1:A:178:PHE:CE1	0.92	1.99	4	10
1:A:133:LEU:N	1:A:134:PRO:HD3	0.92	1.80	22	24
1:A:68:PRO:O	1:A:99:GLY:CA	0.91	2.17	3	24
1:A:30:ILE:CG2	1:A:32:ILE:HD11	0.91	1.96	6	15
1:A:136:VAL:CG2	1:A:195:LEU:HD22	0.91	1.95	7	2
1:A:65:ARG:CA	1:A:98:ALA:O	0.91	2.19	20	24
1:A:15:THR:HG22	1:A:18:ALA:HB3	0.91	1.39	1	8
1:A:196:VAL:CG1	1:A:201:ILE:HG21	0.90	1.97	12	24
1:A:196:VAL:HG13	1:A:201:ILE:CG2	0.90	1.96	15	3
1:A:175:VAL:HG11	1:A:201:ILE:HD11	0.90	1.42	3	24
1:A:87:THR:CA	1:A:114:GLN:HB2	0.90	1.95	11	22
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HG23	0.90	1.43	18	15
1:A:175:VAL:HG11	1:A:201:ILE:CD1	0.89	1.97	3	21
1:A:175:VAL:CG1	1:A:196:VAL:HG12	0.88	1.97	20	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:VAL:CB	1:A:109:ALA:HB2	0.88	1.99	12	24
1:A:32:ILE:HG13	1:A:73:ILE:HG23	0.88	1.43	10	22
1:A:73:ILE:HA	1:A:93:LYS:O	0.88	1.68	8	24
1:A:44:LEU:HD23	1:A:110:PHE:CZ	0.88	2.04	13	19
1:A:185:LEU:HD13	1:A:185:LEU:C	0.88	1.89	21	2
1:A:176:ILE:HG21	1:A:193:GLN:OE1	0.87	1.69	20	24
1:A:42:LYS:O	1:A:46:ASN:CB	0.87	2.23	8	24
1:A:71:LEU:HA	1:A:96:GLN:HB2	0.87	1.46	19	24
1:A:87:THR:HA	1:A:114:GLN:HB2	0.87	1.43	24	16
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:O	0.87	1.68	16	5
1:A:178:PHE:CE2	1:A:193:GLN:HB3	0.87	2.05	21	24
1:A:34:LEU:HD13	1:A:35:PRO:HD2	0.86	1.44	5	8
1:A:82:ILE:O	1:A:85:ARG:O	0.86	1.93	5	24
1:A:6:TYR:CG	1:A:45:GLU:HG2	0.86	2.05	3	24
1:A:41:GLN:HB3	1:A:44:LEU:HD11	0.86	1.47	13	13
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD13	0.85	1.70	22	2
1:A:25:ASP:HB2	1:A:28:TYR:CE1	0.85	2.07	11	24
1:A:180:ASN:HA	1:A:191:PRO:HA	0.85	1.46	23	24
1:A:178:PHE:CD1	1:A:193:GLN:CB	0.85	2.59	17	21
1:A:23:MET:O	1:A:30:ILE:HD12	0.85	1.72	21	19
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HG12	0.85	1.46	3	22
1:A:15:THR:HG23	1:A:18:ALA:HB3	0.85	1.48	13	9
1:A:77:THR:CB	1:A:90:VAL:HG12	0.85	2.01	16	23
1:A:178:PHE:CD2	1:A:193:GLN:HB2	0.84	2.07	4	7
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ILE:N	0.84	2.10	4	24
1:A:136:VAL:HG23	1:A:195:LEU:CD2	0.84	2.00	7	2
1:A:69:TYR:HA	1:A:99:GLY:N	0.84	1.87	23	24
1:A:124:THR:HA	1:A:206:ALA:CB	0.84	2.02	11	24
1:A:47:TYR:O	1:A:51:THR:N	0.84	2.11	6	24
1:A:185:LEU:HD11	1:A:191:PRO:O	0.84	1.71	16	13
1:A:66:GLU:N	1:A:99:GLY:O	0.84	2.11	3	13
1:A:161:ASP:OD1	1:A:194:VAL:HA	0.84	1.73	6	23
1:A:200:ALA:O	1:A:204:MET:HB2	0.83	1.72	9	22
1:A:179:PHE:CE1	1:A:192:THR:HG22	0.83	2.08	13	17
1:A:41:GLN:OE1	1:A:44:LEU:HD21	0.83	1.73	24	6
1:A:116:TYR:O	1:A:117:ARG:HG3	0.83	1.73	23	12
1:A:196:VAL:HG22	1:A:197:PRO:HD2	0.83	1.50	13	3
1:A:184:LEU:O	1:A:184:LEU:HD23	0.83	1.73	14	2
1:A:34:LEU:HD23	1:A:44:LEU:HD11	0.83	1.49	11	8
1:A:133:LEU:HD23	1:A:196:VAL:CG2	0.83	2.01	23	16
1:A:185:LEU:HD12	1:A:190:GLY:N	0.83	1.89	3	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:CD1	0.83	2.25	21	9
1:A:55:PHE:CD2	1:A:96:GLN:NE2	0.83	2.45	19	8
1:A:10:LEU:O	1:A:21:ILE:HG13	0.83	1.74	4	24
1:A:161:ASP:OD2	1:A:195:LEU:N	0.83	2.11	7	23
1:A:144:LEU:HD23	1:A:152:VAL:HG21	0.83	1.49	18	8
1:A:77:THR:HB	1:A:90:VAL:HG12	0.83	1.50	9	22
1:A:56:LEU:HD22	1:A:69:TYR:CD2	0.82	2.10	8	24
1:A:83:PRO:HB2	1:A:84:PRO:CD	0.82	2.04	21	24
1:A:71:LEU:HD11	1:A:94:VAL:HG23	0.82	1.50	17	23
1:A:34:LEU:HD21	1:A:41:GLN:OE1	0.82	1.75	19	4
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CG2	0.82	2.04	19	14
1:A:184:LEU:CD1	1:A:192:THR:HG23	0.82	2.04	12	17
1:A:156:PRO:HB3	1:A:160:LEU:CD1	0.82	2.05	8	23
1:A:91:VAL:HG23	1:A:108:LYS:C	0.82	1.95	16	10
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:VAL:HB	0.82	1.49	10	21
1:A:30:ILE:HG23	1:A:32:ILE:CD1	0.82	2.05	12	2
1:A:127:GLN:O	1:A:130:THR:HG23	0.81	1.75	23	20
1:A:178:PHE:CD2	1:A:193:GLN:CB	0.81	2.63	4	23
1:A:93:LYS:HA	1:A:107:TYR:CE1	0.81	2.10	10	23
1:A:73:ILE:HD11	1:A:92:LEU:HD22	0.81	1.50	12	18
1:A:136:VAL:HG21	1:A:176:ILE:HD12	0.81	1.52	7	4
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD12	0.81	1.74	23	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:ASP:HB2	0.81	1.76	1	24
1:A:92:LEU:HD11	1:A:110:PHE:CZ	0.81	2.10	7	18
1:A:176:ILE:CG2	1:A:193:GLN:OE1	0.81	2.28	20	24
1:A:161:ASP:O	1:A:184:LEU:HD21	0.81	1.76	21	17
1:A:66:GLU:N	1:A:99:GLY:C	0.81	2.34	3	24
1:A:87:THR:N	1:A:114:GLN:HG3	0.81	1.90	22	2
1:A:66:GLU:HB2	1:A:100:GLY:CA	0.80	2.05	23	24
1:A:185:LEU:HD11	1:A:191:PRO:N	0.80	1.92	1	8
1:A:63:THR:O	1:A:65:ARG:N	0.80	2.13	4	24
1:A:28:TYR:HB3	1:A:69:TYR:CD2	0.80	2.10	20	24
1:A:161:ASP:CB	1:A:193:GLN:NE2	0.80	2.45	15	24
1:A:87:THR:CA	1:A:114:GLN:HG3	0.80	2.05	2	1
1:A:156:PRO:CB	1:A:160:LEU:HD12	0.80	2.07	13	13
1:A:71:LEU:HD13	1:A:96:GLN:NE2	0.80	1.92	21	20
1:A:32:ILE:HD11	1:A:71:LEU:HD23	0.80	1.53	8	9
1:A:112:TRP:HA	1:A:119:PRO:HA	0.80	1.52	16	24
1:A:185:LEU:HD12	1:A:190:GLY:CA	0.80	2.07	17	6
1:A:48:ILE:CD1	1:A:71:LEU:HD21	0.80	2.07	3	10
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:117:ARG:HA	0.80	2.12	2	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ILE:CG1	1:A:73:ILE:HG23	0.79	2.07	3	21
1:A:78:TYR:CE1	1:A:91:VAL:HG13	0.79	2.12	12	10
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:SER:H	0.79	1.37	16	24
1:A:44:LEU:HD23	1:A:110:PHE:CE1	0.79	2.13	12	17
1:A:64:PRO:O	1:A:101:THR:HB	0.79	1.76	14	24
1:A:41:GLN:OE1	1:A:90:VAL:HG21	0.79	1.78	10	6
1:A:155:ALA:CB	1:A:158:ALA:HB3	0.78	2.06	3	24
1:A:110:PHE:N	1:A:110:PHE:CD1	0.78	2.51	1	12
1:A:28:TYR:CB	1:A:69:TYR:CD2	0.78	2.67	13	24
1:A:120:ILE:CG2	1:A:124:THR:HG23	0.78	2.08	19	10
1:A:176:ILE:N	1:A:195:LEU:HD12	0.78	1.93	9	24
1:A:75:SER:CB	1:A:92:LEU:HD23	0.78	2.09	3	4
1:A:120:ILE:HG23	1:A:124:THR:HG23	0.78	1.56	18	13
1:A:127:GLN:HG3	1:A:204:MET:O	0.78	1.77	5	24
1:A:28:TYR:CD2	1:A:56:LEU:HD13	0.78	2.13	13	24
1:A:178:PHE:CD2	1:A:193:GLN:HB3	0.77	2.14	19	23
1:A:56:LEU:HD22	1:A:69:TYR:HD2	0.77	1.38	3	24
1:A:32:ILE:HD12	1:A:32:ILE:N	0.77	1.94	24	5
1:A:79:GLN:NE2	1:A:114:GLN:OE1	0.77	2.17	22	8
1:A:144:LEU:HD23	1:A:152:VAL:CG2	0.77	2.08	18	17
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:HB	0.77	1.55	18	2
1:A:138:PRO:O	1:A:142:GLY:N	0.77	2.18	10	24
1:A:48:ILE:HD13	1:A:73:ILE:HD13	0.77	1.56	4	12
1:A:41:GLN:HE21	1:A:44:LEU:HD21	0.77	1.40	6	10
1:A:161:ASP:HB2	1:A:193:GLN:NE2	0.77	1.95	17	24
1:A:91:VAL:HG23	1:A:109:ALA:N	0.77	1.95	18	10
1:A:31:ASN:C	1:A:32:ILE:HD12	0.77	2.00	20	14
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:ALA:CB	0.77	2.10	12	9
1:A:124:THR:HA	1:A:206:ALA:HB2	0.76	1.54	18	18
1:A:133:LEU:HD22	1:A:194:VAL:CG2	0.76	2.10	18	20
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:CD	0.76	2.59	19	23
1:A:127:GLN:HA	1:A:206:ALA:C	0.76	2.00	3	24
1:A:44:LEU:HB3	1:A:110:PHE:CZ	0.76	2.16	20	21
1:A:10:LEU:O	1:A:21:ILE:CG1	0.76	2.34	8	24
1:A:185:LEU:HD11	1:A:190:GLY:C	0.76	2.00	21	1
1:A:32:ILE:HG13	1:A:73:ILE:CG2	0.76	2.10	22	19
1:A:113:ASP:N	1:A:118:LYS:O	0.76	2.14	11	11
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:HG23	0.76	1.57	21	17
1:A:52:ARG:HB3	1:A:71:LEU:HD22	0.76	1.56	19	18
1:A:91:VAL:HG11	1:A:169:ALA:HB2	0.76	1.57	21	8
1:A:159:GLY:N	1:A:184:LEU:HD12	0.75	1.96	19	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:O	1:A:47:TYR:HB3	0.75	1.81	12	24
1:A:41:GLN:O	1:A:44:LEU:HG	0.75	1.81	17	21
1:A:184:LEU:C	1:A:185:LEU:HD12	0.75	2.02	10	6
1:A:202:ASP:HA	1:A:205:LEU:HD22	0.75	1.56	5	23
1:A:185:LEU:C	1:A:189:ALA:HB3	0.75	2.02	19	11
1:A:34:LEU:CD1	1:A:41:GLN:HG3	0.75	2.11	19	16
1:A:34:LEU:HD11	1:A:41:GLN:HG3	0.75	1.59	19	9
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:O	0.75	1.80	21	7
1:A:196:VAL:HG12	1:A:201:ILE:CG2	0.74	2.11	18	21
1:A:92:LEU:HD12	1:A:108:LYS:O	0.74	1.81	7	8
1:A:44:LEU:HB3	1:A:92:LEU:HD21	0.74	1.58	19	2
1:A:19:CYS:O	1:A:33:SER:HA	0.74	1.82	2	24
1:A:77:THR:OG1	1:A:90:VAL:HG12	0.74	1.82	3	15
1:A:176:ILE:HG12	1:A:193:GLN:CG	0.74	2.13	15	24
1:A:82:ILE:O	1:A:83:PRO:C	0.74	2.26	20	24
1:A:89:ALA:HB2	1:A:170:VAL:HG13	0.74	1.60	5	1
1:A:43:SER:O	1:A:47:TYR:HB2	0.74	1.82	7	24
1:A:80:SER:N	1:A:87:THR:O	0.74	2.21	7	24
1:A:139:ILE:O	1:A:143:GLU:N	0.74	2.20	17	24
1:A:110:PHE:CD1	1:A:110:PHE:N	0.74	2.56	8	12
1:A:63:THR:O	1:A:65:ARG:HG3	0.74	1.83	13	12
1:A:41:GLN:C	1:A:43:SER:N	0.74	2.40	15	24
1:A:170:VAL:HG23	1:A:174:GLY:O	0.74	1.83	7	21
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:HB3	0.74	2.18	17	3
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:HB3	0.74	2.18	11	18
1:A:184:LEU:HD12	1:A:192:THR:HG23	0.74	1.60	12	6
1:A:133:LEU:N	1:A:134:PRO:CD	0.73	2.51	22	24
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:SER:N	0.73	1.98	21	18
1:A:55:PHE:CD1	1:A:104:THR:HG21	0.73	2.18	24	22
1:A:95:TYR:CD1	1:A:105:THR:HG22	0.73	2.18	8	2
1:A:32:ILE:CG2	1:A:73:ILE:HG23	0.73	2.14	18	15
1:A:124:THR:CA	1:A:206:ALA:HB2	0.73	2.14	11	24
1:A:44:LEU:HB3	1:A:110:PHE:HZ	0.73	1.43	17	21
1:A:27:ALA:O	1:A:69:TYR:CD1	0.72	2.42	20	24
1:A:92:LEU:O	1:A:107:TYR:CD1	0.72	2.41	17	22
1:A:78:TYR:CE1	1:A:91:VAL:HG12	0.72	2.19	9	11
1:A:6:TYR:CG	1:A:7:CYS:N	0.72	2.55	6	24
1:A:33:SER:O	1:A:34:LEU:HD22	0.72	1.84	24	10
1:A:6:TYR:OH	1:A:34:LEU:HD23	0.72	1.84	15	10
1:A:97:ASN:OD1	1:A:100:GLY:C	0.72	2.27	17	5
1:A:68:PRO:O	1:A:99:GLY:HA2	0.72	1.84	3	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:LEU:HD23	1:A:152:VAL:HG23	0.72	1.61	6	16
1:A:53:ASP:O	1:A:57:SER:CB	0.72	2.37	24	24
1:A:107:TYR:HB2	1:A:191:PRO:HG3	0.72	1.60	21	9
1:A:44:LEU:HB3	1:A:92:LEU:HD11	0.72	1.59	5	18
1:A:185:LEU:CD1	1:A:190:GLY:C	0.72	2.58	20	8
1:A:21:ILE:CG2	1:A:32:ILE:HB	0.72	2.15	6	22
1:A:185:LEU:HD12	1:A:190:GLY:C	0.72	2.05	8	10
1:A:31:ASN:O	1:A:32:ILE:HD12	0.72	1.85	23	4
1:A:185:LEU:O	1:A:190:GLY:O	0.71	2.08	4	15
1:A:90:VAL:HG23	1:A:110:PHE:CE1	0.71	2.20	11	22
1:A:160:LEU:CD1	1:A:194:VAL:HG12	0.71	2.15	4	21
1:A:133:LEU:HD13	1:A:194:VAL:HG21	0.71	1.62	13	15
1:A:178:PHE:CG	1:A:193:GLN:CB	0.71	2.73	7	23
1:A:197:PRO:HB3	1:A:200:ALA:HB3	0.71	1.61	18	24
1:A:68:PRO:C	1:A:99:GLY:HA2	0.71	2.05	5	24
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:VAL:CG2	0.71	2.14	6	23
1:A:32:ILE:N	1:A:32:ILE:HD12	0.71	2.01	11	7
1:A:159:GLY:CA	1:A:184:LEU:HD12	0.71	2.16	11	5
1:A:54:LYS:O	1:A:57:SER:HB3	0.71	1.86	8	16
1:A:102:HIS:CE1	1:A:104:THR:OG1	0.70	2.43	2	14
1:A:196:VAL:HG12	1:A:197:PRO:HD2	0.70	1.63	16	21
1:A:178:PHE:N	1:A:178:PHE:CD1	0.70	2.59	16	3
1:A:34:LEU:HD11	1:A:44:LEU:HD21	0.70	1.63	15	3
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:VAL:CB	0.70	2.16	3	21
1:A:133:LEU:HD13	1:A:194:VAL:CG2	0.70	2.16	13	17
1:A:52:ARG:HA	1:A:96:GLN:HE22	0.70	1.46	6	5
1:A:41:GLN:NE2	1:A:90:VAL:HG21	0.70	2.02	17	15
1:A:78:TYR:HE1	1:A:91:VAL:HG12	0.70	1.47	15	7
1:A:44:LEU:CB	1:A:92:LEU:HD21	0.70	2.17	19	8
1:A:34:LEU:HD13	1:A:35:PRO:CD	0.70	2.17	5	6
1:A:6:TYR:CD2	1:A:7:CYS:N	0.70	2.60	19	24
1:A:41:GLN:NE2	1:A:44:LEU:HD21	0.70	2.00	9	7
1:A:133:LEU:HB2	1:A:194:VAL:HB	0.70	1.63	4	24
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:LEU:HD21	0.69	1.64	5	2
1:A:88:GLN:HB3	1:A:114:GLN:HG2	0.69	1.64	3	2
1:A:41:GLN:CD	1:A:44:LEU:HD21	0.69	2.08	3	4
1:A:75:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD23	0.69	1.63	3	6
1:A:161:ASP:OD2	1:A:195:LEU:HB2	0.69	1.87	17	23
1:A:136:VAL:HG11	1:A:162:PRO:CD	0.69	2.17	7	23
1:A:95:TYR:CG	1:A:105:THR:HG22	0.69	2.22	1	2
1:A:116:TYR:O	1:A:117:ARG:HG2	0.69	1.86	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:PRO:O	1:A:138:PRO:HD3	0.69	1.88	5	24
1:A:93:LYS:CA	1:A:107:TYR:CE1	0.69	2.75	18	23
1:A:96:GLN:O	1:A:104:THR:O	0.69	2.11	18	24
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:O	0.69	2.40	7	8
1:A:42:LYS:HE3	1:A:42:LYS:HA	0.69	1.63	8	11
1:A:90:VAL:CG2	1:A:110:PHE:CE1	0.69	2.76	5	3
1:A:68:PRO:HD2	1:A:99:GLY:HA2	0.69	1.64	6	23
1:A:197:PRO:HB2	1:A:201:ILE:HG23	0.69	1.64	18	6
1:A:124:THR:HB	1:A:206:ALA:HB2	0.69	1.63	24	6
1:A:176:ILE:HD13	1:A:193:GLN:OE1	0.68	1.88	19	24
1:A:71:LEU:HD11	1:A:94:VAL:CG2	0.68	2.16	17	23
1:A:13:THR:N	1:A:20:GLN:O	0.68	2.24	2	24
1:A:68:PRO:O	1:A:99:GLY:N	0.68	2.26	20	24
1:A:161:ASP:OD2	1:A:176:ILE:CG1	0.68	2.41	6	24
1:A:41:GLN:O	1:A:43:SER:N	0.68	2.26	15	24
1:A:181:PRO:CG	1:A:192:THR:OG1	0.68	2.42	1	24
1:A:92:LEU:HD11	1:A:110:PHE:HZ	0.68	1.48	13	19
1:A:55:PHE:CD2	1:A:96:GLN:HG2	0.68	2.24	6	2
1:A:42:LYS:CA	1:A:42:LYS:HE3	0.68	2.17	2	10
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:CD	0.68	2.67	6	14
1:A:30:ILE:HG22	1:A:32:ILE:HD12	0.68	1.65	16	4
1:A:86:GLY:C	1:A:114:GLN:HB2	0.68	2.08	16	9
1:A:124:THR:CB	1:A:206:ALA:HB2	0.68	2.19	9	24
1:A:116:TYR:C	1:A:117:ARG:HG3	0.68	2.10	14	2
1:A:175:VAL:O	1:A:196:VAL:HG23	0.68	1.89	21	20
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:GLU:H	0.67	1.50	15	10
1:A:184:LEU:HD13	1:A:192:THR:HG23	0.67	1.65	1	10
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD12	0.67	2.05	19	12
1:A:122:TYR:HB3	1:A:126:TRP:CD1	0.67	2.23	5	24
1:A:157:ASN:O	1:A:184:LEU:HB2	0.67	1.88	7	22
1:A:184:LEU:HB3	1:A:192:THR:OG1	0.67	1.89	15	23
1:A:59:ALA:HA	1:A:63:THR:OG1	0.67	1.89	3	24
1:A:96:GLN:O	1:A:104:THR:CB	0.67	2.42	6	19
1:A:42:LYS:HE3	1:A:42:LYS:CA	0.67	2.18	16	9
1:A:28:TYR:HA	1:A:69:TYR:H	0.67	1.50	17	24
1:A:65:ARG:O	1:A:66:GLU:C	0.67	2.32	3	24
1:A:116:TYR:O	1:A:118:LYS:HG3	0.67	1.89	2	6
1:A:141:GLN:HA	1:A:144:LEU:HB2	0.67	1.66	21	24
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HB2	0.67	1.88	17	7
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:CB	0.66	2.79	1	21
1:A:88:GLN:HB2	1:A:114:GLN:OE1	0.66	1.89	22	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:201:ILE:HA	1:A:204:MET:HB3	0.66	1.68	7	24
1:A:176:ILE:HG23	1:A:193:GLN:HG3	0.66	1.67	11	24
1:A:178:PHE:CE2	1:A:193:GLN:CB	0.66	2.78	21	17
1:A:48:ILE:CG1	1:A:71:LEU:HD21	0.66	2.19	12	23
1:A:28:TYR:C	1:A:28:TYR:HD1	0.66	1.92	5	13
1:A:91:VAL:CG1	1:A:109:ALA:HB2	0.66	2.20	12	9
1:A:66:GLU:HB2	1:A:99:GLY:O	0.66	1.87	3	2
1:A:75:SER:HA	1:A:92:LEU:HA	0.66	1.67	3	21
1:A:69:TYR:HB3	1:A:98:ALA:HA	0.66	1.68	17	24
1:A:48:ILE:HD13	1:A:73:ILE:CD1	0.66	2.21	2	12
1:A:21:ILE:HD13	1:A:21:ILE:C	0.66	2.12	14	10
1:A:77:THR:HG23	1:A:90:VAL:CG1	0.66	2.21	23	1
1:A:48:ILE:CD1	1:A:73:ILE:HD13	0.66	2.21	4	6
1:A:184:LEU:O	1:A:184:LEU:HD22	0.66	1.90	15	9
1:A:170:VAL:HA	1:A:175:VAL:HA	0.65	1.68	4	21
1:A:28:TYR:HD1	1:A:28:TYR:C	0.65	1.93	15	11
1:A:137:PHE:CE1	1:A:160:LEU:HA	0.65	2.25	15	24
1:A:133:LEU:HD12	1:A:133:LEU:N	0.65	2.05	10	12
1:A:111:ASP:OD2	1:A:170:VAL:HG11	0.65	1.91	10	5
1:A:15:THR:HG21	1:A:20:GLN:NE2	0.65	2.05	23	9
1:A:66:GLU:H	1:A:99:GLY:C	0.65	1.93	3	3
1:A:176:ILE:HG13	1:A:195:LEU:HB2	0.65	1.67	21	24
1:A:86:GLY:O	1:A:114:GLN:HB2	0.65	1.92	20	7
1:A:133:LEU:O	1:A:195:LEU:N	0.65	2.30	13	24
1:A:144:LEU:O	1:A:147:GLN:N	0.65	2.30	15	24
1:A:184:LEU:O	1:A:184:LEU:CD2	0.65	2.44	13	12
1:A:185:LEU:CB	1:A:191:PRO:O	0.65	2.45	17	8
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:HD13	0.65	2.12	18	15
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:CG2	0.65	2.20	21	17
1:A:141:GLN:O	1:A:145:SER:N	0.65	2.27	10	24
1:A:156:PRO:O	1:A:184:LEU:CD1	0.65	2.44	17	15
1:A:42:LYS:CE	1:A:42:LYS:HA	0.65	2.22	24	13
1:A:90:VAL:O	1:A:109:ALA:HA	0.65	1.92	23	9
1:A:29:ASN:O	1:A:70:GLU:HA	0.65	1.91	19	24
1:A:28:TYR:HA	1:A:69:TYR:N	0.65	2.06	23	24
1:A:82:ILE:O	1:A:83:PRO:O	0.65	2.15	20	24
1:A:160:LEU:HD22	1:A:161:ASP:OD1	0.65	1.92	17	14
1:A:176:ILE:HA	1:A:195:LEU:HA	0.65	1.68	5	24
1:A:80:SER:HB2	1:A:87:THR:N	0.65	2.05	2	3
1:A:28:TYR:CD1	1:A:28:TYR:C	0.64	2.70	15	11
1:A:141:GLN:NE2	1:A:154:ILE:HD12	0.64	2.07	18	20

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ILE:HG23	1:A:21:ILE:O	0.64	1.91	23	13
1:A:28:TYR:C	1:A:28:TYR:CD1	0.64	2.70	2	13
1:A:179:PHE:CD1	1:A:192:THR:HG22	0.64	2.26	13	1
1:A:178:PHE:CA	1:A:192:THR:O	0.64	2.46	19	24
1:A:156:PRO:HA	1:A:160:LEU:HB2	0.64	1.69	14	15
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:SER:H	0.64	2.03	6	24
1:A:6:TYR:CD1	1:A:45:GLU:HG2	0.64	2.26	13	16
1:A:32:ILE:CG1	1:A:73:ILE:CG2	0.64	2.75	13	22
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HB3	0.64	1.92	21	1
1:A:87:THR:N	1:A:114:GLN:HB2	0.64	2.06	3	7
1:A:30:ILE:HG22	1:A:32:ILE:HD13	0.64	1.70	23	2
1:A:56:LEU:HB3	1:A:69:TYR:CE2	0.64	2.28	12	24
1:A:12:GLY:HA2	1:A:20:GLN:O	0.64	1.92	12	24
1:A:113:ASP:O	1:A:113:ASP:OD1	0.64	2.15	1	7
1:A:66:GLU:CB	1:A:99:GLY:C	0.64	2.65	24	23
1:A:91:VAL:HB	1:A:109:ALA:CB	0.64	2.21	9	9
1:A:88:GLN:OE1	1:A:112:TRP:HB3	0.64	1.93	6	20
1:A:21:ILE:C	1:A:21:ILE:HD13	0.63	2.12	6	12
1:A:136:VAL:CG1	1:A:161:ASP:HA	0.63	2.24	17	22
1:A:63:THR:HG22	1:A:64:PRO:HD2	0.63	1.68	17	23
1:A:134:PRO:HA	1:A:160:LEU:HD21	0.63	1.71	7	19
1:A:26:PRO:O	1:A:27:ALA:HB2	0.63	1.93	15	24
1:A:21:ILE:O	1:A:21:ILE:HG23	0.63	1.93	5	11
1:A:15:THR:HG21	1:A:18:ALA:HB3	0.63	1.70	15	12
1:A:21:ILE:HG22	1:A:32:ILE:O	0.63	1.93	6	13
1:A:32:ILE:HD11	1:A:71:LEU:CD2	0.63	2.24	20	5
1:A:52:ARG:O	1:A:56:LEU:HG	0.63	1.93	8	24
1:A:41:GLN:N	1:A:41:GLN:OE1	0.63	2.31	8	8
1:A:133:LEU:CD2	1:A:196:VAL:HG22	0.63	2.15	23	1
1:A:176:ILE:CA	1:A:195:LEU:HD12	0.63	2.23	9	24
1:A:185:LEU:HD21	1:A:190:GLY:CA	0.63	2.23	21	1
1:A:137:PHE:N	1:A:138:PRO:HD2	0.63	2.09	22	24
1:A:71:LEU:HD13	1:A:96:GLN:HE21	0.63	1.51	11	13
1:A:136:VAL:HG11	1:A:176:ILE:HD11	0.63	1.70	6	14
1:A:205:LEU:O	1:A:206:ALA:HB3	0.63	1.94	18	24
1:A:185:LEU:CD1	1:A:190:GLY:N	0.63	2.62	3	8
1:A:161:ASP:H	1:A:184:LEU:HD11	0.63	1.54	3	11
1:A:34:LEU:HD11	1:A:41:GLN:OE1	0.63	1.94	24	2
1:A:181:PRO:HG3	1:A:192:THR:CB	0.62	2.23	22	20
1:A:156:PRO:HA	1:A:160:LEU:H	0.62	1.54	19	6
1:A:44:LEU:CG	1:A:92:LEU:HD21	0.62	2.24	11	9

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:ALA:CB	1:A:170:VAL:HG13	0.62	2.23	5	1
1:A:178:PHE:HA	1:A:192:THR:O	0.62	1.94	19	23
1:A:91:VAL:CA	1:A:109:ALA:HB2	0.62	2.24	12	3
1:A:156:PRO:O	1:A:184:LEU:HD13	0.62	1.95	11	5
1:A:135:VAL:C	1:A:195:LEU:HD23	0.62	2.15	8	23
1:A:107:TYR:HB2	1:A:191:PRO:CG	0.62	2.24	21	18
1:A:113:ASP:CB	1:A:118:LYS:O	0.62	2.48	24	6
1:A:30:ILE:HG23	1:A:32:ILE:HD12	0.62	1.71	12	1
1:A:87:THR:HA	1:A:114:GLN:HG3	0.62	1.69	2	1
1:A:145:SER:O	1:A:149:GLY:CA	0.62	2.47	4	24
1:A:136:VAL:C	1:A:138:PRO:HD2	0.62	2.15	7	24
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:CB	0.62	2.82	5	18
1:A:79:GLN:HA	1:A:87:THR:O	0.62	1.95	7	23
1:A:97:ASN:OD1	1:A:100:GLY:CA	0.62	2.48	6	3
1:A:6:TYR:CD2	1:A:45:GLU:CB	0.62	2.83	6	16
1:A:183:GLU:HA	1:A:186:PRO:HD3	0.62	1.72	11	20
1:A:197:PRO:O	1:A:201:ILE:HG23	0.62	1.94	13	3
1:A:47:TYR:O	1:A:50:GLN:HB2	0.62	1.95	15	24
1:A:30:ILE:HG23	1:A:71:LEU:HD23	0.62	1.71	22	9
1:A:177:PHE:O	1:A:193:GLN:HA	0.62	1.95	13	24
1:A:176:ILE:HG23	1:A:178:PHE:CZ	0.62	2.30	4	2
1:A:175:VAL:C	1:A:195:LEU:HD12	0.61	2.15	9	24
1:A:179:PHE:O	1:A:191:PRO:CA	0.61	2.48	10	10
1:A:125:LEU:HD13	1:A:125:LEU:C	0.61	2.15	23	9
1:A:77:THR:OG1	1:A:90:VAL:CG1	0.61	2.49	3	1
1:A:88:GLN:CB	1:A:114:GLN:HG2	0.61	2.25	11	2
1:A:124:THR:O	1:A:205:LEU:HB3	0.61	1.94	18	8
1:A:41:GLN:CD	1:A:41:GLN:N	0.61	2.54	22	9
1:A:30:ILE:CG2	1:A:71:LEU:HD23	0.61	2.25	21	9
1:A:34:LEU:HD23	1:A:44:LEU:CD1	0.61	2.24	11	6
1:A:112:TRP:CD1	1:A:112:TRP:C	0.61	2.74	5	13
1:A:176:ILE:CG2	1:A:178:PHE:CE1	0.61	2.82	4	3
1:A:175:VAL:HG11	1:A:201:ILE:CG1	0.61	2.26	1	4
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:ALA:HB2	0.61	1.73	2	5
1:A:134:PRO:O	1:A:138:PRO:CD	0.61	2.49	5	24
1:A:21:ILE:HG23	1:A:32:ILE:HD13	0.61	1.70	24	9
1:A:179:PHE:HE1	1:A:192:THR:HG22	0.61	1.55	15	18
1:A:78:TYR:HE1	1:A:91:VAL:HG13	0.61	1.55	12	7
1:A:77:THR:HG23	1:A:90:VAL:HG12	0.61	1.71	23	1
1:A:31:ASN:C	1:A:32:ILE:CD1	0.61	2.69	17	3
1:A:176:ILE:HG13	1:A:195:LEU:CB	0.61	2.26	20	24

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:PRO:HB2	1:A:84:PRO:HD3	0.61	1.73	21	24
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:C	0.61	2.55	24	5
1:A:87:THR:C	1:A:114:GLN:HG3	0.61	2.17	21	9
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:C	0.61	2.15	9	2
1:A:181:PRO:HG3	1:A:192:THR:HB	0.60	1.73	22	15
1:A:185:LEU:CD2	1:A:189:ALA:HB3	0.60	2.26	21	1
1:A:89:ALA:HA	1:A:110:PHE:O	0.60	1.97	1	18
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:NE2	0.60	2.69	6	10
1:A:97:ASN:HB2	1:A:102:HIS:O	0.60	1.97	7	12
1:A:124:THR:HA	1:A:206:ALA:CA	0.60	2.26	6	24
1:A:6:TYR:CG	1:A:45:GLU:CG	0.60	2.84	23	24
1:A:53:ASP:O	1:A:57:SER:N	0.60	2.34	8	24
1:A:116:TYR:O	1:A:117:ARG:CG	0.60	2.49	4	11
1:A:84:PRO:O	1:A:85:ARG:O	0.60	2.18	16	24
1:A:91:VAL:CG2	1:A:91:VAL:O	0.60	2.49	12	4
1:A:42:LYS:HA	1:A:42:LYS:HE3	0.60	1.73	16	13
1:A:136:VAL:CG1	1:A:162:PRO:HD3	0.60	2.27	22	24
1:A:66:GLU:CB	1:A:100:GLY:HA3	0.60	2.25	18	23
1:A:112:TRP:CE3	1:A:119:PRO:HD3	0.60	2.32	6	18
1:A:56:LEU:HD22	1:A:69:TYR:HB2	0.60	1.74	24	21
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:CG1	0.60	2.18	13	2
1:A:47:TYR:CD2	1:A:51:THR:OG1	0.60	2.53	19	24
1:A:10:LEU:O	1:A:21:ILE:HG12	0.60	1.97	16	24
1:A:121:THR:O	1:A:125:LEU:N	0.60	2.35	10	24
1:A:178:PHE:CD1	1:A:178:PHE:N	0.60	2.66	14	2
1:A:41:GLN:HA	1:A:41:GLN:NE2	0.60	2.12	1	2
1:A:44:LEU:HD23	1:A:110:PHE:HE1	0.60	1.51	12	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:51:THR:HG23	0.60	2.32	19	1
1:A:42:LYS:HA	1:A:42:LYS:CE	0.60	2.24	22	6
1:A:157:ASN:HD22	1:A:192:THR:HG21	0.60	1.57	15	10
1:A:131:ASP:HB3	1:A:132:PRO:CD	0.60	2.25	22	3
1:A:77:THR:CG2	1:A:90:VAL:HG12	0.60	2.26	23	2
1:A:40:ASP:O	1:A:43:SER:N	0.59	2.34	8	16
1:A:185:LEU:CD1	1:A:191:PRO:N	0.59	2.65	23	8
1:A:161:ASP:HB3	1:A:176:ILE:HD11	0.59	1.74	22	10
1:A:145:SER:HA	1:A:150:GLN:C	0.59	2.18	3	18
1:A:90:VAL:O	1:A:110:PHE:CE1	0.59	2.54	3	17
1:A:95:TYR:C	1:A:95:TYR:CD1	0.59	2.73	15	10
1:A:48:ILE:HG13	1:A:71:LEU:HD21	0.59	1.74	21	12
1:A:42:LYS:HZ1	1:A:46:ASN:HA	0.59	1.57	5	4
1:A:101:THR:O	1:A:103:PRO:HD3	0.59	1.98	12	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:LEU:CD1	1:A:191:PRO:O	0.59	2.51	18	11
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CG1	0.59	2.26	6	21
1:A:41:GLN:O	1:A:44:LEU:N	0.59	2.36	15	20
1:A:112:TRP:NE1	1:A:113:ASP:O	0.59	2.36	11	22
1:A:136:VAL:HG11	1:A:162:PRO:HD3	0.59	1.74	7	15
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG13	0.59	1.97	20	10
1:A:161:ASP:HB3	1:A:193:GLN:NE2	0.59	2.10	12	24
1:A:131:ASP:CB	1:A:132:PRO:CD	0.59	2.80	22	4
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:CG2	0.59	2.50	2	6
1:A:78:TYR:O	1:A:79:GLN:HG2	0.59	1.97	7	5
1:A:196:VAL:HG13	1:A:201:ILE:HG12	0.59	1.74	13	3
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:VAL:HG23	0.59	1.75	21	17
1:A:6:TYR:CE1	1:A:44:LEU:HD11	0.59	2.32	10	8
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:O	0.59	2.21	23	7
1:A:179:PHE:N	1:A:192:THR:O	0.59	2.33	6	24
1:A:70:GLU:O	1:A:96:GLN:HB2	0.59	1.97	6	2
1:A:127:GLN:HA	1:A:206:ALA:OXT	0.59	1.97	5	24
1:A:42:LYS:CE	1:A:46:ASN:HB2	0.59	2.28	2	24
1:A:178:PHE:CD2	1:A:192:THR:C	0.59	2.76	17	7
1:A:184:LEU:C	1:A:185:LEU:CG	0.59	2.71	13	2
1:A:185:LEU:HD11	1:A:192:THR:N	0.59	2.13	7	7
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:HG13	0.59	1.96	7	5
1:A:97:ASN:OD1	1:A:100:GLY:N	0.59	2.36	17	3
1:A:68:PRO:O	1:A:69:TYR:HD1	0.58	1.81	8	24
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:117:ARG:CA	0.58	2.86	21	24
1:A:113:ASP:OD2	1:A:116:TYR:HB2	0.58	1.98	1	4
1:A:48:ILE:O	1:A:49:ALA:C	0.58	2.41	14	24
1:A:112:TRP:CD1	1:A:113:ASP:O	0.58	2.56	16	20
1:A:178:PHE:HD1	1:A:178:PHE:N	0.58	1.96	4	2
1:A:95:TYR:CD1	1:A:95:TYR:C	0.58	2.75	13	14
1:A:91:VAL:CG1	1:A:91:VAL:O	0.58	2.51	23	1
1:A:31:ASN:C	1:A:32:ILE:HD13	0.58	2.19	17	1
1:A:185:LEU:HD22	1:A:190:GLY:C	0.58	2.18	19	5
1:A:185:LEU:HD22	1:A:190:GLY:CA	0.58	2.28	10	5
1:A:145:SER:HA	1:A:150:GLN:O	0.58	1.98	6	18
1:A:136:VAL:HG11	1:A:161:ASP:HA	0.58	1.75	5	22
1:A:73:ILE:CG1	1:A:94:VAL:HG23	0.58	2.29	6	1
1:A:127:GLN:H	1:A:127:GLN:NE2	0.58	1.96	2	16
1:A:28:TYR:CE1	1:A:30:ILE:HD11	0.58	2.34	5	12
1:A:95:TYR:CB	1:A:105:THR:HG23	0.58	2.18	21	3
1:A:154:ILE:CG2	1:A:159:GLY:HA3	0.58	2.27	14	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:VAL:CB	1:A:201:ILE:HG21	0.58	2.28	7	18
1:A:185:LEU:CD1	1:A:185:LEU:O	0.58	2.48	11	4
1:A:78:TYR:N	1:A:78:TYR:CD1	0.58	2.71	23	13
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:119:PRO:HD3	0.58	2.33	24	12
1:A:86:GLY:C	1:A:114:GLN:HB3	0.58	2.18	23	7
1:A:122:TYR:HA	1:A:126:TRP:CD1	0.58	2.34	18	7
1:A:32:ILE:CG2	1:A:73:ILE:HD13	0.58	2.29	6	2
1:A:178:PHE:CD2	1:A:192:THR:O	0.58	2.56	17	8
1:A:28:TYR:HB2	1:A:69:TYR:CD2	0.58	2.33	15	24
1:A:94:VAL:HG13	1:A:94:VAL:O	0.58	1.99	12	13
1:A:96:GLN:O	1:A:104:THR:HG22	0.58	1.99	8	9
1:A:170:VAL:HB	1:A:175:VAL:HB	0.58	1.75	15	11
1:A:135:VAL:HB	1:A:195:LEU:HD23	0.58	1.76	7	12
1:A:201:ILE:HA	1:A:204:MET:CB	0.58	2.28	5	18
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:HG3	0.58	2.33	4	3
1:A:140:VAL:O	1:A:144:LEU:HD13	0.58	1.98	11	11
1:A:71:LEU:CD1	1:A:94:VAL:HG23	0.57	2.29	22	11
1:A:172:ASN:O	1:A:198:ARG:HG3	0.57	1.99	11	17
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:CG1	0.57	2.51	6	2
1:A:22:GLN:HA	1:A:30:ILE:O	0.57	1.99	12	12
1:A:32:ILE:HG12	1:A:73:ILE:CG2	0.57	2.29	12	8
1:A:41:GLN:N	1:A:41:GLN:CD	0.57	2.57	8	6
1:A:78:TYR:CD1	1:A:78:TYR:N	0.57	2.72	3	10
1:A:143:GLU:O	1:A:147:GLN:N	0.57	2.36	5	6
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:O	0.57	2.37	3	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	0.57	1.58	24	6
1:A:176:ILE:HG23	1:A:178:PHE:HE1	0.57	1.57	14	10
1:A:181:PRO:HG3	1:A:192:THR:OG1	0.57	1.99	15	7
1:A:54:LYS:CA	1:A:57:SER:HB2	0.57	2.30	22	19
1:A:185:LEU:HD22	1:A:189:ALA:HB3	0.57	1.76	21	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:SER:N	0.57	2.67	1	16
1:A:89:ALA:HB2	1:A:170:VAL:CG1	0.57	2.28	5	1
1:A:182:GLY:O	1:A:183:GLU:HG3	0.57	1.99	13	10
1:A:161:ASP:OD2	1:A:176:ILE:HD11	0.57	1.99	24	23
1:A:10:LEU:O	1:A:11:LYS:HB2	0.57	1.98	24	23
1:A:41:GLN:C	1:A:43:SER:H	0.57	2.02	15	23
1:A:55:PHE:CE1	1:A:104:THR:HG21	0.57	2.35	9	18
1:A:27:ALA:O	1:A:69:TYR:CE1	0.57	2.58	12	24
1:A:185:LEU:CD1	1:A:191:PRO:C	0.57	2.73	13	8
1:A:29:ASN:ND2	1:A:31:ASN:OD1	0.57	2.38	9	3
1:A:93:LYS:HB2	1:A:107:TYR:CE1	0.57	2.35	2	20

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:GLU:HB3	0.57	1.75	24	10
1:A:73:ILE:CB	1:A:94:VAL:HG23	0.56	2.30	6	1
1:A:90:VAL:O	1:A:110:PHE:CD1	0.56	2.58	3	15
1:A:63:THR:HG22	1:A:102:HIS:HB2	0.56	1.76	21	12
1:A:112:TRP:C	1:A:112:TRP:CD1	0.56	2.78	1	11
1:A:75:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD23	0.56	1.76	19	6
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:CG	0.56	2.89	23	22
1:A:101:THR:O	1:A:103:PRO:CD	0.56	2.53	3	23
1:A:111:ASP:CG	1:A:170:VAL:HG11	0.56	2.20	8	5
1:A:42:LYS:CE	1:A:42:LYS:CA	0.56	2.82	8	11
1:A:185:LEU:HG	1:A:191:PRO:N	0.56	2.15	9	2
1:A:178:PHE:CD1	1:A:193:GLN:HB3	0.56	2.31	17	1
1:A:175:VAL:HG22	1:A:175:VAL:O	0.56	1.99	23	4
1:A:102:HIS:CE1	1:A:104:THR:HG1	0.56	2.19	18	4
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:ALA:HB1	0.56	1.77	8	7
1:A:141:GLN:O	1:A:144:LEU:N	0.56	2.39	24	23
1:A:161:ASP:CB	1:A:193:GLN:CD	0.56	2.74	15	24
1:A:175:VAL:CG1	1:A:196:VAL:HB	0.56	2.31	18	2
1:A:185:LEU:HD13	1:A:189:ALA:CB	0.56	2.30	17	4
1:A:52:ARG:CB	1:A:71:LEU:HD22	0.56	2.30	19	7
1:A:66:GLU:H	1:A:101:THR:H	0.56	1.42	18	24
1:A:88:GLN:OE1	1:A:112:TRP:CD1	0.56	2.58	8	13
1:A:129:ASP:HB2	1:A:204:MET:HG3	0.56	1.76	10	5
1:A:34:LEU:CD2	1:A:44:LEU:HD11	0.56	2.27	11	2
1:A:94:VAL:O	1:A:94:VAL:HG12	0.56	2.00	6	1
1:A:55:PHE:CE1	1:A:104:THR:CG2	0.56	2.89	10	15
1:A:63:THR:HG21	1:A:102:HIS:CD2	0.56	2.36	18	2
1:A:30:ILE:CG2	1:A:32:ILE:CD1	0.56	2.84	3	4
1:A:113:ASP:HB3	1:A:118:LYS:O	0.55	2.02	8	5
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:LEU:HD13	0.55	1.78	13	2
1:A:133:LEU:HD13	1:A:194:VAL:HB	0.55	1.76	18	4
1:A:185:LEU:HB3	1:A:191:PRO:O	0.55	2.00	24	7
1:A:71:LEU:HG	1:A:73:ILE:CG2	0.55	2.31	20	5
1:A:95:TYR:HB2	1:A:105:THR:HG22	0.55	1.78	8	2
1:A:156:PRO:CA	1:A:160:LEU:HB2	0.55	2.31	19	16
1:A:159:GLY:O	1:A:160:LEU:C	0.55	2.44	4	9
1:A:93:LYS:HB2	1:A:107:TYR:CZ	0.55	2.36	15	18
1:A:55:PHE:HD2	1:A:96:GLN:NE2	0.55	1.99	10	7
1:A:34:LEU:CD1	1:A:35:PRO:HD2	0.55	2.28	5	2
1:A:124:THR:CA	1:A:206:ALA:CB	0.55	2.79	23	2
1:A:98:ALA:HB3	1:A:102:HIS:HB3	0.55	1.79	3	17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:GLN:OE1	1:A:41:GLN:N	0.55	2.38	16	7
1:A:48:ILE:HD13	1:A:73:ILE:HD12	0.55	1.79	22	3
1:A:157:ASN:ND2	1:A:192:THR:HG21	0.55	2.17	15	2
1:A:185:LEU:HD11	1:A:191:PRO:CA	0.55	2.32	1	5
1:A:127:GLN:NE2	1:A:127:GLN:H	0.55	1.99	19	8
1:A:145:SER:O	1:A:149:GLY:HA2	0.55	2.01	19	24
1:A:41:GLN:O	1:A:42:LYS:C	0.55	2.45	18	24
1:A:144:LEU:HD22	1:A:154:ILE:HD11	0.55	1.79	15	6
1:A:29:ASN:HB3	1:A:70:GLU:CG	0.55	2.32	21	2
1:A:44:LEU:O	1:A:47:TYR:CB	0.55	2.55	12	24
1:A:196:VAL:CG1	1:A:197:PRO:HD2	0.55	2.32	18	3
1:A:95:TYR:C	1:A:95:TYR:HD1	0.55	2.05	15	1
1:A:141:GLN:HE22	1:A:154:ILE:HD12	0.55	1.60	7	19
1:A:90:VAL:HG23	1:A:110:PHE:HE1	0.55	1.61	16	15
1:A:95:TYR:CB	1:A:105:THR:HG22	0.55	2.32	8	2
1:A:95:TYR:HD1	1:A:96:GLN:N	0.55	2.00	15	3
1:A:175:VAL:HG13	1:A:196:VAL:CB	0.55	2.32	11	17
1:A:197:PRO:O	1:A:201:ILE:CG1	0.55	2.55	15	21
1:A:83:PRO:HB2	1:A:84:PRO:HD2	0.55	1.79	14	24
1:A:185:LEU:CD1	1:A:189:ALA:CB	0.55	2.84	24	5
1:A:44:LEU:CD2	1:A:110:PHE:CZ	0.55	2.88	13	6
1:A:134:PRO:O	1:A:137:PHE:HB2	0.55	2.02	13	22
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:HG23	0.55	2.01	17	11
1:A:97:ASN:C	1:A:97:ASN:HD22	0.55	2.05	24	5
1:A:156:PRO:HA	1:A:160:LEU:N	0.54	2.17	19	21
1:A:122:TYR:HB3	1:A:126:TRP:NE1	0.54	2.17	8	24
1:A:91:VAL:HG13	1:A:91:VAL:O	0.54	2.02	15	4
1:A:6:TYR:CD2	1:A:45:GLU:CG	0.54	2.90	24	21
1:A:6:TYR:CE2	1:A:45:GLU:CB	0.54	2.90	23	24
1:A:181:PRO:HG2	1:A:192:THR:OG1	0.54	2.02	6	11
1:A:66:GLU:HB2	1:A:101:THR:N	0.54	2.17	7	7
1:A:52:ARG:HD3	1:A:53:ASP:N	0.54	2.17	12	6
1:A:93:LYS:HG3	1:A:107:TYR:CZ	0.54	2.37	5	4
1:A:6:TYR:CE1	1:A:41:GLN:HB3	0.54	2.38	6	20
1:A:136:VAL:HB	1:A:195:LEU:HB2	0.54	1.77	10	20
1:A:34:LEU:HD21	1:A:41:GLN:CG	0.54	2.32	18	2
1:A:34:LEU:HD12	1:A:41:GLN:HG3	0.54	1.78	12	3
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:HG13	0.54	2.02	9	1
1:A:42:LYS:CA	1:A:42:LYS:CE	0.54	2.86	22	9
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:OE1	0.54	2.61	4	4
1:A:78:TYR:C	1:A:79:GLN:HG2	0.54	2.21	17	9

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ASN:O	1:A:50:GLN:HG2	0.54	2.03	10	24
1:A:131:ASP:HB3	1:A:132:PRO:HD2	0.54	1.78	22	7
1:A:30:ILE:CG2	1:A:32:ILE:HD13	0.54	2.32	20	2
1:A:157:ASN:C	1:A:184:LEU:HB2	0.54	2.23	21	4
1:A:69:TYR:CA	1:A:99:GLY:H	0.54	2.04	19	6
1:A:197:PRO:HD2	1:A:201:ILE:CG2	0.54	2.32	1	18
1:A:161:ASP:HB3	1:A:193:GLN:CD	0.54	2.23	1	22
1:A:175:VAL:O	1:A:196:VAL:N	0.54	2.34	22	17
1:A:185:LEU:CD1	1:A:189:ALA:HB3	0.54	2.33	6	4
1:A:65:ARG:CB	1:A:99:GLY:HA3	0.54	2.32	3	1
1:A:6:TYR:HE1	1:A:41:GLN:HB3	0.54	1.62	14	15
1:A:52:ARG:HA	1:A:96:GLN:NE2	0.54	2.17	6	9
1:A:80:SER:HB3	1:A:87:THR:N	0.54	2.17	8	8
1:A:65:ARG:HB3	1:A:99:GLY:HA3	0.54	1.78	3	1
1:A:28:TYR:CB	1:A:69:TYR:CG	0.54	2.90	23	24
1:A:67:ALA:HB3	1:A:68:PRO:CD	0.54	2.27	5	14
1:A:3:PRO:O	1:A:4:LYS:HG2	0.54	2.03	5	12
1:A:136:VAL:HG21	1:A:176:ILE:CD1	0.54	2.33	17	19
1:A:88:GLN:HG3	1:A:112:TRP:CD1	0.54	2.38	15	2
1:A:111:ASP:OD2	1:A:125:LEU:HD23	0.54	2.03	9	1
1:A:161:ASP:HB2	1:A:193:GLN:O	0.54	2.03	14	21
1:A:32:ILE:CB	1:A:73:ILE:HG23	0.54	2.33	2	13
1:A:113:ASP:OD1	1:A:118:LYS:N	0.54	2.41	16	9
1:A:55:PHE:CG	1:A:104:THR:HG21	0.54	2.38	15	12
1:A:110:PHE:HD1	1:A:110:PHE:N	0.54	2.00	1	1
1:A:28:TYR:HB3	1:A:69:TYR:CG	0.54	2.38	10	24
1:A:42:LYS:CD	1:A:45:GLU:OE2	0.54	2.56	5	8
1:A:170:VAL:HG13	1:A:170:VAL:O	0.54	2.03	20	4
1:A:131:ASP:CB	1:A:132:PRO:HD2	0.53	2.33	22	22
1:A:126:TRP:O	1:A:206:ALA:CA	0.53	2.56	18	24
1:A:34:LEU:CG	1:A:41:GLN:HG3	0.53	2.33	4	10
1:A:90:VAL:HG23	1:A:90:VAL:O	0.53	2.04	23	9
1:A:91:VAL:HG22	1:A:91:VAL:O	0.53	2.04	1	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:116:TYR:HB2	0.53	2.22	22	3
1:A:64:PRO:O	1:A:102:HIS:N	0.53	2.42	4	4
1:A:6:TYR:CE2	1:A:45:GLU:HB3	0.53	2.39	20	6
1:A:41:GLN:NE2	1:A:41:GLN:HA	0.53	2.18	18	2
1:A:181:PRO:HD3	1:A:192:THR:H	0.53	1.63	23	14
1:A:175:VAL:O	1:A:175:VAL:CG2	0.53	2.57	23	1
1:A:144:LEU:CD2	1:A:152:VAL:HG21	0.53	2.28	18	3
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:HG2	0.53	2.04	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:ASP:O	1:A:205:LEU:HB2	0.53	2.03	14	24
1:A:175:VAL:CG2	1:A:177:PHE:CE1	0.53	2.92	1	18
1:A:71:LEU:HG	1:A:73:ILE:HG22	0.53	1.79	17	10
1:A:55:PHE:CE1	1:A:104:THR:HB	0.53	2.39	19	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:92:LEU:HD13	0.53	1.81	21	2
1:A:41:GLN:N	1:A:41:GLN:NE2	0.53	2.56	12	3
1:A:29:ASN:HB3	1:A:70:GLU:HG3	0.53	1.79	2	2
1:A:179:PHE:N	1:A:179:PHE:CD1	0.53	2.77	13	10
1:A:185:LEU:HD12	1:A:191:PRO:C	0.53	2.24	21	1
1:A:54:LYS:O	1:A:57:SER:CB	0.53	2.57	23	23
1:A:179:PHE:CD1	1:A:179:PHE:N	0.53	2.77	23	12
1:A:32:ILE:CD1	1:A:32:ILE:N	0.53	2.66	24	8
1:A:178:PHE:HB3	1:A:192:THR:O	0.53	2.03	4	4
1:A:185:LEU:HD21	1:A:191:PRO:HD2	0.53	1.81	10	3
1:A:82:ILE:N	1:A:85:ARG:O	0.53	2.42	3	24
1:A:96:GLN:O	1:A:104:THR:HB	0.53	2.03	6	7
1:A:40:ASP:C	1:A:42:LYS:N	0.53	2.61	8	20
1:A:90:VAL:HG23	1:A:110:PHE:CD1	0.53	2.38	4	4
1:A:82:ILE:HG23	1:A:83:PRO:HD2	0.53	1.79	16	12
1:A:71:LEU:CD1	1:A:73:ILE:HG22	0.53	2.34	23	1
1:A:29:ASN:OD1	1:A:30:ILE:N	0.53	2.42	17	2
1:A:97:ASN:CG	1:A:102:HIS:O	0.53	2.47	21	2
1:A:160:LEU:CD2	1:A:161:ASP:OD1	0.53	2.57	15	17
1:A:87:THR:C	1:A:114:GLN:CG	0.53	2.77	16	8
1:A:41:GLN:OE1	1:A:44:LEU:CD2	0.53	2.53	24	4
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:LEU:CD2	0.53	2.34	5	1
1:A:86:GLY:O	1:A:114:GLN:HB3	0.53	2.03	1	6
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.53	2.03	1	7
1:A:180:ASN:CA	1:A:191:PRO:HA	0.53	2.30	20	4
1:A:113:ASP:CG	1:A:118:LYS:O	0.53	2.48	7	3
1:A:91:VAL:HG23	1:A:107:TYR:CE1	0.53	2.39	17	1
1:A:128:ALA:C	1:A:130:THR:H	0.53	2.07	1	24
1:A:141:GLN:NE2	1:A:154:ILE:CD1	0.53	2.71	18	23
1:A:80:SER:HB2	1:A:87:THR:HB	0.53	1.81	13	10
1:A:33:SER:HB2	1:A:74:THR:HG23	0.53	1.79	14	8
1:A:197:PRO:CB	1:A:201:ILE:HG23	0.53	2.34	18	6
1:A:32:ILE:HD11	1:A:71:LEU:HG	0.53	1.81	23	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:181:PRO:HG3	0.53	2.39	17	1
1:A:32:ILE:HD12	1:A:73:ILE:CG2	0.53	2.34	17	1
1:A:45:GLU:HA	1:A:48:ILE:HB	0.53	1.80	15	1
1:A:6:TYR:CZ	1:A:45:GLU:HB3	0.52	2.38	13	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ASP:O	1:A:132:PRO:O	0.52	2.27	8	18
1:A:55:PHE:CE2	1:A:104:THR:HB	0.52	2.38	6	1
1:A:124:THR:OG1	1:A:206:ALA:HB2	0.52	2.04	8	5
1:A:48:ILE:C	1:A:50:GLN:N	0.52	2.62	13	24
1:A:176:ILE:HG13	1:A:195:LEU:CA	0.52	2.34	20	18
1:A:68:PRO:C	1:A:99:GLY:CA	0.52	2.76	19	8
1:A:175:VAL:O	1:A:175:VAL:HG22	0.52	2.03	13	1
1:A:196:VAL:HG13	1:A:201:ILE:CG1	0.52	2.34	20	3
1:A:132:PRO:C	1:A:134:PRO:HD3	0.52	2.24	10	19
1:A:88:GLN:OE1	1:A:112:TRP:CG	0.52	2.63	10	15
1:A:19:CYS:O	1:A:33:SER:CA	0.52	2.56	6	10
1:A:6:TYR:CD2	1:A:45:GLU:HB2	0.52	2.38	6	4
1:A:91:VAL:HG23	1:A:109:ALA:CA	0.52	2.34	16	3
1:A:185:LEU:CG	1:A:191:PRO:O	0.52	2.57	23	5
1:A:32:ILE:HG12	1:A:73:ILE:HG23	0.52	1.79	3	1
1:A:48:ILE:HD12	1:A:51:THR:HB	0.52	1.81	11	3
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:CB	0.52	2.58	9	4
1:A:176:ILE:N	1:A:195:LEU:CD1	0.52	2.71	9	19
1:A:141:GLN:NE2	1:A:154:ILE:CG1	0.52	2.73	15	17
1:A:175:VAL:CG1	1:A:201:ILE:HD11	0.52	2.34	5	2
1:A:88:GLN:CG	1:A:112:TRP:CD1	0.52	2.92	15	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:41:GLN:CG	0.52	2.32	19	1
1:A:19:CYS:CB	1:A:34:LEU:O	0.52	2.58	17	8
1:A:68:PRO:O	1:A:99:GLY:HA3	0.52	2.04	3	3
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:VAL:HG22	0.52	1.80	6	1
1:A:75:SER:HB3	1:A:92:LEU:CD2	0.52	2.34	23	3
1:A:116:TYR:HB2	1:A:118:LYS:HD2	0.52	1.82	11	1
1:A:176:ILE:CD1	1:A:193:GLN:OE1	0.52	2.56	19	17
1:A:179:PHE:O	1:A:181:PRO:HD3	0.52	2.05	23	16
1:A:83:PRO:CB	1:A:84:PRO:CD	0.52	2.87	1	20
1:A:90:VAL:CG2	1:A:90:VAL:O	0.52	2.58	3	5
1:A:43:SER:CB	1:A:110:PHE:CE2	0.52	2.93	5	2
1:A:73:ILE:CD1	1:A:92:LEU:HD13	0.52	2.34	21	1
1:A:26:PRO:O	1:A:27:ALA:CB	0.52	2.58	18	24
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:CA	0.52	2.72	2	17
1:A:65:ARG:CB	1:A:98:ALA:O	0.52	2.58	20	13
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:THR:N	0.52	2.01	24	4
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:HB3	0.52	2.05	21	10
1:A:178:PHE:CB	1:A:192:THR:O	0.52	2.58	19	12
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HD12	0.52	2.04	10	2
1:A:88:GLN:O	1:A:88:GLN:OE1	0.52	2.28	24	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:SER:HB3	1:A:92:LEU:CG	0.52	2.35	1	5
1:A:51:THR:O	1:A:55:PHE:HD2	0.51	1.88	19	1
1:A:161:ASP:HB3	1:A:176:ILE:CD1	0.51	2.35	22	7
1:A:51:THR:O	1:A:55:PHE:CD2	0.51	2.63	19	2
1:A:137:PHE:CE1	1:A:159:GLY:O	0.51	2.63	14	21
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:GLU:N	0.51	2.20	12	9
1:A:68:PRO:C	1:A:69:TYR:CD1	0.51	2.83	3	24
1:A:67:ALA:N	1:A:99:GLY:O	0.51	2.43	22	18
1:A:179:PHE:O	1:A:191:PRO:CB	0.51	2.58	22	7
1:A:129:ASP:HB3	1:A:204:MET:HG3	0.51	1.81	16	5
1:A:6:TYR:HD2	1:A:10:LEU:HG	0.51	1.65	12	17
1:A:48:ILE:HG13	1:A:71:LEU:CD2	0.51	2.36	24	17
1:A:186:PRO:O	1:A:190:GLY:N	0.51	2.38	17	7
1:A:93:LYS:CB	1:A:107:TYR:CZ	0.51	2.94	5	14
1:A:35:PRO:CG	1:A:75:SER:O	0.51	2.58	14	7
1:A:185:LEU:HD11	1:A:189:ALA:C	0.51	2.25	9	1
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:HB2	0.51	2.39	21	4
1:A:91:VAL:CG1	1:A:109:ALA:CB	0.51	2.89	8	2
1:A:87:THR:N	1:A:114:GLN:CG	0.51	2.70	22	1
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:HB2	0.51	2.05	14	8
1:A:73:ILE:HG13	1:A:94:VAL:HG23	0.51	1.83	6	1
1:A:79:GLN:HB3	1:A:114:GLN:HE22	0.51	1.65	5	4
1:A:136:VAL:HG11	1:A:161:ASP:CB	0.51	2.35	6	17
1:A:48:ILE:O	1:A:51:THR:N	0.51	2.44	13	24
1:A:125:LEU:CD1	1:A:126:TRP:CE3	0.51	2.94	5	13
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:TRP:CE2	0.51	2.41	5	23
1:A:96:GLN:O	1:A:104:THR:OG1	0.51	2.29	17	6
1:A:13:THR:HB	1:A:20:GLN:HG3	0.51	1.83	7	9
1:A:185:LEU:CD1	1:A:190:GLY:CA	0.51	2.88	8	2
1:A:21:ILE:CD1	1:A:21:ILE:C	0.51	2.79	14	9
1:A:76:ALA:O	1:A:78:TYR:CE1	0.51	2.64	3	18
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:C	0.51	2.64	24	2
1:A:145:SER:O	1:A:149:GLY:N	0.51	2.44	15	6
1:A:15:THR:CG2	1:A:20:GLN:NE2	0.51	2.74	23	6
1:A:141:GLN:CA	1:A:144:LEU:HB2	0.51	2.35	21	23
1:A:169:ALA:N	1:A:176:ILE:O	0.51	2.44	6	8
1:A:93:LYS:HA	1:A:107:TYR:CD1	0.51	2.41	6	22
1:A:35:PRO:HG2	1:A:75:SER:O	0.51	2.05	14	7
1:A:185:LEU:HB3	1:A:191:PRO:C	0.51	2.26	8	5
1:A:19:CYS:HB3	1:A:34:LEU:O	0.51	2.06	19	9
1:A:160:LEU:HD22	1:A:194:VAL:HA	0.51	1.82	7	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ILE:CG2	1:A:21:ILE:O	0.51	2.58	8	11
1:A:178:PHE:CD2	1:A:191:PRO:O	0.51	2.63	7	3
1:A:32:ILE:HG12	1:A:48:ILE:HG12	0.51	1.83	20	1
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:CD2	0.50	2.59	1	6
1:A:59:ALA:HB2	1:A:98:ALA:HB1	0.50	1.83	3	2
1:A:91:VAL:HG23	1:A:91:VAL:O	0.50	2.06	2	1
1:A:45:GLU:HG3	1:A:46:ASN:N	0.50	2.21	10	19
1:A:133:LEU:HB2	1:A:194:VAL:C	0.50	2.27	13	10
1:A:32:ILE:HG12	1:A:73:ILE:HD13	0.50	1.82	10	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:HA2	0.50	2.22	3	8
1:A:91:VAL:CG1	1:A:169:ALA:HB2	0.50	2.32	21	2
1:A:82:ILE:HB	1:A:86:GLY:HA2	0.50	1.83	23	14
1:A:6:TYR:CE1	1:A:41:GLN:CB	0.50	2.94	8	19
1:A:112:TRP:HZ2	1:A:117:ARG:HA	0.50	1.66	7	1
1:A:77:THR:HB	1:A:90:VAL:CG1	0.50	2.32	15	12
1:A:178:PHE:CG	1:A:193:GLN:HB3	0.50	2.40	7	1
1:A:185:LEU:N	1:A:185:LEU:HD12	0.50	2.21	14	3
1:A:84:PRO:O	1:A:85:ARG:C	0.50	2.50	10	24
1:A:67:ALA:CB	1:A:68:PRO:HD3	0.50	2.24	22	15
1:A:137:PHE:CD1	1:A:160:LEU:HA	0.50	2.42	17	4
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HE3	0.50	2.06	5	8
1:A:133:LEU:HD13	1:A:194:VAL:CB	0.50	2.36	18	3
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:CD1	0.50	2.59	10	3
1:A:157:ASN:O	1:A:183:GLU:C	0.50	2.50	3	13
1:A:87:THR:CA	1:A:114:GLN:CG	0.50	2.89	22	2
1:A:32:ILE:CG2	1:A:73:ILE:CG2	0.50	2.89	22	10
1:A:97:ASN:CB	1:A:102:HIS:O	0.50	2.60	18	17
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:CB	0.50	2.59	19	10
1:A:55:PHE:CE2	1:A:104:THR:CG2	0.50	2.94	6	2
1:A:87:THR:HA	1:A:114:GLN:CB	0.50	2.37	4	2
1:A:80:SER:HB2	1:A:87:THR:CB	0.50	2.37	21	12
1:A:124:THR:HA	1:A:206:ALA:HA	0.50	1.84	17	24
1:A:87:THR:CG2	1:A:112:TRP:O	0.50	2.60	15	4
1:A:88:GLN:N	1:A:114:GLN:HG2	0.50	2.22	16	4
1:A:34:LEU:HG	1:A:41:GLN:HG3	0.50	1.82	5	2
1:A:6:TYR:CD2	1:A:45:GLU:CD	0.50	2.85	15	5
1:A:157:ASN:HA	1:A:184:LEU:HB2	0.50	1.84	8	4
1:A:4:LYS:HE3	1:A:8:GLU:CG	0.50	2.37	19	1
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:HG23	0.50	2.07	19	12
1:A:127:GLN:O	1:A:130:THR:CG2	0.50	2.58	3	8
1:A:159:GLY:HA2	1:A:184:LEU:HD12	0.50	1.83	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ILE:HD11	1:A:71:LEU:CG	0.50	2.37	23	2
1:A:19:CYS:N	1:A:34:LEU:O	0.50	2.45	21	3
1:A:40:ASP:HB2	1:A:112:TRP:HZ3	0.50	1.67	15	1
1:A:178:PHE:CZ	1:A:193:GLN:CG	0.49	2.94	4	6
1:A:71:LEU:HA	1:A:96:GLN:CB	0.49	2.36	6	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:98:ALA:N	0.49	2.59	24	4
1:A:34:LEU:HD21	1:A:41:GLN:CD	0.49	2.28	3	2
1:A:133:LEU:HB2	1:A:194:VAL:CB	0.49	2.35	20	14
1:A:6:TYR:CE2	1:A:45:GLU:HB2	0.49	2.42	1	9
1:A:196:VAL:HG22	1:A:197:PRO:CD	0.49	2.32	13	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:44:LEU:CD2	0.49	2.35	15	1
1:A:68:PRO:C	1:A:69:TYR:HD1	0.49	2.11	19	24
1:A:52:ARG:HA	1:A:96:GLN:OE1	0.49	2.07	10	7
1:A:179:PHE:CZ	1:A:181:PRO:HB3	0.49	2.42	17	1
1:A:117:ARG:O	1:A:118:LYS:HG2	0.49	2.07	14	1
1:A:59:ALA:CA	1:A:63:THR:OG1	0.49	2.58	3	11
1:A:185:LEU:O	1:A:186:PRO:O	0.49	2.31	7	8
1:A:156:PRO:HA	1:A:160:LEU:CB	0.49	2.38	14	5
1:A:6:TYR:OH	1:A:34:LEU:CD2	0.49	2.60	15	5
1:A:140:VAL:HG12	1:A:154:ILE:HD12	0.49	1.84	17	5
1:A:32:ILE:N	1:A:32:ILE:CD1	0.49	2.75	17	4
1:A:97:ASN:HD21	1:A:100:GLY:HA2	0.49	1.67	3	1
1:A:34:LEU:HD21	1:A:41:GLN:HG3	0.49	1.84	2	4
1:A:185:LEU:C	1:A:185:LEU:CD1	0.49	2.65	21	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD1	0.49	2.76	2	8
1:A:134:PRO:HA	1:A:160:LEU:CD2	0.49	2.37	4	14
1:A:21:ILE:HG22	1:A:32:ILE:HB	0.49	1.85	8	7
1:A:40:ASP:HB2	1:A:112:TRP:CZ3	0.49	2.43	3	3
1:A:74:THR:O	1:A:92:LEU:HA	0.49	2.07	3	2
1:A:77:THR:HG23	1:A:88:GLN:OE1	0.49	2.07	3	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:170:VAL:HG12	0.49	2.38	9	1
1:A:185:LEU:HD11	1:A:190:GLY:N	0.49	2.23	9	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:H	0.49	2.06	15	16
1:A:161:ASP:HB2	1:A:193:GLN:HE21	0.49	1.65	22	17
1:A:43:SER:HB2	1:A:110:PHE:CE2	0.49	2.43	5	1
1:A:15:THR:HG23	1:A:18:ALA:CB	0.49	2.35	21	3
1:A:30:ILE:HD13	1:A:52:ARG:NH2	0.49	2.23	1	1
1:A:75:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	0.49	1.85	6	3
1:A:197:PRO:O	1:A:201:ILE:HG13	0.49	2.08	2	9
1:A:113:ASP:C	1:A:113:ASP:OD1	0.49	2.51	1	3
1:A:21:ILE:O	1:A:21:ILE:CG2	0.49	2.61	17	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ILE:HG23	1:A:32:ILE:HD11	0.49	1.83	12	1
1:A:122:TYR:CB	1:A:126:TRP:CD1	0.49	2.96	19	22
1:A:136:VAL:CG1	1:A:176:ILE:HD11	0.49	2.38	19	5
1:A:54:LYS:HA	1:A:57:SER:HB2	0.49	1.84	19	18
1:A:87:THR:O	1:A:114:GLN:NE2	0.49	2.46	6	4
1:A:117:ARG:O	1:A:117:ARG:HG3	0.49	2.08	5	1
1:A:177:PHE:O	1:A:193:GLN:CA	0.49	2.60	15	8
1:A:75:SER:HB2	1:A:92:LEU:CD2	0.49	2.38	7	1
1:A:74:THR:O	1:A:93:LYS:N	0.49	2.37	21	8
1:A:81:ALA:HB3	1:A:172:ASN:ND2	0.49	2.23	12	1
1:A:185:LEU:CA	1:A:189:ALA:HB3	0.48	2.37	19	3
1:A:192:THR:CG2	1:A:193:GLN:N	0.48	2.76	16	7
1:A:21:ILE:HG23	1:A:32:ILE:CD1	0.48	2.38	6	4
1:A:28:TYR:CD2	1:A:56:LEU:CD1	0.48	2.93	13	13
1:A:63:THR:O	1:A:65:ARG:CG	0.48	2.62	10	3
1:A:136:VAL:HG11	1:A:162:PRO:HD2	0.48	1.84	7	2
1:A:178:PHE:HD2	1:A:191:PRO:O	0.48	1.90	7	2
1:A:21:ILE:C	1:A:21:ILE:CD1	0.48	2.82	21	9
1:A:42:LYS:HE3	1:A:42:LYS:O	0.48	2.08	11	5
1:A:178:PHE:CE2	1:A:191:PRO:O	0.48	2.66	17	1
1:A:185:LEU:HG	1:A:191:PRO:O	0.48	2.08	21	1
1:A:75:SER:CA	1:A:92:LEU:HA	0.48	2.38	2	11
1:A:175:VAL:HG22	1:A:196:VAL:HG23	0.48	1.85	1	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:201:ILE:HG12	0.48	2.37	13	3
1:A:135:VAL:C	1:A:138:PRO:HD2	0.48	2.28	15	21
1:A:89:ALA:CB	1:A:170:VAL:CG1	0.48	2.91	5	1
1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:HD22	0.48	2.28	13	1
1:A:121:THR:HG23	1:A:123:ASP:H	0.48	1.68	14	17
1:A:34:LEU:HD21	1:A:92:LEU:CD2	0.48	2.38	16	1
1:A:56:LEU:HD22	1:A:69:TYR:CB	0.48	2.36	24	12
1:A:56:LEU:HB3	1:A:69:TYR:CD2	0.48	2.43	24	16
1:A:141:GLN:NE2	1:A:154:ILE:HG13	0.48	2.23	11	22
1:A:137:PHE:CZ	1:A:160:LEU:HA	0.48	2.44	16	5
1:A:54:LYS:C	1:A:57:SER:HB2	0.48	2.28	23	6
1:A:117:ARG:O	1:A:117:ARG:CG	0.48	2.62	12	1
1:A:161:ASP:CG	1:A:176:ILE:HD11	0.48	2.29	7	1
1:A:176:ILE:CG2	1:A:178:PHE:CZ	0.48	2.96	4	1
1:A:137:PHE:CD1	1:A:160:LEU:O	0.48	2.66	22	5
1:A:44:LEU:HD13	1:A:92:LEU:CD2	0.48	2.39	11	1
1:A:40:ASP:HB3	1:A:112:TRP:CZ3	0.48	2.43	21	2
1:A:97:ASN:C	1:A:97:ASN:ND2	0.48	2.67	21	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:HIS:NE2	1:A:104:THR:HG23	0.48	2.24	4	1
1:A:18:ALA:HB1	1:A:20:GLN:NE2	0.48	2.24	20	1
1:A:127:GLN:N	1:A:127:GLN:NE2	0.48	2.62	2	18
1:A:136:VAL:CG1	1:A:161:ASP:OD2	0.48	2.62	4	18
1:A:47:TYR:O	1:A:50:GLN:CB	0.48	2.62	8	24
1:A:126:TRP:O	1:A:206:ALA:HA	0.47	2.08	18	19
1:A:93:LYS:HB2	1:A:107:TYR:OH	0.47	2.09	4	8
1:A:143:GLU:O	1:A:146:LYS:HB3	0.47	2.09	17	4
1:A:68:PRO:O	1:A:69:TYR:CD1	0.47	2.66	8	24
1:A:116:TYR:C	1:A:117:ARG:CG	0.47	2.82	1	6
1:A:41:GLN:CA	1:A:41:GLN:NE2	0.47	2.77	18	3
1:A:107:TYR:H	1:A:191:PRO:HG3	0.47	1.68	13	1
1:A:32:ILE:N	1:A:32:ILE:HD13	0.47	2.24	17	1
1:A:113:ASP:HB3	1:A:118:LYS:CG	0.47	2.39	8	1
1:A:80:SER:HB3	1:A:87:THR:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HD22	0.47	2.09	16	12
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:PHE:N	0.47	2.78	4	17
1:A:86:GLY:C	1:A:114:GLN:CB	0.47	2.81	16	7
1:A:73:ILE:CB	1:A:94:VAL:CG2	0.47	2.91	6	1
1:A:43:SER:HB3	1:A:110:PHE:CD2	0.47	2.44	23	3
1:A:113:ASP:OD2	1:A:116:TYR:N	0.47	2.45	8	1
1:A:112:TRP:CA	1:A:119:PRO:HA	0.47	2.36	6	3
1:A:194:VAL:HG23	1:A:194:VAL:O	0.47	2.10	12	10
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:117:ARG:C	0.47	2.87	18	3
1:A:141:GLN:O	1:A:144:LEU:HB2	0.47	2.09	24	14
1:A:13:THR:O	1:A:20:GLN:HG2	0.47	2.10	6	3
1:A:176:ILE:CG1	1:A:195:LEU:HD13	0.47	2.39	18	12
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:HG23	0.47	2.09	12	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:98:ALA:CB	0.47	2.39	8	15
1:A:133:LEU:HB3	1:A:195:LEU:C	0.47	2.30	2	15
1:A:161:ASP:OD2	1:A:176:ILE:CD1	0.47	2.63	22	20
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HD13	0.47	1.86	6	1
1:A:185:LEU:HD21	1:A:191:PRO:CD	0.47	2.39	10	2
1:A:135:VAL:O	1:A:138:PRO:CG	0.47	2.63	18	10
1:A:8:GLU:CG	1:A:9:GLU:N	0.47	2.77	3	3
1:A:42:LYS:HZ1	1:A:46:ASN:CA	0.47	2.23	5	2
1:A:80:SER:CB	1:A:87:THR:N	0.47	2.78	7	5
1:A:67:ALA:H	1:A:68:PRO:CD	0.47	2.23	3	1
1:A:72:ASN:O	1:A:94:VAL:HA	0.47	2.09	2	4
1:A:196:VAL:HB	1:A:201:ILE:HG12	0.47	1.85	7	2
1:A:192:THR:HG22	1:A:193:GLN:N	0.47	2.25	19	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:O	1:A:47:TYR:CA	0.47	2.63	9	24
1:A:133:LEU:CD1	1:A:133:LEU:N	0.47	2.74	10	9
1:A:79:GLN:CA	1:A:87:THR:O	0.47	2.62	15	7
1:A:75:SER:HB2	1:A:92:LEU:CA	0.47	2.40	8	2
1:A:93:LYS:CB	1:A:107:TYR:CE1	0.47	2.97	2	11
1:A:22:GLN:HB3	1:A:31:ASN:ND2	0.47	2.25	4	9
1:A:6:TYR:CE1	1:A:44:LEU:CD1	0.47	2.97	10	3
1:A:136:VAL:CB	1:A:176:ILE:HD11	0.47	2.40	15	7
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:N	0.47	2.25	22	3
1:A:10:LEU:HD21	1:A:45:GLU:OE1	0.47	2.10	22	1
1:A:32:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CD1	0.47	2.40	6	2
1:A:44:LEU:HA	1:A:47:TYR:HB3	0.47	1.87	11	4
1:A:196:VAL:HB	1:A:201:ILE:HG21	0.47	1.85	1	8
1:A:177:PHE:O	1:A:194:VAL:N	0.47	2.46	15	10
1:A:135:VAL:CB	1:A:195:LEU:HD23	0.47	2.40	22	5
1:A:75:SER:HG	1:A:90:VAL:HB	0.47	1.69	20	2
1:A:47:TYR:O	1:A:50:GLN:CA	0.46	2.64	14	24
1:A:94:VAL:HG12	1:A:106:THR:O	0.46	2.10	6	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:125:LEU:O	0.46	2.10	8	10
1:A:196:VAL:HG13	1:A:201:ILE:CB	0.46	2.40	20	3
1:A:92:LEU:C	1:A:107:TYR:CE1	0.46	2.88	17	1
1:A:127:GLN:OE1	1:A:130:THR:HG23	0.46	2.10	8	1
1:A:28:TYR:HB3	1:A:69:TYR:CE2	0.46	2.45	14	12
1:A:42:LYS:HE2	1:A:46:ASN:HB2	0.46	1.87	2	3
1:A:170:VAL:CG1	1:A:170:VAL:O	0.46	2.63	20	1
1:A:137:PHE:N	1:A:138:PRO:CD	0.46	2.78	4	24
1:A:143:GLU:O	1:A:146:LYS:N	0.46	2.49	17	20
1:A:160:LEU:C	1:A:161:ASP:OD1	0.46	2.53	22	5
1:A:73:ILE:CG2	1:A:94:VAL:HG23	0.46	2.40	3	4
1:A:185:LEU:HD11	1:A:192:THR:CA	0.46	2.40	7	2
1:A:7:CYS:HA	1:A:10:LEU:HB2	0.46	1.87	19	9
1:A:121:THR:HG23	1:A:123:ASP:HB2	0.46	1.87	19	6
1:A:127:GLN:NE2	1:A:205:LEU:HD12	0.46	2.25	13	15
1:A:175:VAL:CG1	1:A:201:ILE:HG12	0.46	2.41	1	12
1:A:6:TYR:CD1	1:A:41:GLN:HB2	0.46	2.44	6	4
1:A:87:THR:HG22	1:A:112:TRP:O	0.46	2.10	1	5
1:A:89:ALA:CA	1:A:110:PHE:O	0.46	2.63	2	6
1:A:160:LEU:O	1:A:161:ASP:OD1	0.46	2.34	7	1
1:A:185:LEU:HD13	1:A:189:ALA:HB3	0.46	1.87	4	4
1:A:136:VAL:N	1:A:195:LEU:HD23	0.46	2.26	8	7
1:A:70:GLU:O	1:A:96:GLN:HG3	0.46	2.11	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:PHE:HZ	1:A:154:ILE:O	0.46	1.94	14	2
1:A:63:THR:CG2	1:A:102:HIS:HB2	0.46	2.41	8	8
1:A:15:THR:HB	1:A:18:ALA:HB3	0.46	1.86	16	2
1:A:136:VAL:HG11	1:A:161:ASP:CA	0.46	2.41	18	12
1:A:88:GLN:OE1	1:A:88:GLN:O	0.46	2.34	12	4
1:A:78:TYR:HD1	1:A:89:ALA:O	0.46	1.93	18	3
1:A:127:GLN:CD	1:A:204:MET:O	0.46	2.53	2	15
1:A:186:PRO:O	1:A:189:ALA:N	0.46	2.48	3	12
1:A:48:ILE:O	1:A:52:ARG:HG3	0.46	2.11	6	5
1:A:135:VAL:HG21	1:A:197:PRO:N	0.46	2.26	10	1
1:A:64:PRO:O	1:A:101:THR:CB	0.46	2.60	3	1
1:A:185:LEU:CD2	1:A:190:GLY:N	0.46	2.64	21	1
1:A:6:TYR:OH	1:A:44:LEU:HD11	0.46	2.10	21	1
1:A:116:TYR:O	1:A:117:ARG:CD	0.46	2.64	20	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:194:VAL:HG23	0.46	2.27	1	4
1:A:180:ASN:O	1:A:180:ASN:OD1	0.46	2.34	19	1
1:A:185:LEU:O	1:A:190:GLY:N	0.46	2.49	19	1
1:A:94:VAL:C	1:A:106:THR:O	0.46	2.51	6	1
1:A:181:PRO:CD	1:A:192:THR:OG1	0.46	2.63	1	1
1:A:205:LEU:O	1:A:206:ALA:CB	0.46	2.64	13	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:92:LEU:HD21	0.46	2.41	11	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:110:PHE:CZ	0.46	2.46	21	1
1:A:156:PRO:O	1:A:184:LEU:HG	0.45	2.11	2	1
1:A:141:GLN:HE22	1:A:154:ILE:CD1	0.45	2.24	7	8
1:A:126:TRP:O	1:A:206:ALA:O	0.45	2.34	21	22
1:A:143:GLU:O	1:A:146:LYS:CB	0.45	2.64	10	6
1:A:133:LEU:HG	1:A:196:VAL:HG23	0.45	1.87	13	1
1:A:162:PRO:O	1:A:193:GLN:NE2	0.45	2.48	21	3
1:A:184:LEU:HB3	1:A:192:THR:HG23	0.45	1.88	2	4
1:A:81:ALA:O	1:A:172:ASN:ND2	0.45	2.49	17	1
1:A:185:LEU:HD22	1:A:185:LEU:C	0.45	2.32	21	1
1:A:87:THR:C	1:A:114:GLN:NE2	0.45	2.70	6	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:117:ARG:N	0.45	2.48	13	6
1:A:78:TYR:HB3	1:A:171:THR:HG22	0.45	1.88	23	2
1:A:176:ILE:HG12	1:A:193:GLN:CD	0.45	2.32	6	12
1:A:43:SER:O	1:A:47:TYR:CB	0.45	2.63	6	14
1:A:29:ASN:ND2	1:A:30:ILE:N	0.45	2.65	7	3
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:O	0.45	2.65	13	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:C	0.45	2.55	3	2
1:A:48:ILE:CG1	1:A:71:LEU:CD2	0.45	2.94	15	5
1:A:49:ALA:O	1:A:53:ASP:CB	0.45	2.64	4	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:CG2	1:A:83:PRO:HD2	0.45	2.42	13	5
1:A:77:THR:CG2	1:A:88:GLN:HG2	0.45	2.41	23	1
1:A:44:LEU:HB3	1:A:110:PHE:CE2	0.45	2.45	20	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:100:GLY:HA2	0.45	2.12	6	1
1:A:78:TYR:O	1:A:79:GLN:OE1	0.45	2.35	6	1
1:A:77:THR:CG2	1:A:88:GLN:OE1	0.45	2.65	3	1
1:A:117:ARG:O	1:A:117:ARG:HG2	0.45	2.11	12	1
1:A:185:LEU:CD2	1:A:191:PRO:N	0.45	2.80	19	4
1:A:176:ILE:HG12	1:A:193:GLN:HG2	0.45	1.88	7	11
1:A:27:ALA:C	1:A:68:PRO:HB2	0.45	2.31	18	7
1:A:75:SER:HB2	1:A:92:LEU:CG	0.45	2.41	15	8
1:A:97:ASN:ND2	1:A:101:THR:N	0.45	2.65	21	2
1:A:95:TYR:HB2	1:A:105:THR:CG2	0.45	2.24	19	2
1:A:44:LEU:HD13	1:A:92:LEU:HD21	0.45	1.88	11	1
1:A:29:ASN:OD1	1:A:70:GLU:CG	0.45	2.64	6	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:71:LEU:HD22	0.45	2.42	12	9
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:N	0.45	2.65	12	16
1:A:127:GLN:HG2	1:A:129:ASP:H	0.45	1.70	5	8
1:A:97:ASN:O	1:A:97:ASN:ND2	0.45	2.48	8	7
1:A:48:ILE:HD11	1:A:73:ILE:HG21	0.45	1.88	12	2
1:A:75:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	0.45	1.89	12	3
1:A:140:VAL:O	1:A:144:LEU:CD1	0.45	2.65	11	4
1:A:185:LEU:HD11	1:A:191:PRO:CD	0.45	2.40	23	2
1:A:34:LEU:HD21	1:A:41:GLN:HE21	0.45	1.72	23	2
1:A:113:ASP:OD1	1:A:116:TYR:N	0.45	2.50	3	2
1:A:34:LEU:CD1	1:A:41:GLN:OE1	0.45	2.65	24	1
1:A:87:THR:C	1:A:114:GLN:HG2	0.45	2.32	22	1
1:A:134:PRO:O	1:A:137:PHE:CB	0.44	2.65	22	7
1:A:144:LEU:O	1:A:147:GLN:CB	0.44	2.66	15	6
1:A:97:ASN:HD22	1:A:97:ASN:C	0.44	2.15	5	3
1:A:4:LYS:HD2	1:A:8:GLU:HB2	0.44	1.88	21	5
1:A:77:THR:CG2	1:A:90:VAL:CG1	0.44	2.92	23	1
1:A:127:GLN:NE2	1:A:127:GLN:N	0.44	2.64	18	6
1:A:161:ASP:OD2	1:A:195:LEU:CB	0.44	2.64	24	4
1:A:161:ASP:CB	1:A:176:ILE:HD11	0.44	2.41	7	1
1:A:32:ILE:HG13	1:A:73:ILE:HG21	0.44	1.88	17	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:45:GLU:HG2	0.44	2.47	15	1
1:A:94:VAL:O	1:A:106:THR:N	0.44	2.44	6	1
1:A:184:LEU:C	1:A:185:LEU:CD1	0.44	2.82	22	4
1:A:6:TYR:HE1	1:A:41:GLN:CB	0.44	2.26	12	4
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:CG1	0.44	2.65	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:O	1:A:107:TYR:HD1	0.44	1.96	18	1
1:A:47:TYR:O	1:A:51:THR:OG1	0.44	2.35	19	1
1:A:141:GLN:NE2	1:A:141:GLN:N	0.44	2.65	10	4
1:A:29:ASN:ND2	1:A:70:GLU:HG3	0.44	2.28	5	2
1:A:43:SER:HB3	1:A:110:PHE:CE2	0.44	2.48	12	1
1:A:63:THR:HG21	1:A:102:HIS:CG	0.44	2.48	19	4
1:A:161:ASP:OD2	1:A:176:ILE:HG13	0.44	2.11	6	5
1:A:97:ASN:ND2	1:A:102:HIS:N	0.44	2.66	6	1
1:A:107:TYR:HB2	1:A:191:PRO:HG2	0.44	1.88	16	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:194:VAL:CG2	0.44	3.00	9	3
1:A:66:GLU:CB	1:A:100:GLY:CA	0.44	2.93	7	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:41:GLN:HG3	0.44	2.43	2	3
1:A:97:ASN:HD22	1:A:100:GLY:H	0.44	1.56	18	8
1:A:102:HIS:CE1	1:A:104:THR:CG2	0.44	3.00	4	3
1:A:185:LEU:H	1:A:186:PRO:CD	0.44	2.26	19	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:69:TYR:HD2	0.44	2.18	8	12
1:A:175:VAL:CG2	1:A:175:VAL:O	0.44	2.65	5	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:21:ILE:HG13	0.44	1.90	13	1
1:A:98:ALA:H	1:A:102:HIS:HB3	0.44	1.73	18	3
1:A:141:GLN:N	1:A:141:GLN:NE2	0.44	2.66	18	2
1:A:75:SER:OG	1:A:90:VAL:HB	0.44	2.13	21	1
1:A:6:TYR:OH	1:A:44:LEU:CD1	0.44	2.66	19	2
1:A:48:ILE:CG2	1:A:49:ALA:N	0.44	2.81	3	8
1:A:66:GLU:HB2	1:A:99:GLY:C	0.44	2.30	23	2
1:A:77:THR:HG21	1:A:88:GLN:HG2	0.44	1.88	23	1
1:A:182:GLY:O	1:A:183:GLU:HG2	0.44	2.12	3	1
1:A:181:PRO:HD3	1:A:192:THR:HB	0.44	1.89	21	1
1:A:33:SER:O	1:A:74:THR:HA	0.44	2.13	21	3
1:A:178:PHE:HB3	1:A:191:PRO:HB2	0.44	1.90	23	3
1:A:77:THR:CA	1:A:90:VAL:HG12	0.44	2.42	1	1
1:A:42:LYS:CE	1:A:46:ASN:CB	0.44	2.95	12	4
1:A:15:THR:CG2	1:A:18:ALA:CB	0.44	2.86	13	4
1:A:185:LEU:CD1	1:A:189:ALA:C	0.44	2.86	2	3
1:A:34:LEU:HD21	1:A:44:LEU:HD22	0.44	1.88	15	1
1:A:129:ASP:HB3	1:A:204:MET:CG	0.44	2.43	16	3
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:CG	0.44	2.66	16	4
1:A:32:ILE:CG1	1:A:73:ILE:HD13	0.44	2.42	10	1
1:A:181:PRO:CG	1:A:192:THR:CB	0.44	2.96	3	8
1:A:178:PHE:N	1:A:178:PHE:HD1	0.44	2.08	14	1
1:A:51:THR:O	1:A:55:PHE:CD1	0.43	2.71	6	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:126:TRP:CD2	0.43	3.01	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:VAL:HG22	1:A:110:PHE:CD1	0.43	2.47	3	1
1:A:30:ILE:CG2	1:A:32:ILE:HD12	0.43	2.39	3	1
1:A:176:ILE:CG1	1:A:193:GLN:OE1	0.43	2.66	19	2
1:A:157:ASN:HA	1:A:192:THR:HG21	0.43	1.88	11	2
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:HA	0.43	1.72	24	6
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:CG2	0.43	2.67	20	3
1:A:15:THR:OG1	1:A:20:GLN:NE2	0.43	2.51	16	1
1:A:102:HIS:NE2	1:A:104:THR:CG2	0.43	2.81	4	2
1:A:89:ALA:CB	1:A:110:PHE:O	0.43	2.66	2	4
1:A:42:LYS:HA	1:A:42:LYS:HD2	0.43	1.69	22	3
1:A:159:GLY:CA	1:A:184:LEU:CD1	0.43	2.96	19	4
1:A:136:VAL:CG1	1:A:161:ASP:CG	0.43	2.86	6	4
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:O	0.43	2.51	15	5
1:A:55:PHE:CZ	1:A:104:THR:CG2	0.43	3.01	23	2
1:A:116:TYR:CB	1:A:118:LYS:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:32:ILE:CD1	1:A:73:ILE:CG2	0.43	2.97	17	1
1:A:197:PRO:CA	1:A:201:ILE:HG23	0.43	2.42	20	2
1:A:87:THR:HA	1:A:114:GLN:CG	0.43	2.42	2	1
1:A:176:ILE:CB	1:A:195:LEU:HD13	0.43	2.43	20	3
1:A:73:ILE:CD1	1:A:92:LEU:HD22	0.43	2.42	9	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:45:GLU:OE1	0.43	2.67	22	1
1:A:178:PHE:HA	1:A:193:GLN:HA	0.43	1.91	21	3
1:A:185:LEU:HD21	1:A:190:GLY:C	0.43	2.34	21	1
1:A:96:GLN:N	1:A:104:THR:O	0.43	2.51	9	11
1:A:87:THR:HG23	1:A:112:TRP:O	0.43	2.13	19	1
1:A:137:PHE:CE1	1:A:154:ILE:CG2	0.43	3.01	22	2
1:A:41:GLN:NE2	1:A:41:GLN:CA	0.43	2.81	24	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:125:LEU:C	0.43	2.82	18	2
1:A:91:VAL:HA	1:A:109:ALA:HA	0.43	1.89	20	1
1:A:52:ARG:CA	1:A:96:GLN:HE22	0.43	2.20	6	1
1:A:178:PHE:CE1	1:A:193:GLN:OE1	0.43	2.72	7	2
1:A:53:ASP:O	1:A:57:SER:CA	0.43	2.67	8	1
1:A:176:ILE:HB	1:A:195:LEU:HD13	0.43	1.89	16	2
1:A:89:ALA:HB3	1:A:170:VAL:HG12	0.43	1.90	9	1
1:A:44:LEU:CB	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.94	19	1
1:A:126:TRP:O	1:A:206:ALA:C	0.43	2.57	2	18
1:A:48:ILE:CD1	1:A:73:ILE:CD1	0.43	2.96	14	4
1:A:170:VAL:HB	1:A:175:VAL:CB	0.43	2.44	11	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:189:ALA:HB3	0.43	1.90	24	1
1:A:41:GLN:HE21	1:A:41:GLN:N	0.43	2.11	24	1
1:A:186:PRO:HD2	1:A:189:ALA:HB3	0.43	1.91	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:LEU:H	1:A:133:LEU:HD12	0.43	1.70	10	1
1:A:94:VAL:HG13	1:A:106:THR:O	0.43	2.14	24	1
1:A:156:PRO:CG	1:A:160:LEU:HD12	0.43	2.44	19	3
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:CG1	0.43	2.67	7	2
1:A:78:TYR:CE1	1:A:91:VAL:CG1	0.43	3.00	15	2
1:A:55:PHE:CD2	1:A:104:THR:HB	0.42	2.49	6	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:TRP:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:201:ILE:HD12	1:A:205:LEU:HD13	0.42	1.90	15	2
1:A:64:PRO:HB2	1:A:101:THR:HB	0.42	1.89	3	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:101:THR:N	0.42	2.52	9	1
1:A:90:VAL:HG22	1:A:110:PHE:CE1	0.42	2.47	5	1
1:A:184:LEU:HB3	1:A:192:THR:HG1	0.42	1.72	13	1
1:A:48:ILE:HD11	1:A:71:LEU:CD2	0.42	2.28	3	1
1:A:133:LEU:O	1:A:160:LEU:CD2	0.42	2.67	17	4
1:A:170:VAL:CG2	1:A:174:GLY:O	0.42	2.63	15	6
1:A:185:LEU:HG	1:A:190:GLY:C	0.42	2.34	24	2
1:A:15:THR:CG2	1:A:15:THR:O	0.42	2.67	4	2
1:A:179:PHE:CE1	1:A:192:THR:HB	0.42	2.49	17	1
1:A:6:TYR:HD2	1:A:10:LEU:CG	0.42	2.27	9	1
1:A:29:ASN:ND2	1:A:70:GLU:HG2	0.42	2.30	2	1
1:A:184:LEU:HB3	1:A:192:THR:CB	0.42	2.44	4	2
1:A:184:LEU:HD22	1:A:192:THR:HA	0.42	1.92	14	3
1:A:102:HIS:NE2	1:A:104:THR:OG1	0.42	2.52	5	2
1:A:54:LYS:HA	1:A:57:SER:CB	0.42	2.44	12	3
1:A:185:LEU:CD2	1:A:191:PRO:HD2	0.42	2.44	15	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:125:LEU:CD2	0.42	2.65	9	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:170:VAL:HG11	0.42	2.13	15	2
1:A:157:ASN:CA	1:A:184:LEU:HB2	0.42	2.44	21	1
1:A:205:LEU:HA	1:A:205:LEU:HD12	0.42	1.74	21	2
1:A:112:TRP:HB2	1:A:119:PRO:HA	0.42	1.91	2	1
1:A:129:ASP:CB	1:A:204:MET:HG3	0.42	2.45	22	3
1:A:91:VAL:HA	1:A:109:ALA:CB	0.42	2.45	12	1
1:A:136:VAL:CG2	1:A:176:ILE:HD12	0.42	2.36	7	1
1:A:41:GLN:NE2	1:A:41:GLN:N	0.42	2.67	24	1
1:A:95:TYR:HA	1:A:105:THR:HA	0.42	1.92	22	2
1:A:55:PHE:CD2	1:A:104:THR:CG2	0.42	3.02	6	1
1:A:90:VAL:CG2	1:A:110:PHE:CZ	0.42	3.03	5	1
1:A:42:LYS:HD2	1:A:42:LYS:HA	0.42	1.74	21	3
1:A:186:PRO:C	1:A:188:ALA:N	0.42	2.73	21	1
1:A:87:THR:HG22	1:A:111:ASP:OD1	0.42	2.14	8	1
1:A:183:GLU:CA	1:A:186:PRO:HD3	0.42	2.45	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:TRP:CE2	1:A:117:ARG:HA	0.42	2.48	10	1
1:A:34:LEU:O	1:A:35:PRO:O	0.42	2.37	5	4
1:A:170:VAL:CA	1:A:175:VAL:HA	0.42	2.43	3	5
1:A:25:ASP:CG	1:A:26:PRO:CD	0.42	2.88	7	1
1:A:133:LEU:H	1:A:134:PRO:HD3	0.42	1.67	22	1
1:A:44:LEU:HG	1:A:45:GLU:H	0.42	1.75	19	1
1:A:88:GLN:OE1	1:A:112:TRP:CB	0.42	2.68	4	3
1:A:122:TYR:HB3	1:A:126:TRP:HE1	0.42	1.73	10	1
1:A:141:GLN:HB3	1:A:151:GLN:HB2	0.42	1.91	22	2
1:A:172:ASN:O	1:A:198:ARG:NE	0.42	2.53	22	2
1:A:75:SER:HB3	1:A:92:LEU:CA	0.42	2.45	12	1
1:A:87:THR:CA	1:A:114:GLN:HG2	0.42	2.45	22	1
1:A:66:GLU:HA	1:A:101:THR:OG1	0.42	2.14	4	2
1:A:65:ARG:O	1:A:67:ALA:N	0.41	2.53	3	1
1:A:185:LEU:HD21	1:A:189:ALA:C	0.41	2.34	21	1
1:A:67:ALA:CB	1:A:68:PRO:CD	0.41	2.95	21	1
1:A:156:PRO:O	1:A:160:LEU:N	0.41	2.51	4	1
1:A:85:ARG:CD	1:A:85:ARG:N	0.41	2.83	8	1
1:A:30:ILE:CD1	1:A:52:ARG:NH2	0.41	2.83	1	1
1:A:105:THR:O	1:A:106:THR:CG2	0.41	2.68	12	5
1:A:6:TYR:CD2	1:A:10:LEU:HG	0.41	2.50	13	1
1:A:180:ASN:CG	1:A:191:PRO:HB3	0.41	2.35	7	3
1:A:170:VAL:CB	1:A:175:VAL:HB	0.41	2.45	15	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:191:PRO:N	0.41	2.30	8	1
1:A:55:PHE:CG	1:A:96:GLN:NE2	0.41	2.87	19	1
1:A:159:GLY:N	1:A:184:LEU:HG	0.41	2.30	9	2
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:N	0.41	2.31	17	1
1:A:66:GLU:N	1:A:101:THR:H	0.41	2.13	20	2
1:A:127:GLN:N	1:A:127:GLN:HE21	0.41	2.14	18	1
1:A:69:TYR:HA	1:A:99:GLY:CA	0.41	2.44	3	3
1:A:32:ILE:CD1	1:A:73:ILE:HG23	0.41	2.45	23	1
1:A:91:VAL:HA	1:A:109:ALA:HB2	0.41	1.90	12	1
1:A:32:ILE:HG13	1:A:48:ILE:HG12	0.41	1.92	17	1
1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HG	0.41	1.48	14	1
1:A:68:PRO:HD2	1:A:99:GLY:CA	0.41	2.42	6	1
1:A:184:LEU:CB	1:A:192:THR:HG23	0.41	2.46	2	2
1:A:176:ILE:CB	1:A:195:LEU:CD1	0.41	2.99	16	3
1:A:144:LEU:CD2	1:A:154:ILE:HD11	0.41	2.45	10	1
1:A:137:PHE:CE1	1:A:160:LEU:CA	0.41	3.02	17	1
1:A:170:VAL:CG2	1:A:175:VAL:HB	0.41	2.46	22	2
1:A:52:ARG:HG2	1:A:71:LEU:CD2	0.41	2.45	22	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:PHE:CZ	1:A:154:ILE:O	0.41	2.73	14	1
1:A:44:LEU:CB	1:A:110:PHE:CZ	0.41	3.03	6	1
1:A:55:PHE:CD2	1:A:104:THR:HG21	0.41	2.50	6	1
1:A:32:ILE:CA	1:A:73:ILE:HG23	0.41	2.45	6	1
1:A:48:ILE:O	1:A:52:ARG:CD	0.41	2.69	8	3
1:A:10:LEU:HD21	1:A:45:GLU:OE2	0.41	2.16	3	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:201:ILE:CG1	0.41	2.98	20	1
1:A:78:TYR:OH	1:A:91:VAL:CG1	0.41	2.68	10	1
1:A:78:TYR:OH	1:A:91:VAL:HG12	0.41	2.16	10	1
1:A:43:SER:CB	1:A:110:PHE:CD2	0.41	3.03	23	2
1:A:23:MET:O	1:A:30:ILE:CD1	0.41	2.67	24	1
1:A:141:GLN:O	1:A:144:LEU:CB	0.41	2.69	22	2
1:A:42:LYS:HA	1:A:45:GLU:OE2	0.41	2.15	6	1
1:A:197:PRO:CD	1:A:201:ILE:CG2	0.41	2.98	1	2
1:A:42:LYS:HD2	1:A:45:GLU:OE2	0.41	2.16	5	1
1:A:90:VAL:CG2	1:A:110:PHE:CD1	0.41	3.04	23	1
1:A:148:THR:C	1:A:150:GLN:H	0.41	2.19	21	3
1:A:113:ASP:OD2	1:A:118:LYS:HD3	0.41	2.16	11	1
1:A:185:LEU:HD22	1:A:191:PRO:N	0.41	2.29	15	1
1:A:116:TYR:O	1:A:118:LYS:CG	0.41	2.69	22	1
1:A:137:PHE:CZ	1:A:154:ILE:HB	0.41	2.51	22	1
1:A:43:SER:HG	1:A:110:PHE:HD2	0.41	1.57	8	1
1:A:65:ARG:HB3	1:A:99:GLY:CA	0.41	2.45	3	1
1:A:88:GLN:OE1	1:A:89:ALA:N	0.41	2.53	3	1
1:A:86:GLY:C	1:A:114:GLN:HG3	0.41	2.35	22	1
1:A:87:THR:CA	1:A:114:GLN:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:88:GLN:N	1:A:114:GLN:CG	0.41	2.84	8	1
1:A:94:VAL:CG1	1:A:106:THR:O	0.41	2.69	8	1
1:A:15:THR:O	1:A:15:THR:CG2	0.41	2.68	18	2
1:A:32:ILE:HA	1:A:73:ILE:HG23	0.40	1.91	6	2
1:A:175:VAL:CG1	1:A:196:VAL:CG1	0.40	2.90	13	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:185:LEU:C	0.40	2.88	9	1
1:A:185:LEU:CD2	1:A:189:ALA:CB	0.40	2.99	21	1
1:A:40:ASP:CG	1:A:40:ASP:O	0.40	2.60	21	1
1:A:34:LEU:HD21	1:A:92:LEU:HD23	0.40	1.93	16	1
1:A:93:LYS:HG3	1:A:107:TYR:OH	0.40	2.15	5	1
1:A:185:LEU:HD13	1:A:190:GLY:O	0.40	2.16	15	1
1:A:77:THR:HG22	1:A:78:TYR:N	0.40	2.31	3	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:102:HIS:O	0.40	2.39	21	1
1:A:34:LEU:HD13	1:A:34:LEU:C	0.40	2.35	4	1
1:A:156:PRO:O	1:A:184:LEU:CG	0.40	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:21:ILE:N	1:A:32:ILE:O	0.40	2.53	6	1
1:A:185:LEU:HD21	1:A:191:PRO:N	0.40	2.31	10	1
1:A:43:SER:OG	1:A:110:PHE:CD2	0.40	2.75	23	1
1:A:193:GLN:HG2	1:A:194:VAL:N	0.40	2.30	23	1
1:A:6:TYR:HB2	1:A:10:LEU:HD23	0.40	1.92	9	1
1:A:48:ILE:O	1:A:52:ARG:HD2	0.40	2.16	24	1
1:A:179:PHE:HE1	1:A:192:THR:CG2	0.40	2.29	16	1
1:A:79:GLN:HB2	1:A:114:GLN:HE22	0.40	1.76	10	1
1:A:182:GLY:O	1:A:183:GLU:CG	0.40	2.70	3	1
1:A:148:THR:C	1:A:150:GLN:N	0.40	2.75	7	1
1:A:20:GLN:HA	1:A:32:ILE:O	0.40	2.17	9	1
1:A:89:ALA:HB2	1:A:111:ASP:HA	0.40	1.92	9	1
1:A:82:ILE:CA	1:A:85:ARG:O	0.40	2.69	9	1
1:A:134:PRO:N	1:A:160:LEU:HD21	0.40	2.31	4	1
1:A:136:VAL:HG12	1:A:160:LEU:O	0.40	2.16	8	1

## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	192/204 (94%)	150±1 (78±1%)	25±1 (13±1%)	17±1 (9±0%)	<b>2</b>	<b>13</b>
All	All	4608/4896 (94%)	3604 (78%)	602 (13%)	402 (9%)	<b>2</b>	<b>13</b>

All 22 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	27	ALA	24
1	A	159	GLY	24
1	A	185	LEU	24
1	A	152	VAL	24
1	A	67	ALA	24
1	A	103	PRO	24
1	A	85	ARG	24

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	LYS	24
1	A	68	PRO	24
1	A	181	PRO	24
1	A	83	PRO	24
1	A	42	LYS	24
1	A	132	PRO	23
1	A	64	PRO	22
1	A	186	PRO	20
1	A	7	CYS	19
1	A	182	GLY	9
1	A	169	ALA	9
1	A	5	THR	9
1	A	66	GLU	1
1	A	131	ASP	1
1	A	183	GLU	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	163/173 (94%)	98±2 (60±2%)	65±2 (40±2%)	1	5
All	All	3912/4152 (94%)	2347 (60%)	1565 (40%)	1	5

All 110 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	21	ILE	24
1	A	5	THR	24
1	A	54	LYS	24
1	A	60	THR	24
1	A	42	LYS	24
1	A	63	THR	24
1	A	52	ARG	24
1	A	107	TYR	24
1	A	205	LEU	24
1	A	73	ILE	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	179	PHE	24
1	A	122	TYR	24
1	A	10	LEU	24
1	A	44	LEU	24
1	A	95	TYR	24
1	A	110	PHE	24
1	A	127	GLN	24
1	A	141	GLN	24
1	A	69	TYR	24
1	A	28	TYR	24
1	A	24	SER	24
1	A	176	ILE	24
1	A	112	TRP	24
1	A	137	PHE	24
1	A	133	LEU	24
1	A	92	LEU	24
1	A	20	GLN	24
1	A	193	GLN	24
1	A	199	SER	23
1	A	96	GLN	23
1	A	78	TYR	23
1	A	201	ILE	23
1	A	97	ASN	23
1	A	160	LEU	23
1	A	104	THR	22
1	A	85	ARG	22
1	A	114	GLN	22
1	A	25	ASP	21
1	A	196	VAL	21
1	A	61	SER	21
1	A	145	SER	21
1	A	65	ARG	20
1	A	136	VAL	20
1	A	117	ARG	20
1	A	131	ASP	20
1	A	173	ASP	19
1	A	45	GLU	19
1	A	80	SER	19
1	A	30	ILE	19
1	A	147	GLN	19
1	A	88	GLN	18
1	A	118	LYS	17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	185	LEU	16
1	A	124	THR	16
1	A	123	ASP	15
1	A	34	LEU	15
1	A	184	LEU	15
1	A	148	THR	14
1	A	129	ASP	14
1	A	29	ASN	14
1	A	175	VAL	14
1	A	79	GLN	13
1	A	57	SER	13
1	A	15	THR	12
1	A	102	HIS	12
1	A	22	GLN	11
1	A	151	GLN	10
1	A	93	LYS	10
1	A	87	THR	10
1	A	17	GLN	10
1	A	91	VAL	10
1	A	40	ASP	9
1	A	198	ARG	8
1	A	33	SER	7
1	A	153	SER	7
1	A	113	ASP	7
1	A	11	LYS	6
1	A	152	VAL	6
1	A	70	GLU	6
1	A	66	GLU	6
1	A	130	THR	6
1	A	187	GLU	6
1	A	43	SER	6
1	A	23	MET	6
1	A	108	LYS	5
1	A	144	LEU	5
1	A	183	GLU	5
1	A	202	ASP	4
1	A	32	ILE	4
1	A	41	GLN	4
1	A	48	ILE	4
1	A	31	ASN	4
1	A	75	SER	4
1	A	178	PHE	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	157	ASN	3
1	A	82	ILE	2
1	A	62	SER	2
1	A	51	THR	2
1	A	204	MET	2
1	A	146	LYS	2
1	A	170	VAL	1
1	A	94	VAL	1
1	A	111	ASP	1
1	A	105	THR	1
1	A	161	ASP	1
1	A	192	THR	1
1	A	53	ASP	1
1	A	77	THR	1
1	A	191	PRO	1
1	A	9	GLU	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided