



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 16, 2022 – 08:54 AM EST

PDB ID : 1MUT
Title : NMR STUDY OF MUTT ENZYME, A NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE
PYROPHOSPHOHYDROLASE
Authors : Abeygunawardana, C.; Weber, D.J.; Gittis, A.G.; Frick, D.N.; Lin, J.; Miller,
A.-F.; Bessman, M.J.; Mildvan, A.S.
Deposited on : 1995-09-14

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.26
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

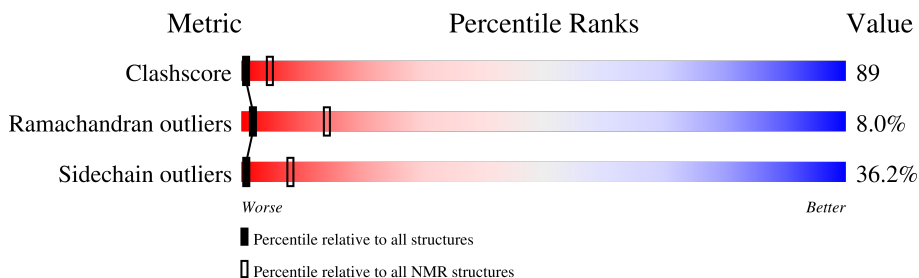
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	129	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:22, A:31-A:129 (118)	0.90	11

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 5, 8, 9, 11, 13, 14
2	6, 10, 12, 15
3	4, 7
Single-model clusters	3

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2090 atoms, of which 1035 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE.

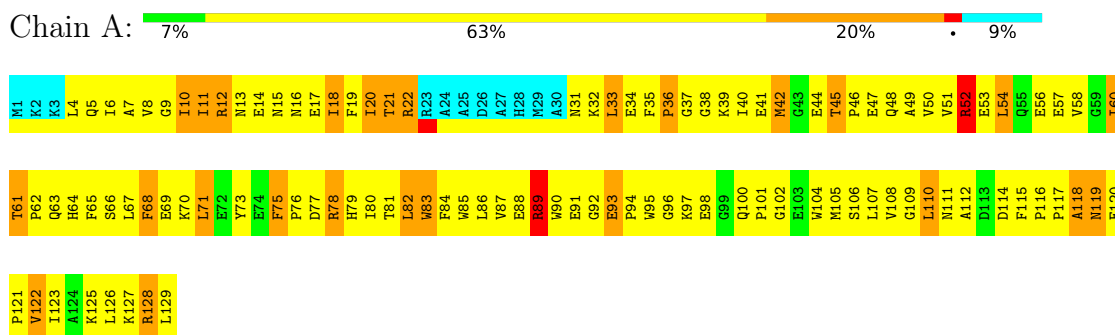
Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	129	2090	679	1035	180	192	4	0

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

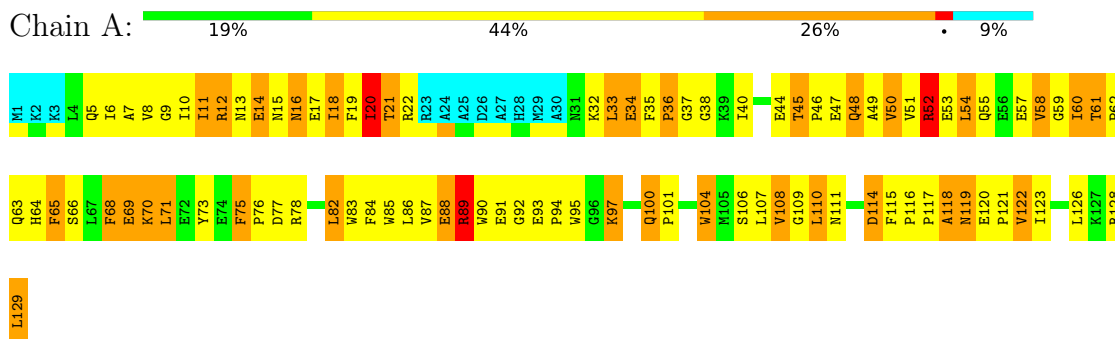


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

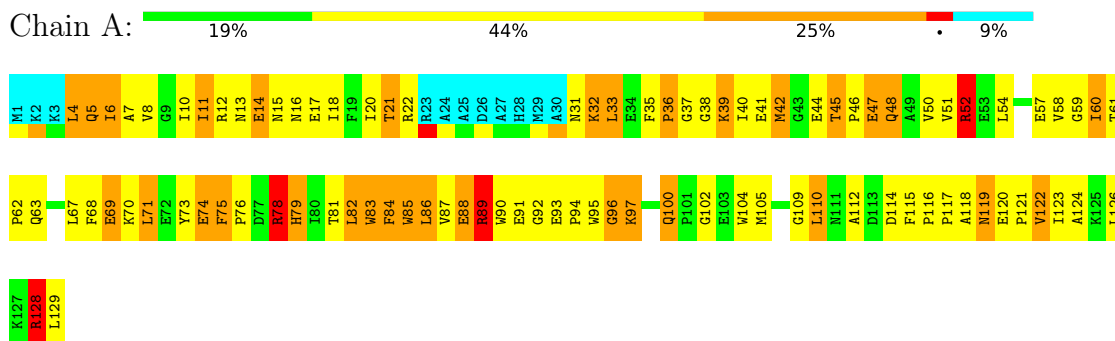
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



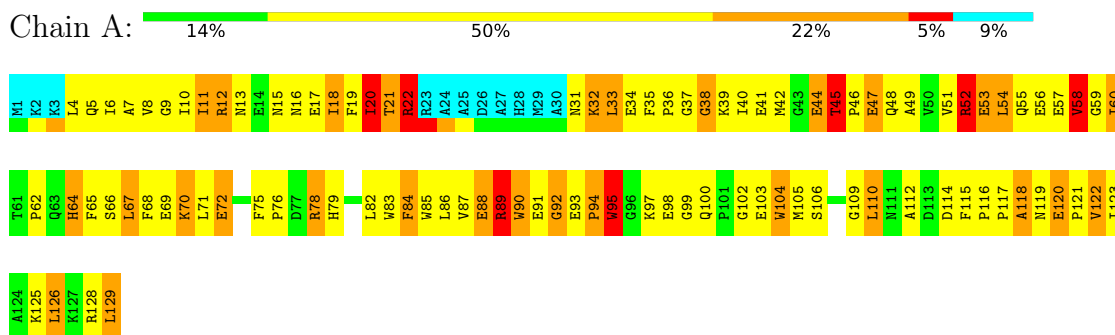
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



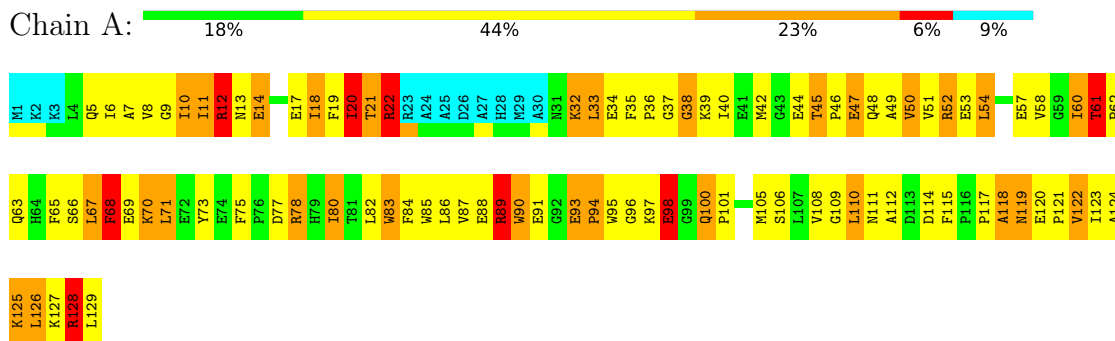
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



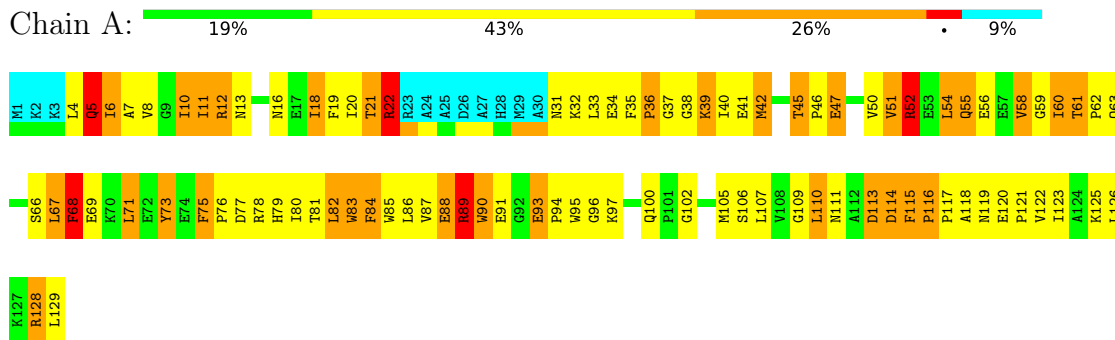
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



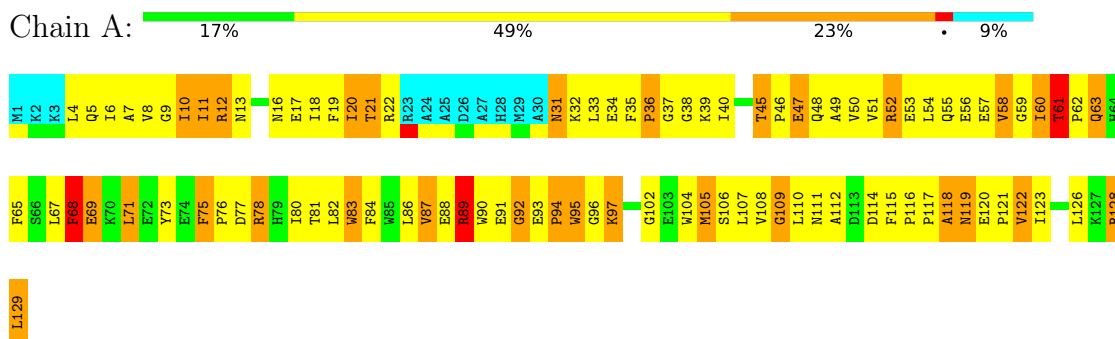
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



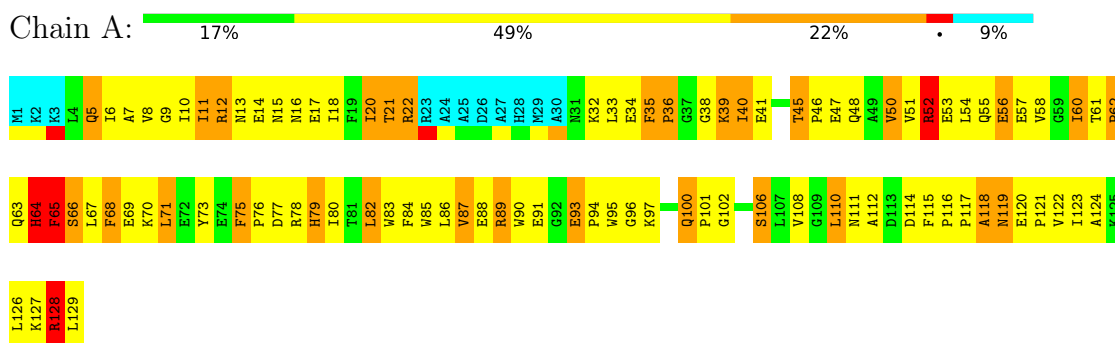
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



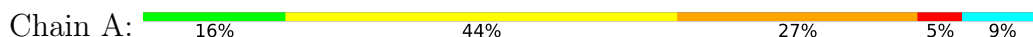
4.2.7 Score per residue for model 7

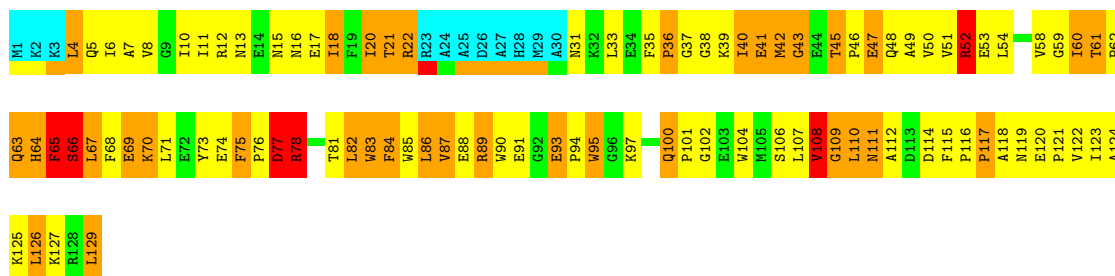
- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

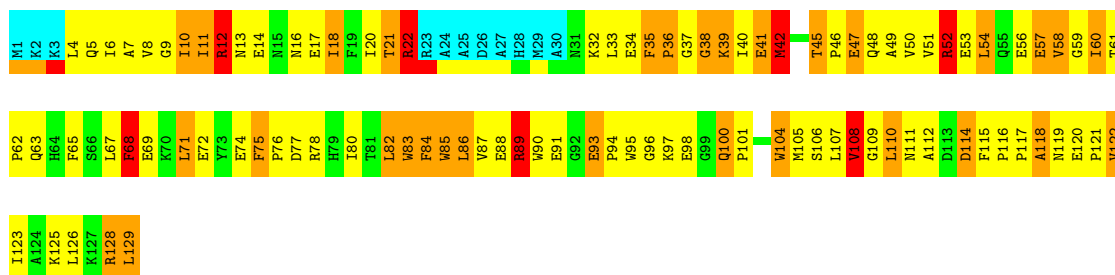




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

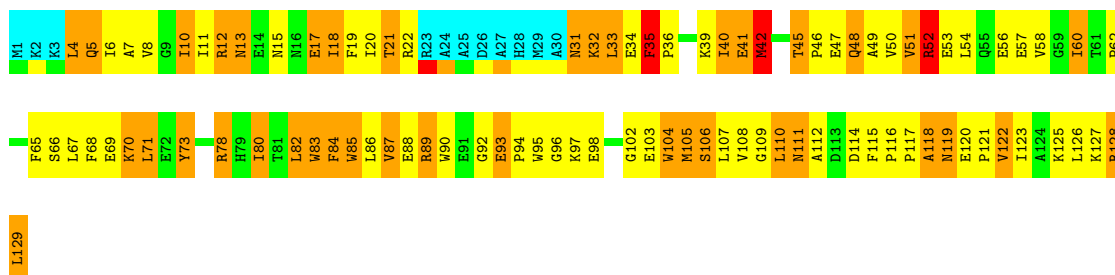
Chain A: 15% 47% 24% 5% 9%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 19% 40% 30% 9%

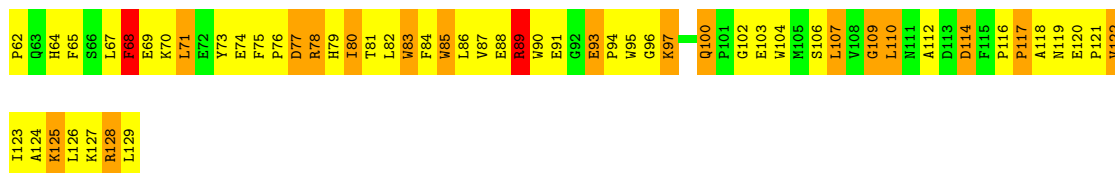


4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 15% 50% 22% 5% 9%

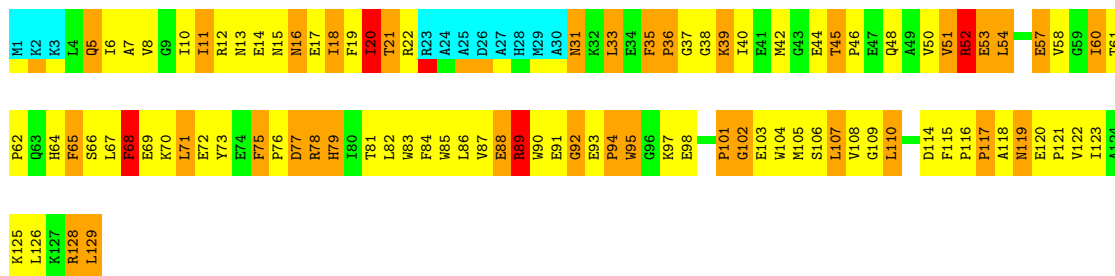




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

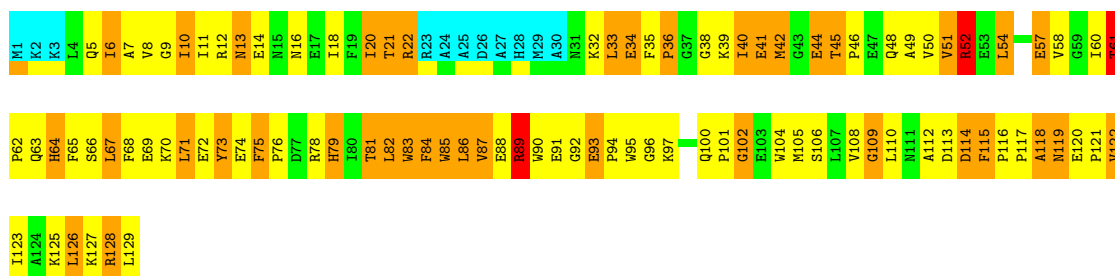
Chain A: 17% 45% 26% 9%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

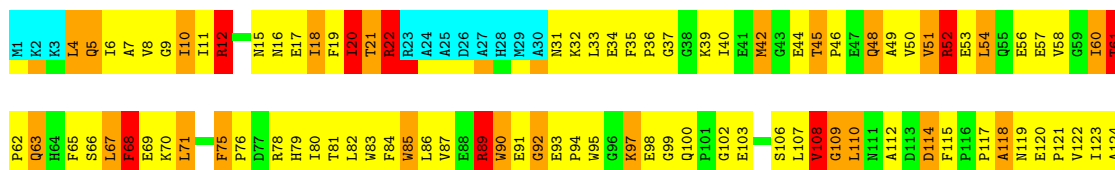
Chain A: 16% 43% 31% 9%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 17% 50% 18% 7% 9%

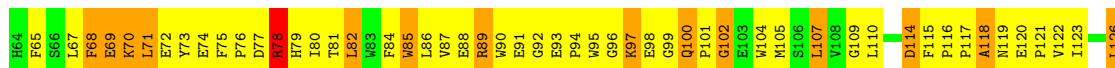
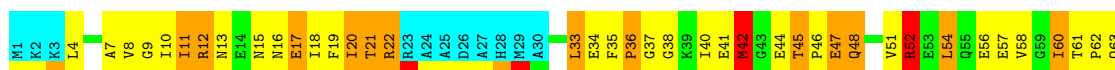




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATE PYROPHOSPHOHYDROLASE

Chain A: 18% 50% 22% 9%



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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	5.3±0.9
All	All	0	79

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	52	ARG	Sidechain	14
1	A	78	ARG	Sidechain	14
1	A	89	ARG	Sidechain	14
1	A	22	ARG	Sidechain	13
1	A	12	ARG	Sidechain	12
1	A	128	ARG	Sidechain	12

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	972	945	945	171±11
All	All	14580	14175	14175	2566

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 89.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD21	1.06	1.14	1	1
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:CZ2	1.05	1.85	8	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:HD11	1.05	1.21	3	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:HG21	1.05	1.26	2	11
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD11	1.04	1.24	5	3
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CZ3	1.03	1.89	13	12
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:CD1	1.02	1.84	2	7
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD22	1.01	1.32	13	1
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:CD2	1.01	1.86	1	3
1:A:58:VAL:HG21	1:A:93:GLU:O	0.97	1.57	4	11
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD13	0.97	1.31	3	6
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:CG2	0.96	1.90	13	8
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:CD1	0.96	1.95	2	4
1:A:67:LEU:HD22	1:A:85:TRP:CZ3	0.96	1.95	3	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:34:GLU:O	0.94	1.62	15	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HG12	0.94	1.62	6	5
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:C	0.94	1.83	2	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:123:ILE:HD11	0.94	1.97	4	3
1:A:67:LEU:HD22	1:A:85:TRP:CE3	0.93	1.98	3	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:HB3	0.93	1.40	11	11
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:OD1	0.92	1.63	13	5
1:A:60:ILE:HD12	1:A:93:GLU:O	0.92	1.65	6	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:CE1	0.91	2.00	14	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD21	0.91	1.39	9	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:HD13	0.91	1.42	4	2
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:HG11	0.89	2.03	15	6
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:CG	0.88	1.98	3	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CB	0.88	1.97	10	11
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD11	0.88	1.98	2	2
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HD23	0.88	1.68	11	1
1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:VAL:HG12	0.88	1.41	3	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CB	0.88	1.98	3	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:O	0.87	1.67	2	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CZ3	0.87	2.05	13	2
1:A:86:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	0.86	1.43	6	5
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:HB3	0.86	1.45	14	7
1:A:112:ALA:CA	1:A:123:ILE:HG21	0.86	2.01	7	3
1:A:86:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	0.86	1.48	2	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:CG2	0.85	2.01	2	4
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CZ3	0.85	2.07	2	3
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:HG22	0.84	1.72	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:GLU:CG	1:A:58:VAL:HG12	0.84	2.02	3	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:HA	0.83	1.48	4	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG23	0.83	1.72	1	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:62:PRO:HG3	0.83	1.49	2	3
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD13	0.83	1.73	5	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD12	0.82	2.03	7	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:NE1	0.82	1.89	5	2
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CD2	0.82	2.09	4	1
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HG22	0.81	1.75	1	4
1:A:67:LEU:HD12	1:A:84:PHE:O	0.81	1.75	12	6
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:NE1	0.81	1.90	7	3
1:A:71:LEU:HD22	1:A:122:VAL:CG2	0.81	2.06	9	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HG22	0.80	1.52	1	3
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CE3	0.80	2.11	14	8
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:CD1	0.80	2.12	9	6
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:CD	0.80	2.43	12	2
1:A:54:LEU:HD11	1:A:95:TRP:C	0.79	1.98	12	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HB	0.79	1.54	14	8
1:A:107:LEU:HD21	1:A:129:LEU:O	0.79	1.78	10	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD11	0.79	2.07	12	1
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:HD3	0.78	1.93	3	2
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:HD3	0.78	1.54	4	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:CD	0.78	2.09	4	7
1:A:71:LEU:HD22	1:A:122:VAL:HG21	0.78	1.53	9	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	0.78	1.53	12	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD21	0.78	1.55	14	1
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:HD3	0.78	1.55	15	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HD13	0.77	1.56	3	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:114:ASP:OD2	0.77	1.80	13	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:N	0.77	1.94	3	3
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD12	0.77	1.57	5	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD21	0.76	2.05	1	1
1:A:20:ILE:HG23	1:A:21:THR:N	0.76	1.94	14	6
1:A:11:ILE:HA	1:A:87:VAL:HG22	0.76	1.55	6	10
1:A:58:VAL:HG12	1:A:95:TRP:CD1	0.76	2.15	7	3
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:HG2	0.76	1.58	7	1
1:A:61:THR:N	1:A:62:PRO:CD	0.76	2.49	13	4
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HB2	0.76	1.58	3	1
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:87:VAL:HG12	0.76	2.16	5	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD21	0.75	2.11	6	5
1:A:6:ILE:O	1:A:40:ILE:HD11	0.75	1.80	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD21	0.75	2.16	10	4
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD13	0.75	1.57	2	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CD1	0.74	2.18	3	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HG12	0.74	2.12	15	7
1:A:4:LEU:HD13	1:A:81:THR:OG1	0.74	1.83	5	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:83:TRP:O	0.74	1.80	5	5
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CH2	0.74	2.17	5	1
1:A:9:GLY:H	1:A:54:LEU:HD11	0.74	1.40	6	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:N	0.73	1.98	5	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:HD21	0.73	2.18	5	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG22	0.73	1.59	14	4
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:HG21	0.73	1.59	2	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:93:GLU:O	0.73	1.84	6	1
1:A:61:THR:O	1:A:61:THR:HG23	0.73	1.82	9	3
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:NE1	0.72	1.99	9	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:110:LEU:HD11	0.72	1.61	5	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:72:GLU:N	0.72	1.99	3	1
1:A:6:ILE:HD13	1:A:80:ILE:HG23	0.72	1.60	5	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD11	0.72	2.12	5	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD12	0.72	1.61	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG12	0.71	1.85	14	3
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD12	0.71	1.60	3	5
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:HG21	0.71	1.61	10	6
1:A:8:VAL:HG13	1:A:8:VAL:O	0.71	1.85	6	3
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	0.71	1.60	6	1
1:A:18:ILE:HG13	1:A:110:LEU:HD22	0.71	1.62	10	1
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HD12	0.70	2.20	1	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG21	0.70	2.09	14	7
1:A:18:ILE:HD13	1:A:18:ILE:N	0.70	2.01	12	3
1:A:21:THR:HG23	1:A:102:GLY:CA	0.70	2.16	5	2
1:A:18:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HB2	0.70	1.60	4	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HD12	0.70	1.85	12	2
1:A:5:GLN:HG2	1:A:40:ILE:HG21	0.70	1.61	13	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:69:GLU:N	0.70	2.59	7	15
1:A:90:TRP:NE1	1:A:92:GLY:O	0.70	2.25	3	2
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CB	0.70	2.16	8	2
1:A:21:THR:HG23	1:A:102:GLY:HA2	0.70	1.62	3	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:O	0.70	1.86	11	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:123:ILE:HD11	0.70	2.21	4	3
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:NE1	0.69	2.02	6	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE1	0.69	2.80	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CG	0.69	2.44	11	9
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:CD	0.69	2.55	12	15
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD11	0.69	2.12	3	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:85:TRP:CH2	0.69	2.22	11	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CZ	0.69	2.80	3	5
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:O	0.69	2.46	2	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CZ	0.69	2.80	6	5
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:CZ2	0.69	2.22	15	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:HB2	0.69	1.63	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:HA	0.69	1.65	2	7
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:CZ2	0.69	2.23	3	1
1:A:106:SER:O	1:A:108:VAL:HG23	0.69	1.88	7	2
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD12	0.68	1.61	7	2
1:A:6:ILE:CD1	1:A:80:ILE:HG23	0.68	2.17	5	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:85:TRP:CH2	0.68	2.81	15	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:C	0.68	2.09	6	6
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.68	2.62	13	5
1:A:58:VAL:HG11	1:A:93:GLU:O	0.68	1.87	11	5
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CE3	0.68	2.22	13	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:8:VAL:O	0.68	1.88	9	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:N	0.68	2.60	13	1
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD2	0.68	1.66	11	2
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HB3	0.68	1.65	3	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:93:GLU:O	0.68	2.41	6	1
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.68	2.19	6	5
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HD11	0.68	2.18	5	3
1:A:58:VAL:HG22	1:A:60:ILE:HD13	0.68	1.63	6	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:HE1	0.68	1.48	5	2
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:HG22	0.68	2.09	4	3
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HD21	0.67	2.23	1	4
1:A:69:GLU:O	1:A:122:VAL:HG21	0.67	1.89	6	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	0.67	1.64	14	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:HB3	0.67	1.66	12	4
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:HB3	0.67	1.90	12	5
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:HB2	0.67	1.90	1	10
1:A:75:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HD13	0.67	2.25	4	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:O	0.67	1.89	6	1
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:HD23	0.67	2.05	8	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:HD3	0.67	1.67	10	7
1:A:126:LEU:HD23	1:A:126:LEU:N	0.67	2.05	1	4
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:O	0.67	2.48	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:CG	0.67	2.78	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:CA	0.67	2.19	13	2
1:A:84:PHE:CG	1:A:122:VAL:HG11	0.67	2.25	14	5
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:HG13	0.67	1.66	7	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CG	0.67	2.19	7	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD21	0.66	2.19	9	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:HB2	0.66	1.68	9	2
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:HZ2	0.66	1.46	8	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:HD1	0.66	1.50	9	4
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:HE1	0.66	1.48	4	4
1:A:11:ILE:HD13	1:A:60:ILE:CD1	0.66	2.20	13	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:TRP:N	0.66	2.06	3	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:HG12	0.66	2.20	11	7
1:A:4:LEU:HG	1:A:80:ILE:HG22	0.66	1.68	10	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:63:GLN:OE1	0.66	1.91	1	1
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:HA	0.66	1.64	2	1
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:CG1	0.66	2.21	6	8
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:CD1	0.66	2.79	2	5
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG13	0.66	2.25	15	3
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:CE2	0.66	2.26	15	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:83:TRP:HZ3	0.65	1.45	13	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:HA	0.65	1.67	6	1
1:A:54:LEU:CB	1:A:95:TRP:CE2	0.65	2.80	6	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:85:TRP:CZ3	0.65	2.83	13	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:TRP:H	0.65	1.51	3	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:105:MET:HE2	0.65	1.67	5	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:CD2	0.65	2.80	6	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:HB3	0.65	1.90	10	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:HG2	0.65	1.67	3	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:CD1	0.65	2.26	5	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:85:TRP:CZ3	0.65	2.27	2	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:87:VAL:CG1	0.65	2.80	14	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:90:TRP:CD1	0.64	2.27	8	7
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:O	0.64	1.91	3	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:HG22	0.64	1.92	13	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:91:GLU:N	0.64	2.65	9	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD22	0.64	2.17	13	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD22	0.64	2.22	15	1
1:A:83:TRP:N	1:A:83:TRP:CD1	0.64	2.66	1	4
1:A:126:LEU:H	1:A:126:LEU:HD23	0.64	1.53	14	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:46:PRO:HD2	0.64	1.69	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CD1	0.64	2.81	3	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.64	1.91	14	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:CD1	0.64	2.81	7	3
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.64	2.65	12	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:OXT	0.64	1.93	10	1
1:A:33:LEU:N	1:A:33:LEU:CD2	0.64	2.61	5	1
1:A:85:TRP:CZ3	1:A:87:VAL:CG1	0.64	2.81	5	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB3	0.63	1.70	1	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.28	1	2
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD13	0.63	2.19	3	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CE2	0.63	2.86	15	4
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CH2	0.63	2.66	6	2
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HG12	0.63	1.68	4	5
1:A:51:VAL:CG1	1:A:52:ARG:N	0.63	2.61	12	13
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HG21	0.63	2.23	9	2
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:HE3	0.63	1.70	4	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CB	0.63	2.23	15	3
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:CH2	0.63	2.82	8	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:CZ2	0.63	2.82	1	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:122:VAL:HG11	0.63	2.28	10	2
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:HB3	0.63	1.93	3	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG12	0.63	2.28	11	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:54:LEU:HD12	0.63	2.23	6	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:HD12	0.63	1.69	7	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:21:THR:N	0.63	2.61	15	5
1:A:95:TRP:CE3	1:A:95:TRP:C	0.63	2.72	8	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB2	0.63	2.24	2	7
1:A:67:LEU:CD2	1:A:85:TRP:CZ3	0.63	2.80	3	1
1:A:100:GLN:N	1:A:101:PRO:CD	0.63	2.61	15	3
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CB	0.62	2.24	2	3
1:A:33:LEU:HD23	1:A:114:ASP:O	0.62	1.94	5	2
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:CD	0.62	2.67	5	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.62	2.63	7	2
1:A:20:ILE:HD11	1:A:34:GLU:O	0.62	1.94	6	2
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HD1	0.62	1.53	14	4
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:HB2	0.62	1.94	12	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CH2	0.62	2.29	13	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:O	0.62	1.94	2	3
1:A:40:ILE:HG23	1:A:40:ILE:O	0.62	1.94	11	9
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HD12	0.62	2.29	1	4
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:CD	0.62	2.77	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ALA:N	0.62	2.09	4	2
1:A:100:GLN:N	1:A:101:PRO:HD3	0.62	2.09	7	3
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CB	0.62	2.78	9	8
1:A:89:ARG:O	1:A:90:TRP:HB3	0.62	1.93	4	5
1:A:60:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CD1	0.62	2.82	11	3
1:A:4:LEU:CG	1:A:80:ILE:HG22	0.62	2.25	10	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:82:LEU:HD11	0.61	1.70	7	1
1:A:5:GLN:OE1	1:A:81:THR:HG21	0.61	1.93	11	1
1:A:85:TRP:C	1:A:85:TRP:CD1	0.61	2.73	14	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CE3	0.61	2.83	14	5
1:A:45:THR:HG22	1:A:47:GLU:H	0.61	1.55	2	2
1:A:58:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HB3	0.61	1.71	15	1
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:CG	0.61	2.53	8	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:35:PHE:O	0.61	2.48	7	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:35:PHE:O	0.61	1.96	10	2
1:A:71:LEU:O	1:A:81:THR:HG23	0.61	1.96	5	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:CD1	0.61	2.30	14	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:92:GLY:N	0.61	2.64	3	2
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:NE1	0.61	2.64	4	2
1:A:50:VAL:CG2	1:A:85:TRP:CE3	0.61	2.83	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:CD1	0.61	2.80	2	1
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:HD12	0.61	2.15	5	1
1:A:35:PHE:CB	1:A:36:PRO:CD	0.61	2.78	10	2
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HA	0.61	1.96	2	8
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:CG2	0.61	2.78	3	7
1:A:83:TRP:O	1:A:83:TRP:CD1	0.61	2.54	5	2
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:CD2	0.60	2.26	3	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE1	0.60	2.89	3	4
1:A:123:ILE:HD13	1:A:126:LEU:HD12	0.60	1.73	7	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:90:TRP:CH2	0.60	2.30	8	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:122:VAL:CB	0.60	2.25	5	2
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:N	0.60	2.69	10	9
1:A:11:ILE:CG2	1:A:90:TRP:CZ3	0.60	2.82	10	5
1:A:54:LEU:HD21	1:A:63:GLN:HE22	0.60	1.55	4	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:115:PHE:CE2	0.60	2.31	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD12	0.60	1.71	7	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CG	0.60	2.80	7	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:CD1	0.60	2.31	11	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:O	0.60	2.49	7	10
1:A:8:VAL:HG11	1:A:35:PHE:HB3	0.60	1.71	8	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:N	0.60	2.64	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:HG23	0.60	2.26	13	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:CD	0.60	2.80	10	7
1:A:19:PHE:CD2	1:A:19:PHE:O	0.60	2.54	6	6
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG11	0.60	2.32	13	3
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD3	0.60	1.72	3	1
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:HD3	0.60	2.17	5	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:PHE:CE1	0.60	2.31	11	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:84:PHE:CZ	0.60	2.90	3	3
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:CD2	0.60	2.54	8	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:CB	0.60	2.50	13	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CD1	0.59	2.32	8	2
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CD1	0.59	2.32	2	4
1:A:4:LEU:HD12	1:A:4:LEU:O	0.59	1.97	5	2
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:CD	0.59	2.80	10	7
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CA	0.59	2.27	9	4
1:A:65:PHE:CD2	1:A:87:VAL:HG12	0.59	2.32	3	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:60:ILE:H	0.59	1.57	5	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:60:ILE:CD1	0.59	2.28	6	1
1:A:5:GLN:HG3	1:A:40:ILE:HG23	0.59	1.73	10	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:CD1	0.59	2.55	3	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:108:VAL:O	0.59	1.98	4	2
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:HG22	0.59	1.95	7	2
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:HD2	0.59	2.12	4	15
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:HD12	0.59	2.17	4	2
1:A:6:ILE:O	1:A:83:TRP:CD1	0.59	2.56	7	7
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:CG2	0.59	2.50	11	11
1:A:58:VAL:CG1	1:A:95:TRP:HB3	0.59	2.27	5	7
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:HD3	0.59	1.75	5	4
1:A:14:GLU:CG	1:A:89:ARG:NH1	0.59	2.66	12	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:100:GLN:OE1	0.59	2.56	4	1
1:A:85:TRP:CE3	1:A:87:VAL:HG12	0.59	2.32	5	1
1:A:111:ASN:HB2	1:A:123:ILE:HD12	0.59	1.75	10	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:85:TRP:CH2	0.59	2.91	15	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:GLY:N	0.58	2.66	8	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:H	0.58	1.58	3	2
1:A:61:THR:H	1:A:62:PRO:HD3	0.58	1.58	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:CD2	0.58	2.22	9	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:HD2	0.58	1.74	3	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:ARG:N	0.58	2.13	12	6
1:A:107:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD23	0.58	2.28	6	2
1:A:19:PHE:CG	1:A:19:PHE:O	0.58	2.54	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:CD1	0.58	2.82	8	4
1:A:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:O	0.58	2.56	10	2
1:A:68:PHE:CZ	1:A:69:GLU:O	0.58	2.56	13	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CG1	0.58	2.51	13	14
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:HB3	0.58	1.74	8	1
1:A:68:PHE:HE2	1:A:122:VAL:HG13	0.58	1.57	5	5
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:CG1	0.58	2.82	6	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:CB	0.58	2.86	7	1
1:A:115:PHE:CE1	1:A:123:ILE:HD12	0.58	2.33	13	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:92:GLY:O	0.58	2.57	3	5
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HG23	0.58	1.99	2	7
1:A:54:LEU:HB2	1:A:95:TRP:CE2	0.58	2.33	6	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CH2	0.58	2.77	4	3
1:A:65:PHE:HB2	1:A:87:VAL:HG12	0.58	1.74	15	4
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:HA	0.58	2.28	12	1
1:A:4:LEU:H	1:A:4:LEU:HD12	0.58	1.59	2	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:CB	0.58	2.52	10	2
1:A:18:ILE:CG1	1:A:110:LEU:HD22	0.58	2.29	10	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:62:PRO:HD3	0.58	1.74	14	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CH2	0.57	2.57	1	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:GLU:N	0.57	2.14	11	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG11	0.57	2.34	8	3
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD2	0.57	2.29	10	8
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:HD2	0.57	2.34	1	5
1:A:58:VAL:CB	1:A:93:GLU:O	0.57	2.52	14	4
1:A:60:ILE:HB	1:A:62:PRO:HD3	0.57	1.76	11	2
1:A:112:ALA:CA	1:A:123:ILE:CG2	0.57	2.81	10	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:CA	0.57	2.28	13	4
1:A:32:LYS:C	1:A:33:LEU:HD22	0.57	2.18	5	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.57	2.88	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:C	0.57	2.72	12	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:9:GLY:N	0.57	2.14	1	4
1:A:90:TRP:CE3	1:A:90:TRP:N	0.57	2.72	8	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:83:TRP:O	0.57	2.52	2	5
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:N	0.57	2.73	2	2
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:CD	0.57	2.68	4	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CZ2	0.57	2.57	13	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:HB3	0.57	1.76	13	3
1:A:67:LEU:CD2	1:A:83:TRP:CZ3	0.57	2.87	5	3
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:O	0.57	2.57	3	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.57	2.58	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:HG23	1:A:60:ILE:HG23	0.57	1.77	13	1
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:CB	0.57	2.53	12	2
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:CD1	0.57	2.29	10	1
1:A:19:PHE:O	1:A:19:PHE:CD2	0.56	2.58	14	2
1:A:54:LEU:HD11	1:A:95:TRP:O	0.56	1.99	12	1
1:A:72:GLU:HG3	1:A:81:THR:HG23	0.56	1.76	13	2
1:A:63:GLN:HA	1:A:89:ARG:O	0.56	2.00	4	5
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CD1	0.56	2.93	4	1
1:A:61:THR:N	1:A:62:PRO:HD3	0.56	2.14	13	4
1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:ALA:N	0.56	2.15	10	5
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:CB	0.56	2.53	13	14
1:A:8:VAL:HG12	1:A:82:LEU:CD1	0.56	2.30	7	2
1:A:33:LEU:CG	1:A:114:ASP:O	0.56	2.54	5	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CZ2	0.56	2.35	8	2
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:O	0.56	2.54	3	3
1:A:8:VAL:HG13	1:A:83:TRP:O	0.56	2.00	7	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:52:ARG:N	0.56	2.16	8	8
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:C	0.56	2.20	8	11
1:A:45:THR:HG23	1:A:47:GLU:H	0.56	1.59	6	3
1:A:53:GLU:O	1:A:95:TRP:NE1	0.56	2.38	7	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:119:ASN:OD1	0.56	2.59	4	4
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:CD1	0.56	2.88	1	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:7:ALA:N	0.56	2.68	14	9
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:95:TRP:CH2	0.56	2.93	4	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:84:PHE:CE2	0.56	2.94	10	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:95:TRP:CB	0.56	2.30	15	4
1:A:58:VAL:CG1	1:A:93:GLU:O	0.56	2.54	1	4
1:A:116:PRO:N	1:A:117:PRO:CD	0.56	2.68	5	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CD1	0.56	2.31	8	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:79:HIS:O	0.56	2.00	15	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:91:GLU:O	0.56	2.00	7	2
1:A:84:PHE:CE1	1:A:119:ASN:OD1	0.56	2.59	4	1
1:A:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:NE1	0.56	2.16	7	1
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:HB1	0.56	1.77	11	2
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:CG2	0.56	2.54	13	1
1:A:85:TRP:CD1	1:A:85:TRP:N	0.55	2.73	8	4
1:A:112:ALA:N	1:A:123:ILE:CG2	0.55	2.69	7	2
1:A:60:ILE:O	1:A:64:HIS:NE2	0.55	2.38	8	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:63:GLN:HE22	0.55	1.61	14	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:85:TRP:CZ3	0.55	2.93	14	2
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:HD23	0.55	2.36	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HD11	0.55	2.37	2	1
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CD2	0.55	2.59	4	2
1:A:116:PRO:N	1:A:117:PRO:HD3	0.55	2.15	5	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG21	0.55	2.31	7	2
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:CZ2	0.55	2.89	8	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:NE1	0.55	2.17	4	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:N	0.55	2.74	8	7
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:HB2	0.55	2.01	13	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:GLU:CB	0.55	2.54	9	4
1:A:21:THR:HG22	1:A:100:GLN:OE1	0.55	2.01	1	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:HB3	0.55	1.78	1	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:HB3	0.55	2.37	7	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:CE2	0.55	2.89	1	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:PHE:O	0.55	2.60	3	1
1:A:46:PRO:O	1:A:83:TRP:CH2	0.55	2.60	4	1
1:A:67:LEU:HD21	1:A:70:LYS:CE	0.55	2.31	4	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:20:ILE:N	0.55	2.15	5	1
1:A:123:ILE:CA	1:A:126:LEU:HD12	0.55	2.29	5	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:95:TRP:O	0.55	2.59	8	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:N	0.55	2.17	13	4
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:CD	0.55	2.85	12	11
1:A:68:PHE:CG	1:A:126:LEU:HD21	0.55	2.36	5	1
1:A:18:ILE:HG13	1:A:110:LEU:HD13	0.55	1.78	10	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CZ3	0.55	2.86	13	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:63:GLN:CD	0.55	2.22	4	2
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:CA	0.55	2.55	2	4
1:A:48:GLN:O	1:A:51:VAL:HG12	0.55	2.02	15	6
1:A:58:VAL:HG21	1:A:94:PRO:CB	0.55	2.32	3	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:CG1	0.55	2.87	15	4
1:A:67:LEU:CD1	1:A:84:PHE:O	0.55	2.54	4	3
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:CB	0.55	2.32	15	1
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:CG2	0.54	2.55	7	6
1:A:5:GLN:HB2	1:A:40:ILE:HG21	0.54	1.77	10	3
1:A:61:THR:O	1:A:61:THR:CG2	0.54	2.55	9	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:60:ILE:HD11	0.54	1.78	13	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:HB3	0.54	1.78	7	2
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:CB	0.54	2.55	9	3
1:A:33:LEU:HD11	1:A:105:MET:CE	0.54	2.31	5	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:117:PRO:HG3	0.54	2.37	5	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:CG	0.54	2.32	9	1
1:A:90:TRP:CZ2	1:A:94:PRO:HG3	0.54	2.38	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HG13	0.54	1.78	13	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:68:PHE:C	0.54	2.80	9	4
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:CE2	0.54	2.37	4	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:63:GLN:OE1	0.54	2.02	1	1
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:O	0.54	2.23	1	2
1:A:45:THR:O	1:A:49:ALA:CB	0.54	2.56	3	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CG	0.54	2.56	11	5
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:O	0.54	2.55	11	2
1:A:20:ILE:HG22	1:A:21:THR:N	0.54	2.17	9	3
1:A:46:PRO:HB2	1:A:83:TRP:CH2	0.54	2.37	2	1
1:A:70:LYS:HD3	1:A:83:TRP:CE3	0.54	2.36	3	2
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CE1	0.54	2.37	5	3
1:A:89:ARG:CZ	1:A:89:ARG:CB	0.54	2.85	4	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:CE3	0.54	2.38	6	1
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:87:VAL:HG12	0.54	2.37	15	2
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CD	0.54	2.56	15	3
1:A:33:LEU:CD2	1:A:114:ASP:O	0.54	2.56	12	2
1:A:90:TRP:CE2	1:A:94:PRO:HG3	0.54	2.38	5	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.54	2.76	5	1
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:C	0.54	2.45	6	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:O	0.54	2.41	12	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CG	0.54	2.55	2	8
1:A:15:ASN:O	1:A:17:GLU:CG	0.54	2.56	12	5
1:A:57:GLU:OE2	1:A:95:TRP:CD1	0.54	2.60	3	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:PRO:HD3	0.54	2.02	6	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG22	0.54	2.38	7	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:94:PRO:O	0.54	2.61	10	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CG	0.54	2.38	10	3
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:HB2	0.54	2.33	4	5
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:HE1	0.54	1.58	9	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:90:TRP:CZ3	0.54	2.38	1	1
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HD12	0.54	2.17	9	1
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:O	0.54	2.26	3	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG13	0.54	2.38	13	3
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.54	2.56	14	2
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:C	0.53	2.46	13	12
1:A:4:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HG22	0.53	2.32	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE2	0.53	2.97	14	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:HD2	0.53	2.34	10	7
1:A:20:ILE:HG13	1:A:33:LEU:HD23	0.53	1.78	3	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:CD2	0.53	2.38	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:HB3	1:A:86:LEU:HD23	0.53	1.80	9	1
1:A:54:LEU:O	1:A:59:GLY:N	0.53	2.41	3	2
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:HA	0.53	1.79	3	1
1:A:9:GLY:N	1:A:54:LEU:HD11	0.53	2.16	6	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:HD23	0.53	2.02	14	2
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:CD1	0.53	2.56	15	2
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:HB2	0.53	2.39	7	3
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:CD1	0.53	2.77	1	9
1:A:21:THR:O	1:A:34:GLU:CG	0.53	2.56	10	1
1:A:44:GLU:CB	1:A:48:GLN:OE1	0.53	2.56	13	1
1:A:75:PHE:CD2	1:A:76:PRO:HD2	0.53	2.39	7	7
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:VAL:H	0.53	1.63	4	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:CD2	0.53	2.56	14	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:LEU:CD1	0.53	2.56	15	1
1:A:57:GLU:HB2	1:A:95:TRP:CD1	0.53	2.39	2	2
1:A:122:VAL:CG1	1:A:126:LEU:HD11	0.53	2.34	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG1	0.53	2.56	9	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:95:TRP:N	0.53	2.18	12	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HD13	0.53	1.79	14	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:HD21	0.53	1.81	15	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HG	0.53	1.81	4	1
1:A:69:GLU:O	1:A:122:VAL:CG2	0.53	2.57	12	2
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:N	0.53	2.19	10	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:85:TRP:CE3	0.53	2.38	12	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:GLU:HB2	0.53	2.04	11	4
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	8	6
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:CE2	0.53	2.38	5	6
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:GLY:H	0.53	1.64	3	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:115:PHE:CD1	0.53	2.39	6	3
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	8	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:69:GLU:HB2	0.53	2.39	1	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:HB2	0.53	2.33	3	1
1:A:17:GLU:CB	1:A:105:MET:O	0.53	2.57	6	2
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CE2	0.53	2.38	6	1
1:A:40:ILE:HD11	1:A:83:TRP:CE2	0.53	2.36	8	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:VAL:N	0.53	2.72	1	4
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.53	2.33	1	11
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:CD2	0.53	2.39	2	1
1:A:6:ILE:O	1:A:40:ILE:CD1	0.53	2.56	3	1
1:A:22:ARG:N	1:A:100:GLN:OE1	0.53	2.42	9	1
1:A:7:ALA:HB2	1:A:40:ILE:HB	0.53	1.79	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:C	1:A:79:HIS:CD2	0.52	2.83	2	1
1:A:57:GLU:OE2	1:A:95:TRP:NE1	0.52	2.42	3	1
1:A:66:SER:O	1:A:68:PHE:N	0.52	2.41	4	2
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CA	0.52	2.87	12	1
1:A:109:GLY:O	1:A:114:ASP:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:115:PHE:CE2	0.52	2.40	8	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:125:LYS:HB2	0.52	2.39	9	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CD	0.52	2.57	8	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:PHE:HB3	0.52	2.38	3	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:95:TRP:O	0.52	2.57	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG22	0.52	2.34	6	2
1:A:111:ASN:HB3	1:A:115:PHE:CD1	0.52	2.38	10	1
1:A:75:PHE:CE2	1:A:80:ILE:CD1	0.52	2.93	4	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:114:ASP:OD1	0.52	2.57	8	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:119:ASN:OD1	0.52	2.56	9	1
1:A:110:LEU:HG	1:A:111:ASN:N	0.52	2.20	10	1
1:A:40:ILE:HD13	1:A:83:TRP:CZ2	0.52	2.40	1	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:CB	0.52	2.87	1	3
1:A:58:VAL:HG23	1:A:59:GLY:N	0.52	2.20	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CB	0.52	2.83	3	1
1:A:5:GLN:HB2	1:A:40:ILE:CG2	0.52	2.33	4	4
1:A:12:ARG:C	1:A:13:ASN:ND2	0.52	2.63	7	2
1:A:12:ARG:O	1:A:13:ASN:ND2	0.52	2.43	7	3
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE1	0.52	2.98	6	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:CG	0.52	2.57	6	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:HB2	0.52	1.82	1	3
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:CA	0.52	2.58	11	4
1:A:22:ARG:CD	1:A:32:LYS:O	0.52	2.58	3	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:62:PRO:HD3	0.52	2.34	14	2
1:A:66:SER:O	1:A:86:LEU:O	0.52	2.28	13	2
1:A:105:MET:SD	1:A:105:MET:N	0.52	2.82	10	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:ALA:H	0.52	1.64	1	4
1:A:18:ILE:N	1:A:18:ILE:CD1	0.52	2.67	12	3
1:A:50:VAL:O	1:A:53:GLU:N	0.52	2.43	4	5
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:CG	0.52	2.92	1	2
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:CG	0.52	2.35	2	1
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD2	0.52	2.83	8	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:88:GLU:OE2	0.52	2.57	11	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:CA	0.52	2.35	12	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:CD1	0.52	2.87	12	1
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD13	0.52	1.81	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:CD1	0.52	2.40	15	4
1:A:35:PHE:CE2	1:A:84:PHE:CD2	0.52	2.97	13	1
1:A:127:LYS:HG3	1:A:128:ARG:N	0.52	2.18	15	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HH2	0.51	1.65	5	2
1:A:4:LEU:HA	1:A:79:HIS:O	0.51	2.05	2	2
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:CB	0.51	2.58	3	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:117:PRO:HG3	0.51	2.40	5	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:CG2	0.51	2.35	10	2
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CA	0.51	2.34	11	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:CB	0.51	2.36	1	2
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:C	0.51	2.49	3	2
1:A:5:GLN:CB	1:A:40:ILE:CG2	0.51	2.89	4	1
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:O	0.51	2.29	8	9
1:A:19:PHE:O	1:A:19:PHE:CG	0.51	2.63	12	3
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:O	0.51	2.28	8	3
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:NE1	0.51	2.20	4	1
1:A:18:ILE:HB	1:A:20:ILE:HD11	0.51	1.82	5	3
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:CG	0.51	2.58	4	1
1:A:126:LEU:CB	1:A:129:LEU:HD13	0.51	2.28	4	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:CB	0.51	2.88	6	1
1:A:65:PHE:CA	1:A:87:VAL:HG23	0.51	2.36	11	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:N	0.51	2.42	2	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD3	0.51	2.35	3	1
1:A:35:PHE:HB2	1:A:36:PRO:CD	0.51	2.36	7	1
1:A:93:GLU:N	1:A:94:PRO:HD2	0.51	2.18	12	1
1:A:119:ASN:C	1:A:121:PRO:HD2	0.51	2.26	5	8
1:A:46:PRO:O	1:A:83:TRP:CZ2	0.51	2.63	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:C	0.51	2.80	12	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:CD1	0.51	2.41	12	1
1:A:54:LEU:HB2	1:A:95:TRP:CZ2	0.51	2.41	6	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:CG	0.51	2.59	11	2
1:A:112:ALA:N	1:A:123:ILE:HG21	0.51	2.19	7	2
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:HB3	0.51	2.05	15	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG21	0.51	2.41	11	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CZ3	0.50	2.41	9	3
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:CD1	0.50	2.36	11	10
1:A:65:PHE:CG	1:A:85:TRP:CZ3	0.50	3.00	1	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HG22	0.50	2.36	11	2
1:A:85:TRP:O	1:A:85:TRP:CD1	0.50	2.64	1	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:90:TRP:HB2	0.50	2.36	14	3
1:A:119:ASN:HB3	1:A:122:VAL:HG23	0.50	1.83	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:HZ	1:A:123:ILE:HD11	0.50	1.66	12	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:HD1	0.50	1.66	12	1
1:A:106:SER:O	1:A:107:LEU:C	0.50	2.49	12	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CE3	0.50	2.93	13	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:CE2	0.50	2.95	7	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:N	0.50	2.80	12	2
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CE2	0.50	2.42	12	2
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:HA	0.50	2.06	14	4
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CB	0.50	2.36	4	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CB	0.50	2.36	13	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:93:GLU:HB3	0.50	1.82	6	1
1:A:111:ASN:HB3	1:A:115:PHE:CE1	0.50	2.41	10	1
1:A:62:PRO:HB2	1:A:65:PHE:CE1	0.50	2.41	12	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HG3	0.50	2.06	6	4
1:A:21:THR:HB	1:A:36:PRO:CG	0.50	2.37	3	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:52:ARG:HB2	0.50	2.35	14	1
1:A:10:ILE:C	1:A:11:ILE:CG1	0.50	2.80	2	5
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:CD1	0.50	2.79	4	1
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:CZ2	0.50	2.41	7	1
1:A:67:LEU:HB2	1:A:85:TRP:CE3	0.50	2.42	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:O	0.50	2.59	12	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:CG1	0.50	2.94	13	1
1:A:16:ASN:ND2	1:A:108:VAL:HG23	0.50	2.22	14	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HG	0.50	2.41	15	1
1:A:6:ILE:HD13	1:A:80:ILE:CG2	0.50	2.34	5	1
1:A:90:TRP:CE2	1:A:94:PRO:HA	0.50	2.41	6	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:CD	0.50	2.37	9	1
1:A:60:ILE:O	1:A:62:PRO:HD3	0.50	2.07	10	2
1:A:40:ILE:HD12	1:A:83:TRP:CE2	0.50	2.42	3	2
1:A:4:LEU:CA	1:A:79:HIS:O	0.50	2.60	2	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CG1	0.50	2.36	4	3
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CD1	0.50	2.42	6	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:C	0.50	2.80	2	1
1:A:40:ILE:CG2	1:A:40:ILE:O	0.50	2.60	4	1
1:A:62:PRO:C	1:A:90:TRP:HA	0.50	2.27	14	4
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:PRO:CD	0.49	2.60	6	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB3	0.49	2.28	11	5
1:A:5:GLN:HB3	1:A:40:ILE:HG21	0.49	1.83	9	1
1:A:57:GLU:OE1	1:A:57:GLU:CA	0.49	2.60	12	1
1:A:22:ARG:CD	1:A:33:LEU:HA	0.49	2.37	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:GLY:HA3	1:A:95:TRP:CZ3	0.49	2.42	3	2
1:A:62:PRO:CD	1:A:91:GLU:HB2	0.49	2.37	5	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HB	0.49	2.36	11	2
1:A:13:ASN:ND2	1:A:88:GLU:O	0.49	2.45	9	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:115:PHE:CE1	0.49	2.41	10	1
1:A:53:GLU:O	1:A:56:GLU:CG	0.49	2.60	6	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:82:LEU:CD1	0.49	2.85	7	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:86:LEU:HD23	0.49	2.36	9	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:92:GLY:CA	0.49	2.91	3	1
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:HA2	0.49	2.08	11	3
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:C	0.49	2.26	2	3
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HG12	0.49	2.23	3	1
1:A:4:LEU:C	1:A:5:GLN:CG	0.49	2.80	5	1
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:HG23	0.49	1.85	5	1
1:A:115:PHE:O	1:A:117:PRO:HD2	0.49	2.07	5	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:93:GLU:N	0.49	2.46	14	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CB	0.49	2.38	2	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:129:LEU:CD2	0.49	2.90	15	3
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:CE2	0.49	2.43	7	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:31:ASN:OD1	0.49	2.60	8	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:48:GLN:H	0.49	1.68	8	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:33:LEU:HA	0.49	2.38	15	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CB	0.49	2.37	1	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE2	0.49	3.00	7	3
1:A:58:VAL:HG22	1:A:93:GLU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:84:PHE:HZ	0.49	1.68	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HB3	0.49	2.38	2	2
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:CB	0.49	2.61	12	6
1:A:99:GLY:C	1:A:101:PRO:CD	0.49	2.81	15	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:CD	0.49	2.91	2	3
1:A:47:GLU:O	1:A:49:ALA:N	0.49	2.46	8	4
1:A:63:GLN:HG3	1:A:90:TRP:N	0.49	2.23	13	2
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:HB2	0.49	2.08	11	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CZ2	0.49	2.81	4	2
1:A:83:TRP:CZ2	1:A:85:TRP:HB3	0.49	2.43	4	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:33:LEU:CD2	0.49	2.37	6	1
1:A:70:LYS:CB	1:A:83:TRP:HB3	0.49	2.37	8	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CB	0.49	2.59	9	2
1:A:57:GLU:CB	1:A:95:TRP:HB2	0.49	2.38	15	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:CB	0.48	2.37	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:TRP:CE2	1:A:85:TRP:HB3	0.48	2.42	4	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:CB	0.48	2.90	8	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:CD2	0.48	2.96	8	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.48	2.28	10	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:114:ASP:O	0.48	2.08	12	1
1:A:13:ASN:O	1:A:15:ASN:N	0.48	2.46	2	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:86:LEU:HD22	0.48	2.44	2	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:62:PRO:HG3	0.48	2.38	10	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:34:GLU:O	0.48	2.60	6	3
1:A:70:LYS:CG	1:A:82:LEU:O	0.48	2.61	1	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:95:TRP:HB3	0.48	1.83	5	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:CG2	0.48	2.39	9	3
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:HD3	0.48	2.08	12	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.39	14	1
1:A:61:THR:HB	1:A:91:GLU:CB	0.48	2.39	2	3
1:A:79:HIS:CD2	1:A:79:HIS:N	0.48	2.82	2	3
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CG	0.48	2.66	4	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:HB2	0.48	2.42	5	3
1:A:93:GLU:CB	1:A:94:PRO:HD2	0.48	2.37	6	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:GLY:N	0.48	2.22	8	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:O	0.48	2.66	13	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.38	11	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CG2	0.48	2.39	11	1
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:HB2	0.48	1.85	15	1
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:HA3	0.48	2.09	10	4
1:A:110:LEU:O	1:A:110:LEU:CD1	0.48	2.55	4	2
1:A:65:PHE:HA	1:A:87:VAL:HG23	0.48	1.85	11	1
1:A:50:VAL:HA	1:A:53:GLU:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:O	0.48	2.31	13	3
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:N	0.48	2.46	14	1
1:A:11:ILE:CG1	1:A:19:PHE:HB3	0.48	2.38	5	2
1:A:55:GLN:HA	1:A:59:GLY:CA	0.48	2.39	5	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:ND2	0.48	2.46	6	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:VAL:N	0.48	2.24	6	2
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:O	0.48	2.32	7	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:ARG:H	0.48	1.68	14	4
1:A:8:VAL:CG2	1:A:9:GLY:N	0.48	2.76	1	3
1:A:8:VAL:CA	1:A:37:GLY:HA2	0.48	2.39	2	1
1:A:47:GLU:O	1:A:48:GLN:C	0.48	2.51	4	4
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:CD	0.48	2.38	5	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:C	0.48	2.86	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HB3	0.48	2.09	12	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:114:ASP:OD2	0.48	2.60	13	1
1:A:107:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	0.48	1.85	15	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:46:PRO:HD2	0.48	2.08	5	5
1:A:8:VAL:CG2	1:A:35:PHE:HB3	0.48	2.38	15	2
1:A:58:VAL:CG2	1:A:93:GLU:HB3	0.48	2.38	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:CG2	0.48	2.92	14	4
1:A:13:ASN:CB	1:A:17:GLU:HB2	0.48	2.39	11	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:84:PHE:C	0.48	2.29	12	1
1:A:106:SER:OG	1:A:108:VAL:HG23	0.48	2.09	13	1
1:A:58:VAL:HG21	1:A:60:ILE:HG12	0.48	1.86	2	1
1:A:57:GLU:CG	1:A:58:VAL:N	0.48	2.77	3	1
1:A:20:ILE:HD11	1:A:115:PHE:CE1	0.48	2.44	7	1
1:A:10:ILE:O	1:A:87:VAL:HG13	0.48	2.09	8	1
1:A:10:ILE:HA	1:A:36:PRO:CG	0.48	2.39	9	1
1:A:37:GLY:O	1:A:96:GLY:O	0.48	2.32	9	1
1:A:15:ASN:O	1:A:17:GLU:HG3	0.48	2.08	12	5
1:A:90:TRP:CD1	1:A:94:PRO:HD3	0.48	2.44	4	1
1:A:5:GLN:C	1:A:40:ILE:CG2	0.48	2.82	13	2
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:O	0.48	2.62	13	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.48	2.39	13	1
1:A:47:GLU:O	1:A:50:VAL:HG12	0.47	2.08	5	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:102:GLY:HA2	0.47	2.38	5	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:HB3	0.47	2.09	11	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:PRO:HD3	0.47	2.30	3	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:HA	0.47	2.40	6	4
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:O	0.47	2.09	5	1
1:A:47:GLU:C	1:A:51:VAL:HG12	0.47	2.28	6	1
1:A:54:LEU:CG	1:A:95:TRP:CZ2	0.47	2.97	8	1
1:A:60:ILE:C	1:A:62:PRO:HD3	0.47	2.30	13	2
1:A:16:ASN:CG	1:A:16:ASN:O	0.47	2.53	9	8
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:PHE:HB3	0.47	2.45	3	1
1:A:21:THR:HA	1:A:102:GLY:HA2	0.47	1.85	12	4
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:HA	0.47	1.86	8	1
1:A:7:ALA:HB1	1:A:53:GLU:OE2	0.47	2.10	10	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:62:PRO:CG	0.47	2.38	10	1
1:A:70:LYS:HG2	1:A:71:LEU:N	0.47	2.25	14	1
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:CG1	0.47	2.39	2	4
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:HA3	0.47	2.09	3	4
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:CG	0.47	2.63	3	1
1:A:70:LYS:CD	1:A:83:TRP:CE3	0.47	2.98	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG3	0.47	2.10	6	1
1:A:35:PHE:CB	1:A:36:PRO:HD3	0.47	2.39	10	2
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CD2	0.47	2.71	8	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:125:LYS:HB3	0.47	2.45	11	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:60:ILE:HD11	0.47	2.40	13	1
1:A:99:GLY:C	1:A:101:PRO:HD3	0.47	2.30	15	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:CA	0.47	2.40	2	2
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:H	0.47	1.69	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:O	0.47	2.33	15	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:CD1	0.47	2.54	5	1
1:A:10:ILE:HD11	1:A:84:PHE:HB2	0.47	1.86	8	2
1:A:35:PHE:O	1:A:36:PRO:O	0.47	2.31	13	4
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:C	0.47	2.53	8	11
1:A:66:SER:HB3	1:A:86:LEU:O	0.47	2.09	3	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:21:THR:H	0.47	1.69	5	3
1:A:58:VAL:CG2	1:A:60:ILE:CD1	0.47	2.93	6	1
1:A:63:GLN:OE1	1:A:95:TRP:NE1	0.47	2.48	6	1
1:A:58:VAL:CB	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.97	8	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:85:TRP:CD2	0.47	2.45	12	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:92:GLY:C	0.47	2.30	13	1
1:A:22:ARG:HG2	1:A:33:LEU:CD2	0.47	2.40	14	1
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:HD12	0.47	2.30	11	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:88:GLU:O	0.47	2.52	2	3
1:A:11:ILE:HG23	1:A:87:VAL:CG1	0.47	2.39	7	1
1:A:56:GLU:CG	1:A:56:GLU:O	0.47	2.62	7	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:CD2	0.47	2.98	8	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:85:TRP:CH2	0.47	2.45	13	2
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:CD2	0.47	2.78	12	1
1:A:65:PHE:CE1	1:A:85:TRP:CH2	0.47	3.02	15	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:36:PRO:O	0.47	2.10	5	4
1:A:21:THR:CB	1:A:36:PRO:HG3	0.47	2.40	5	1
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ALA:C	0.47	2.54	11	4
1:A:8:VAL:O	1:A:85:TRP:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.98	6	1
1:A:73:TYR:N	1:A:80:ILE:O	0.47	2.48	7	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CH2	0.47	2.45	8	1
1:A:6:ILE:HD13	1:A:39:LYS:HA	0.47	1.87	10	1
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD22	0.47	2.25	12	1
1:A:50:VAL:O	1:A:51:VAL:C	0.46	2.54	4	8
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:HB2	0.46	2.10	9	7
1:A:57:GLU:HB2	1:A:95:TRP:NE1	0.46	2.25	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ILE:O	1:A:104:TRP:HA	0.46	2.10	12	3
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:N	0.46	2.26	3	1
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	1.88	4	2
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:OD1	0.46	2.32	5	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:102:GLY:HA3	0.46	2.45	10	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:HD11	0.46	1.88	15	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HB2	0.46	2.10	10	5
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:C	0.46	2.52	12	2
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:O	0.46	2.33	6	1
1:A:5:GLN:HG2	1:A:83:TRP:CZ2	0.46	2.45	7	1
1:A:61:THR:HB	1:A:91:GLU:HB3	0.46	1.86	15	2
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE2	0.46	2.33	8	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:C	0.46	2.53	8	2
1:A:63:GLN:O	1:A:65:PHE:CD2	0.46	2.68	1	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG2	0.46	2.55	1	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:HG2	0.46	2.45	3	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:100:GLN:NE2	0.46	2.26	11	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:80:ILE:O	0.46	2.09	11	2
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HG13	0.46	2.10	13	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HB	0.46	2.11	1	4
1:A:126:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	0.46	1.88	2	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:HG3	0.46	2.10	5	1
1:A:73:TYR:CB	1:A:80:ILE:O	0.46	2.64	7	1
1:A:44:GLU:C	1:A:45:THR:HG22	0.46	2.31	3	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG2	0.46	2.10	7	4
1:A:58:VAL:HG11	1:A:94:PRO:CA	0.46	2.39	7	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:88:GLU:N	0.46	2.78	7	2
1:A:73:TYR:HB3	1:A:80:ILE:CG1	0.46	2.40	10	1
1:A:93:GLU:H	1:A:94:PRO:HD3	0.46	1.71	12	1
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:CD2	0.46	2.40	13	2
1:A:20:ILE:HG23	1:A:21:THR:H	0.46	1.71	15	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:126:LEU:C	0.46	2.84	15	1
1:A:11:ILE:HA	1:A:87:VAL:CG2	0.46	2.41	15	8
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:N	0.46	2.49	15	2
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:C	0.46	2.54	8	4
1:A:54:LEU:HD12	1:A:60:ILE:H	0.46	1.70	3	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:85:TRP:HA	0.46	2.41	3	3
1:A:20:ILE:HG12	1:A:115:PHE:CZ	0.46	2.46	7	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:85:TRP:CE3	0.46	2.44	12	1
1:A:48:GLN:C	1:A:51:VAL:HG12	0.46	2.31	15	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HG12	0.46	2.11	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:PRO:HA	1:A:90:TRP:HA	0.46	1.87	12	4
1:A:11:ILE:HG21	1:A:90:TRP:CD2	0.46	2.46	3	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:NE1	0.46	2.26	15	2
1:A:53:GLU:O	1:A:95:TRP:CE2	0.46	2.69	7	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:95:TRP:CE2	0.46	2.46	8	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HG2	0.46	2.10	12	3
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CB	0.46	2.41	8	2
1:A:36:PRO:HB3	1:A:97:LYS:N	0.46	2.26	2	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD13	0.46	2.41	2	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:31:ASN:OD1	0.46	2.11	8	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:95:TRP:CH2	0.46	2.45	8	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:CA	0.46	2.41	11	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:96:GLY:O	0.46	2.11	13	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:63:GLN:OE1	0.46	2.63	1	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:93:GLU:O	0.46	2.11	9	2
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:CG	0.46	2.63	3	3
1:A:109:GLY:O	1:A:114:ASP:HB2	0.46	2.10	4	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:94:PRO:HB2	0.46	1.87	7	1
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:HB	0.46	2.10	8	1
1:A:42:MET:O	1:A:43:GLY:O	0.46	2.33	8	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:89:ARG:O	0.46	2.11	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:OE1	0.46	2.64	1	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG21	0.46	1.87	7	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:83:TRP:N	0.46	2.82	8	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:127:LYS:HE2	0.46	1.88	10	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CG1	0.45	2.64	1	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HG3	0.45	2.11	3	3
1:A:32:LYS:HD3	1:A:116:PRO:CG	0.45	2.41	5	1
1:A:5:GLN:CB	1:A:40:ILE:HG21	0.45	2.41	8	2
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CG	0.45	2.46	8	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:95:TRP:CB	0.45	2.41	12	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:21:THR:N	0.45	2.27	14	2
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:N	0.45	2.48	15	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CZ	0.45	3.04	1	1
1:A:45:THR:CB	1:A:46:PRO:HD3	0.45	2.41	3	1
1:A:55:GLN:HG3	1:A:56:GLU:N	0.45	2.26	3	1
1:A:91:GLU:HG2	1:A:92:GLY:N	0.45	2.25	3	1
1:A:62:PRO:HA	1:A:90:TRP:CB	0.45	2.42	9	2
1:A:73:TYR:HB2	1:A:80:ILE:HD11	0.45	1.86	10	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:C	0.45	2.32	12	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:95:TRP:HE1	0.45	1.71	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:O	1:A:127:LYS:O	0.45	2.33	11	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:CD1	0.45	2.99	15	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CB	0.45	2.64	1	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:46:PRO:HD3	0.45	2.11	3	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:69:GLU:HB2	0.45	2.47	5	3
1:A:89:ARG:O	1:A:90:TRP:CB	0.45	2.63	4	2
1:A:97:LYS:O	1:A:98:GLU:C	0.45	2.53	15	2
1:A:73:TYR:OH	1:A:118:ALA:O	0.45	2.32	5	1
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:OXT	0.45	2.34	4	2
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:HG3	0.45	1.88	3	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:97:LYS:O	0.45	2.55	15	1
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:HD2	0.45	1.89	12	8
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:HG3	0.45	2.12	4	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:84:PHE:C	0.45	2.85	12	1
1:A:85:TRP:NE1	1:A:87:VAL:HG13	0.45	2.26	15	1
1:A:12:ARG:O	1:A:13:ASN:CG	0.45	2.54	2	3
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:C	0.45	2.55	5	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:GLN:O	0.45	2.34	2	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:17:GLU:O	0.45	2.12	10	2
1:A:54:LEU:HA	1:A:95:TRP:NE1	0.45	2.27	9	4
1:A:85:TRP:CZ2	1:A:95:TRP:CZ2	0.45	3.04	4	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:VAL:N	0.45	2.27	4	1
1:A:93:GLU:CG	1:A:94:PRO:HD2	0.45	2.42	6	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:80:ILE:N	0.45	2.27	9	1
1:A:62:PRO:HA	1:A:89:ARG:O	0.45	2.11	11	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.45	2.90	14	2
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:C	0.45	2.33	2	1
1:A:67:LEU:O	1:A:68:PHE:C	0.45	2.55	4	7
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HB	0.45	2.12	8	7
1:A:35:PHE:HE2	1:A:123:ILE:HD11	0.45	1.68	7	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HG12	0.45	1.87	7	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:85:TRP:CZ2	0.45	3.05	12	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:85:TRP:CE3	0.45	3.05	13	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:GLU:OE2	0.45	2.34	14	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG2	0.45	2.12	14	1
1:A:126:LEU:HB2	1:A:129:LEU:CD2	0.45	2.42	14	1
1:A:37:GLY:O	1:A:97:LYS:HD3	0.45	2.12	1	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:HB2	0.45	2.42	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:HG2	0.45	2.40	2	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:CB	0.45	2.65	2	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG22	0.45	2.47	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:HB2	1:A:36:PRO:HD3	0.45	1.89	7	1
1:A:58:VAL:CB	1:A:95:TRP:HB3	0.45	2.41	8	1
1:A:8:VAL:O	1:A:84:PHE:HB3	0.45	2.12	9	1
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:CD	0.44	3.01	1	2
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:HB	0.44	2.42	4	2
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CG	0.44	2.66	12	2
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:HG11	0.44	1.89	9	2
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CD2	0.44	2.70	8	1
1:A:110:LEU:HB2	1:A:129:LEU:CD1	0.44	2.42	8	1
1:A:7:ALA:O	1:A:37:GLY:C	0.44	2.56	9	1
1:A:111:ASN:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.44	3.00	10	1
1:A:17:GLU:CG	1:A:105:MET:O	0.44	2.65	12	1
1:A:115:PHE:CB	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.42	13	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:44:GLU:N	0.44	2.51	15	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:CG	0.44	3.00	3	1
1:A:97:LYS:CG	1:A:98:GLU:N	0.44	2.80	4	2
1:A:33:LEU:HB2	1:A:114:ASP:O	0.44	2.11	5	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:THR:HB	0.44	2.11	13	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CG	0.44	2.42	2	1
1:A:7:ALA:O	1:A:53:GLU:OE2	0.44	2.34	3	1
1:A:22:ARG:CG	1:A:32:LYS:O	0.44	2.65	3	1
1:A:56:GLU:O	1:A:56:GLU:CD	0.44	2.56	7	1
1:A:33:LEU:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.44	3.00	9	1
1:A:10:ILE:O	1:A:87:VAL:HG22	0.44	2.11	12	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD11	0.44	1.89	15	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:CD2	0.44	2.78	1	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:105:MET:O	0.44	2.13	2	2
1:A:40:ILE:CD1	1:A:83:TRP:NE1	0.44	2.81	3	1
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HD12	0.44	2.13	4	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:HD3	0.44	2.27	5	3
1:A:35:PHE:HB3	1:A:82:LEU:HD22	0.44	1.89	5	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:OD1	0.44	2.35	8	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG3	0.44	2.12	9	2
1:A:89:ARG:NH1	1:A:89:ARG:HG2	0.44	2.27	11	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CD1	0.44	2.99	1	1
1:A:68:PHE:HE2	1:A:122:VAL:HG22	0.44	1.72	3	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:CG	0.44	2.86	4	1
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:N	0.44	2.27	5	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:74:GLU:N	0.44	2.86	11	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:126:LEU:CD2	0.44	3.01	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:GLN:HA	1:A:90:TRP:HB3	0.44	1.89	1	1
1:A:44:GLU:HB2	1:A:48:GLN:NE2	0.44	2.28	3	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:126:LEU:HB3	0.44	2.47	4	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CH2	0.44	2.48	5	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:33:LEU:HD12	0.44	2.39	5	1
1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:OD1	0.44	2.51	5	2
1:A:11:ILE:HD12	1:A:19:PHE:CD2	0.44	2.47	6	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:CG	0.44	2.55	6	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:94:PRO:CB	0.44	2.43	7	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:84:PHE:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:67:LEU:HA	1:A:85:TRP:HA	0.44	1.90	13	2
1:A:115:PHE:CD2	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.47	10	1
1:A:60:ILE:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.44	2.41	11	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:89:ARG:CG	0.44	2.79	11	2
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:CA	0.44	2.43	8	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:N	0.44	2.81	8	1
1:A:15:ASN:HB3	1:A:17:GLU:CG	0.44	2.43	10	2
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD2	0.44	2.13	15	1
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HB2	0.44	2.12	12	2
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:CD	0.44	2.86	1	1
1:A:124:ALA:O	1:A:127:LYS:HG3	0.44	2.13	7	2
1:A:46:PRO:HA	1:A:83:TRP:CH2	0.44	2.47	8	1
1:A:106:SER:O	1:A:110:LEU:HB2	0.44	2.13	10	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:113:ASP:O	0.44	2.57	13	1
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:HA3	0.44	1.89	9	3
1:A:47:GLU:C	1:A:49:ALA:N	0.44	2.71	6	3
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:NE1	0.44	2.27	6	1
1:A:55:GLN:O	1:A:59:GLY:HA2	0.44	2.13	6	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:H	0.44	2.26	8	1
1:A:70:LYS:HE2	1:A:83:TRP:CE3	0.44	2.48	8	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:17:GLU:C	0.44	2.32	11	1
1:A:50:VAL:CB	1:A:85:TRP:CE3	0.44	3.01	12	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:114:ASP:O	0.43	2.12	14	6
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CZ	0.43	2.48	1	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:21:THR:CB	1:A:36:PRO:CG	0.43	2.96	3	1
1:A:64:HIS:C	1:A:65:PHE:CD1	0.43	2.92	3	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:HD3	0.43	1.89	5	1
1:A:90:TRP:NE1	1:A:94:PRO:HA	0.43	2.28	6	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG2	0.43	2.28	8	1
1:A:4:LEU:CG	1:A:80:ILE:CG2	0.43	2.96	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:THR:HB	1:A:46:PRO:HD2	0.43	1.90	10	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA3	0.43	1.89	11	1
1:A:37:GLY:N	1:A:97:LYS:HB2	0.43	2.28	11	2
1:A:21:THR:O	1:A:33:LEU:HD22	0.43	2.13	14	1
1:A:85:TRP:CE2	1:A:87:VAL:CG1	0.43	3.01	15	1
1:A:4:LEU:HD23	1:A:79:HIS:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:129:LEU:HD23	0.43	2.43	2	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HB2	0.43	2.43	2	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HD3	0.43	2.13	2	1
1:A:7:ALA:HA	1:A:83:TRP:CD1	0.43	2.48	8	1
1:A:4:LEU:HG	1:A:80:ILE:CG2	0.43	2.41	10	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:36:PRO:CA	0.43	2.66	15	1
1:A:85:TRP:O	1:A:86:LEU:C	0.43	2.57	2	2
1:A:10:ILE:C	1:A:11:ILE:HG12	0.43	2.33	3	3
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:HA3	0.43	2.43	15	2
1:A:53:GLU:HA	1:A:56:GLU:CG	0.43	2.43	14	2
1:A:128:ARG:O	1:A:128:ARG:NE	0.43	2.52	14	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:VAL:N	0.43	2.29	1	1
1:A:97:LYS:CB	1:A:100:GLN:HB3	0.43	2.42	2	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:HB	0.43	1.91	7	2
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:HD3	0.43	2.28	7	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:129:LEU:HD23	0.43	2.44	9	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:105:MET:O	0.43	2.57	12	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HG	0.43	2.13	14	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HG	0.43	2.48	15	1
1:A:122:VAL:O	1:A:123:ILE:C	0.43	2.57	5	1
1:A:35:PHE:N	1:A:36:PRO:HD2	0.43	2.29	10	2
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:HG12	0.43	1.89	11	1
1:A:83:TRP:HB2	1:A:85:TRP:CE2	0.43	2.49	12	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:O	0.43	2.14	13	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:18:ILE:CG1	0.43	2.44	14	1
1:A:98:GLU:OE1	1:A:98:GLU:O	0.43	2.37	14	1
1:A:14:GLU:CA	1:A:14:GLU:OE1	0.43	2.66	1	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:60:ILE:HG12	0.43	2.43	1	2
1:A:21:THR:HG22	1:A:100:GLN:HG2	0.43	1.90	3	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:60:ILE:HG13	0.43	2.43	3	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CB	0.43	2.67	13	7
1:A:57:GLU:HB3	1:A:95:TRP:HB3	0.43	1.91	14	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:129:LEU:C	0.43	2.32	10	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG3	0.43	2.27	15	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CG	0.43	2.43	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:CG	0.43	2.66	2	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:HG2	0.43	2.14	2	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:72:GLU:N	0.43	2.77	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:HB3	0.43	2.13	10	2
1:A:53:GLU:HG3	1:A:54:LEU:N	0.43	2.28	12	1
1:A:71:LEU:CG	1:A:122:VAL:HB	0.43	2.44	4	1
1:A:90:TRP:N	1:A:90:TRP:CD2	0.43	2.86	8	1
1:A:10:ILE:HA	1:A:36:PRO:HG3	0.43	1.90	9	1
1:A:97:LYS:HD3	1:A:100:GLN:CB	0.43	2.43	9	1
1:A:20:ILE:CG1	1:A:105:MET:SD	0.43	3.07	10	1
1:A:21:THR:CB	1:A:97:LYS:HB2	0.43	2.44	10	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:NE1	0.43	2.29	14	1
1:A:10:ILE:O	1:A:11:ILE:HG12	0.43	2.14	10	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG23	0.43	2.43	3	1
1:A:88:GLU:O	1:A:89:ARG:CD	0.43	2.67	3	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:84:PHE:CZ	0.43	3.07	4	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:63:GLN:NE2	0.43	2.28	5	1
1:A:36:PRO:CA	1:A:82:LEU:HD11	0.43	2.43	7	1
1:A:100:GLN:CB	1:A:101:PRO:CD	0.43	2.96	8	1
1:A:32:LYS:CG	1:A:32:LYS:O	0.43	2.67	10	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA2	0.42	1.90	2	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:31:ASN:N	0.42	2.52	2	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:HG22	0.42	2.14	2	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:59:GLY:H	0.42	1.74	2	1
1:A:66:SER:C	1:A:86:LEU:O	0.42	2.58	3	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CD1	0.42	2.49	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:CG1	0.42	2.57	6	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CZ	0.42	3.02	7	1
1:A:111:ASN:O	1:A:127:LYS:HE2	0.42	2.14	8	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:60:ILE:CD1	0.42	2.94	13	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:85:TRP:CE2	0.42	2.49	11	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:90:TRP:C	0.42	2.91	14	1
1:A:12:ARG:HG3	1:A:17:GLU:O	0.42	2.13	15	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:108:VAL:O	0.42	2.36	1	1
1:A:70:LYS:HG2	1:A:82:LEU:O	0.42	2.13	1	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:CB	0.42	2.97	2	1
1:A:4:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG12	0.42	1.91	6	1
1:A:63:GLN:OE1	1:A:95:TRP:CE2	0.42	2.72	6	1
1:A:6:ILE:O	1:A:83:TRP:NE1	0.42	2.52	7	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:CE	0.42	2.82	7	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:83:TRP:CB	0.42	2.43	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:THR:OG1	1:A:35:PHE:C	0.42	2.57	9	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:110:LEU:HD22	0.42	2.44	10	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:N	0.42	2.82	12	1
1:A:87:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CZ3	0.42	2.49	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:HB3	0.42	2.42	15	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:CB	0.42	3.03	7	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:85:TRP:CG	0.42	2.49	8	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:83:TRP:HB3	0.42	1.91	8	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:HA	0.42	1.90	12	1
1:A:126:LEU:O	1:A:127:LYS:C	0.42	2.57	14	1
1:A:22:ARG:HD2	1:A:31:ASN:OD1	0.42	2.15	8	1
1:A:53:GLU:CD	1:A:95:TRP:CZ3	0.42	2.93	9	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:97:LYS:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:C	0.42	2.86	1	2
1:A:54:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HD11	0.42	2.44	2	1
1:A:114:ASP:O	1:A:114:ASP:OD1	0.42	2.37	2	1
1:A:63:GLN:HG3	1:A:89:ARG:O	0.42	2.13	8	2
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CD1	0.42	2.73	5	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:90:TRP:HB2	0.42	1.91	6	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:C	0.42	2.56	6	1
1:A:5:GLN:O	1:A:40:ILE:CG2	0.42	2.68	8	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:129:LEU:CD2	0.42	2.44	9	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:114:ASP:O	0.42	2.15	13	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HB2	0.42	2.14	15	1
1:A:10:ILE:HG13	1:A:84:PHE:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CD1	0.42	2.92	6	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:52:ARG:HG2	0.42	2.28	9	1
1:A:17:GLU:C	1:A:18:ILE:HD13	0.42	2.35	1	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:62:PRO:HG3	0.42	1.90	3	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:60:ILE:HD11	0.42	2.44	6	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:123:ILE:CG2	0.42	2.44	6	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:125:LYS:CB	0.42	3.03	11	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:92:GLY:HA3	0.42	1.91	12	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:103:GLU:O	0.42	2.15	3	1
1:A:66:SER:CB	1:A:86:LEU:O	0.42	2.68	3	1
1:A:4:LEU:N	1:A:79:HIS:HB2	0.42	2.30	5	1
1:A:56:GLU:CD	1:A:56:GLU:O	0.42	2.58	11	1
1:A:52:ARG:HB2	1:A:52:ARG:NH2	0.42	2.29	14	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD22	0.42	2.50	14	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:107:LEU:HD12	0.42	1.92	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:HG12	0.42	2.44	8	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:59:GLY:N	0.42	2.83	9	1
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:HG13	0.42	1.91	10	1
1:A:106:SER:OG	1:A:108:VAL:CG2	0.42	2.68	13	1
1:A:71:LEU:O	1:A:81:THR:CG2	0.41	2.68	2	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD21	0.41	1.92	3	1
1:A:115:PHE:C	1:A:117:PRO:HD2	0.41	2.35	5	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:48:GLN:HB2	0.41	1.92	8	1
1:A:21:THR:O	1:A:34:GLU:HB2	0.41	2.14	10	1
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:C	0.41	2.57	10	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CA	0.41	2.45	12	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:56:GLU:HG3	0.41	1.92	15	1
1:A:22:ARG:HG2	1:A:32:LYS:O	0.41	2.15	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:N	0.41	2.30	9	2
1:A:22:ARG:CZ	1:A:103:GLU:OE2	0.41	2.68	11	1
1:A:51:VAL:O	1:A:54:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:97:LYS:HD2	1:A:100:GLN:NE2	0.41	2.30	11	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:122:VAL:CG2	0.41	2.98	1	2
1:A:54:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG13	0.41	1.92	8	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:O	0.41	2.37	8	1
1:A:70:LYS:HB2	1:A:82:LEU:O	0.41	2.15	10	1
1:A:6:ILE:HB	1:A:82:LEU:HD22	0.41	1.91	13	1
1:A:48:GLN:O	1:A:51:VAL:N	0.41	2.53	14	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:85:TRP:CH2	0.41	3.08	14	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CB	0.41	2.69	15	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:60:ILE:HG12	0.41	1.92	1	1
1:A:67:LEU:N	1:A:86:LEU:O	0.41	2.53	3	1
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:GLY:H	0.41	2.28	8	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:115:PHE:CZ	0.41	2.51	10	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:107:LEU:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:HE2	0.41	1.92	13	1
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:HG2	0.41	2.14	3	1
1:A:97:LYS:HB3	1:A:100:GLN:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CD1	0.41	2.68	5	1
1:A:4:LEU:HB3	1:A:79:HIS:CB	0.41	2.45	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HG	0.41	2.15	11	2
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:N	0.41	2.30	1	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:HG3	0.41	2.16	4	1
1:A:4:LEU:O	1:A:5:GLN:CB	0.41	2.67	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:CD2	1:A:105:MET:SD	0.41	3.09	13	1
1:A:115:PHE:CE1	1:A:123:ILE:CD1	0.41	3.03	13	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:4:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CD1	0.41	2.50	6	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:CB	0.41	2.69	8	1
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:91:GLU:HB3	0.41	2.46	11	1
1:A:11:ILE:CG1	1:A:94:PRO:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:91:GLU:C	1:A:92:GLY:O	0.41	2.59	3	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:90:TRP:C	0.41	2.36	5	1
1:A:62:PRO:O	1:A:90:TRP:CA	0.41	2.69	14	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:CA	0.41	2.99	2	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:100:GLN:HB3	0.41	2.46	2	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:114:ASP:HB2	0.41	1.93	2	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:PRO:CD	0.41	2.89	3	1
1:A:37:GLY:HA2	1:A:96:GLY:O	0.41	2.16	4	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HD11	0.41	1.93	6	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:95:TRP:CA	0.41	2.45	6	1
1:A:6:ILE:HG23	1:A:39:LYS:HD2	0.41	1.92	8	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:97:LYS:HB2	0.41	2.43	9	1
1:A:86:LEU:HD21	1:A:129:LEU:CD2	0.41	2.44	10	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	0.41	1.92	12	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:90:TRP:HB2	0.41	1.92	13	1
1:A:113:ASP:O	1:A:113:ASP:OD1	0.41	2.39	13	1
1:A:16:ASN:ND2	1:A:107:LEU:HB2	0.41	2.31	15	1
1:A:22:ARG:HB2	1:A:33:LEU:HA	0.41	1.93	15	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:97:LYS:HG2	0.41	1.91	1	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:63:GLN:NE2	0.41	2.31	4	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD3	0.41	2.15	6	1
1:A:20:ILE:O	1:A:102:GLY:HA2	0.41	2.16	8	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:HB2	0.41	2.16	13	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:84:PHE:CD2	0.41	2.50	10	1
1:A:17:GLU:C	1:A:18:ILE:CG1	0.41	2.89	11	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:84:PHE:CD1	0.41	3.03	14	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CG	0.40	2.48	3	1
1:A:98:GLU:HG3	1:A:99:GLY:N	0.40	2.31	3	1
1:A:65:PHE:HB3	1:A:87:VAL:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:12:ARG:HG3	1:A:18:ILE:HG12	0.40	1.93	7	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:103:GLU:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:95:TRP:CB	0.40	2.45	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:LEU:CD2	1:A:126:LEU:N	0.40	2.84	13	1
1:A:22:ARG:HD2	1:A:32:LYS:O	0.40	2.17	2	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:114:ASP:CB	0.40	2.45	2	1
1:A:111:ASN:HB3	1:A:113:ASP:OD2	0.40	2.16	5	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:33:LEU:HD23	0.40	1.93	6	1
1:A:51:VAL:O	1:A:55:GLN:HG2	0.40	2.16	6	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:C	0.40	2.58	7	1
1:A:64:HIS:N	1:A:89:ARG:O	0.40	2.54	8	1
1:A:10:ILE:HG23	1:A:36:PRO:HG3	0.40	1.91	9	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG21	0.40	1.90	9	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:88:GLU:C	0.40	2.75	9	1
1:A:4:LEU:HG	1:A:79:HIS:O	0.40	2.17	14	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:95:TRP:O	0.40	2.16	5	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:NE1	0.40	2.76	5	1
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:CD	0.40	2.69	10	1
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:HG12	0.40	2.17	13	1
1:A:65:PHE:CB	1:A:87:VAL:CG1	0.40	2.95	15	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:114:ASP:CG	0.40	2.37	4	1
1:A:69:GLU:OE1	1:A:125:LYS:NZ	0.40	2.55	4	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:108:VAL:HB	0.40	2.17	8	1
1:A:46:PRO:O	1:A:85:TRP:CH2	0.40	2.75	8	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:LEU:CD1	0.40	2.99	8	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:85:TRP:N	0.40	2.31	13	1
1:A:72:GLU:HG2	1:A:73:TYR:N	0.40	2.29	13	1
1:A:10:ILE:CG1	1:A:84:PHE:HB2	0.40	2.46	2	1
1:A:36:PRO:HB3	1:A:96:GLY:CA	0.40	2.46	2	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:87:VAL:CG1	0.40	3.04	3	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:84:PHE:HA	0.40	1.94	5	1
1:A:55:GLN:HA	1:A:59:GLY:HA2	0.40	1.93	5	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:93:GLU:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:34:GLU:O	0.40	2.69	13	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	117/129 (91%)	78±4 (66±3%)	30±4 (25±3%)	9±2 (8±2%)	2	14
All	All	1755/1935 (91%)	1167 (66%)	447 (25%)	141 (8%)	2	14

All 43 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	36	PRO	13
1	A	118	ALA	10
1	A	42	MET	8
1	A	68	PHE	8
1	A	61	THR	7
1	A	20	ILE	6
1	A	38	GLY	6
1	A	77	ASP	5
1	A	96	GLY	5
1	A	67	LEU	5
1	A	109	GLY	5
1	A	108	VAL	4
1	A	92	GLY	4
1	A	94	PRO	4
1	A	95	TRP	3
1	A	116	PRO	3
1	A	90	TRP	3
1	A	87	VAL	3
1	A	117	PRO	3
1	A	102	GLY	3
1	A	16	ASN	2
1	A	101	PRO	2
1	A	5	GLN	2
1	A	14	GLU	2
1	A	97	LYS	2
1	A	35	PHE	2
1	A	64	HIS	2
1	A	65	PHE	2
1	A	31	ASN	2
1	A	40	ILE	2
1	A	45	THR	1
1	A	58	VAL	1
1	A	98	GLU	1
1	A	43	GLY	1
1	A	63	GLN	1
1	A	66	SER	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	110	LEU	1
1	A	39	LYS	1
1	A	4	LEU	1
1	A	12	ARG	1
1	A	80	ILE	1
1	A	41	GLU	1
1	A	99	GLY	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	103/110 (94%)	66±4 (64±3%)	37±4 (36±3%)	1 8
All	All	1545/1650 (94%)	986 (64%)	559 (36%)	1 8

All 91 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	THR	15
1	A	89	ARG	15
1	A	45	THR	14
1	A	52	ARG	14
1	A	60	ILE	14
1	A	71	LEU	13
1	A	20	ILE	11
1	A	32	LYS	11
1	A	82	LEU	11
1	A	106	SER	11
1	A	110	LEU	11
1	A	47	GLU	11
1	A	11	ILE	10
1	A	70	LYS	10
1	A	73	TYR	10
1	A	75	PHE	10
1	A	100	GLN	10
1	A	18	ILE	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	33	LEU	9
1	A	54	LEU	9
1	A	68	PHE	9
1	A	114	ASP	9
1	A	122	VAL	9
1	A	78	ARG	9
1	A	83	TRP	9
1	A	44	GLU	8
1	A	97	LYS	8
1	A	119	ASN	8
1	A	22	ARG	8
1	A	125	LYS	8
1	A	10	ILE	8
1	A	93	GLU	8
1	A	48	GLN	7
1	A	129	LEU	7
1	A	4	LEU	7
1	A	84	PHE	7
1	A	85	TRP	7
1	A	42	MET	7
1	A	34	GLU	6
1	A	58	VAL	6
1	A	64	HIS	6
1	A	111	ASN	6
1	A	39	LYS	6
1	A	5	GLN	6
1	A	13	ASN	6
1	A	77	ASP	6
1	A	51	VAL	6
1	A	66	SER	5
1	A	69	GLU	5
1	A	88	GLU	5
1	A	104	TRP	5
1	A	74	GLU	5
1	A	128	ARG	5
1	A	105	MET	5
1	A	126	LEU	5
1	A	63	GLN	5
1	A	81	THR	5
1	A	14	GLU	4
1	A	65	PHE	4
1	A	79	HIS	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	LEU	4
1	A	61	THR	4
1	A	57	GLU	4
1	A	41	GLU	4
1	A	50	VAL	3
1	A	55	GLN	3
1	A	6	ILE	3
1	A	72	GLU	3
1	A	12	ARG	3
1	A	98	GLU	3
1	A	40	ILE	3
1	A	108	VAL	3
1	A	35	PHE	3
1	A	107	LEU	3
1	A	31	ASN	2
1	A	53	GLU	2
1	A	95	TRP	2
1	A	80	ILE	2
1	A	115	PHE	2
1	A	56	GLU	2
1	A	87	VAL	2
1	A	17	GLU	2
1	A	103	GLU	2
1	A	15	ASN	1
1	A	90	TRP	1
1	A	120	GLU	1
1	A	113	ASP	1
1	A	62	PRO	1
1	A	101	PRO	1
1	A	67	LEU	1
1	A	127	LYS	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided