

# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

#### Feb 19, 2018 – 11:45 am GMT

PDB ID : 1RIP

Title : RIBOSOMAL PROTEIN S17: CHARACTERIZATION OF THE THREE-

DIMENSIONAL STRUCTURE BY 1H-AND 15N-NMR

Authors: Golden, B.L.; Hoffman, D.W.; Ramakrishnan, V.; White, S.W.

Deposited on : 1993-08-17

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

Percentile statistics : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)

RCI : v 1n 11 5 13 A (Berjanski et al., 2005)

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker: trunk30686

Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001) Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)

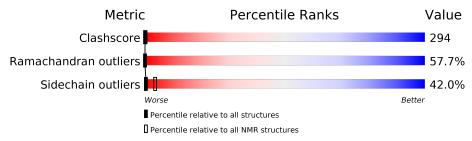
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk30686

### 1 Overall quality at a glance (i)

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	NMR archive
	$(\# \mathrm{Entries})$	$(\#  ext{Entries})$
Clashscore	136279	12091
Ramachandran outliers	132675	10835
Sidechain outliers	132484	10811

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain					
1	A	81	26%	51%	20%	•		



## 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 6 models. Model 6 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:6-A:83 (78)	2.19	6						

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 2 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 6
2	4, 5



## 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1394 atoms, of which 723 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called RIBOSOMAL PROTEIN S17.

Mol	Chain	Residues		Atoms					
1	Λ	01	Total	С	Н	N	О	S	0
1	A	01	1394	428	723	124	117	2	U

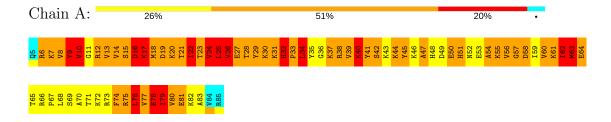


## 4 Residue-property plots (i)

### 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: RIBOSOMAL PROTEIN S17

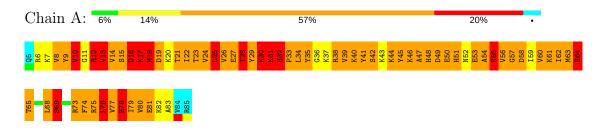


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

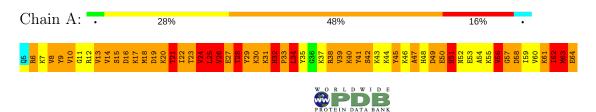
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

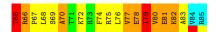
• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

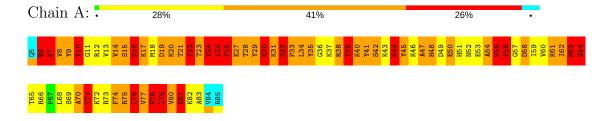
• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17





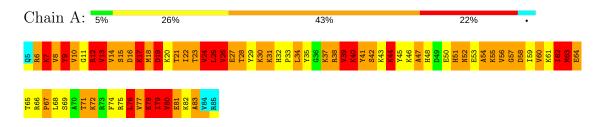
### 4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17



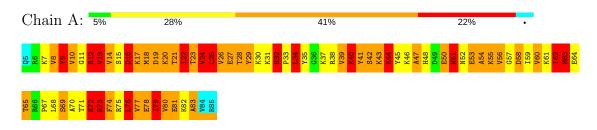
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17



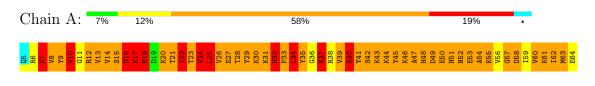
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17



#### 4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

• Molecule 1: RIBOSOMAL PROTEIN S17









#### Refinement protocol and experimental data overview (i) 5



Of the? calculated structures, 6 were deposited, based on the following criterion:?.

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or refinement.

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	В	ond lengths	В	Sond angles
WIOI	Chain	RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	$1.16 \pm 0.03$	$0\pm0/654~(0.0\pm0.0\%)$	$1.09 \pm 0.04$	$1\pm1/875~(0.1\pm0.1\%)$
All	All	1.16	0/3924 (0.0%)	1.09	5/5250 (0.1%)

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	${ m Col} \ { m Chain} \ { m Res} \ { m Type} \ { m Atoms} \ { m Z} \ { m Observed}(^o)$		$oxed{Z} oxed{ ext{Observed}(^o)}$		$\mathrm{Ideal}(^{o})$	Mod	dels		
MIOI	Chain	nes	туре	Atoms	L	Z Observed()		Worst	Total
1	A	26	VAL	CB-CA-C	-7.19	97.74	111.40	2	2
1	A	9	TYR	CB-CG-CD2	-6.46	117.12	121.00	4	1
1	A	9	TYR	CB-CG-CD1	5.80	124.48	121.00	4	1
1	A	62	ILE	CA-C-N	5.24	128.72	117.20	5	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	$\mathbf{H}(\mathbf{added})$	Clashes
1	A	643	691	691	392±19
All	All	3858	4146	4146	2354

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 294.

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



l A	<b>A</b>	Q1 1 (8)	D. (8)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{Å})$	$\operatorname{Distance}(\mathrm{\AA})$	Worst	Total
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:HG13	1.23	1.32	5	3
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:HG23	1.14	1.42	3	3
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:HG23	1.09	1.43	6	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HG12	1.09	1.23	1	1
1:A:11:GLY:O	1:A:60:VAL:HG12	1.05	1.48	4	2
1:A:23:THR:O	1:A:24:VAL:HG12	1.04	1.50	5	5
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:HG22	1.03	1.51	4	4
1:A:62:ILE:N	1:A:76:LEU:HD22	1.02	1.69	2	1
1:A:29:TYR:CG	1:A:39:VAL:HG21	1.01	1.90	6	2
1:A:26:VAL:HB	1:A:45:TYR:CZ	1.01	1.91	6	5
1:A:60:VAL:HG23	1:A:79:ILE:O	1.01	1.56	4	2
1:A:26:VAL:HG23	1:A:45:TYR:CE2	1.00	1.90	4	2
1:A:15:SER:N	1:A:22:ILE:HG22	0.99	1.71	3	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:HG13	0.99	1.92	2	1
1:A:39:VAL:HG11	1:A:41:TYR:CD1	0.98	1.94	1	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:CG1	0.97	2.12	5	5
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:CB	0.97	1.89	5	3
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:CG1	0.97	1.90	1	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:60:VAL:HG11	0.97	1.89	2	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CD2	0.96	2.53	1	1
1:A:9:TYR:CG	1:A:45:TYR:CE2	0.96	2.53	2	2
1:A:10:VAL:O	1:A:26:VAL:HG11	0.96	1.59	4	2
1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:HG13	0.95	1.61	4	1
1:A:15:SER:CA	1:A:22:ILE:HG22	0.95	1.92	3	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:HB2	0.94	1.36	4	4
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HG23	0.94	1.63	2	5
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	0.93	1.38	5	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:45:TYR:CD2	0.93	1.99	4	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:HG22	0.92	1.64	5	5
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:VAL:HG22	0.92	1.37	2	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:41:TYR:O	0.92	1.65	6	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:CD1	0.92	1.98	1	1
1:A:13:VAL:O	1:A:60:VAL:HG23	0.92	1.63	5	1
1:A:61:LYS:HE3	1:A:76:LEU:HD21	0.92	1.42	2	1
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:HG13	0.92	1.62	2	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HG23	0.91	1.40	2	1
1:A:60:VAL:O	1:A:79:ILE:HG22	0.91	1.64	3	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:HG13	0.91	1.66	6	5
1:A:11:GLY:HA2	1:A:24:VAL:CG2	0.91	1.95	3	2
1:A:24:VAL:HB	1:A:60:VAL:HG21	0.91	1.40	2	1
1:A:13:VAL:HG21	1:A:25:LEU:HD23	0.91	1.43	3	1
1:A:45:TYR:N	1:A:45:TYR:CD1	0.91	2.34	3	5



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:62:ILE:CG1	1:A:62:ILE:O	0.90	2.17	5	1	
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:HG12	0.90	1.65	3	2	
1:A:25:LEU:HD23	1:A:43:LYS:CB	0.90	1.97	5	1	
1:A:59:ILE:HG22	1:A:80:VAL:CG1	0.90	1.96	5	1	
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:CG2	0.89	2.19	6	6	
1:A:63:MET:CE	1:A:76:LEU:HD12	0.89	1.97	3	1	
1:A:44:LYS:C	1:A:45:TYR:CD1	0.88	2.45	5	5	
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:CD1	0.88	2.22	5	1	
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:HB3	0.88	1.46	3	3	
1:A:61:LYS:C	1:A:62:ILE:HG22	0.87	1.87	4	3	
1:A:76:LEU:HD13	1:A:76:LEU:O	0.87	1.67	6	1	
1:A:24:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HG11	0.87	1.45	2	1	
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:HG11	0.87	2.03	5	2	
1:A:10:VAL:O	1:A:26:VAL:CG2	0.87	2.23	3	3	
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:HG22	0.87	1.70	6	3	
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:HD13	0.87	1.70	5	1	
1:A:10:VAL:C	1:A:26:VAL:HG21	0.86	1.90	4	2	
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:HG23	0.86	1.70	5	2	
1:A:11:GLY:O	1:A:24:VAL:HG23	0.86	1.70	1	2	
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:CB	0.86	2.00	5	1	
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:HG12	0.86	1.71	1	1	
1:A:10:VAL:HB	1:A:61:LYS:HA	0.86	1.46	5	4	
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:CG2	0.86	1.99	2	1	
1:A:12:ARG:C	1:A:13:VAL:HG23	0.86	1.88	6	2	
1:A:15:SER:O	1:A:16:ASP:HB3	0.85	1.69	1	5	
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:LYS:N	0.85	1.86	4	3	
1:A:59:ILE:HG22	1:A:80:VAL:HG13	0.85	1.49	5	1	
1:A:26:VAL:HB	1:A:45:TYR:CE2	0.85	2.07	2	2	
1:A:25:LEU:HD12	1:A:26:VAL:N	0.85	1.87	3	1	
1:A:21:THR:HG21	1:A:49:ASP:OD1	0.85	1.72	6	1	
1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:HG12	0.85	1.72	3	3	
1:A:45:TYR:HD2	1:A:62:ILE:HD12	0.84	1.30	5	1	
1:A:58:ASP:CB	1:A:80:VAL:HG23	0.84	2.02	3	1	
1:A:32:HIS:HB2	1:A:33:PRO:HD3	0.84	1.50	3	5	
1:A:15:SER:OG	1:A:56:VAL:HG22	0.84	1.73	5	1	
1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:HG13	0.84	1.73	4	1	
1:A:11:GLY:C	1:A:60:VAL:HG12	0.83	1.94	2	1	
1:A:10:VAL:O	1:A:24:VAL:CG2	0.83	2.26	3	2	
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:CB	0.83	2.03	1	2	
1:A:26:VAL:CG2	1:A:45:TYR:CE2	0.83	2.62	4	4	
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:CG1	0.82	2.27	4	1	



Continued from previous page...

Atom-1  1:A:62:ILE:HD12  1:A:43:LYS:O  1:A:24:VAL:HG22  1:A:13:VAL:O  1:A:60:VAL:HG22  1:A:9:TYR:C  1:A:64:GLU:HB2	Atom-2  1:A:63:MET:N  1:A:44:LYS:HB3  1:A:25:LEU:H  1:A:14:VAL:CG2  1:A:61:LYS:H	0.82 0.82 0.81 0.81	1.90 1.72	Worst 1	Total 3
1:A:43:LYS:O 1:A:24:VAL:HG22 1:A:13:VAL:O 1:A:60:VAL:HG22 1:A:9:TYR:C	1:A:44:LYS:HB3 1:A:25:LEU:H 1:A:14:VAL:CG2	0.82 0.81	1.72		
1:A:24:VAL:HG22 1:A:13:VAL:O 1:A:60:VAL:HG22 1:A:9:TYR:C	1:A:25:LEU:H 1:A:14:VAL:CG2	0.81		0	$\overline{}$
1:A:13:VAL:O 1:A:60:VAL:HG22 1:A:9:TYR:C	1:A:14:VAL:CG2		1 05	2	3
1:A:60:VAL:HG22 1:A:9:TYR:C		0.81	1.35	1	4
1:A:9:TYR:C	1:A:61:LYS:H	0.01	2.29	2	5
		0.81	1.35	2	3
1. A. 64.CI II.IID0	1:A:10:VAL:HG12	0.81	1.96	1	3
1.A.04.GLU.HB2	1:A:74:PHE:CB	0.80	2.07	6	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CD1	0.80	2.70	6	2
1:A:25:LEU:HD23	1:A:43:LYS:HB3	0.80	1.53	5	1
1:A:21:THR:O	1:A:22:ILE:HB	0.80	1.74	3	4
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:HG22	0.80	1.76	3	2
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:CG	0.80	2.29	5	5
1:A:45:TYR:CD2	1:A:62:ILE:HD12	0.80	2.10	5	1
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:HG22	0.80	1.75	1	2
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:CG2	0.80	2.29	3	6
1:A:59:ILE:CG2	1:A:80:VAL:HG13	0.80	2.06	5	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:57:GLY:CA	0.80	2.07	5	1
1:A:11:GLY:C	1:A:24:VAL:HG23	0.80	1.98	1	4
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:HG21	0.80	2.12	6	3
1:A:59:ILE:HB	1:A:80:VAL:HG12	0.79	1.54	2	2
1:A:40:LYS:O	1:A:41:TYR:HB2	0.79	1.78	3	6
1:A:12:ARG:O	1:A:13:VAL:HG23	0.79	1.76	1	3
1:A:63:MET:SD	1:A:76:LEU:HD12	0.79	2.18	6	1
1:A:10:VAL:CB	1:A:61:LYS:HA	0.79	2.07	4	6
1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:HG22	0.79	1.77	4	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:CB	0.79	2.25	5	6
1:A:12:ARG:N	1:A:24:VAL:HG23	0.79	1.92	6	1
1:A:32:HIS:CD2	1:A:33:PRO:HD2	0.79	2.12	3	4
1:A:22:ILE:O	1:A:23:THR:OG1	0.79	2.00	1	6
1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:CE1	0.79	2.71	3	2
1:A:23:THR:OG1	1:A:47:ALA:HB3	0.79	1.78	3	1
1:A:11:GLY:H	1:A:61:LYS:CA	0.79	1.90	6	2
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:HG13	0.78	1.78	2	1
1:A:53:GLU:HB2	1:A:56:VAL:HG12	0.78	1.53	3	1
1:A:62:ILE:HD12	1:A:63:MET:H	0.78	1.38	1	3
1:A:12:ARG:O	1:A:13:VAL:CG2	0.78	2.32	3	5
1:A:11:GLY:HA2	1:A:24:VAL:HG21	0.78	1.54	6	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:VAL:HG12	0.78	1.54	3	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:60:VAL:O	0.78	1.77	1	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CG	0.77	2.72	3	2
1:A:63:MET:HG2	1:A:75:ARG:O	0.77	1.79	5	2



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models		
		` ′	,	Worst	Total	
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:LYS:H	0.77	1.37	4	2	
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CZ	0.77	2.72	4	1	
1:A:44:LYS:O	1:A:45:TYR:CD1	0.77	2.37	2	2	
1:A:43:LYS:O	1:A:44:LYS:HG3	0.77	1.80	6	3	
1:A:23:THR:HG22	1:A:24:VAL:H	0.77	1.39	6	3	
1:A:13:VAL:HG11	1:A:16:ASP:CB	0.77	2.09	6	2	
1:A:39:VAL:HG11	1:A:41:TYR:CE1	0.77	2.14	1	1	
1:A:9:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CG	0.76	2.73	4	2	
1:A:74:PHE:CE1	1:A:76:LEU:HD22	0.76	2.15	1	1	
1:A:12:ARG:O	1:A:13:VAL:HG22	0.76	1.81	3	1	
1:A:10:VAL:O	1:A:26:VAL:HG21	0.76	1.81	6	2	
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:HD1	0.76	1.39	1	1	
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:HG12	0.76	1.81	4	1	
1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:HG23	0.76	1.79	6	4	
1:A:9:TYR:CE2	1:A:45:TYR:CD1	0.76	2.73	4	3	
1:A:76:LEU:HD22	1:A:77:VAL:N	0.76	1.95	6	1	
1:A:8:VAL:HG12	1:A:75:ARG:CD	0.76	2.11	5	1	
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:VAL:CG1	0.76	2.09	3	1	
1:A:8:VAL:HG23	1:A:9:TYR:N	0.76	1.96	4	3	
1:A:23:THR:HA	1:A:45:TYR:O	0.76	1.79	2	3	
1:A:15:SER:CB	1:A:56:VAL:HG22	0.76	2.10	5	1	
1:A:63:MET:HE2	1:A:76:LEU:HD12	0.76	1.56	3	1	
1:A:10:VAL:CG2	1:A:26:VAL:HG11	0.75	2.11	6	1	
1:A:39:VAL:HG12	1:A:40:LYS:N	0.75	1.95	1	1	
1:A:68:LEU:HD23	1:A:69:SER:N	0.75	1.97	2	2	
1:A:75:ARG:O	1:A:76:LEU:HB2	0.75	1.81	5	2	
1:A:9:TYR:C	1:A:10:VAL:HG22	0.75	2.01	4	3	
1:A:62:ILE:CD1	1:A:63:MET:H	0.75	1.93	2	4	
1:A:62:ILE:HD13	1:A:63:MET:H	0.75	1.41	2	1	
1:A:10:VAL:HG13	1:A:26:VAL:HG21	0.75	1.58	3	1	
1:A:27:GLU:C	1:A:28:THR:HG22	0.74	2.01	1	4	
1:A:60:VAL:HG22	1:A:61:LYS:N	0.74	1.96	1	2	
1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:CG1	0.74	2.34	4	4	
1:A:9:TYR:CE2	1:A:64:GLU:CB	0.74	2.69	4	1	
1:A:9:TYR:HB2	1:A:63:MET:HA	0.74	1.58	3	3	
1:A:62:ILE:HG12	1:A:62:ILE:O	0.74	1.82	5	1	
1:A:21:THR:HG21	1:A:48:HIS:CD2	0.74	2.18	2	2	
1:A:43:LYS:O	1:A:44:LYS:CG	0.74	2.36	6	3	
1:A:76:LEU:CD2	1:A:77:VAL:HG12	0.74	2.12	3	1	
1:A:10:VAL:HG12	1:A:62:ILE:H	0.74	1.41	4	1	
1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD2	0.73	2.75	1	2	



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1	A4 a 2	Clack(Å)	Distance (Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:46:LYS:O	1:A:47:ALA:HB2	0.73	1.82	5	6
1:A:10:VAL:O	1:A:24:VAL:HG23	0.73	1.81	3	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:HB2	0.73	1.83	6	4
1:A:45:TYR:O	1:A:46:LYS:O	0.73	2.05	1	1
1:A:12:ARG:C	1:A:13:VAL:CG2	0.73	2.57	1	6
1:A:14:VAL:HG13	1:A:47:ALA:CB	0.73	2.13	2	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CE2	0.73	2.77	1	1
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:CG1	0.73	2.37	2	3
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:CB	0.73	2.36	6	6
1:A:15:SER:CB	1:A:56:VAL:HG13	0.73	2.14	5	1
1:A:22:ILE:O	1:A:23:THR:HG23	0.73	1.84	2	1
1:A:44:LYS:C	1:A:45:TYR:CG	0.72	2.63	1	2
1:A:61:LYS:CE	1:A:76:LEU:HD21	0.72	2.14	2	1
1:A:28:THR:O	1:A:40:LYS:CB	0.72	2.38	1	2
1:A:56:VAL:O	1:A:58:ASP:N	0.72	2.22	6	4
1:A:61:LYS:CE	1:A:77:VAL:HG11	0.72	2.15	4	3
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:HG23	0.72	1.83	6	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:62:ILE:HD11	0.72	2.19	1	1
1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:HG23	0.72	1.83	2	2
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CE1	0.72	2.77	4	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:CG2	0.72	2.38	5	6
1:A:13:VAL:HG21	1:A:25:LEU:HB2	0.72	1.59	1	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:45:TYR:CD2	0.72	2.72	2	2
1:A:10:VAL:HG23	1:A:61:LYS:HA	0.72	1.59	3	2
1:A:22:ILE:HG23	1:A:24:VAL:H	0.71	1.44	3	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:45:TYR:HB2	0.71	2.14	4	5
1:A:79:ILE:C	1:A:80:VAL:HG22	0.71	2.05	4	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:47:ALA:HB3	0.71	1.60	5	2
1:A:78:GLU:C	1:A:79:ILE:HG23	0.71	2.05	6	2
1:A:8:VAL:O	1:A:9:TYR:CD1	0.71	2.43	2	3
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:HD12	0.71	1.85	5	1
1:A:11:GLY:HA2	1:A:24:VAL:HG23	0.71	1.60	3	1
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:CG2	0.71	2.38	5	4
1:A:64:GLU:HB3	1:A:74:PHE:CB	0.71	2.15	2	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:CG1	0.71	2.39	6	5
1:A:26:VAL:HB	1:A:45:TYR:OH	0.71	1.84	6	3
1:A:11:GLY:H	1:A:61:LYS:N	0.71	1.84	6	2
1:A:24:VAL:C	1:A:25:LEU:HD13	0.71	2.06	6	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:C	0.71	2.05	1	5
1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:HA	0.71	1.86	2	6
1:A:9:TYR:CG	1:A:45:TYR:CE1	0.71	2.78	6	2



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:13:VAL:C	Atom 1		Clash (Å)	Distance (Å)	Models	
1:A:44:LYS:O	Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$		
1:A:59:ILE:O         1:A:60:VAL:O         0.70         2.08         5         3           1:A:9:TYR:CE2         1:A:60:VAL:IG2         0.70         2.74         4         1           1:A:19:TYR:CE2         1:A:60:VAL:IG2         0.70         2.06         5         1           1:A:1:A:VAL:CG2         1:A:60:VAL:GB         0.70         2.70         4         3           1:A:1:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG23         0.70         1.63         1         1           1:A:23:THR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.58         6         1           1:A:29:TYR:O         1:A:24:THR:O         0.70         2.07         2         2           1:A:24:PHE:CD1         1:A:25:HR:CB         0.70         2.07         2         2           1:A:24:PR:CE2         1:A:26:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:24:VAL:GB         1:A:45:TYR:CE1         0.69         2.80         4         1           1:A:24:VAL:GB         1:A:46:TYR:CE2         0.69<						
1:A:9:TYR:CE2         1:A:69:UCG         0.70         2.74         4         1           1:A:59:ILE:C         1:A:80:VAL:HG12         0.70         2.06         5         1           1:A:41:VAL:CG2         1:A:60:VAL:CB         0.70         2.70         4         3           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:HG23         0.70         1.63         1         1           1:A:23:THR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.58         6         1           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.39         3         6           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:44:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:9:TYR:CE2         1:A:45:TYR:CE1         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:N         0.69	1:A:44:LYS:O		0.71	2.44	1	
1:A:59:ILE:C         1:A:60:VAL:HG12         0.70         2.06         5         1           1:A:14:VAL:CG2         1:A:60:VAL:CB         0.70         2.70         4         3           1:A:14:VAL:CG2         1:A:60:VAL:CB         0.70         2.70         4         3           1:A:23:THR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.24         1         1           1:A:29:TYR:CED         1:A:23:THR:CB         0.70         2.39         3         6           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:24:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.16         5         1           1:A:26:GIU:HB2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         2.16         5         1           1:A:28:THR:O         1:A:45:TYR:CE2         0	1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:O	0.70	2.08	5	3
1:A:14:VAL:CG2         1:A:60:VAL:CB         0.70         2.70         4         3           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:HG23         0.70         1.63         1         1           1:A:23:THR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:74:PHE:CD1         1:A:74:PHE:N         0.70         2.58         6         1           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.39         3         6           1:A:25:LYS:C         1:A:56:VAL:HG22         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:24:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:28:TRR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.16         5         1           1:A:24:VAL:GG2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         2.17         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:N         0.69         2.25         1         2           1:A:29:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2         0.	1:A:9:TYR:CE2	1:A:64:GLU:CG	0.70	2.74	4	1
1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:HG23         0.70         1.63         1         1           1:A:23:THR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5         5           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:74:PHE:CD1         1:A:74:PHE:N         0.70         2.58         6         1           1:A:22:ILE:O         1:A:24:VAL:HG22         0.70         2.39         3         6           1:A:55:LYS:C         1:A:56:VAL:HG22         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:24:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:9:TYR:CE2         1:A:45:TYR:CE1         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:24:VAL:HG11         1:A:62:ILE:CB         0.69         2.16         5         1           1:A:44:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         1.62         3         2           1:A:14:VAL:CG2         1:A:41:TYR:N         0.69         2.25         1         2           1:A:29:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2	1:A:59:ILE:C	1:A:80:VAL:HG12	0.70	2.06	5	1
1:A:23:THR:O         1:A:24:VAL:CG1         0.70         2.35         5           1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:74:PHE:CD1         1:A:74:PHE:N         0.70         2.58         6         1           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.39         3         6           1:A:55:LYS:C         1:A:66:VAL:HG22         0.70         2.09         2         2           1:A:9:TYR:CE2         1:A:45:TYR:CE1         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:24:VAL:HG11         1:A:62:ILE:CB         0.69         2.16         5         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         2.16         5         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         2.17         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:N         0.69         2.25         1         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB3         0.69         1.62         4         1           1:A:29:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2         0.69	1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:CB	0.70	2.70	4	3
1:A:29:TYR:O         1:A:42:SER:N         0.70         2.24         1         1           1:A:74:PHE:CD1         1:A:74:PHE:N         0.70         2.58         6         1           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.39         3         6           1:A:55:IVS:C         1:A:56:VALHG22         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:24:VALO         0.70         2.09         2         1           1:A:9:TYR:CE2         1:A:45:TYR:CB1         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:24:VAL:HG11         1:A:62:ILE:CB         0.69         2.16         5         1           1:A:64:GLU:HB2         1:A:74:PHE:IHA         0.69         1.62         3         2           1:A:14:VAL:CG2         1:A:46:VAL:HG21         0.69         2.25         1         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB3         0.69         1.62         4         1           1:A:9:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2         0.69         2.80         4         2           1:A:21:THR:O         1:A:45:TYR:CE2	1:A:61:LYS:HD3	1:A:77:VAL:HG23	0.70	1.63	1	1
1:A:74:PHE:CD1         1:A:74:PHE:N         0.70         2.58         6         1           1:A:22:ILE:O         1:A:23:THR:CB         0.70         2.39         3         6           1:A:55:LYS:C         1:A:56:VAL:HG22         0.70         2.07         2         2           1:A:12:ARG:O         1:A:24:VAL:O         0.70         2.09         2         1           1:A:9:TYR:CE2         1:A:45:TYR:CE1         0.69         2.80         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:CD2         0.69         2.45         6         1           1:A:24:VAL:HG11         1:A:62:ILE:CB         0.69         2.16         5         1           1:A:64:GLU:HB2         1:A:74:PHE:HA         0.69         2.17         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:40:VAL:HG21         0.69         2.25         1         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB3         0.69         1.62         4         1           1:A:9:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2         0.69         2.80         4         2           1:A:21:THR:O         1:A:45:TYR:CE2         0.69         2.80         4         2           1:A:22:THR:O         1:A:45:TYR:CE2 <td< td=""><td>1:A:23:THR:O</td><td>1:A:24:VAL:CG1</td><td>0.70</td><td>2.35</td><td>5</td><td>5</td></td<>	1:A:23:THR:O	1:A:24:VAL:CG1	0.70	2.35	5	5
1:A:22:ILE:O       1:A:23:THR:CB       0.70       2.39       3       6         1:A:55:LYS:C       1:A:56:VAL:HG22       0.70       2.07       2       2         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:O       0.70       2.09       2       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.80       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:CD2       0.69       2.45       6       1         1:A:46:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       2.16       5       1         1:A:64:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       2.17       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG	1:A:29:TYR:O	1:A:42:SER:N	0.70	2.24	1	1
1:A:55:LYS:C       1:A:56:VAL:HG22       0.70       2.07       2       2         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:O       0.70       2.09       2       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.80       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:CD2       0.69       2.45       6       1         1:A:24:VAL:HG11       1:A:60:ILE:CB       0.69       2.16       5       1         1:A:64:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       1.62       3       2         1:A:41:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:GG<	1:A:74:PHE:CD1	1:A:74:PHE:N	0.70	2.58	6	1
1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:O       0.70       2.09       2       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.80       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:CD2       0.69       2.45       6       1         1:A:24:VAL:HG11       1:A:62:ILE:CB       0.69       2.16       5       1         1:A:46:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       1.62       3       2         1:A:14:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:21:THR:O       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:26:LU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.64       1       1         1:A:21:ARG:O       1:A:24:VAL:CA <td>1:A:22:ILE:O</td> <td>1:A:23:THR:CB</td> <td>0.70</td> <td>2.39</td> <td>3</td> <td>6</td>	1:A:22:ILE:O	1:A:23:THR:CB	0.70	2.39	3	6
1:A:9:TYR:CE2       1:A:45:TYR:CD2       0.69       2.80       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:CD2       0.69       2.45       6       1         1:A:24:VAL:HG11       1:A:62:ILE:CB       0.69       2.16       5       1         1:A:64:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       1.62       3       2         1:A:14:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:45:TYR:CB1       1:A:60:VAL:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CB2       0.69       2.80       4       2       1         1:A:21:THR:O       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.08       1       1       1       1:A:76:LEU:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:VAL:HG22	0.70	2.07	2	2
1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:CD2       0.69       2.45       6       1         1:A:24:VAL:HG11       1:A:62:ILE:CB       0.69       2.16       5       1         1:A:64:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       1.62       3       2         1:A:14:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:26:VAL:GB1       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:21:ARG	1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:O	0.70	2.09	2	1
1:A:24:VAL:HG11         1:A:62:ILE:CB         0.69         2.16         5         1           1:A:64:GLU:HB2         1:A:74:PHE:HA         0.69         1.62         3         2           1:A:14:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG21         0.69         2.17         4         1           1:A:28:THR:O         1:A:41:TYR:N         0.69         2.25         1         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB3         0.69         1.62         4         1           1:A:9:TYR:CD1         1:A:45:TYR:CE2         0.69         2.80         4         2           1:A:21:THR:O         1:A:22:ILE:HG22         0.69         1.86         1         3           1:A:21:THR:O         1:A:22:ILE:HG22         0.69         2.80         4         2           1:A:21:THR:O         1:A:45:TYR:CE2         0.69         2.88         1         1           1:A:21:THR:O         1:A:45:TYR:HG21         0.69         2.17         2         1           1:A:76:LEU:C         1:A:77:VAL:HG22         0.69         2.08         1         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:HA         0.69         1.65         2         2           1:A:11:GLY:HA2         1:A:65:HE:HG23	1:A:9:TYR:CE2	1:A:45:TYR:CE1	0.69	2.80	4	1
1:A:64:GLU:HB2       1:A:74:PHE:HA       0.69       1.62       3       2         1:A:14:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:C	1:A:28:THR:O	1:A:41:TYR:CD2	0.69	2.45	6	1
1:A:14:VAL:CG2       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       4       1         1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1	1:A:24:VAL:HG11	1:A:62:ILE:CB	0.69	2.16	5	1
1:A:28:THR:O       1:A:41:TYR:N       0.69       2.25       1       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:42:TYR:CE2       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:76:LEU:HD23       1:A:60:VAL:CG2 </td <td>1:A:64:GLU:HB2</td> <td>1:A:74:PHE:HA</td> <td>0.69</td> <td>1.62</td> <td>3</td> <td>2</td>	1:A:64:GLU:HB2	1:A:74:PHE:HA	0.69	1.62	3	2
1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.69       1.62       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:45:SILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:62:LEU:HD23       1:A:60:VAL	1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:HG21	0.69	2.17	4	1
1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CE2       0.69       2.80       4       2         1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:62:ILE:CG1       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1	1:A:28:THR:O	1:A:41:TYR:N	0.69	2.25	1	2
1:A:21:THR:O       1:A:22:ILE:HG22       0.69       1.86       1       3         1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CE1       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:62:ILE:C	1:A:63:MET:HB3	1:A:74:PHE:HB3	0.69	1.62	4	1
1:A:24:VAL:CB       1:A:60:VAL:HG21       0.69       2.17       2       1         1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CB1       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1<	1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:CE2	0.69	2.80	4	2
1:A:76:LEU:C       1:A:77:VAL:HG22       0.69       2.08       1       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1 </td <td>1:A:21:THR:O</td> <td>1:A:22:ILE:HG22</td> <td>0.69</td> <td>1.86</td> <td>1</td> <td>3</td>	1:A:21:THR:O	1:A:22:ILE:HG22	0.69	1.86	1	3
1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:HA       0.69       1.65       2       2         1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2 <td>1:A:24:VAL:CB</td> <td>1:A:60:VAL:HG21</td> <td>0.69</td> <td>2.17</td> <td>2</td> <td>1</td>	1:A:24:VAL:CB	1:A:60:VAL:HG21	0.69	2.17	2	1
1:A:26:VAL:O       1:A:42:SER:OG       0.69       2.09       1       1         1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:76:LEU:C	1:A:77:VAL:HG22	0.69	2.08	1	1
1:A:11:GLY:HA2       1:A:59:ILE:HG23       0.69       1.64       1       1         1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:10:VAL:HA	1:A:61:LYS:HA	0.69	1.65	2	2
1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:26:VAL:O	1:A:42:SER:OG	0.69	2.09	1	1
1:A:12:ARG:O       1:A:24:VAL:CA       0.69       2.40       4       5         1:A:28:THR:O       1:A:29:TYR:HB3       0.69       1.87       3       4         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:11:GLY:HA2	1:A:59:ILE:HG23	0.69	1.64	1	1
1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CZ       0.69       2.80       2       4         1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:CA	0.69	2.40	4	5
1:A:75:ARG:O       1:A:76:LEU:HB3       0.69       1.85       1       3         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:28:THR:O	1:A:29:TYR:HB3	0.69	1.87	3	4
1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CE1       0.69       2.81       3         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:CZ	0.69	2.80	2	4
1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:75:ARG:O	1:A:76:LEU:HB3	0.69			3
1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:HD23       0.69       1.88       5       1         1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CE1	0.69	2.81	3	3
1:A:76:LEU:HD23       1:A:76:LEU:C       0.69       2.07       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:HD23	0.69			
1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG2       0.69       2.18       2       1         1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3						1
1:A:62:ILE:CG1       1:A:63:MET:H       0.69       2.01       2       1         1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:24:VAL:HB					
1:A:39:VAL:HG12       1:A:41:TYR:N       0.69       2.02       1       2         1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3	1:A:62:ILE:CG1					1
1:A:9:TYR:CZ       1:A:62:ILE:CD1       0.69       2.76       1       2         1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3		1:A:41:TYR:N				
1:A:8:VAL:O       1:A:9:TYR:CG       0.69       2.46       6       3         1:A:61:LYS:C       1:A:62:ILE:CG2       0.68       2.61       4       3						
1:A:61:LYS:C 1:A:62:ILE:CG2 0.68 2.61 4 3						
	1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:CB	0.68	2.41	5	6



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Continued from pres	Atom 2	Clash (Å)	$Distance(\mathring{A})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:80:VAL:O	1:A:81:GLU:CB	0.68	2.42	5	3
1:A:62:ILE:CD1	1:A:62:ILE:O	0.68	2.42	4	1
1:A:26:VAL:N	1:A:45:TYR:CE1	0.68	2.60	5	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:25:LEU:H	0.68	2.01	4	4
1:A:46:LYS:O	1:A:62:ILE:CG1	0.68	2.41	5	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CE2	0.68	2.81	1	1
1:A:62:ILE:HG22	1:A:76:LEU:CB	0.68	2.18	1	1
1:A:41:TYR:O	1:A:42:SER:CB	0.68	2.40	5	6
1:A:28:THR:O	1:A:29:TYR:HB2	0.68	1.87	2	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:HG3	0.68	1.88	4	2
1:A:79:ILE:C	1:A:80:VAL:HG12	0.68	2.07	3	2
1:A:26:VAL:CB	1:A:45:TYR:CE2	0.68	2.76	2	2
1:A:58:ASP:HB3	1:A:80:VAL:HG23	0.68	1.66	3	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:62:ILE:CD1	0.68	2.77	1	2
1:A:62:ILE:HG13	1:A:74:PHE:CD1	0.68	2.24	2	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:61:LYS:HB3	0.67	1.64	5	2
1:A:64:GLU:CG	1:A:75:ARG:N	0.67	2.58	6	1
1:A:39:VAL:HG22	1:A:40:LYS:N	0.67	2.03	4	2
1:A:8:VAL:HG12	1:A:63:MET:SD	0.67	2.29	1	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:41:TYR:CE1	0.67	2.78	6	1
1:A:10:VAL:HA	1:A:62:ILE:N	0.67	2.04	3	3
1:A:76:LEU:CD2	1:A:77:VAL:HG22	0.67	2.18	2	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:39:VAL:CG2	0.67	2.78	1	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:62:ILE:N	0.67	2.03	4	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:57:GLY:HA3	0.67	2.20	6	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:HG22	0.67	1.88	4	3
1:A:20:LYS:C	1:A:21:THR:HG23	0.67	2.10	1	3
1:A:63:MET:HB3	1:A:75:ARG:N	0.67	2.05	5	2
1:A:23:THR:HG22	1:A:24:VAL:N	0.67	2.04	1	4
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:CA	0.67	2.21	6	2
1:A:60:VAL:O	1:A:79:ILE:N	0.67	2.28	5	3
1:A:44:LYS:CG	1:A:44:LYS:O	0.67	2.42	5	1
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HB	0.66	1.90	6	4
1:A:23:THR:O	1:A:24:VAL:HB	0.66	1.89	1	3
1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:HB	0.66	1.87	1	4
1:A:9:TYR:CG	1:A:45:TYR:CZ	0.66	2.82	4	3
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:CG	0.66	2.44	5	2
1:A:50:GLU:O	1:A:51:HIS:HB2	0.66	1.90	3	4
1:A:25:LEU:HD13	1:A:44:LYS:HD3	0.66	1.66	3	1
1:A:14:VAL:O	1:A:23:THR:N	0.66	2.28	4	4
1:A:13:VAL:O	1:A:57:GLY:CA	0.66	2.43	1	2



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1		Cleab ( Å )	Distance	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:53:GLU:O	1:A:54:ALA:HB3	0.66	1.90	2	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:CG2	0.66	2.43	6	3
1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CG	0.66	2.84	1	2
1:A:10:VAL:O	1:A:26:VAL:CG1	0.66	2.44	2	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:25:LEU:O	0.66	2.44	4	3
1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:CB	0.66	2.43	5	1
1:A:23:THR:CG2	1:A:45:TYR:HB2	0.66	2.20	1	1
1:A:58:ASP:HB2	1:A:80:VAL:HG23	0.66	1.64	3	1
1:A:10:VAL:CA	1:A:61:LYS:HA	0.66	2.21	5	6
1:A:75:ARG:O	1:A:76:LEU:CB	0.66	2.44	6	4
1:A:38:ARG:C	1:A:39:VAL:HG12	0.66	2.09	3	3
1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:CB	0.66	2.44	5	6
1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:HG22	0.66	1.91	5	2
1:A:60:VAL:O	1:A:78:GLU:HA	0.66	1.90	5	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:47:ALA:HB1	0.66	1.68	2	1
1:A:29:TYR:CD1	1:A:39:VAL:HG23	0.66	2.26	3	1
1:A:13:VAL:HG11	1:A:16:ASP:HB2	0.66	1.66	6	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:26:VAL:CG1	0.66	2.79	5	1
1:A:18:MET:O	1:A:18:MET:HG3	0.66	1.91	1	3
1:A:39:VAL:CG1	1:A:41:TYR:CD1	0.66	2.77	1	1
1:A:28:THR:N	1:A:43:LYS:N	0.66	2.44	1	1
1:A:32:HIS:CB	1:A:33:PRO:CD	0.65	2.74	6	5
1:A:62:ILE:HD13	1:A:62:ILE:C	0.65	2.12	5	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:HB3	0.65	1.66	5	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:26:VAL:O	0.65	2.42	1	1
1:A:29:TYR:CD1	1:A:30:LYS:N	0.65	2.63	1	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:HD23	0.65	1.66	5	2
1:A:25:LEU:C	1:A:26:VAL:CG2	0.65	2.65	4	4
1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:CG2	0.65	2.45	6	6
1:A:13:VAL:HG23	1:A:24:VAL:CA	0.65	2.21	5	3
1:A:64:GLU:CB	1:A:74:PHE:HA	0.65	2.22	6	2
1:A:32:HIS:CG	1:A:33:PRO:CD	0.65	2.80	2	5
1:A:27:GLU:O	1:A:28:THR:HG22	0.65	1.91	6	3
1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:HG23	0.65	1.92	5	2
1:A:13:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HA	0.65	1.66	5	2
1:A:48:HIS:CG	1:A:49:ASP:N	0.65	2.62	1	1
1:A:10:VAL:HB	1:A:61:LYS:CG	0.65	2.21	5	2
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:CB	0.65	2.43	5	6
1:A:25:LEU:CA	1:A:44:LYS:HG2	0.65	2.22	6	2
1:A:32:HIS:CG	1:A:33:PRO:HD2	0.65	2.26	2	5
1:A:39:VAL:HG12	1:A:41:TYR:H	0.65	1.51	2	1
			C		



Continued from previous page...

1:A:63:MET:HG3         1:A:75:ARG:O         0.65         1.92         3         2           1:A:61:VALHG21         1:A:61:LYS:HD3         0.65         1.67         4         1           1:A:24:VAL:GG1         1:A:45:TYR:C         0.65         2.65         6         1           1:A:11:GLY:CA         1:A:24:VAL:HG23         0.65         2.22         3         2           1:A:62:ILE:HG13         1:A:74:PHE:CG         0.65         2.27         2         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:62:MET:O         1:A:63:MET:OB         1:A:65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:31:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:72:SER:HB3         1:A:45:TYR:CG	Continuea from pre		(11-(Å)	Distance (Å)	Models	
1:A:10:VAL:HG21         1:A:61:LYS:HD3         0.65         1.67         4         1           1:A:24:VAL:CG1         1:A:45:TYR:C         0.65         2.65         6         1           1:A:11:GLY:CA         1:A:24:VAL:HG23         0.65         2.22         3         2           1:A:62:ILE:HG13         1:A:74:PHE:CG         0.65         2.27         2         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:25:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         1.91         6         3           1:A:26:VAL:O         1:A:27:GLU:O         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.245         1         3           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HHB3         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET;CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:79:TS:C         1:A:8:VAL:HG13         0	Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{\AA})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:24:VAL:CG1         1:A:45:TYR:C         0.65         2.65         6         1           1:A:11:GLY:CA         1:A:24:VAL:HG23         0.65         2.22         3         2           1:A:62:ILE:HG13         1:A:74:PHE:CG         0.65         2.27         2         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:15:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         2.80         3         1           1:A:26:VAL:O         1:A:27:GLU:O         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:63:WAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:VYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:72:YS:C         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:29:TYR:CD1         1:A:39:VAL:CG2 <td< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td>3</td><td></td></td<>					3	
1:A:11:GLY:CA         1:A:24:VAL:HG23         0.65         2.22         3         2           1:A:62:ILE:HG13         1:A:74:PHE:CG         0.65         2.27         2         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:15:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         1.91         6         3           1:A:63:MET:O         1:A:64:GU:CB         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HBIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:7:LYS:C         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:4:4:LYS:C         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2           1:A:40:LYS:O         1:A:476:LEU:C	1:A:10:VAL:HG21	1:A:61:LYS:HD3	0.65	1.67	4	1
1:A:62:ILE:HG13         1:A:74:PHE:CG         0.65         2.27         2         1           1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:15:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         1.91         6         3           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:7:IYS:C         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:7:IYS:C         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:4:1YS:C         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2           1:A:40:LYS:O         1:A:47:ELEU:C         0.64	1:A:24:VAL:CG1	1:A:45:TYR:C	0.65	2.65	6	1
1:A:29:TYR:CE2         1:A:30:LYS:CD         0.65         2.80         3         1           1:A:15:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         1.91         6         3           1:A:26:VAL:O         1:A:27:GLU:O         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.13         5         3           1:A:46:SSC         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:42:YS:C         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2           1:A:40:LYS:O         1:A:47:ALA:CB         0.64         2.45         1         6           1:A:46:LYS:O         1:A:47:6LEU:CB         0.64 <td>1:A:11:GLY:CA</td> <td>1:A:24:VAL:HG23</td> <td>0.65</td> <td>2.22</td> <td>3</td> <td>2</td>	1:A:11:GLY:CA	1:A:24:VAL:HG23	0.65	2.22	3	2
1:A:15:SER:O         1:A:23:THR:HB         0.65         1.91         6         3           1:A:26:VAL:O         1:A:27:GLU:O         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:44:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:48:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:64:GYS:C         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2         1           1:A:40:LYS:O         1:A:41:TYR:CG         0.64         2.45         1         6         1           1:A:45:LEU:CB	1:A:62:ILE:HG13	1:A:74:PHE:CG	0.65	2.27		1
1:A:26:VAL:O         1:A:27:GLU:O         0.65         2.15         5         1           1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:56:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET;CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET;CB         1:A:48:VAL:HG13         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET;CB         1:A:48:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:44:LYS:C         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2           1:A:29:TYR:CD1         1:A:41:TYR:CG         0.64         2.45         1         6           1:A:46:LYS:O         1:A:47:ELEU:C         0.64         2.12         6         1           1:A:44:LYS:HG3         1:A:45:TYR:N <t< td=""><td>1:A:29:TYR:CE2</td><td>1:A:30:LYS:CD</td><td>0.65</td><td>2.80</td><td>3</td><td>1</td></t<>	1:A:29:TYR:CE2	1:A:30:LYS:CD	0.65	2.80	3	1
1:A:63:MET:O         1:A:64:GLU:CB         0.65         2.45         1         3           1:A:13:VAL:HG21         1:A:25:LEU:CB         0.65         2.21         1         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:CD2         0.64         2.49         6         4           1:A:15:SER:HB3         1:A:66:VAL:HG13         0.64         1.68         5         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:MET:CB         1:A:74:PHE:HB3         0.64         2.23         4         1           1:A:63:LYS:C         1:A:8:VAL:HG13         0.64         2.13         5         3           1:A:44:LYS:O         1:A:45:TYR:CG         0.64         2.51         2         2           1:A:46:LYS:O         1:A:47:ALA:CB         0.64         2.81         3         1           1:A:76:LEU:HD22         1:A:76:LEU:C         0.64         2.45         1         6           1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:HD13         0.64         2.12         6         1           1:A:64:GLU:HB3         1:A:76:LEU:HD13	1:A:15:SER:O	1:A:23:THR:HB	0.65	1.91	6	3
1:A:13:VAL:HG21       1:A:25:LEU:CB       0.65       2.21       1       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:CD2       0.64       2.49       6       4         1:A:15:SER:HB3       1:A:56:VAL:HG13       0.64       1.68       5       1         1:A:63:MET:CB       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:63:MET:CB       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:63:MET:CB       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:7:LYS:C       1:A:8:VAL:HG13       0.64       2.23       4       1         1:A:47:LYS:C       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:76:LEU:C       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N<	1:A:26:VAL:O	1:A:27:GLU:O	0.65	2.15	5	1
1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:CD2       0.64       2.49       6       4         1:A:15:SER:HB3       1:A:56:VAL:HG13       0.64       1.68       5       1         1:A:63:MET:CB       1:A:7:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:7:LYS:C       1:A:8:VAL:HG13       0.64       2.13       5       3         1:A:44:LYS:O       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:45:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:33:PRO:O       1:A:57:GLY:HA3	1:A:63:MET:O	1:A:64:GLU:CB	0.65	2.45	1	3
1:A:15:SER:HB3       1:A:56:VAL:HG13       0.64       1.68       5       1         1:A:63:MET:CB       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:7:LYS:C       1:A:8:VAL:HG13       0.64       2.13       5       3         1:A:44:LYS:O       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:476:LEU:C       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:76:LEU:HB3       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:9:TYR:OH       1:A:34:LEU:CB<	1:A:13:VAL:HG21	1:A:25:LEU:CB	0.65	2.21	1	1
1:A:63:MET:CB       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.23       4       1         1:A:7:LYS:C       1:A:8:VAL:HG13       0.64       2.13       5       3         1:A:44:LYS:O       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:79:TYR:OD1       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2<	1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:CD2	0.64	2.49	6	4
1:A:7:LYS:C       1:A:8:VAL:HG13       0.64       2.13       5       3         1:A:44:LYS:O       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:HD3       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:61:LYS:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.46       5       4         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:9:TYR:OH       1:A:34:TYR:CD2       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2	1:A:15:SER:HB3	1:A:56:VAL:HG13	0.64	1.68	5	1
1:A:44:LYS:O       1:A:45:TYR:CG       0.64       2.51       2       2         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:31:VAL:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:34:TYR:CD2       0.64       2.46       4       6         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2	1:A:63:MET:CB	1:A:74:PHE:HB3	0.64	2.23	4	1
1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:CG2       0.64       2.81       3       1         1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:45:LEU:C       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:45:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.46       5       4         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:76:LEU:HB3       <	1:A:7:LYS:C	1:A:8:VAL:HG13	0.64	2.13	5	3
1:A:40:LYS:O       1:A:41:TYR:CG       0.64       2.50       5       2         1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:45:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:44:LYS:O	1:A:45:TYR:CG	0.64	2.51	2	2
1:A:46:LYS:O       1:A:47:ALA:CB       0.64       2.45       1       6         1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.46       4       6         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:29:TYR:CD1	1:A:39:VAL:CG2	0.64	2.81	3	1
1:A:76:LEU:HD22       1:A:76:LEU:C       0.64       2.12       6       1         1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:40:LYS:O	1:A:41:TYR:CG	0.64	2.50	5	2
1:A:76:LEU:C       1:A:76:LEU:HD13       0.64       2.12       6       1         1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:64:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:46:LYS:O	1:A:47:ALA:CB	0.64	2.45	1	6
1:A:44:LYS:HG3       1:A:45:TYR:N       0.64       2.08       2       1         1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:45:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:76:LEU:HD22	1:A:76:LEU:C	0.64	2.12	6	1
1:A:64:GLU:HB3       1:A:74:PHE:HB3       0.64       1.69       2       1         1:A:45:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD13	0.64	2.12	6	1
1:A:45:TYR:CD1       1:A:45:TYR:N       0.64       2.62       4       1         1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:44:LYS:HG3	1:A:45:TYR:N	0.64	2.08	2	1
1:A:61:LYS:O       1:A:62:ILE:CB       0.64       2.46       5       4         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:64:GLU:HB3	1:A:74:PHE:HB3	0.64	1.69	2	1
1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:HA3       0.64       1.93       6       4         1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:45:TYR:CD1	1:A:45:TYR:N	0.64	2.62	4	1
1:A:33:PRO:O       1:A:34:LEU:CB       0.64       2.46       4       6         1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:CB	0.64	2.46	5	4
1:A:9:TYR:OH       1:A:45:TYR:CD2       0.64       2.51       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:13:VAL:O	1:A:57:GLY:HA3	0.64	1.93	6	4
1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:CB       0.64       2.46       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:CB	0.64	2.46	4	6
1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:HB2       0.64       1.92       5       4         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:9:TYR:OH	1:A:45:TYR:CD2	0.64	2.51	1	1
1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:HB       0.64       1.93       4       3         1:A:62:ILE:HG22       1:A:76:LEU:HB3       0.64       1.68       1       1	1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:CB	0.64	2.46	3	6
1:A:62:ILE:HG22 1:A:76:LEU:HB3 0.64 1.68 1 1	1:A:60:VAL:O	1:A:61:LYS:HB2	0.64	1.92	5	4
	1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:HB	0.64	1.93	4	3
4 4 7 CITY O 4 4 7 C 4 CD CD CD CC	1:A:62:ILE:HG22	1:A:76:LEU:HB3	0.64	1.68	1	1
1:A:57:GLY:O	1:A:57:GLY:O	1:A:58:ASP:CB	0.63	2.46	2	4
1:A:16:ASP:O 1:A:17:LYS:CB 0.63 2.46 1 6	1:A:16:ASP:O	1:A:17:LYS:CB	0.63	2.46	1	6
1:A:24:VAL:CG1 1:A:45:TYR:CB 0.63 2.75 5 2	1:A:24:VAL:CG1	1:A:45:TYR:CB	0.63	2.75	5	2
1:A:10:VAL:O 1:A:24:VAL:HG21 0.63 1.92 6 1	1:A:10:VAL:O	1:A:24:VAL:HG21	0.63	1.92	6	1
1:A:64:GLU:O 1:A:64:GLU:CG 0.63 2.46 1 1	1:A:64:GLU:O	1:A:64:GLU:CG	0.63	2.46	1	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:9:TYR:CD2	1:A:65:THR:HG22	0.63	2.28	3	1
1:A:9:TYR:OH 1:A:62:ILE:CD1 0.63 2.47 4 2	1:A:9:TYR:OH	1:A:62:ILE:CD1	0.63	2.47	4	2
1:A:79:ILE:HG23	1:A:79:ILE:HG23	1:A:80:VAL:N	0.63	2.08	2	3
1:A:76:LEU:O 1:A:77:VAL:HB 0.63 1.93 6 2	1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:HB	0.63	1.93	6	2
1:A:63:MET:CB 1:A:74:PHE:HB2 0.63 2.23 5 1	1:A:63:MET:CB	1:A:74:PHE:HB2	0.63	2.23	5	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1		Clash ( Å )	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\text{\AA})$	Worst	Total
1:A:23:THR:CA	1:A:45:TYR:O	0.63	2.45	2	2
1:A:8:VAL:HG12	1:A:75:ARG:HB2	0.63	1.68	4	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:CB	0.63	2.46	1	6
1:A:23:THR:C	1:A:24:VAL:HG12	0.63	2.12	3	2
1:A:13:VAL:HA	1:A:57:GLY:HA2	0.63	1.69	3	2
1:A:10:VAL:N	1:A:45:TYR:CE2	0.63	2.67	6	2
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:CG1	0.63	2.79	2	2
1:A:14:VAL:HB	1:A:57:GLY:HA3	0.63	1.71	4	4
1:A:23:THR:CA	1:A:46:LYS:HA	0.63	2.24	6	4
1:A:13:VAL:O	1:A:57:GLY:N	0.63	2.32	6	2
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:CG2	0.63	2.81	6	2
1:A:8:VAL:CA	1:A:63:MET:HG2	0.63	2.23	6	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:75:ARG:CG	0.63	2.23	5	1
1:A:62:ILE:CG1	1:A:74:PHE:CG	0.63	2.81	2	1
1:A:60:VAL:O	1:A:61:LYS:CG	0.63	2.47	4	2
1:A:28:THR:O	1:A:29:TYR:CB	0.63	2.47	6	6
1:A:21:THR:HA	1:A:48:HIS:CG	0.63	2.29	1	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:CA	0.63	2.24	1	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:30:LYS:N	0.63	2.67	6	2
1:A:12:ARG:C	1:A:13:VAL:HG22	0.63	2.14	3	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:C	0.63	2.14	3	1
1:A:27:GLU:O	1:A:28:THR:CB	0.62	2.46	6	6
1:A:25:LEU:CB	1:A:44:LYS:HG2	0.62	2.24	6	2
1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:N	0.62	2.32	6	4
1:A:8:VAL:O	1:A:63:MET:HA	0.62	1.94	2	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:HG12	0.62	2.14	1	1
1:A:17:LYS:O	1:A:18:MET:HB2	0.62	1.93	4	5
1:A:14:VAL:HB	1:A:57:GLY:CA	0.62	2.24	4	2
1:A:62:ILE:HD13	1:A:62:ILE:O	0.62	1.94	4	1
1:A:43:LYS:O	1:A:44:LYS:CB	0.62	2.47	3	6
1:A:9:TYR:CE2	1:A:45:TYR:OH	0.62	2.52	5	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:63:MET:O	0.62	2.51	2	1
1:A:7:LYS:C	1:A:8:VAL:HG22	0.62	2.13	6	2
1:A:13:VAL:O	1:A:58:ASP:N	0.62	2.32	1	2
1:A:22:ILE:O	1:A:47:ALA:N	0.62	2.31	3	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:10:VAL:N	0.62	2.68	4	2
1:A:40:LYS:O	1:A:41:TYR:CD2	0.62	2.53	2	2
1:A:62:ILE:HD13	1:A:63:MET:N	0.62	2.09	2	1
1:A:64:GLU:CB	1:A:74:PHE:CB	0.62	2.77	1	2
	1 A 70 OLILOO	0.62	2.48	3	2
1:A:77:VAL:O	1:A:78:GLU:CG	0.02	2.40	0	



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:79:ILE:O	Atom 1		Cleab ( Å )	Distance(Å)	Models	
1:A:63:MET:HA	Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{\AA})$	,	Worst	Total
1:A:7:LYS:O						
1:A:14:VAL:CG2         1:A:60:VAL:HG11         0.62         2.25         4         1           1:A:17:DVS:O         1:A:18:MET:CB         0.62         2.48         5         6           1:A:12:DVS:GO         1:A:16:ASP:CB         0.62         1.71         5         1           1:A:15:SER:O         1:A:16:ASP:CB         0.62         2.47         6         6           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:4:WAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:HE:HB3         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:HE:NB3         0.62         2.48         5         3           1:A:66:VAL:HG12         1:A:79:HE:N         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:39:VAL:HD12         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>						
1:A:17:LYS:O         1:A:18:MET;CB         0.62         2.48         5         6           1:A:24:VAL:HG21         1:A:62:ILE:HG21         0.62         1.71         5         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:62:ILE:HG21         0.62         1.71         4         2           1:A:15:SER:O         1:A:16:ASP:CB         0.62         2.47         6         6           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:4:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:42:SER:H         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23					3	
1:A:24:VAL:HG21         1:A:62:ILE:HG21         0.62         1.71         5         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:HG2         0.62         1.71         4         2           1:A:15:SER:O         1:A:16:ASP:CB         0.62         2.47         6         6           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:4:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:ILE:CGI         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:ND         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:ND         0.62         2.48         5         3           1:A:6:S:MET:HE3         1:A:79:ILE:CGI         0.62         2.48         5         3           1:A:6:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:6:VAL:CA         1:A:33:VAL:HG23			0.62	2.25		1
1:A:10:VAL:HB         1:A:16:ASP:CB         0.62         1.71         4         2           1:A:15:SER:O         1:A:16:ASP:CB         0.62         2.47         6         6           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:14:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:63:MET:O         1:A:74:PHE:HB3         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         2.48         5         3           1:A:4:4:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.48         5         3           1:A:3:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61<	1:A:17:LYS:O	1:A:18:MET:CB	0.62			6
1:A:15:SER:O         1:A:16:ASP:CB         0.62         2.47         6         6           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:14:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         1.95         6         1           1:A:78:GLU:O         1:A:79:ILE:N         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.48         5         3           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         2.48         5         3           1:A:40:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.48         5         3           1:A:4:3:VAL:GA         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:3:VAL:HA         1:A:58:ASP:O         0.6	1:A:24:VAL:HG21	1:A:62:ILE:HG21	0.62	1.71	5	1
1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:CB         0.62         2.47         6         5           1:A:14:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:74:PHE:HB3         0.62         1.95         6         1           1:A:78:GLU:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.48         5         3           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:4:4:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:M         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:32:HB:HB2         1:A:33:PRO:CD         0	1:A:10:VAL:HB	1:A:61:LYS:HG2	0.62	1.71	4	2
1:A:14:VAL:HG22         1:A:60:VAL:CB         0.62         2.23         1         2           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:74:PHE:HB3         0.62         1.95         6         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:66:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:66:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:39:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         <	1:A:15:SER:O	1:A:16:ASP:CB	0.62	2.47	6	6
1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:H         0.62         1.92         1         1           1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:79:HLE:CG1         0.62         1.95         6         1           1:A:63:MET:HO         1:A:79:HLE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:HLE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:HE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:N         0.61         2.38         2         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:58:ASP:N         0.61         2.10         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:45:TYR:CZ         0.61<	1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:CB	0.62	2.47	6	5
1:A:10:VAL:HB         1:A:61:LYS:CA         0.62         2.24         5         2           1:A:63:MET:O         1:A:74:PHE:HB3         0.62         1.95         6         1           1:A:78:GLU:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         2.48         5         3           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:31:VAL:B         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:HA         1:A:58:ASP:N         0.61         2.10         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.88         1         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:CB	1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:CB	0.62	2.23	1	2
1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:HB3       0.62       1.95       6       1         1:A:78:GLU:O       1:A:79:ILE:CG1       0.62       2.48       5       3         1:A:60:VAL:HG12       1:A:79:ILE:N       0.62       2.10       5       1         1:A:63:MET:HE3       1:A:76:LEU:HD12       0.62       1.69       3       1         1:A:14:VAL:CA       1:A:23:THR:O       0.62       2.48       5       3         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HG23       0.62       2.30       3       1         1:A:62:ILE:HB       1:A:75:ARG:CA       0.61       2.25       6       1         1:A:13:VAL:N       1:A:58:ASP:O       0.61       2.32       5       2         1:A:15:SER:C       1:A:23:THR:OG1       0.61       2.38       2       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:53:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:31:VAL:CG2       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:31:VAL:CG2       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.79       1       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB <td>1:A:29:TYR:N</td> <td>1:A:42:SER:H</td> <td>0.62</td> <td>1.92</td> <td>1</td> <td>1</td>	1:A:29:TYR:N	1:A:42:SER:H	0.62	1.92	1	1
1:A:78:GLU:O         1:A:79:ILE:CG1         0.62         2.48         5         3           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:13:VAL:HA         1:A:23:THR:OG1         0.61         2.38         2         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.88         1         2           1:A:64:GLU:HG2         1:A:74:PHE:CE1         0.61         2.79         1         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:CB	1:A:10:VAL:HB	1:A:61:LYS:CA	0.62	2.24	5	2
1:A:60:VAL:HG12         1:A:79:ILE:N         0.62         2.10         5         1           1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:15:SER:C         1:A:23:THR:OG1         0.61         2.38         2         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:58:ASP:N         0.61         2.10         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.28         1         2           1:A:43:VAL:GQ2         1:A:25:LEU:CB         0.61         2.79         1         1         1:A:64:GU:HB2         1:A:74:PHE:CB1         0.61         2.25         5         2           1:A:44:VAL:GQ2         1:A:45:TYR:CDB         0.61	1:A:63:MET:O	1:A:74:PHE:HB3	0.62	1.95	6	1
1:A:63:MET:HE3         1:A:76:LEU:HD12         0.62         1.69         3         1           1:A:14:VAL:CA         1:A:23:THR:O         0.62         2.48         5         3           1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:15:SER:C         1:A:23:THR:OG1         0.61         2.38         2         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:58:ASP:N         0.61         2.10         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.88         1         2           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.79         1         1           1:A:64:GLU:HG2         1:A:74:PHE:CE1         0.61         2.31         4         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:CB         0.61         2.15         5         2           1:A:60:VAL:O         1:A:25:LEU:N         0	1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:CG1	0.62	2.48	5	3
1:A:14:VAL:CA       1:A:23:THR:O       0.62       2.48       5       3         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HG23       0.62       2.30       3       1         1:A:62:ILE:HB       1:A:75:ARG:CA       0.61       2.25       6       1         1:A:13:VAL:N       1:A:58:ASP:O       0.61       2.32       5       2         1:A:15:SER:C       1:A:23:THR:OG1       0.61       2.38       2       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:3:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1	1:A:60:VAL:HG12	1:A:79:ILE:N	0.62	2.10	5	1
1:A:29:TYR:CE1         1:A:39:VAL:HG23         0.62         2.30         3         1           1:A:62:ILE:HB         1:A:75:ARG:CA         0.61         2.25         6         1           1:A:13:VAL:N         1:A:58:ASP:O         0.61         2.32         5         2           1:A:15:SER:C         1:A:23:THR:OG1         0.61         2.38         2         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:58:ASP:N         0.61         2.10         5         2           1:A:32:HIS:HB2         1:A:33:PRO:CD         0.61         2.25         3         5           1:A:9:TYR:CE1         1:A:45:TYR:CZ         0.61         2.88         1         2           1:A:13:VAL:CG2         1:A:25:LEU:CB         0.61         2.79         1         1           1:A:64:GLU:HG2         1:A:74:PHE:CB1         0.61         2.31         4         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:CB         0.61         2.25         5         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:CB         0.61         2.63         3         6           1:A:60:VAL:OG2         1:A:61:LYS:CB         0.61         2.48         6         3           1:A:9:TYR:CG         1:A:45:TYR:CD1 <t< td=""><td>1:A:63:MET:HE3</td><td>1:A:76:LEU:HD12</td><td>0.62</td><td>1.69</td><td>3</td><td>1</td></t<>	1:A:63:MET:HE3	1:A:76:LEU:HD12	0.62	1.69	3	1
1:A:62:ILE:HB       1:A:75:ARG:CA       0.61       2.25       6       1         1:A:13:VAL:N       1:A:58:ASP:O       0.61       2.32       5       2         1:A:15:SER:C       1:A:23:THR:OG1       0.61       2.38       2       1         1:A:15:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:3:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.20       5       2         1:A:3:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.15       5       2         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2	1:A:14:VAL:CA	1:A:23:THR:O	0.62	2.48	5	3
1:A:13:VAL:N       1:A:58:ASP:O       0.61       2.32       5       2         1:A:15:SER:C       1:A:23:THR:OG1       0.61       2.38       2       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:13:VAL:CG2       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:47:4PHE:CB1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB1       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:60:VAL:OG2       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2<	1:A:29:TYR:CE1	1:A:39:VAL:HG23	0.62	2.30	3	1
1:A:15:SER:C       1:A:23:THR:OG1       0.61       2.38       2       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:13:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:60:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.48       6       3         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.88       4       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD	1:A:62:ILE:HB	1:A:75:ARG:CA	0.61	2.25	6	1
1:A:13:VAL:HA       1:A:58:ASP:N       0.61       2.10       5       2         1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:13:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.63       3       6         1:A:24:VAL:CG2       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.63       3       6         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O<	1:A:13:VAL:N	1:A:58:ASP:O	0.61	2.32	5	2
1:A:32:HIS:HB2       1:A:33:PRO:CD       0.61       2.25       3       5         1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:13:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.15       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:OG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:9:TYR:CG       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:19:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:19:TYR:CA       1:A:424:	1:A:15:SER:C	1:A:23:THR:OG1	0.61	2.38	2	1
1:A:9:TYR:CE1       1:A:45:TYR:CZ       0.61       2.88       1       2         1:A:13:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.15       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:11:GLY:CA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1<	1:A:13:VAL:HA	1:A:58:ASP:N	0.61	2.10	5	2
1:A:13:VAL:CG2       1:A:25:LEU:CB       0.61       2.79       1       1         1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.63       3       6         1:A:24:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.31       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB <td>1:A:32:HIS:HB2</td> <td>1:A:33:PRO:CD</td> <td>0.61</td> <td>2.25</td> <td>3</td> <td>5</td>	1:A:32:HIS:HB2	1:A:33:PRO:CD	0.61	2.25	3	5
1:A:64:GLU:HG2       1:A:74:PHE:CE1       0.61       2.31       4       1         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:24:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.48       6       3         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O	1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CZ	0.61	2.88	1	2
1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:CB       0.61       2.25       5       2         1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:24:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:11:GLY:CA       1:A:23:THR:O       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N	1:A:13:VAL:CG2	1:A:25:LEU:CB	0.61	2.79	1	1
1:A:63:MET:HB3       1:A:74:PHE:C       0.61       2.15       5       2         1:A:24:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N	1:A:64:GLU:HG2	1:A:74:PHE:CE1	0.61	2.31	4	1
1:A:24:VAL:CG2       1:A:25:LEU:N       0.61       2.63       3       6         1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:11:GLY:CA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:63:MET:HB3	1:A:74:PHE:CB	0.61	2.25	5	2
1:A:60:VAL:O       1:A:61:LYS:CB       0.61       2.48       6       3         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:63:MET:HB3	1:A:74:PHE:C	0.61	2.15	5	2
1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CD1       0.61       2.89       3       2         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:24:VAL:CG2	1:A:25:LEU:N	0.61	2.63	3	6
1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:CD1       0.61       2.31       3       1         1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:60:VAL:O	1:A:61:LYS:CB	0.61	2.48	6	3
1:A:8:VAL:N       1:A:63:MET:HB2       0.61       2.10       3       1         1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:9:TYR:CG	1:A:45:TYR:CD1	0.61	2.89	3	2
1:A:9:TYR:CD1       1:A:45:TYR:CD2       0.61       2.88       4       1         1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:62:ILE:HD13	1:A:74:PHE:CD1	0.61	2.31	3	1
1:A:14:VAL:HA       1:A:23:THR:O       0.61       1.94       5       4         1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:8:VAL:N		0.61	2.10	3	1
1:A:11:GLY:CA       1:A:24:VAL:CG2       0.61       2.78       6       2         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:CD2	0.61	2.88	4	1
1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:CG1       0.61       2.79       6       1         1:A:23:THR:O       1:A:24:VAL:CB       0.61       2.47       3       3         1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:14:VAL:HA	1:A:23:THR:O	0.61	1.94	5	4
1:A:23:THR:O     1:A:24:VAL:CB     0.61     2.47     3     3       1:A:62:ILE:HA     1:A:75:ARG:O     0.61     1.96     2     2       1:A:18:MET:O     1:A:20:LYS:N     0.61     2.34     1     4	1:A:11:GLY:CA	1:A:24:VAL:CG2	0.61	2.78	6	2
1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:59:ILE:CG2	1:A:80:VAL:CG1	0.61	2.79	6	1
1:A:62:ILE:HA       1:A:75:ARG:O       0.61       1.96       2       2         1:A:18:MET:O       1:A:20:LYS:N       0.61       2.34       1       4	1:A:23:THR:O	1:A:24:VAL:CB	0.61	2.47	3	3
1:A:18:MET:O 1:A:20:LYS:N 0.61 2.34 1 4	1:A:62:ILE:HA	1:A:75:ARG:O	0.61	1.96		2
	1:A:18:MET:O	1:A:20:LYS:N		2.34		4
	1:A:40:LYS:O	1:A:41:TYR:CB	0.61	2.49	5	6



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1	Atom 2	Clash (Å)	Distance (Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\text{\AA})$	Worst	Total
1:A:12:ARG:HB2	1:A:25:LEU:O	0.61	1.95	4	2
1:A:60:VAL:HG23	1:A:79:ILE:C	0.61	2.17	4	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:62:ILE:HB	0.61	1.72	5	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:61:LYS:CD	0.61	2.26	4	1
1:A:29:TYR:CG	1:A:39:VAL:CG2	0.61	2.79	6	2
1:A:26:VAL:HG23	1:A:45:TYR:CD1	0.61	2.30	5	1
1:A:77:VAL:O	1:A:78:GLU:CB	0.61	2.49	1	4
1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:CG2	0.60	2.49	2	3
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:VAL:O	0.60	2.48	2	2
1:A:63:MET:O	1:A:64:GLU:CG	0.60	2.48	2	3
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:HG22	0.60	1.97	2	1
1:A:14:VAL:H	1:A:24:VAL:HA	0.60	1.56	6	3
1:A:28:THR:HG23	1:A:40:LYS:C	0.60	2.16	2	2
1:A:44:LYS:HG3	1:A:44:LYS:O	0.60	1.94	5	1
1:A:63:MET:HA	1:A:75:ARG:C	0.60	2.16	4	2
1:A:27:GLU:O	1:A:43:LYS:O	0.60	2.19	1	1
1:A:64:GLU:HB2	1:A:74:PHE:CA	0.60	2.25	6	1
1:A:22:ILE:O	1:A:23:THR:CG2	0.60	2.49	2	1
1:A:60:VAL:O	1:A:61:LYS:HG2	0.60	1.97	4	1
1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:C	0.60	2.40	1	4
1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:HG12	0.60	1.96	5	1
1:A:13:VAL:HA	1:A:57:GLY:CA	0.60	2.27	3	2
1:A:11:GLY:HA2	1:A:24:VAL:CB	0.60	2.25	3	1
1:A:14:VAL:O	1:A:23:THR:O	0.60	2.20	4	3
1:A:26:VAL:HG21	1:A:45:TYR:HE2	0.60	1.56	6	1
1:A:62:ILE:CG1	1:A:74:PHE:CD1	0.60	2.85	2	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:63:MET:CA	0.60	2.26	2	2
1:A:15:SER:CA	1:A:22:ILE:CG2	0.60	2.76	3	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:CG2	0.60	2.79	4	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:79:ILE:O	0.60	1.97	5	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:63:MET:O	0.60	2.17	1	1
1:A:28:THR:O	1:A:41:TYR:CD1	0.60	2.54	4	2
1:A:26:VAL:HG21	1:A:45:TYR:CE2	0.60	2.31	6	2
1:A:60:VAL:O	1:A:78:GLU:C	0.60	2.40	3	2
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:CD1	0.60	2.49	5	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:O	0.60	1.96	2	1
1:A:62:ILE:CA	1:A:75:ARG:O	0.60	2.50	3	3
1:A:60:VAL:O	1:A:79:ILE:CG2	0.60	2.48	1	2
1:A:63:MET:HB2	1:A:74:PHE:CD2	0.60	2.31	4	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:23:THR:HG21	0.60	1.96	6	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:26:VAL:CG2	0.60	2.27	6	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

At any 1		Cleab (Å)	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{\AA})$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:63:MET:SD	1:A:74:PHE:CZ	0.60	2.94	5	1
1:A:32:HIS:CB	1:A:33:PRO:HD3	0.60	2.26	3	3
1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:HG12	0.59	1.96	3	3
1:A:22:ILE:N	1:A:47:ALA:HA	0.59	2.12	1	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:LYS:CB	0.59	2.50	2	6
1:A:76:LEU:O	1:A:77:VAL:CB	0.59	2.50	5	6
1:A:50:GLU:O	1:A:51:HIS:CB	0.59	2.49	1	6
1:A:62:ILE:CA	1:A:76:LEU:HB3	0.59	2.27	2	2
1:A:9:TYR:CZ	1:A:62:ILE:HD12	0.59	2.32	1	1
1:A:9:TYR:C	1:A:10:VAL:CG1	0.59	2.67	1	2
1:A:48:HIS:CD2	1:A:49:ASP:O	0.59	2.56	6	1
1:A:28:THR:O	1:A:28:THR:HG23	0.59	1.96	2	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:61:LYS:HA	0.59	2.27	3	2
1:A:74:PHE:CE1	1:A:76:LEU:CD2	0.59	2.85	1	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:26:VAL:CG2	0.59	2.26	3	1
1:A:9:TYR:HE1	1:A:62:ILE:HG23	0.59	1.58	4	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:79:ILE:H	0.59	1.56	5	1
1:A:22:ILE:O	1:A:47:ALA:HA	0.59	1.97	1	1
1:A:30:LYS:O	1:A:31:LYS:CB	0.59	2.50	1	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:45:TYR:CD1	0.59	2.90	4	2
1:A:26:VAL:O	1:A:45:TYR:CE1	0.59	2.56	5	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:63:MET:O	0.59	2.50	5	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:63:MET:O	0.59	2.55	1	2
1:A:60:VAL:CG2	1:A:79:ILE:O	0.59	2.51	1	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:26:VAL:HG11	0.59	1.74	3	1
1:A:27:GLU:O	1:A:28:THR:CG2	0.59	2.50	6	3
1:A:14:VAL:HA	1:A:23:THR:C	0.59	2.18	3	1
1:A:11:GLY:N	1:A:26:VAL:HG21	0.59	2.13	4	1
1:A:59:ILE:C	1:A:80:VAL:HA	0.59	2.18	3	3
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:HA	0.59	1.73	1	2
1:A:14:VAL:O	1:A:47:ALA:O	0.59	2.21	2	3
1:A:29:TYR:CB	1:A:39:VAL:HG21	0.59	2.28	6	2
1:A:32:HIS:CD2	1:A:33:PRO:CD	0.59	2.85	2	4
1:A:11:GLY:N	1:A:60:VAL:CG1	0.59	2.66	2	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:HB3	0.59	1.97	3	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:80:VAL:N	0.59	2.13	1	2
1:A:10:VAL:HG23	1:A:26:VAL:HG11	0.59	1.72	6	1
1:A:60:VAL:O	1:A:79:ILE:O	0.59	2.20	6	1
1:A:13:VAL:CG1		0.50	2.00	6	1
1.A.15. VAL.UG1	1:A:16:ASP:CB	0.58	2.80	0	1
1:A:9:TYR:N	1:A:16:ASP:CB 1:A:63:MET:CG	0.58	2.80	6	1



Continued from previous page...

	Atom 2	Cleab ( Å )	Distance	Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\text{\AA})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:24:VAL:HG22	1:A:25:LEU:N	0.58	2.13	3	5
1:A:25:LEU:HG	1:A:43:LYS:HA	0.58	1.75	2	1
1:A:61:LYS:CG	1:A:62:ILE:N	0.58	2.65	1	1
1:A:13:VAL:HA	1:A:58:ASP:H	0.58	1.57	4	2
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:HB2	0.58	1.99	1	5
1:A:63:MET:SD	1:A:74:PHE:CE2	0.58	2.96	5	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:26:VAL:HG11	0.58	2.29	3	1
1:A:39:VAL:CG2	1:A:40:LYS:N	0.58	2.66	4	1
1:A:43:LYS:CG	1:A:43:LYS:O	0.58	2.52	4	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:26:VAL:CG1	0.58	2.28	6	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CE2	0.58	2.90	2	1
1:A:60:VAL:HG23	1:A:79:ILE:H	0.58	1.57	2	1
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:TYR:CE2	0.58	2.33	1	1
1:A:25:LEU:N	1:A:45:TYR:HD1	0.58	1.97	1	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:76:LEU:HD22	0.58	2.32	1	1
1:A:7:LYS:CB	1:A:63:MET:SD	0.58	2.92	3	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:HB	0.58	2.29	4	3
1:A:24:VAL:HG22	1:A:45:TYR:CD2	0.58	2.33	3	1
1:A:50:GLU:O	1:A:51:HIS:CG	0.58	2.57	5	4
1:A:10:VAL:HG23	1:A:26:VAL:HG21	0.58	1.75	6	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:45:TYR:CE2	0.58	2.86	2	2
1:A:56:VAL:O	1:A:57:GLY:C	0.58	2.40	2	3
1:A:9:TYR:CZ	1:A:63:MET:O	0.58	2.57	1	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:25:LEU:HD23	0.58	2.24	3	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:C	0.58	2.18	6	4
1:A:16:ASP:O	1:A:16:ASP:CG	0.58	2.41	6	2
1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:OH	0.58	2.54	2	1
1:A:44:LYS:C	1:A:45:TYR:CD2	0.58	2.77	1	1
1:A:29:TYR:CG	1:A:30:LYS:N	0.58	2.71	1	3
1:A:24:VAL:HG12	1:A:46:LYS:CA	0.58	2.29	6	1
1:A:63:MET:O	1:A:74:PHE:CB	0.58	2.51	6	2
1:A:13:VAL:O	1:A:60:VAL:CG2	0.58	2.49	5	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:75:ARG:CB	0.58	2.29	4	1
1:A:21:THR:O	1:A:22:ILE:CG2	0.58	2.52	1	3
1:A:26:VAL:HG23	1:A:45:TYR:CG	0.58	2.34	5	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:75:ARG:HD3	0.58	1.75	5	1
1:A:61:LYS:O	1:A:78:GLU:HA	0.57	1.99	2	2
1:A:53:GLU:O	1:A:54:ALA:O	0.57	2.22	6	3
1:A:59:ILE:CB	1:A:80:VAL:HG13	0.57	2.28	5	1
1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:OG1	0.57	2.22	6	4
1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:HB2	0.57	1.99	5	5



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1	- 0	Cleab ( Å )	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:10:VAL:CG2	1:A:11:GLY:N	0.57	2.67	1	2
1:A:13:VAL:CG2	1:A:25:LEU:HB2	0.57	2.29	1	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:60:VAL:CB	0.57	2.28	4	1
1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:CA	0.57	2.53	4	4
1:A:39:VAL:HG13	1:A:40:LYS:H	0.57	1.60	5	3
1:A:10:VAL:HA	1:A:62:ILE:HG22	0.57	1.77	5	1
1:A:34:LEU:O	1:A:35:TYR:C	0.57	2.42	1	2
1:A:64:GLU:N	1:A:74:PHE:HB2	0.57	2.14	1	2
1:A:82:LYS:O	1:A:83:ALA:HB3	0.57	1.99	1	3
1:A:9:TYR:CZ	1:A:64:GLU:HB2	0.57	2.34	4	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:25:LEU:HD21	0.57	2.00	6	1
1:A:20:LYS:C	1:A:21:THR:HG22	0.57	2.20	5	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	0.57	1.77	4	2
1:A:26:VAL:CB	1:A:45:TYR:CZ	0.57	2.81	6	2
1:A:9:TYR:HB3	1:A:62:ILE:HD11	0.57	1.77	3	2
1:A:41:TYR:N	1:A:41:TYR:CD1	0.57	2.71	5	1
1:A:63:MET:HG2	1:A:64:GLU:N	0.57	2.14	1	1
1:A:14:VAL:N	1:A:24:VAL:HA	0.57	2.15	1	5
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:CB	0.57	2.51	2	6
1:A:41:TYR:O	1:A:42:SER:OG	0.57	2.23	1	4
1:A:13:VAL:HG23	1:A:24:VAL:O	0.57	2.00	5	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:60:VAL:CG1	0.57	2.30	4	1
1:A:59:ILE:CG1	1:A:81:GLU:CB	0.57	2.83	6	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:43:LYS:HB2	0.57	1.72	5	1
1:A:29:TYR:CE2	1:A:30:LYS:HD2	0.57	2.35	3	1
1:A:63:MET:CG	1:A:75:ARG:O	0.56	2.53	4	3
1:A:21:THR:O	1:A:22:ILE:CB	0.56	2.53	1	5
1:A:25:LEU:HB3	1:A:44:LYS:HG2	0.56	1.76	6	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:OH	0.56	2.55	2	1
1:A:28:THR:C	1:A:42:SER:N	0.56	2.58	1	1
1:A:11:GLY:O	1:A:12:ARG:C	0.56	2.44	4	3
1:A:26:VAL:O	1:A:42:SER:O	0.56	2.23	4	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ASP:HB2	0.56	2.00	4	4
1:A:13:VAL:HG23	1:A:24:VAL:C	0.56	2.19	5	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:CB	0.56	2.31	6	1
1:A:15:SER:O	1:A:23:THR:OG1	0.56	2.23	2	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:63:MET:HA	0.56	2.30	2	2
1:A:28:THR:O	1:A:40:LYS:HB2	0.56	2.00	1	2
1:A:23:THR:O	1:A:60:VAL:HG11	0.56	2.01	1	1
1:A:29:TYR:CE1	1:A:39:VAL:CG2	0.56	2.88	3	1
1:A:63:MET:O	1:A:75:ARG:N	0.56	2.37	3	1



Continued from previous page...

Continued from pre		Clash (Å)	Distance (Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{Å})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:24:VAL:CB	1:A:60:VAL:HG11	0.56	2.29	2	1
1:A:63:MET:CE	1:A:65:THR:CG2	0.56	2.84	1	1
1:A:49:ASP:CB	1:A:53:GLU:OE2	0.56	2.53	3	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:64:GLU:HG3	0.56	2.35	4	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:57:GLY:HA2	0.56	1.78	5	2
1:A:63:MET:SD	1:A:75:ARG:CB	0.56	2.93	2	1
1:A:29:TYR:O	1:A:30:LYS:O	0.56	2.24	3	2
1:A:58:ASP:HB2	1:A:80:VAL:CG2	0.56	2.31	3	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:CD2	0.56	2.54	5	1
1:A:29:TYR:N	1:A:41:TYR:O	0.56	2.39	2	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:80:VAL:CG2	0.56	2.30	2	1
1:A:13:VAL:HA	1:A:57:GLY:C	0.56	2.20	5	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:MET:CG	0.56	2.30	1	1
1:A:23:THR:HA	1:A:46:LYS:HA	0.56	1.76	6	2
1:A:40:LYS:CG	1:A:41:TYR:N	0.56	2.69	6	1
1:A:8:VAL:O	1:A:64:GLU:O	0.56	2.24	5	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:77:VAL:CG1	0.56	2.81	3	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:N	0.56	2.16	2	2
1:A:26:VAL:CB	1:A:45:TYR:OH	0.56	2.54	6	1
1:A:63:MET:N	1:A:75:ARG:O	0.56	2.39	6	2
1:A:49:ASP:OD2	1:A:54:ALA:HB3	0.56	2.00	2	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:9:TYR:N	0.56	2.68	5	3
1:A:64:GLU:CB	1:A:74:PHE:CA	0.56	2.84	6	2
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:SD	0.56	2.63	5	2
1:A:39:VAL:HG22	1:A:40:LYS:H	0.56	1.59	5	1
1:A:28:THR:O	1:A:40:LYS:C	0.56	2.44	1	2
1:A:23:THR:HG21	1:A:45:TYR:C	0.56	2.22	1	1
1:A:51:HIS:O	1:A:52:ASN:CB	0.55	2.52	3	6
1:A:12:ARG:O	1:A:24:VAL:CG2	0.55	2.53	5	2
1:A:25:LEU:CA	1:A:44:LYS:O	0.55	2.54	2	1
1:A:53:GLU:O	1:A:54:ALA:CB	0.55	2.54	2	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:77:VAL:HG11	0.55	2.31	4	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:40:LYS:N	0.55	2.16	5	2
1:A:9:TYR:HB3	1:A:63:MET:O	0.55	2.02	5	1
1:A:58:ASP:CB	1:A:80:VAL:CG2	0.55	2.81	3	1
1:A:15:SER:HA	1:A:22:ILE:HG22	0.55	1.74	3	1
1:A:11:GLY:HA3	1:A:26:VAL:HG22	0.55	1.77	5	2
1:A:63:MET:HG3	1:A:76:LEU:HA	0.55	1.77	5	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:VAL:CG2	0.55	2.24	2	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:61:LYS:HB2	0.55	2.31	1	1
1:A:11:GLY:O	1:A:58:ASP:O	0.55	2.25	3	1
5:= - : 5			Continued		



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:9:TYR:CD1	Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Mod	dels
1:A:25:LEU:CA         1:A:42:SER:H         0.55         2.90         1         2           1:A:28:THR.C         1:A:42:SER:H         0.55         2.04         1         1           1:A:25:LEU:HB2         1:A:44:LYS:CD         0.55         2.31         3         1           1:A:63:MET:C         1:A:62:LE:HD13         0.55         2.37         4         1           1:A:63:MET:C         1:A:63:GLU:CB         0.55         2.70         3         1           1:A:49:ASP:OD2         1:A:53:GLU:CB         0.55         2.55         6         1           1:A:59:ILE:CG2         1:A:80:VAL:HB12         0.55         2.32         6         1           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2.02         1           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG1         1:A:61:LYS:N         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.23         6         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N<	Atom-1		Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:28:THR:C         1:A:42:SER:H         0.55         2.04         1         1           1:A:25:LEU:HB2         1:A:44:LYS:CD         0.55         2.31         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:62:ILE:HD13         0.55         2.37         4         1           1:A:63:MET:C         1:A:64:GLU:CG         0.55         2.70         3         1           1:A:63:MET:C         1:A:64:GLU:CB         0.55         2.55         6         1           1:A:9:FILE:CG         1:A:80:VAL:HG12         0.55         2.32         6         1           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:64:GLU:HG3         1:A:63:MET:SD         0.55         2.42         1         1           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:61:LYS:O         1:A:8:VAL:HB         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>1</td>						1
1:A:25:LEU:HB2         1:A:44:LYS:CD         0.55         2.31         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:62:ILE:HD13         0.55         2.37         4         1           1:A:63:MET:C         1:A:64:GLU:CG         0.55         2.70         3         1           1:A:49:ASP:OD2         1:A:53:GLU:CB         0.55         2.55         6         1           1:A:59:ILE:CG2         1:A:80:VAL:HBB         0.55         2.01         1         4           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG1         1:A:63:MET:SD         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:HA         0.55         2.23         6         3           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0	1:A:25:LEU:CA	1:A:45:TYR:CD1	0.55	2.90	1	2
1:A:9:TYR:CE1         1:A:62:ILE:HD13         0.55         2.37         4         1           1:A:63:MET:C         1:A:64:GLU:CG         0.55         2.70         3         1           1:A:49:ASP:OD2         1:A:53:GLU:CB         0.55         2.55         6         1           1:A:59:ILE:CG2         1:A:80:VAL:HG12         0.55         2.32         6         1           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:79:ILE:O         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55         2.23         6         3           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLY:HA2	1:A:28:THR:C		0.55	2.04	1	1
1:A:63:MET:C       1:A:64:GLU:CG       0.55       2.70       3       1         1:A:49:ASP:OD2       1:A:53:GLU:CB       0.55       2.55       6       1         1:A:59:ILE:CG2       1:A:80:VAL:HG12       0.55       2.32       6       1         1:A:79:ILE:O       1:A:80:VAL:HB       0.55       2.01       1       4         1:A:20:LYS:O       1:A:21:THR:HB       0.55       2.02       5       2         1:A:64:GLU:HG3       1:A:64:GLU:O       0.55       2.02       1       1         1:A:8:VAL:HA       1:A:63:MET:SD       0.55       2.42       1       1         1:A:60:VAL:HG12       1:A:61:LYS:N       0.55       2.42       1       1         1:A:10:VAL:HG12       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       3         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.32       6       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:60:VAL:GH3       1:A:26:VAL:HG11 <td>1:A:25:LEU:HB2</td> <td>1:A:44:LYS:CD</td> <td>0.55</td> <td>2.31</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:25:LEU:HB2	1:A:44:LYS:CD	0.55	2.31	3	1
1:A:49:ASP:OD2         1:A:53:GLU:CB         0.55         2.55         6         1           1:A:59:ILE:CG2         1:A:80:VAL:HG12         0.55         2.32         6         1           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GEU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:10:VAL:HG12         1:A:61:LYS:C         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55         2.23         6         3           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.65         1         3           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GU:NB2         0.55<	1:A:9:TYR:CE1	1:A:62:ILE:HD13	0.55	2.37	4	1
1:A:59:ILE:CG2         1:A:80:VAL:HG12         0.55         2.32         6         1           1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:7:LYS:O         1:A:8:VAL:HB         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55         2.23         6         3           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         1.77         3         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         2.37         5         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:64:GLU:HB2	1:A:63:MET:C	1:A:64:GLU:CG	0.55	2.70	3	1
1:A:79:ILE:O         1:A:80:VAL:HB         0.55         2.01         1         4           1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:8:VAL:HA         1:A:63:MET:SD         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:C         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:HA         0.55         2.23         6         3           1:A:10:VAL:G1         1:A:61:LYS:HA         0.55         2.23         6         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         1.77         3         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         2.37         5         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:76:CVAL:O         0	1:A:49:ASP:OD2	1:A:53:GLU:CB	0.55	2.55	6	1
1:A:20:LYS:O         1:A:21:THR:HB         0.55         2.02         5         2           1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:8:VAL:HA         1:A:63:MET:SD         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:G1         1:A:61:LYS:HA         0.55         2.23         6         3           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.32         6         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:HB2         0.55         1.77         3         1           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:HB2         0.55         1.77         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:76:GLY:HA2         0.55         2.32         3         2           1:A:29:TYR:CE1         1:A:73:ARG:CD         0.55         2.67         1         1           1:A:63:MET:O         1:A:43:LYS:N         0.55 </td <td>1:A:59:ILE:CG2</td> <td>1:A:80:VAL:HG12</td> <td>0.55</td> <td>2.32</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:59:ILE:CG2	1:A:80:VAL:HG12	0.55	2.32	6	1
1:A:64:GLU:HG3         1:A:64:GLU:O         0.55         2.02         1         1           1:A:8:VAL:HA         1:A:63:MET:SD         0.55         2.42         1         1           1:A:60:VAL:HG12         1:A:61:LYS:N         0.55         2.15         3         1           1:A:10:VAL:HA         1:A:61:LYS:C         0.55         2.02         3         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:61:LYS:HA         0.55         2.32         6         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:63:MET:N         0.55         2.65         1         3           1:A:63:MET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:63:WET:CG         1:A:64:GLU:N         0.55         2.69         1         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         1.77         3         1           1:A:60:VAL:HG13         1:A:78:GLU:HB2         0.55         2.37         5         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:64:GLU:HB2         0.55         2.37         5         1           1:A:13:VAL:CA         1:A:73:ARG:CD         0.55         2.32         3         2           1:A:28:THR:HA         1:A:43:33:LYS:N <t< td=""><td>1:A:79:ILE:O</td><td>1:A:80:VAL:HB</td><td>0.55</td><td>2.01</td><td>1</td><td>4</td></t<>	1:A:79:ILE:O	1:A:80:VAL:HB	0.55	2.01	1	4
1:A:8:VAL:HA       1:A:63:MET:SD       0.55       2.42       1       1         1:A:60:VAL:HG12       1:A:61:LYS:N       0.55       2.15       3       1         1:A:7:LYS:O       1:A:8:VAL:HB       0.55       2.02       3       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       3         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.32       3       2         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:66:MET:O       1:A:48:HIS:CD       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12	1:A:20:LYS:O	1:A:21:THR:HB	0.55	2.02	5	2
1:A:60:VAL:HG12       1:A:61:LYS:N       0.55       2.15       3       1         1:A:7:LYS:O       1:A:8:VAL:HB       0.55       2.02       3       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       3         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HA       0.55       2.32       6       1         1:A:63:MET:CG       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:76:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:60:WI:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:68:LEU:HD12	1:A:64:GLU:HG3	1:A:64:GLU:O	0.55	2.02	1	1
1:A:7:LYS:O       1:A:8:VAL:HB       0.55       2.02       3       1         1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       3         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HA       0.55       2.32       6       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:4:3:LYS:N       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:28:THR:HA       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:60:MET:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.60       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:43:LYS:O	1:A:8:VAL:HA	1:A:63:MET:SD	0.55	2.42	1	1
1:A:10:VAL:HA       1:A:61:LYS:C       0.55       2.23       6       3         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HA       0.55       2.32       6       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:25:T;GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:13:VAL:CA       1:A:45:T;GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:HE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:66:LUS:CD       1:A:68:LEU:HDI2	1:A:60:VAL:HG12	1:A:61:LYS:N	0.55	2.15	3	1
1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HA       0.55       2.32       6       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:45:TYS:CBLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:44:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:45:HE:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:60:GU:O <td>1:A:7:LYS:O</td> <td>1:A:8:VAL:HB</td> <td>0.55</td> <td>2.02</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:HB	0.55	2.02	3	1
1:A:62:ILE:CD1       1:A:63:MET:N       0.55       2.65       1       3         1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.54       2.60       6       1         1:A:69:GLU:O       1:A:79:ILE:CA       0.54       2.60       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:26:VAL:O       1:A:39:VAL:HB	1:A:10:VAL:HA	1:A:61:LYS:C	0.55	2.23	6	3
1:A:63:MET:CG       1:A:64:GLU:N       0.55       2.69       1       1         1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.17       1       1         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:65:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH	1:A:10:VAL:CG1	1:A:61:LYS:HA	0.55	2.32	6	1
1:A:60:VAL:HG13       1:A:78:GLU:HB2       0.55       1.77       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.54       2.60       6       1         1:A:69:GLU:O       1:A:65:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH	1:A:62:ILE:CD1	1:A:63:MET:N	0.55	2.65	1	3
1:A:9:TYR:CE1       1:A:26:VAL:HG11       0.55       2.37       5       1         1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.54       2.60       6       1         1:A:65:GLU:O       1:A:65:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       2.25       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH	1:A:63:MET:CG	1:A:64:GLU:N	0.55	2.69	1	1
1:A:13:VAL:CA       1:A:57:GLY:HA2       0.55       2.32       3       2         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:63:MET:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:60:GLU:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.02       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:24:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2	1:A:60:VAL:HG13	1:A:78:GLU:HB2	0.55	1.77	3	1
1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:N       0.55       2.17       1       1         1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:50:GLU:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:45:TYR:CG	1:A:9:TYR:CE1	1:A:26:VAL:HG11	0.55	2.37	5	1
1:A:73:ARG:N       1:A:73:ARG:CD       0.55       2.67       1       1         1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:50:GLU:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG	1:A:13:VAL:CA	1:A:57:GLY:HA2	0.55	2.32	3	2
1:A:63:MET:O       1:A:74:PHE:CA       0.55       2.55       3       1         1:A:50:GLU:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:26:VAL:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:24:VAL:CG1       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:28:THR:HA	1:A:43:LYS:N	0.55	2.17	1	1
1:A:50:GLU:O       1:A:51:HIS:CD2       0.54       2.60       6       1         1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:73:ARG:N	1:A:73:ARG:CD	0.55	2.67	1	1
1:A:67:PRO:O       1:A:68:LEU:HD12       0.54       2.02       6       1         1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:63:MET:O	1:A:74:PHE:CA	0.55	2.55	3	1
1:A:61:LYS:CD       1:A:79:ILE:O       0.54       2.56       5       1         1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:50:GLU:O	1:A:51:HIS:CD2	0.54	2.60	6	1
1:A:26:VAL:O       1:A:43:LYS:O       0.54       2.25       2       1         1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:67:PRO:O	1:A:68:LEU:HD12	0.54	2.02	6	1
1:A:14:VAL:HG21       1:A:79:ILE:HA       0.54       1.78       2       1         1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:61:LYS:CD	1:A:79:ILE:O	0.54	2.56	5	1
1:A:24:VAL:HB       1:A:60:VAL:CG1       0.54       2.31       1         1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:26:VAL:O	1:A:43:LYS:O	0.54	2.25	2	1
1:A:29:TYR:CE1       1:A:39:VAL:HB       0.54       2.37       3       1         1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:14:VAL:HG21	1:A:79:ILE:HA	0.54	1.78	2	1
1:A:30:LYS:O       1:A:31:LYS:HB2       0.54       2.02       1       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:24:VAL:HB	1:A:60:VAL:CG1	0.54	2.31	1	1
1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:29:TYR:CE1	1:A:39:VAL:HB	0.54	2.37	3	1
1:A:26:VAL:O       1:A:45:TYR:OH       0.54       2.23       5       2         1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:30:LYS:O	1:A:31:LYS:HB2	0.54	2.02	1	1
1:A:24:VAL:CG1       1:A:46:LYS:N       0.54       2.70       6       1         1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:26:VAL:O	1:A:45:TYR:OH	0.54			2
1:A:48:HIS:C       1:A:48:HIS:CD2       0.54       2.81       3       2         1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:24:VAL:CG1	1:A:46:LYS:N				1
1:A:61:LYS:CD       1:A:80:VAL:CG2       0.54       2.85       2       1         1:A:9:TYR:CG       1:A:45:TYR:CG       0.54       2.96       3       1	1:A:48:HIS:C	1:A:48:HIS:CD2				2
1:A:9:TYR:CG 1:A:45:TYR:CG 0.54 2.96 3 1	1:A:61:LYS:CD	1:A:80:VAL:CG2	0.54	2.85		1
	1:A:9:TYR:CG	1:A:45:TYR:CG				1
1:A:9:TYR:HD1	1:A:9:TYR:HD1					1
	1:A:27:GLU:CA	1:A:43:LYS:HB3				1
						1
	1:A:25:LEU:CD2	1:A:43:LYS:HB3				1



Continued from previous page...

At 1		Clasta (Å)	Distance (8)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{Å})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:28:THR:HG23	1:A:28:THR:O	0.54	2.03	1	1
1:A:15:SER:CA	1:A:47:ALA:HB1	0.54	2.32	1	1
1:A:30:LYS:O	1:A:30:LYS:CG	0.54	2.55	3	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:62:ILE:CD1	0.54	2.32	3	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:61:LYS:HD3	0.54	2.33	4	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:N	0.54	2.17	6	1
1:A:62:ILE:CG1	1:A:63:MET:N	0.54	2.71	2	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:63:MET:N	0.54	2.18	2	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:77:VAL:N	0.54	2.69	1	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:60:VAL:CG1	0.54	2.86	4	2
1:A:13:VAL:CG1	1:A:15:SER:O	0.54	2.56	1	1
1:A:24:VAL:HB	1:A:60:VAL:HG13	0.54	1.79	1	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:40:LYS:HB3	0.54	1.78	1	1
1:A:25:LEU:N	1:A:45:TYR:CD1	0.54	2.76	1	1
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:TYR:OH	0.54	2.01	1	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:80:VAL:H	0.54	1.63	3	2
1:A:10:VAL:N	1:A:62:ILE:HG13	0.54	2.18	6	2
1:A:15:SER:C	1:A:47:ALA:CB	0.54	2.76	1	1
1:A:43:LYS:CB	1:A:45:TYR:OH	0.54	2.56	1	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:44:LYS:HA	0.54	2.33	4	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HG21	0.54	1.79	4	1
1:A:62:ILE:C	1:A:63:MET:CG	0.54	2.75	3	3
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:CG2	0.54	2.56	6	3
1:A:43:LYS:C	1:A:45:TYR:HE1	0.54	2.06	5	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:62:ILE:CG2	0.54	2.31	5	1
1:A:64:GLU:CB	1:A:74:PHE:HB3	0.54	2.33	1	2
1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:ND1	0.54	2.41	1	1
1:A:10:VAL:CA	1:A:62:ILE:HG13	0.54	2.33	6	2
1:A:61:LYS:CE	1:A:77:VAL:CG1	0.54	2.86	5	1
1:A:61:LYS:HD3	1:A:77:VAL:HG12	0.54	1.80	5	1
1:A:26:VAL:H	1:A:43:LYS:C	0.54	2.06	2	1
1:A:26:VAL:O	1:A:27:GLU:CB	0.54	2.56	3	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:HB	0.54	2.03	5	3
1:A:8:VAL:O	1:A:9:TYR:CB	0.54	2.55	6	4
1:A:29:TYR:HB3	1:A:41:TYR:H	0.54	1.63	1	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:CB	0.53	2.90	6	2
1:A:26:VAL:H	1:A:43:LYS:HA	0.53	1.63	5	1
1:A:64:GLU:CA	1:A:74:PHE:HA	0.53	2.33	2	1
1:A:42:SER:O	1:A:45:TYR:OH	0.53	2.27	4	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:CG2	0.53	2.33	4	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:49:ASP:N	0.53	2.71	6	1
	i	l	l	1	



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:73:ARG:HB3	1:A:74:PHE:CE1	0.53	2.39	6	1
1:A:27:GLU:C	1:A:43:LYS:O	0.53	2.46	1	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:GLU:H	0.53	1.62	3	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:77:VAL:CG1	0.53	2.34	4	1
1:A:43:LYS:C	1:A:45:TYR:CE1	0.53	2.81	5	1
1:A:64:GLU:CA	1:A:74:PHE:HB2	0.53	2.33	1	1
1:A:63:MET:HG2	1:A:76:LEU:HA	0.53	1.80	4	1
1:A:63:MET:CB	1:A:74:PHE:CB	0.53	2.87	5	1
1:A:15:SER:CA	1:A:23:THR:OG1	0.53	2.56	2	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:74:PHE:C	0.53	2.80	2	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:80:VAL:N	0.53	2.70	1	2
1:A:10:VAL:O	1:A:26:VAL:HG23	0.53	1.99	3	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:45:TYR:CE2	0.53	2.39	6	2
1:A:9:TYR:N	1:A:63:MET:HG2	0.53	2.18	6	1
1:A:62:ILE:C	1:A:63:MET:HG3	0.53	2.24	5	1
1:A:46:LYS:O	1:A:62:ILE:HG13	0.53	2.03	5	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:39:VAL:HG21	0.53	2.38	1	1
1:A:59:ILE:O	1:A:79:ILE:HG22	0.53	2.03	1	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:26:VAL:CB	0.53	2.34	3	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:46:LYS:N	0.53	2.19	6	1
1:A:64:GLU:HB2	1:A:74:PHE:HB3	0.53	1.76	6	2
1:A:60:VAL:O	1:A:78:GLU:CA	0.53	2.57	5	1
1:A:27:GLU:HG2	1:A:28:THR:HG22	0.53	1.78	2	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:45:TYR:CD1	0.53	2.97	1	2
1:A:30:LYS:CE	1:A:38:ARG:O	0.53	2.57	3	1
1:A:27:GLU:O	1:A:28:THR:HB	0.53	2.04	4	6
1:A:15:SER:HA	1:A:22:ILE:N	0.53	2.19	5	4
1:A:44:LYS:C	1:A:45:TYR:HD1	0.53	2.01	3	3
1:A:11:GLY:CA	1:A:24:VAL:HG21	0.53	2.31	6	1
1:A:60:VAL:HG13	1:A:78:GLU:HA	0.53	1.80	6	2
1:A:40:LYS:C	1:A:41:TYR:CG	0.53	2.80	5	2
1:A:46:LYS:O	1:A:62:ILE:HG12	0.53	2.03	5	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:24:VAL:O	0.53	2.03	2	1
1:A:26:VAL:O	1:A:27:GLU:HB2	0.53	2.03	3	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:61:LYS:HA	0.53	1.80	6	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:43:LYS:HD2	0.53	2.34	5	1
1:A:64:GLU:O	1:A:65:THR:O	0.53	2.26	2	1
1:A:11:GLY:C	1:A:24:VAL:CG2	0.53	2.75	1	1
1:A:21:THR:HA	1:A:48:HIS:HB3	0.53	1.79	1	1
	4 4 40 TATO OD	0.50			1
1:A:27:GLU:N	1:A:43:LYS:CB	0.53	2.72	4	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Mod	dels
	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:60:VAL:CG2	1:A:61:LYS:N	0.53	2.67	1	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:57:GLY:HA3	0.52	2.34	6	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:TYR:HB3	0.52	2.05	4	2
1:A:32:HIS:NE2	1:A:39:VAL:CG2	0.52	2.72	1	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:CG	0.52	2.57	1	1
1:A:43:LYS:HB3	1:A:45:TYR:CZ	0.52	2.39	1	1
1:A:28:THR:CA	1:A:43:LYS:N	0.52	2.72	1	1
1:A:64:GLU:CB	1:A:74:PHE:HB2	0.52	2.33	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:22:ILE:O	0.52	2.27	5	2
1:A:59:ILE:HB	1:A:80:VAL:O	0.52	2.03	5	3
1:A:35:TYR:CD1	1:A:35:TYR:C	0.52	2.83	2	1
1:A:11:GLY:N	1:A:61:LYS:H	0.52	2.02	6	2
1:A:61:LYS:C	1:A:76:LEU:HD22	0.52	2.23	2	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:MET:CB	0.52	2.34	2	2
1:A:17:LYS:N	1:A:48:HIS:HA	0.52	2.19	1	1
1:A:29:TYR:O	1:A:42:SER:CA	0.52	2.57	1	1
1:A:63:MET:O	1:A:74:PHE:HB2	0.52	2.05	3	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:80:VAL:HG11	0.52	1.79	5	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:28:THR:N	0.52	2.42	5	1
1:A:11:GLY:N	1:A:60:VAL:HG13	0.52	2.20	2	1
1:A:8:VAL:CA	1:A:63:MET:HB3	0.52	2.35	2	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:76:LEU:O	0.52	2.03	2	1
1:A:26:VAL:HB	1:A:45:TYR:CE1	0.52	2.39	1	1
1:A:14:VAL:O	1:A:22:ILE:C	0.52	2.48	4	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:HB2	0.52	2.02	5	3
1:A:35:TYR:O	1:A:35:TYR:CG	0.52	2.62	6	1
1:A:55:LYS:C	1:A:56:VAL:CG2	0.52	2.78	2	1
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:CG2	0.52	2.77	1	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:63:MET:HA	0.52	2.40	1	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:63:MET:SD	0.52	2.98	1	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:HA	0.52	1.82	4	1
1:A:44:LYS:CA	1:A:45:TYR:CD1	0.52	2.93	3	2
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:HG2	0.52	2.04	3	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:45:TYR:CD1	0.52	2.40	1	1
1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:HA	0.52	2.04	1	1
1:A:65:THR:OG1	1:A:66:ARG:N	0.52	2.39	2	2
1:A:15:SER:O	1:A:16:ASP:OD1	0.52	2.28	6	3
1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:C	0.52	2.48	5	5
1:A:31:LYS:C	1:A:32:HIS:CD2	0.52	2.83	5	2
1:A:23:THR:HB	1:A:46:LYS:O	0.52	2.05	1	1
1:A:27:GLU:N	1:A:43:LYS:HB3	0.52	2.19	4	1



Continued from previous page...

A + a m 1		Cladb (Å)	Distance (Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{Å})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:79:ILE:C	1:A:80:VAL:CG2	0.52	2.78	4	1
1:A:12:ARG:O	1:A:25:LEU:N	0.52	2.43	1	2
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:HB3	0.52	2.04	6	1
1:A:42:SER:O	1:A:43:LYS:CG	0.52	2.58	5	2
1:A:62:ILE:CD1	1:A:62:ILE:C	0.52	2.77	5	1
1:A:44:LYS:N	1:A:45:TYR:CZ	0.52	2.78	1	1
1:A:21:THR:HA	1:A:48:HIS:CB	0.52	2.35	1	1
1:A:8:VAL:CA	1:A:63:MET:SD	0.52	2.97	1	1
1:A:63:MET:HE3	1:A:65:THR:CG2	0.52	2.34	1	1
1:A:18:MET:O	1:A:19:ASP:C	0.52	2.48	2	4
1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:O	0.52	2.55	6	1
1:A:59:ILE:CG1	1:A:81:GLU:HB2	0.52	2.35	6	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:27:GLU:C	0.52	2.49	5	1
1:A:63:MET:O	1:A:64:GLU:HG3	0.52	2.04	2	2
1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:CA	0.52	2.35	1	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:CD2	0.51	2.35	4	2
1:A:12:ARG:HB3	1:A:25:LEU:O	0.51	2.05	6	2
1:A:64:GLU:HA	1:A:74:PHE:HA	0.51	1.82	2	2
1:A:64:GLU:CA	1:A:74:PHE:CB	0.51	2.88	1	1
1:A:53:GLU:OE1	1:A:53:GLU:CA	0.51	2.57	3	1
1:A:6:ARG:O	1:A:7:LYS:HB3	0.51	2.06	3	1
1:A:9:TYR:HE1	1:A:62:ILE:CD1	0.51	2.16	4	1
1:A:22:ILE:HA	1:A:47:ALA:O	0.51	2.06	5	3
1:A:62:ILE:N	1:A:76:LEU:O	0.51	2.44	6	1
1:A:59:ILE:C	1:A:80:VAL:CG1	0.51	2.77	5	1
1:A:11:GLY:H	1:A:60:VAL:HG13	0.51	1.66	2	1
1:A:8:VAL:N	1:A:63:MET:SD	0.51	2.83	1	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:62:ILE:HG21	0.51	1.82	4	1
1:A:64:GLU:HG2	1:A:74:PHE:CZ	0.51	2.40	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:9:TYR:H	0.51	1.65	5	2
1:A:77:VAL:O	1:A:78:GLU:O	0.51	2.29	6	2
1:A:24:VAL:C	1:A:25:LEU:CD1	0.51	2.78	6	1
1:A:44:LYS:CD	1:A:44:LYS:O	0.51	2.59	5	1
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:HG12	0.51	2.05	1	2
1:A:62:ILE:HD11	1:A:74:PHE:CB	0.51	2.36	2	1
1:A:61:LYS:HB2	1:A:77:VAL:CG1	0.51	2.34	6	1
1:A:11:GLY:HA3	1:A:60:VAL:HG12	0.51	1.81	3	2
1:A:68:LEU:O	1:A:69:SER:CB	0.51	2.57	2	2
1:A:9:TYR:CG	1:A:63:MET:HA	0.51	2.39	2	1
1:A:74:PHE:N	1:A:74:PHE:CD1	0.51	2.78	5	1
1:A:29:TYR:CD1	1:A:39:VAL:HG13	0.51	2.41	1	1
	l .	1	1	1	



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1	Atom 2	Clash (Å)	Distance (Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:29:TYR:CE1	1:A:39:VAL:CB	0.51	2.93	3	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:SER:CB	0.51	2.57	3	1
1:A:25:LEU:HB2	1:A:44:LYS:HG2	0.51	1.83	3	1
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:HG23	0.51	2.06	3	1
1:A:15:SER:OG	1:A:16:ASP:N	0.51	2.44	1	1
1:A:27:GLU:CB	1:A:41:TYR:O	0.51	2.59	1	1
1:A:22:ILE:O	1:A:23:THR:HB	0.51	2.05	3	1
1:A:26:VAL:HG21	1:A:45:TYR:CD2	0.51	2.40	2	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:80:VAL:O	0.51	2.58	4	1
1:A:50:GLU:C	1:A:51:HIS:CG	0.51	2.81	6	2
1:A:29:TYR:CE2	1:A:39:VAL:HB	0.51	2.41	6	2
1:A:45:TYR:HB3	1:A:74:PHE:CE1	0.51	2.40	3	2
1:A:63:MET:O	1:A:64:GLU:HB2	0.51	2.06	5	3
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:CA	0.51	2.35	5	1
1:A:9:TYR:O	1:A:10:VAL:HB	0.51	2.06	2	2
1:A:15:SER:CB	1:A:49:ASP:OD2	0.51	2.59	2	1
1:A:9:TYR:HA	1:A:45:TYR:CE2	0.51	2.41	3	1
1:A:13:VAL:HG11	1:A:16:ASP:HB3	0.51	1.82	6	1
1:A:78:GLU:C	1:A:79:ILE:CG2	0.51	2.78	6	2
1:A:24:VAL:CG1	1:A:62:ILE:HG13	0.51	2.36	5	1
1:A:27:GLU:HB3	1:A:41:TYR:O	0.51	2.05	1	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:60:VAL:O	0.51	2.54	1	1
1:A:29:TYR:CZ	1:A:30:LYS:HD3	0.51	2.41	3	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:44:LYS:CD	0.51	2.36	3	1
1:A:17:LYS:CA	1:A:55:LYS:O	0.50	2.59	4	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:56:VAL:CA	0.50	2.37	5	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:62:ILE:HG21	0.50	2.35	5	1
1:A:29:TYR:CB	1:A:40:LYS:HB2	0.50	2.36	1	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:62:ILE:HD12	0.50	2.42	4	1
1:A:63:MET:HG2	1:A:76:LEU:CA	0.50	2.36	4	1
1:A:38:ARG:C	1:A:39:VAL:CG1	0.50	2.80	3	2
1:A:18:MET:HG3	1:A:20:LYS:CB	0.50	2.36	6	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:CD	0.50	2.36	6	1
1:A:41:TYR:O	1:A:42:SER:HB2	0.50	2.06	5	4
1:A:14:VAL:HG12	1:A:53:GLU:HA	0.50	1.83	3	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:65:THR:CG2	0.50	2.94	3	1
1:A:26:VAL:H	1:A:44:LYS:HG2	0.50	1.66	6	1
1:A:23:THR:O	1:A:60:VAL:CG1	0.50	2.59	1	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:45:TYR:HE1	0.50	2.20	1	1
1:A:76:LEU:C	1:A:77:VAL:CG2	0.50	2.80	1	1
1:A:22:ILE:O	1:A:46:LYS:HA	0.50	2.06	3	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:9:TYR:CD2	1:A:74:PHE:CD2	0.50	2.99	3	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:49:ASP:O	0.50	2.45	3	2
1:A:54:ALA:O	1:A:55:LYS:CG	0.50	2.59	5	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:56:VAL:HG13	0.50	1.81	5	1
1:A:18:MET:O	1:A:18:MET:CG	0.50	2.57	2	2
1:A:50:GLU:O	1:A:50:GLU:CG	0.50	2.59	1	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:46:LYS:O	0.50	2.59	4	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:O	0.50	2.29	3	3
1:A:21:THR:HG21	1:A:49:ASP:CG	0.50	2.26	6	1
1:A:9:TYR:C	1:A:10:VAL:CG2	0.50	2.80	6	2
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LYS:HB2	0.50	2.06	3	4
1:A:61:LYS:O	1:A:78:GLU:CA	0.50	2.59	2	1
1:A:31:LYS:HA	1:A:41:TYR:OH	0.50	2.06	3	1
1:A:63:MET:SD	1:A:64:GLU:HG2	0.50	2.46	3	1
1:A:53:GLU:O	1:A:55:LYS:N	0.50	2.44	4	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:16:ASP:HB3	0.50	2.36	6	1
1:A:73:ARG:CB	1:A:74:PHE:CE1	0.50	2.94	6	1
1:A:61:LYS:HB2	1:A:77:VAL:HB	0.50	1.84	6	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:26:VAL:CG1	0.50	2.37	3	1
1:A:22:ILE:O	1:A:46:LYS:C	0.50	2.50	3	1
1:A:12:ARG:H	1:A:26:VAL:HG22	0.50	1.67	3	1
1:A:49:ASP:HA	1:A:53:GLU:OE2	0.50	2.07	3	1
1:A:35:TYR:CD2	1:A:37:LYS:HD3	0.50	2.42	4	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:25:LEU:CD2	0.50	2.60	6	1
1:A:52:ASN:O	1:A:53:GLU:CB	0.50	2.60	2	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:CG1	0.50	2.55	2	1
1:A:61:LYS:HG3	1:A:77:VAL:HG23	0.50	1.83	2	1
1:A:73:ARG:HD3	1:A:73:ARG:N	0.50	2.21	1	1
1:A:23:THR:CG2	1:A:24:VAL:H	0.50	2.18	4	1
1:A:40:LYS:HG3	1:A:41:TYR:N	0.50	2.21	6	1
1:A:27:GLU:O	1:A:45:TYR:OH	0.50	2.30	5	1
1:A:63:MET:CB	1:A:74:PHE:CG	0.50	2.95	5	1
1:A:53:GLU:O	1:A:54:ALA:C	0.49	2.50	3	3
1:A:63:MET:CB	1:A:75:ARG:N	0.49	2.75	5	2
1:A:10:VAL:O	1:A:45:TYR:CE2	0.49	2.65	6	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:HD13	0.49	2.05	6	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:N	0.49	2.22	6	1
1:A:67:PRO:O	1:A:68:LEU:CB	0.49	2.59	5	1
1:A:27:GLU:HB3	1:A:42:SER:N	0.49	2.22	2	1
1:A:52:ASN:O	1:A:53:GLU:HB2	0.49	2.07	2	1
1:A:62:ILE:CA	1:A:76:LEU:HD22	0.49	2.37	2	1



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Mod	dels
		` ′	,	Worst	Total
1:A:28:THR:CG2	1:A:40:LYS:HB3	0.49	2.37	1	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:CG2	0.49	2.57	3	2
1:A:60:VAL:CG1	1:A:79:ILE:HA	0.49	2.37	5	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:79:ILE:HG13	0.49	2.37	5	1
1:A:10:VAL:HG23	1:A:61:LYS:CA	0.49	2.37	2	3
1:A:29:TYR:O	1:A:41:TYR:O	0.49	2.29	2	1
1:A:63:MET:HG2	1:A:76:LEU:CB	0.49	2.36	2	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:48:HIS:CD2	0.49	2.65	4	1
1:A:10:VAL:O	1:A:45:TYR:CD2	0.49	2.65	6	2
1:A:64:GLU:HG3	1:A:75:ARG:N	0.49	2.22	6	1
1:A:23:THR:C	1:A:24:VAL:CG1	0.49	2.79	3	2
1:A:11:GLY:N	1:A:24:VAL:HG21	0.49	2.22	1	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:77:VAL:HG11	0.49	1.85	4	1
1:A:10:VAL:CB	1:A:61:LYS:HD3	0.49	2.37	4	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:LYS:HB3	0.49	2.07	3	2
1:A:63:MET:SD	1:A:74:PHE:CE1	0.49	3.06	5	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:25:LEU:HD22	0.49	2.22	1	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:HB3	0.49	2.08	4	1
1:A:62:ILE:HB	1:A:75:ARG:HA	0.49	1.84	6	1
1:A:74:PHE:O	1:A:75:ARG:HB3	0.49	2.07	6	1
1:A:23:THR:OG1	1:A:46:LYS:CG	0.49	2.60	1	1
1:A:6:ARG:O	1:A:8:VAL:HG13	0.49	2.07	4	1
1:A:63:MET:CA	1:A:76:LEU:N	0.49	2.76	5	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:62:ILE:N	0.49	2.21	1	1
1:A:6:ARG:O	1:A:7:LYS:CB	0.49	2.61	3	1
1:A:12:ARG:O	1:A:13:VAL:CB	0.49	2.58	6	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:61:LYS:HG2	0.49	2.37	5	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:62:ILE:HD11	0.49	2.39	1	1
1:A:52:ASN:N	1:A:52:ASN:OD1	0.49	2.42	4	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:61:LYS:CA	0.49	2.37	6	2
1:A:76:LEU:CD1	1:A:77:VAL:HG23	0.49	2.38	6	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:80:VAL:N	0.49	2.22	6	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:61:LYS:CB	0.49	2.37	5	2
1:A:42:SER:C	1:A:43:LYS:CG	0.49	2.80	5	1
1:A:11:GLY:H	1:A:60:VAL:CG1	0.49	2.20	2	1
1:A:62:ILE:CA	1:A:76:LEU:O	0.49	2.60	6	1
1:A:62:ILE:C	1:A:75:ARG:O	0.49	2.51	3	3
1:A:76:LEU:C	1:A:77:VAL:HG12	0.49	2.28	3	1
1:A:27:GLU:O	1:A:41:TYR:O	0.49	2.30	6	1
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:CG	0.49	2.61	6	4
1:A:62:ILE:C	1:A:76:LEU:HB3	0.49	2.28	2	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:64:GLU:O	Atom 1		Clash ( Å )	Distance(Å)	Mod	dels
1:A:27:GLU:HB3	Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:63:MET:N         1:A:76:LEU:HA         0.48         2.22         4         2           1:A:15:SER:HB3         1:A:21:THR:CA         0.48         2.38         6         1           1:A:9:TYR:CA         1:A:45:TYR:CE2         0.48         2.96         3         1           1:A:6:LEU:O         1:A:7:VAL:HG12         0.48         2.07         3         1           1:A:6:ARG:O         1:A:7:YVAL:HG12         0.48         2.31         4         1           1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:HD2         0.48         1.90         5         2           1:A:33:VAL:CB         1:A:74:PH2H2         0.48         2.38         5         2           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:36:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:66:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:75:LEU:HD12         1:A:75:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:36:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:CO <td< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>						
1:A:15:SER:HB3			0.49		3	
1:A:9:TYR:CA         1:A:45:TYR:CE2         0.48         2.96         3         1           1:A:76:LEU:O         1:A:77:VAL:HG12         0.48         2.07         3         1           1:A:6:ARG:O         1:A:77:VAL:HG12         0.48         2.07         3         1           1:A:6:ARG:O         1:A:32:HIS:HD2         0.48         2.31         4         1           1:A:31:LYS:O         1:A:38:HIS:HD2         0.48         2.38         5         2           1:A:31:LYS:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.38         5         2           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:66:LU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         2.80         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:38:ARG:O         0.48         2.80         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:22:SER:N         0.4	1:A:63:MET:N	1:A:76:LEU:HA	0.48	2.22	4	2
1:A:76:LEU:O         1:A:77:VAL:HG12         0.48         2.07         3         1           1:A:6:ARG:O         1:A:7:LYS:O         0.48         2.31         4         1           1:A:3:LIVS:O         1:A:32:HIS:HD2         0.48         1.90         5         2           1:A:3:VAL:CB         1:A:57:GLY:HA2         0.48         2.38         5         2           1:A:3:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         2.51         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:77:VAL:H         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:77:VAL:H         0.48         2.80         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.46         4         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48 </td <td>1:A:15:SER:HB3</td> <td>1:A:21:THR:CA</td> <td>0.48</td> <td>2.38</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:15:SER:HB3	1:A:21:THR:CA	0.48	2.38	6	1
1:A:6:ARG:O         1:A:7:LYS:O         0.48         2.31         4         1           1:A:3:LYS:O         1:A:32:HIS:HD2         0.48         1.90         5         2           1:A:3:VAL:CB         1:A:57:GLY:HA2         0.48         2.38         5         2           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:28:THR:C         1:A:47:PHE:HB2         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:25:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:75:LYS:N         1:A:55:LYS:O         0.48         2.62         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:CD         0.48         2.53         6         1           1:A:79:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.06         3         1           1:A:42:SER:O         1:A:42:SER:N         0.48         2.53         6         1           1:A:41:YS:HD3         1:A:77:VAL:H         0.48	1:A:9:TYR:CA	1:A:45:TYR:CE2	0.48	2.96	3	1
1:A:31:LYS:O         1:A:32:HIS:HD2         0.48         1.90         5         2           1:A:13:VAL:CB         1:A:57:GLY:HA2         0.48         2.38         5         2           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:28:THR:C         1:A:41:TYR:O         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:25:LEU:C         1:A:38:ARG:O         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:71:LYS:N         1:A:55:LYS:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:42:SER:O         1:A:43:LYS:HG2         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:48         2.59         1         1         1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:GG2         0.48         2.37         1	1:A:76:LEU:O		0.48	2.07	3	1
1:A:13:VAL:CB         1:A:57:GLY:HA2         0.48         2.38         5         2           1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:28:THR:C         1:A:41:TYR:O         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         2.62         3         1           1:A:55:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.59         1         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.37         1         1           1:A:6:LYS:HD3         1:A:77:VAL:G2         0.48         2.37         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:G2         0.48 <td>1:A:6:ARG:O</td> <td>1:A:7:LYS:O</td> <td>0.48</td> <td>2.31</td> <td>4</td> <td>1</td>	1:A:6:ARG:O	1:A:7:LYS:O	0.48	2.31	4	1
1:A:38:ARG:O         1:A:39:VAL:HG23         0.48         2.08         2         1           1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:28:THR:C         1:A:41:TYR:O         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:25:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:77:VS:N         1:A:55:LYS:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:43:LYS:HG2         0.48         2.08         5         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.59         1         1           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:CG2         0.48         2.37         1         1           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:H         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:HG3         1:A:30:LYS:O         0.48 <td>1:A:31:LYS:O</td> <td>1:A:32:HIS:HD2</td> <td>0.48</td> <td>1.90</td> <td>5</td> <td>2</td>	1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:HD2	0.48	1.90	5	2
1:A:63:MET:HB3         1:A:74:PHE:HB2         0.48         1.82         5         1           1:A:28:THR:C         1:A:41:TYR:O         0.48         2.51         2         1           1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:25:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:55:LYS:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:43:LYS:HG2         0.48         2.08         5         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.59         1         1           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:CG2         0.48         2.37         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:H         0.48         2.20         1         1           1:A:12:ARG:HB2         1:A:26:VAL:HG22         0.48         1.85         3         1           1:A:30:LYS:HG3         1:A:74:PHE:HD1         0	1:A:13:VAL:CB	1:A:57:GLY:HA2	0.48	2.38	5	2
1:A:28:THR:C       1:A:41:TYR:O       0.48       2.51       2       1         1:A:76:LEU:HD12       1:A:77:VAL:H       0.48       1.68       1       1         1:A:25:LEU:C       1:A:25:LEU:CD1       0.48       2.80       3       1         1:A:30:LYS:CD       1:A:38:ARG:O       0.48       2.62       3       1         1:A:17:LYS:N       1:A:35:LYS:O       0.48       2.46       4       1         1:A:76:LEU:CD1       1:A:76:LEU:O       0.48       2.53       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG2       0.48       2.08       5       1         1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1	1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:HG23	0.48	2.08	2	1
1:A:76:LEU:HD12         1:A:77:VAL:H         0.48         1.68         1         1           1:A:25:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:17:LYS:N         1:A:55:LYS:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:29:TYR:N         1:A:43:LYS:HG2         0.48         2.08         5         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.59         1         1           1:A:61:LYS:HB3         1:A:77:VAL:CG2         0.48         2.37         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:HG22         0.48         2.20         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:HG22         0.48         1.85         3         1           1:A:61:LYS:HB3         1:A:26:VAL:HG22         0.48         1.85         3         1           1:A:60:VAL:CG1         1:A:61:LYS:H         0.48         2.09         4         2           1:A:63:MET:CG         1:A:75:ARG:C         0	1:A:63:MET:HB3	1:A:74:PHE:HB2	0.48	1.82	5	1
1:A:25:LEU:C         1:A:25:LEU:CD1         0.48         2.80         3         1           1:A:30:LYS:CD         1:A:38:ARG:O         0.48         2.62         3         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:55:LYS:O         0.48         2.46         4         1           1:A:76:LEU:CD1         1:A:76:LEU:O         0.48         2.53         6         1           1:A:42:SER:O         1:A:43:LYS:HG2         0.48         2.08         5         1           1:A:29:TYR:N         1:A:42:SER:N         0.48         2.59         1         1           1:A:61:LYS:HD3         1:A:77:VAL:GC2         0.48         2.37         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:H         0.48         2.20         1         1           1:A:76:LEU:CG         1:A:77:VAL:H         0.48         2.20         1         1           1:A:12:ARG:HB2         1:A:26:VAL:HG22         0.48         1.85         3         1           1:A:29:HG3         1:A:30:LYS:O         0.48         2.08         3         1           1:A:46:JE:HD13         1:A:74:PHE:HD1         0.48         2.09         4         2           1:A:9:TYR:C         1:A:61:LYS:H         0.48	1:A:28:THR:C	1:A:41:TYR:O	0.48	2.51	2	1
1:A:30:LYS:CD       1:A:38:ARG:O       0.48       2.62       3       1         1:A:17:LYS:N       1:A:55:LYS:O       0.48       2.46       4       1         1:A:76:LEU:CD1       1:A:76:LEU:O       0.48       2.53       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG2       0.48       2.08       5       1         1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:29:RG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:62:ILE:HD3       1:A:74:PHE:HD1       0.48       2.08       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C	1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:VAL:H	0.48	1.68	1	1
1:A:17:LYS:N       1:A:55:LYS:O       0.48       2.46       4       1         1:A:76:LEU:CD1       1:A:76:LEU:O       0.48       2.53       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG2       0.48       2.08       5       1         1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3 <td>1:A:25:LEU:C</td> <td>1:A:25:LEU:CD1</td> <td>0.48</td> <td>2.80</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:CD1	0.48	2.80	3	1
1:A:76:LEU:CD1       1:A:76:LEU:O       0.48       2.53       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG2       0.48       2.08       5       1         1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:CD1       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:65:VAL:OB       1:A:42:DE:HB3	1:A:30:LYS:CD	1:A:38:ARG:O	0.48	2.62	3	1
1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG2       0.48       2.08       5       1         1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:66:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:43:LYS:HG2	1:A:17:LYS:N	1:A:55:LYS:O	0.48	2.46	4	1
1:A:29:TYR:N       1:A:42:SER:N       0.48       2.59       1       1         1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22 </td <td>1:A:76:LEU:CD1</td> <td>1:A:76:LEU:O</td> <td>0.48</td> <td>2.53</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:O	0.48	2.53	6	1
1:A:61:LYS:HD3       1:A:77:VAL:CG2       0.48       2.37       1       1         1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       2.09       4       2         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:66:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:43:LYS:HB3       0.48       1.66       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:HB4 </td <td>1:A:42:SER:O</td> <td>1:A:43:LYS:HG2</td> <td>0.48</td> <td>2.08</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:42:SER:O	1:A:43:LYS:HG2	0.48	2.08	5	1
1:A:76:LEU:CG       1:A:77:VAL:H       0.48       2.20       1       1         1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:63:MET:CG       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA <td>1:A:29:TYR:N</td> <td>1:A:42:SER:N</td> <td>0.48</td> <td>2.59</td> <td>1</td> <td>1</td>	1:A:29:TYR:N	1:A:42:SER:N	0.48	2.59	1	1
1:A:12:ARG:HB2       1:A:26:VAL:HG22       0.48       1.85       3       1         1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:60:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:61:LYS:	1:A:61:LYS:HD3	1:A:77:VAL:CG2	0.48	2.37	1	1
1:A:30:LYS:HG3       1:A:30:LYS:O       0.48       2.08       3       1         1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:6:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H<	1:A:76:LEU:CG	1:A:77:VAL:H	0.48	2.20	1	1
1:A:62:ILE:HD13       1:A:74:PHE:HD1       0.48       1.66       3       1         1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:6:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:28:THR:HG20       1:A:48:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS	1:A:12:ARG:HB2	1:A:26:VAL:HG22	0.48	1.85	3	1
1:A:60:VAL:CG1       1:A:61:LYS:H       0.48       2.09       4       2         1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:26:VAL:O       1:A:45:SASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       1.84       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H	1:A:30:LYS:HG3	1:A:30:LYS:O	0.48	2.08	3	1
1:A:9:TYR:C       1:A:9:TYR:HD1       0.48       2.12       4       1         1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:26:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2 <td>1:A:62:ILE:HD13</td> <td>1:A:74:PHE:HD1</td> <td>0.48</td> <td>1.66</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:62:ILE:HD13	1:A:74:PHE:HD1	0.48	1.66	3	1
1:A:51:HIS:HB3       1:A:53:GLU:CG       0.48       2.39       5       1         1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:LYS:H	0.48	2.09	4	2
1:A:63:MET:CG       1:A:75:ARG:C       0.48       2.82       2       1         1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:9:TYR:C	1:A:9:TYR:HD1	0.48	2.12	4	1
1:A:16:ASP:OD2       1:A:20:LYS:HB3       0.48       2.09       3       1         1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:51:HIS:HB3	1:A:53:GLU:CG	0.48	2.39	5	1
1:A:15:SER:H       1:A:22:ILE:HG22       0.48       1.60       3       1         1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:63:MET:CG	1:A:75:ARG:C	0.48	2.82	2	1
1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:16:ASP:OD2	1:A:20:LYS:HB3	0.48	2.09	3	1
1:A:27:GLU:HB3       1:A:43:LYS:H       0.48       1.68       3       1         1:A:56:VAL:O       1:A:58:ASP:OD1       0.48       2.32       3       1         1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:15:SER:H	1:A:22:ILE:HG22	0.48	1.60	3	1
1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:27:GLU:HB3	1:A:43:LYS:H	0.48	1.68		1
1:A:28:THR:HG23       1:A:41:TYR:HA       0.48       1.84       5       1         1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:56:VAL:O	1:A:58:ASP:OD1	0.48	2.32	3	1
1:A:42:SER:C       1:A:43:LYS:HG3       0.48       2.28       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:28:THR:HG23	1:A:41:TYR:HA	0.48			1
1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CD1       0.48       2.38       5       1         1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2						1
1:A:10:VAL:CB       1:A:61:LYS:HG2       0.48       2.38       5       1         1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:45:TYR:HB3	1:A:62:ILE:CD1				
1:A:29:TYR:CD1       1:A:39:VAL:O       0.48       2.66       2       1         1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:10:VAL:CB	1:A:61:LYS:HG2	0.48	2.38		1
1:A:60:VAL:CG2       1:A:61:LYS:H       0.48       2.13       2       1         1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:29:TYR:CD1	1:A:39:VAL:O				
1:A:15:SER:CB       1:A:48:HIS:O       0.48       2.60       1       1         1:A:77:VAL:O       1:A:78:GLU:HB2       0.48       2.08       1       2	1:A:60:VAL:CG2					
1:A:77:VAL:O 1:A:78:GLU:HB2 0.48 2.08 1 2						
	1:A:64:GLU:HB3	1:A:74:PHE:HB2	0.48	1.85	1	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1		Clash ( Å )	Distance(A)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:8:VAL:C	1:A:63:MET:HA	0.48	2.29	3	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:43:LYS:C	0.48	2.29	4	1
1:A:38:ARG:NH1	1:A:38:ARG:HG2	0.48	2.23	4	1
1:A:32:HIS:CD2	1:A:33:PRO:N	0.48	2.82	6	2
1:A:48:HIS:NE2	1:A:51:HIS:CE1	0.48	2.82	6	1
1:A:59:ILE:O	1:A:79:ILE:C	0.48	2.52	6	2
1:A:10:VAL:CB	1:A:61:LYS:CA	0.48	2.90	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:TYR:HB2	0.48	2.09	5	1
1:A:37:LYS:O	1:A:39:VAL:N	0.48	2.47	2	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:80:VAL:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:28:THR:HA	1:A:43:LYS:CA	0.48	2.39	1	1
1:A:7:LYS:C	1:A:8:VAL:CG1	0.48	2.83	4	1
1:A:12:ARG:N	1:A:24:VAL:CG2	0.48	2.75	6	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:45:TYR:CD2	0.48	2.44	6	2
1:A:13:VAL:CA	1:A:58:ASP:O	0.48	2.62	5	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:46:LYS:HD2	0.48	2.39	1	1
1:A:60:VAL:CA	1:A:79:ILE:H	0.47	2.21	6	1
1:A:29:TYR:OH	1:A:32:HIS:HB3	0.47	2.09	2	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:CB	0.47	2.39	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:ASP:OD2	0.47	2.32	4	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:63:MET:HG2	0.47	2.38	6	1
1:A:26:VAL:O	1:A:43:LYS:HA	0.47	2.09	5	1
1:A:18:MET:C	1:A:20:LYS:N	0.47	2.66	3	3
1:A:62:ILE:CA	1:A:76:LEU:CB	0.47	2.86	3	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:65:THR:HG21	0.47	2.43	3	1
1:A:29:TYR:HB3	1:A:41:TYR:CD1	0.47	2.44	4	2
1:A:24:VAL:HG22	1:A:26:VAL:HG23	0.47	1.85	2	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:LEU:N	0.47	2.47	2	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:HA	0.47	1.85	1	1
1:A:60:VAL:HG13	1:A:78:GLU:CB	0.47	2.40	3	1
1:A:28:THR:O	1:A:41:TYR:CG	0.47	2.68	4	1
1:A:14:VAL:C	1:A:23:THR:O	0.47	2.52	5	1
1:A:80:VAL:O	1:A:81:GLU:HB2	0.47	2.09	5	2
1:A:27:GLU:HB3	1:A:42:SER:CA	0.47	2.39	2	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:45:TYR:HB2	0.47	1.87	5	1
1:A:61:LYS:HG3	1:A:77:VAL:CG2	0.47	2.40	2	1
1:A:64:GLU:O	1:A:74:PHE:HA	0.47	2.09	3	1
1:A:79:ILE:C	1:A:80:VAL:CG1	0.47	2.78	3	1
1:A:35:TYR:CE2	1:A:37:LYS:HE2	0.47	2.44	4	1
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:HG2	0.47	2.09	6	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:LEU:N	0.47	2.24	6	1
		1 0.21	C + i 1		



Continued from previous page...

Atom 1		Cleab ( Å )	Distance	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:MET:HB3	0.47	1.87	2	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:45:TYR:CD2	0.47	2.97	3	1
1:A:17:LYS:O	1:A:18:MET:HB3	0.47	2.08	3	1
1:A:78:GLU:OE2	1:A:79:ILE:N	0.47	2.47	3	1
1:A:11:GLY:H	1:A:61:LYS:C	0.47	2.13	6	1
1:A:59:ILE:CB	1:A:80:VAL:HG12	0.47	2.35	2	2
1:A:61:LYS:HE2	1:A:77:VAL:CG1	0.47	2.39	5	1
1:A:15:SER:HB3	1:A:53:GLU:OE2	0.47	2.10	3	1
1:A:18:MET:HG3	1:A:18:MET:O	0.47	2.09	4	1
1:A:13:VAL:C	1:A:57:GLY:HA3	0.47	2.30	4	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:26:VAL:CG1	0.47	2.87	6	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:46:LYS:C	0.47	2.30	6	1
1:A:82:LYS:O	1:A:83:ALA:O	0.47	2.33	5	1
1:A:62:ILE:O	1:A:76:LEU:HB3	0.47	2.10	2	1
1:A:63:MET:SD	1:A:75:ARG:HB2	0.47	2.49	2	1
1:A:11:GLY:HA2	1:A:24:VAL:HB	0.47	1.86	3	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:65:THR:CG2	0.47	2.98	3	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:44:LYS:HA	0.47	2.40	4	1
1:A:63:MET:SD	1:A:75:ARG:O	0.47	2.73	4	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:45:TYR:HE2	0.47	2.17	3	2
1:A:27:GLU:CA	1:A:41:TYR:HB3	0.47	2.39	6	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:45:TYR:OH	0.47	2.63	6	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:C	0.47	2.52	6	1
1:A:28:THR:CA	1:A:42:SER:C	0.47	2.84	1	1
1:A:63:MET:CA	1:A:75:ARG:N	0.46	2.78	5	2
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:CA	0.46	2.40	6	1
1:A:11:GLY:HA3	1:A:60:VAL:CG1	0.46	2.40	3	2
1:A:13:VAL:HG21	1:A:25:LEU:HD12	0.46	1.87	5	1
1:A:38:ARG:O	1:A:39:VAL:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:25:LEU:HB2	1:A:44:LYS:CG	0.46	2.40	3	1
1:A:7:LYS:CB	1:A:65:THR:HA	0.46	2.40	4	1
1:A:15:SER:O	1:A:22:ILE:HB	0.46	2.09	3	1
1:A:24:VAL:N	1:A:45:TYR:O	0.46	2.49	4	1
1:A:45:TYR:HB3	1:A:74:PHE:CZ	0.46	2.46	6	1
1:A:27:GLU:N	1:A:42:SER:HA	0.46	2.25	2	1
1:A:29:TYR:CB	1:A:41:TYR:H	0.46	2.23	2	1
1:A:11:GLY:HA2	1:A:59:ILE:CG2	0.46	2.40	1	1
1:A:44:LYS:N	1:A:45:TYR:CE1	0.46	2.83	3	1
1:A:18:MET:SD	1:A:56:VAL:HG11	0.46	2.49	3	1
1:A:9:TYR:HA	1:A:45:TYR:CZ	0.46	2.45	3	1
1:A:15:SER:CB	1:A:21:THR:HA	0.46	2.41	4	2
		1 0.10	C 1: 1		



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:16:ASP:O	Atom 1		Clash ( Å )	Distance (Å)	Models	
1:A:66:LIVS:HD2         1:A:6:ASP:OD1         1:A:17:LVS:HD2         0.46         2.11         3         1           1:A:6:ASP:OD1         1:A:17:LVS:HD2         0.46         2.11         3         1           1:A:23:LEU:C         1:A:45:TYR:O         0.46         2.53         5         3           1:A:25:LEU:HD12         1:A:44:LVS:HB3         0.46         2.24         1         4           1:A:32:HIS:CE1         1:A:43:LYS:HG22         0.46         2.46         2         1           1:A:32:HIS:CE1         1:A:39:VAL:HG22         0.46         2.46         2         1           1:A:32:LEU:C         1:A:47:VAL:HG11         0.46         2.46         2         1           1:A:6:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         2.79         6         1           1:A:6:LYS:HE2         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:6:LYS:CG         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1           1:A:30:LYS:CG	Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$		
1:A:23:THR:C         1:A:45:TYR:O         0.46         2.53         5           1:A:23:THR:C         1:A:45:TYR:O         0.46         2.53         5           3:A:25:LEU:HD12         1:A:44:LYS:HB3         0.46         1.88         6           1:A:25:LEU:C         1:A:26:VAL:HG23         0.46         2.24         1           1:A:3:HIS:CE1         1:A:39:VAL:HG22         0.46         2.46         2         1           1:A:43:LYS:O         1:A:43:LYS:HG2         0.46         2.10         4         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:D2         0.46         2.41         1         1 </td <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>						
1:A:23:THR:C         1:A:45:TYR:O         0.46         2.53         5         3           1:A:25:LEU:HD12         1:A:46:IVS:HB3         0.46         1.88         6         1           1:A:25:LEU:C         1:A:26:VAL:HG23         0.46         2.24         1         4           1:A:32:HIS:CE1         1:A:39:VAL:HG22         0.46         2.24         2         1           1:A:31:YS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         2.10         4         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         2.79         6         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:6:LYS:CG         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.63         5         1           1:A:6:LYS:CG         1:A:79:HE2:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:30:LYS:CG         1:A:46:LYS:HA			0.46	1.88		1
1:A:25:LEU:HD12         1:A:44:LYS:HB3         0.46         1.88         6         1           1:A:25:LEU:C         1:A:26:VAL:HG23         0.46         2.24         1         4           1:A:32:HIS:CE1         1:A:36:VAL:HG22         0.46         2.46         2         1           1:A:43:LYS:O         1:A:43:LYS:HG2         0.46         2.10         4         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1           1:A:23:TYR:CA         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.27         6         2           1:A:41:Q:YA         1:A:46:LYS:HA	1:A:16:ASP:OD1	1:A:17:LYS:HD2	0.46	2.11	3	1
1:A:25:LEU:C         1:A:26:VAL:HG23         0.46         2.24         1         4           1:A:32:HIS:CE1         1:A:39:VAL:HG22         0.46         2.46         2         1           1:A:43:IYS:O         1:A:43:IYS:HG2         0.46         2.10         4         1           1:A:45:LEU:N         1:A:75:LEU:CDI         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CDI         0.46         2.79         6         1           1:A:6:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.82         6         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.64         2         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:30:LYS:CG         1:A:31:LYS:N         0.46         2.77         6         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.4	1:A:23:THR:C	1:A:45:TYR:O	0.46	2.53	5	3
1:A:32:HIS:CE1         1:A:43:LYS:HG2         0.46         2.46         2         1           1:A:43:LYS:O         1:A:43:LYS:HG2         0.46         2.10         4         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.64         2         1           1:A:39:HTR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:30:LYS:CG         1:A:31:LYS:N         0.46         2.27         6         2           1:A:21:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:10:VAL:GG1         1:A:49:ASP:OD1	1:A:25:LEU:HD12	1:A:44:LYS:HB3	0.46	1.88	6	1
1:A:43:LYS:O         1:A:43:LYS:HG2         0.46         2.10         4         1           1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:79:LE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.64         2         1           1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:31:LYS:N         0.46         2.24         3         1           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.27         6         2           1:A:11:GLY:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:14:VAL:HG12         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.31         2         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:46:LYS:TR.H <t< td=""><td>1:A:25:LEU:C</td><td>1:A:26:VAL:HG23</td><td>0.46</td><td>2.24</td><td>1</td><td>4</td></t<>	1:A:25:LEU:C	1:A:26:VAL:HG23	0.46	2.24	1	4
1:A:61:LYS:HE2         1:A:77:VAL:HG11         0.46         1.88         4         2           1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:31:HYR:O         0.46         2.41         1         1         1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.41         1         1         1:A:24:VAL:CG2         1:A:31:LYS:N         0.46         2.24         3         1         1:A:30:LYS:CG         1:A:31:LYS:N         0.46         2.27         6         2         2         1:A:23:THR:N         1:A:46:IYS:HA         0.46         2.25         5         2         1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1         1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.21         1         1:A:25:LEU:HA         1:A:45:TYR:H         0.46         2.38         3         1         1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2	1:A:32:HIS:CE1	1:A:39:VAL:HG22	0.46	2.46	2	1
1:A:25:LEU:N         1:A:25:LEU:CD1         0.46         2.79         6         1           1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:23:MET:HG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.24         3         1           1:A:23:THR:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:10:VAL:GG1         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.38         3         1           1:A:62:LE:CD1         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:55:LEU:HA         1:A:64:GUU:CG         0.4	1:A:43:LYS:O	1:A:43:LYS:HG2	0.46	2.10	4	1
1:A:76:LEU:C         1:A:76:LEU:CD1         0.46         2.82         6         1           1:A:61:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.77         6         2           1:A:11:GLY:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:45:TYR:H         0.46         2.11         2         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:62:ILEU:HA         1:A:44:VS:HB2         0.	1:A:61:LYS:HE2	1:A:77:VAL:HG11	0.46	1.88	4	2
1:A:61:LYS:CG         1:A:79:ILE:O         0.46         2.63         5         1           1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:10:VAL:GG1         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.31         1         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:54:AALA:O         1:A:55:LYS:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:61:LYS:CB	1:A:25:LEU:N	1:A:25:LEU:CD1	0.46	2.79	6	1
1:A:29:TYR:CA         1:A:41:TYR:O         0.46         2.64         2         1           1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:30:LYS:CG         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.77         6         2           1:A:23:THR:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:42:SER:OGD1         0.46         2.11         2         1           1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:61:LYS:HB2         0.46         2	1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:CD1	0.46	2.82	6	1
1:A:18:MET:HG2         1:A:46:LYS:CB         0.46         2.41         1           1:A:24:VAL:CG2         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.24         3         1           1:A:30:LYS:CG         1:A:45:TYR:HD2         0.46         2.77         6         2           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:45:TYR:H         0.46         1.70         1         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:62:LEE:CD1         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:44:LYS:HG2         0.46         2.10         4         2           1:A:20:VAL:CG1         1:A:61:LYS:HB3         0.46	1:A:61:LYS:CG	1:A:79:ILE:O	0.46	2.63	5	1
1:A:24:VAL:CG2       1:A:45:TYR:HD2       0.46       2.24       3       1         1:A:30:LYS:CG       1:A:31:LYS:N       0.46       2.77       6       2         1:A:23:THR:N       1:A:46:LYS:HA       0.46       2.25       5       2         1:A:11:GLY:N       1:A:61:LYS:HA       0.46       2.26       5       1         1:A:14:VAL:HG12       1:A:49:ASP:OD1       0.46       2.11       2       1         1:A:25:LEU:HA       1:A:45:TYR:H       0.46       1.70       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:26:VAL:HG21       0.46       2.38       3       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:OG       0.46       2.32       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:62:LEU:HA       1:A:61:LYS:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:25:LEU:HA       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.93       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP	1:A:29:TYR:CA	1:A:41:TYR:O	0.46	2.64	2	1
1:A:30:LYS:CG         1:A:31:LYS:N         0.46         2.77         6         2           1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:45:TYR:H         0.46         1.70         1         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.41         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:62:LEU:HA         1:A:45:LYS:HB2         0.46         2.10         4         2           1:A:10:VAL:CG1         1:A:61:LYS:HB3         0.46         2.93         5         1           1:A:15:SER:HB3         1:A:49:ASP:OD2	1:A:18:MET:HG2	1:A:46:LYS:CB	0.46	2.41	1	1
1:A:23:THR:N         1:A:46:LYS:HA         0.46         2.25         5         2           1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:45:TYR:H         0.46         1.70         1         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:62:LE:CD1         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:62:LEU:HA         1:A:44:LYS:HG2         0.46         2.10         4         2           1:A:10:VAL:CG1         1:A:61:LYS:HB3         0.46         2.93         5         1           1:A:48:HIS:CD2         1:A:48:HIS:C	1:A:24:VAL:CG2	1:A:45:TYR:HD2	0.46	2.24	3	1
1:A:11:GLY:N         1:A:61:LYS:HA         0.46         2.26         5         1           1:A:14:VAL:HG12         1:A:49:ASP:OD1         0.46         2.11         2         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:49:ASP:TYR:H         0.46         1.70         1         1           1:A:10:VAL:CG1         1:A:26:VAL:HG21         0.46         2.38         3         1           1:A:28:THR:OG1         1:A:42:SER:OG         0.46         2.32         3         1           1:A:63:MET:HG3         1:A:64:GLU:CG         0.46         2.41         3         1           1:A:62:ILE:CD1         1:A:74:PHE:HB2         0.46         2.41         3         1           1:A:25:LEU:HA         1:A:45:YS:HB2         0.46         1.88         6         2           1:A:10:VAL:CG1         1:A:61:LYS:HB3         0.46         2.93         5         1           1:A:48:HIS:CD2         1:A:48:HIS:C <td>1:A:30:LYS:CG</td> <td>1:A:31:LYS:N</td> <td>0.46</td> <td>2.77</td> <td>6</td> <td>2</td>	1:A:30:LYS:CG	1:A:31:LYS:N	0.46	2.77	6	2
1:A:14:VAL:HG12       1:A:49:ASP:OD1       0.46       2.11       2       1         1:A:25:LEU:HA       1:A:45:TYR:H       0.46       1.70       1       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:26:VAL:HG21       0.46       2.38       3       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:OG       0.46       2.32       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:CG1       1:A:45	1:A:23:THR:N	1:A:46:LYS:HA	0.46	2.25	5	2
1:A:25:LEU:HA       1:A:45:TYR:H       0.46       1.70       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:26:VAL:HG21       0.46       2.38       3       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:OG       0.46       2.32       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.93       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.84       6       1         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2 <td< td=""><td>1:A:11:GLY:N</td><td>1:A:61:LYS:HA</td><td>0.46</td><td>2.26</td><td>5</td><td>1</td></td<>	1:A:11:GLY:N	1:A:61:LYS:HA	0.46	2.26	5	1
1:A:10:VAL:CG1       1:A:26:VAL:HG21       0.46       2.38       3       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:OG       0.46       2.32       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:45:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.37       5       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:S	1:A:14:VAL:HG12	1:A:49:ASP:OD1	0.46	2.11	2	1
1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:OG       0.46       2.32       3       1         1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:	1:A:25:LEU:HA	1:A:45:TYR:H	0.46	1.70	1	1
1:A:63:MET:HG3       1:A:64:GLU:CG       0.46       2.41       3       1         1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.10       1       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE	1:A:10:VAL:CG1	1:A:26:VAL:HG21	0.46	2.38	3	1
1:A:62:ILE:CD1       1:A:74:PHE:HB2       0.46       2.41       3       1         1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       2.34       1       2         1:A:63:MET:HA       1:A:75:AR	1:A:28:THR:OG1	1:A:42:SER:OG	0.46	2.32	3	1
1:A:54:ALA:O       1:A:55:LYS:HB2       0.46       2.10       4       2         1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.10       1       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:61:LYS:HD2       1:A:11:GLY:N	1:A:63:MET:HG3	1:A:64:GLU:CG	0.46	2.41	3	1
1:A:25:LEU:HA       1:A:44:LYS:HG2       0.46       1.88       6       2         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:	1:A:62:ILE:CD1	1:A:74:PHE:HB2	0.46	2.41	3	1
1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:CB       0.46       2.93       5       1         1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:54:ALA:O	1:A:55:LYS:HB2	0.46	2.10	4	2
1:A:10:VAL:CG1       1:A:61:LYS:HB3       0.46       2.37       5       1         1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:29:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:HG2	0.46	1.88	6	2
1:A:15:SER:HB3       1:A:49:ASP:OD2       0.46       2.11       2       1         1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:10:VAL:CG1	1:A:61:LYS:CB	0.46	2.93	5	1
1:A:48:HIS:CD2       1:A:48:HIS:C       0.46       2.88       2       2         1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:10:VAL:CG1	1:A:61:LYS:HB3	0.46	2.37	5	1
1:A:60:VAL:C       1:A:61:LYS:CG       0.46       2.84       6       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:15:SER:HB3	1:A:49:ASP:OD2	0.46	2.11	2	1
1:A:14:VAL:CG1       1:A:53:GLU:HA       0.46       2.40       3       1         1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:48:HIS:CD2	1:A:48:HIS:C	0.46	2.88	2	2
1:A:27:GLU:HB2       1:A:41:TYR:CD2       0.46       2.46       6       1         1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:CG	0.46	2.84	6	1
1:A:42:SER:O       1:A:43:LYS:HG3       0.46       2.10       1       1         1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:14:VAL:CG1	1:A:53:GLU:HA	0.46	2.40	3	1
1:A:28:THR:OG1       1:A:42:SER:HA       0.46       2.11       3       1         1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:27:GLU:HB2	1:A:41:TYR:CD2	0.46	2.46		1
1:A:9:TYR:CZ       1:A:64:GLU:HG3       0.45       2.46       4       1         1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:42:SER:O	1:A:43:LYS:HG3	0.46	2.10	1	1
1:A:31:LYS:O       1:A:32:HIS:O       0.45       2.34       1       2         1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:28:THR:OG1	1:A:42:SER:HA	0.46	2.11	3	1
1:A:61:LYS:HD2       1:A:79:ILE:HG13       0.45       1.88       5       1         1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:9:TYR:CZ	1:A:64:GLU:HG3	0.45	2.46	4	1
1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:O	0.45	2.34	1	2
1:A:63:MET:HA       1:A:75:ARG:N       0.45       2.27       5       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:11:GLY:N       0.45       2.25       2       1	1:A:61:LYS:HD2	1:A:79:ILE:HG13	0.45	1.88	5	1
1:A:10:VAL:HG22 1:A:11:GLY:N 0.45 2.25 2 1	1:A:63:MET:HA	1:A:75:ARG:N	0.45			1
	1:A:10:VAL:HG22	1:A:11:GLY:N	0.45	2.25		1
$1.\Lambda.29.1110.O$ $1.\Lambda.90.D19.O$ $0.49$ $2.99$ $1$ $1$	1:A:29:TYR:O	1:A:30:LYS:C	0.45	2.55	1	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Continued from pred	Atom 2	Clasta (Å)	Distance (Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\mathrm{\AA})$	Worst	Total
1:A:28:THR:HA	1:A:42:SER:C	0.45	2.31	1	1
1:A:17:LYS:CA	1:A:48:HIS:HA	0.45	2.41	1	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:81:GLU:CB	0.45	2.41	6	1
1:A:10:VAL:HA	1:A:62:ILE:CG2	0.45	2.40	5	1
1:A:44:LYS:HD3	1:A:44:LYS:O	0.45	2.11	5	1
1:A:23:THR:CG2	1:A:24:VAL:N	0.45	2.73	1	1
1:A:60:VAL:CB	1:A:79:ILE:O	0.45	2.65	1	1
1:A:31:LYS:CA	1:A:41:TYR:OH	0.45	2.64	3	1
1:A:8:VAL:O	1:A:64:GLU:C	0.45	2.54	5	1
1:A:22:ILE:HG12	1:A:46:LYS:HB3	0.45	1.87	2	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:41:TYR:CE1	0.45	2.44	6	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:MET:HB3	0.45	2.11	2	2
1:A:63:MET:CG	1:A:64:GLU:HG2	0.45	2.41	3	1
1:A:9:TYR:CZ	1:A:64:GLU:CB	0.45	2.99	4	1
1:A:26:VAL:O	1:A:45:TYR:HE1	0.45	1.95	5	1
1:A:60:VAL:C	1:A:79:ILE:O	0.45	2.55	2	2
1:A:15:SER:HA	1:A:21:THR:C	0.45	2.32	3	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:45:TYR:CD1	0.45	3.05	3	1
1:A:34:LEU:O	1:A:34:LEU:HG	0.45	2.11	2	3
1:A:24:VAL:HG12	1:A:46:LYS:O	0.45	2.12	2	2
1:A:46:LYS:HE2	1:A:73:ARG:CG	0.45	2.41	6	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:43:LYS:CA	0.45	2.40	2	1
1:A:29:TYR:HB2	1:A:40:LYS:HB2	0.45	1.88	1	1
1:A:63:MET:HB3	1:A:75:ARG:CB	0.45	2.41	1	1
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LYS:HG3	0.45	2.11	3	2
1:A:62:ILE:CD1	1:A:74:PHE:CD1	0.45	2.98	3	1
1:A:51:HIS:O	1:A:52:ASN:HB2	0.45	2.12	4	1
1:A:18:MET:HG2	1:A:20:LYS:CB	0.45	2.42	5	1
1:A:24:VAL:O	1:A:45:TYR:O	0.45	2.35	3	1
1:A:25:LEU:CG	1:A:44:LYS:HB3	0.45	2.42	6	1
1:A:25:LEU:CB	1:A:44:LYS:CG	0.45	2.93	6	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:76:LEU:N	0.45	2.80	6	1
1:A:10:VAL:HA	1:A:61:LYS:CA	0.45	2.39	2	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:O	0.45	2.12	2	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:48:HIS:O	0.45	2.12	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:21:THR:O	0.45	2.35	3	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:ASP:CG	0.45	2.55	4	2
1:A:26:VAL:C	1:A:43:LYS:CB	0.45	2.85	4	1
1:A:32:HIS:CD2	1:A:32:HIS:C	0.45	2.90	6	2
1:A:60:VAL:CA	1:A:79:ILE:N	0.45	2.79	6	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

1:A:53:GLU:CB	Atom 1		Clash ( Å )	Distance (Å)	Models	
1:A:8:VAL:HB         1:A:63:MET:HG2         0.44         1.89         6         1           1:A:13:VAL:GG1         1:A:63:MET:HG2         0.44         2.42         5         1           1:A:37:LYS:O         1:A:38:ARG:C         0.44         2.55         5         1           1:A:61:DYS:HD2         1:A:79:ILE:O         0.44         2.62         5         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.64         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:75:ARG:CO         0.44         2.65         4         1           1:A:64:GLU:O         1:A:64:GLU:O         0.44         2.54         2         1           1:A:75:SER:CB         1:A:74:AL:BII         0.44         2.54         2         1           1:A:64:GLU:O         1:A:42:AL:BII         0.44	Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:13:VAL:CG1         1:A:57:GLY:HA2         0.44         2.42         5         1           1:A:37:DYS:O         1:A:38:ARG:C         0.44         2.55         5         1           1:A:61:LYS:HD2         1:A:38:ARG:C         0.44         2.32         5         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:45:TYR:CD2         0.44         2.64         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:17:LYS:CG         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:64:GU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:64:GU:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:72:IYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:72:IYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HDI2         0.44						
1:A:37:LYS:O         1:A:38:ARG:C         0.44         2.55         5         1           1:A:61:LYS:HD2         1:A:79:ILE:C         0.44         2.32         5         1           1:A:9:TYR:CD2         1:A:45:TYR:CD2         0.44         3.05         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.64         2         1           1:A:6:ASP:O         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:48:AL:CB         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:47:ALA:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:45:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.54         2         1           1:A:45:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.64         3         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:45:TYR:OH         0.44 <td></td> <td></td> <td>0.44</td> <td></td> <td></td> <td></td>			0.44			
1:A:61:LYS:HD2         1:A:45:TYR:CD2         0.44         2.32         5         1           1:A:9:TYR:CD2         1:A:45:TYR:CD2         0.44         3.05         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:45:TYR:CD2         0.44         2.64         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:17:LYS:CG         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.55         5         1           1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.54         2         1           1:A:25:SER:C         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         1.88         5         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:26:VAL:C         1:A:46:TYR:OH         0.44	1:A:13:VAL:CG1	1:A:57:GLY:HA2	0.44	2.42	5	1
1:A:9:TYR:CD2         1:A:45:TYR:CD2         0.44         3.05         2         1           1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.64         2         1           1:A:82:LYS:O         1:A:83:ALA:CB         0.44         2.65         2         3           1:A:15:SER:CB         1:A:63:VAL:CG2         0.44         2.65         4         1           1:A:75:LYS:O         1:A:73:ARG:O         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HBI         0.44         2.33         1         1           1:A:5:YELYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:66:ILE:DIDI2         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CGI         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:29:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.47         3         1           1:A:29:TR:CEI         1:A:65:THR:HG2I         0.	1:A:37:LYS:O	1:A:38:ARG:C	0.44	2.55	5	1
1:A:60:VAL:CA         1:A:79:ILE:O         0.44         2.64         2         1           1:A:82:LYS:O         1:A:83:ALA:CB         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:17:LYS:CG         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.54         2         1           1:A:15:SER:C         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:5:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:29:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44 <td>1:A:61:LYS:HD2</td> <td>1:A:79:ILE:C</td> <td>0.44</td> <td>2.32</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:61:LYS:HD2	1:A:79:ILE:C	0.44	2.32	5	1
1:A:82:LYS:O         1:A:83:ALA:CB         0.44         2.65         2         3           1:A:16:ASP:O         1:A:17:LYS:CG         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.64         4         1           1:A:25:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:26:VAL:C         1:A:43:LYS:HA         0.44         2.43         5         1           1:A:29:TYR:CE1         1:A:66:CTHR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:61:LYS:HD3         0.44         1.87         4         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.4	1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:CD2	0.44	3.05	2	1
1:A:16:ASP:O         1:A:17:LYS:CG         0.44         2.65         4         1           1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:O         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.43         5         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.43         5         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:29:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21 <t< td=""><td>1:A:60:VAL:CA</td><td>1:A:79:ILE:O</td><td>0.44</td><td>2.64</td><td>2</td><td>1</td></t<>	1:A:60:VAL:CA	1:A:79:ILE:O	0.44	2.64	2	1
1:A:15:SER:CB         1:A:56:VAL:CG2         0.44         2.91         5         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:O         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.33         1         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:29:TYR:CE1         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.47         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VALHGI1         1:A:61:LYS:HD3         0.44         1.87         4         1           1:A:34:LEU:HG1         1:A:44:LYS:HG2	1:A:82:LYS:O	1:A:83:ALA:CB	0.44	2.65	2	3
1:A:72:LYS:O         1:A:63:ARG:O         0.44         2.35         5         1           1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.33         1         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         1.88         5         1           1:A:25:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:LYS:HA         0.44         1.88         1         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:61:LYS:HD3         0.44         1.87         4         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.44         2.13         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:60:VAL:HB         0.4	1:A:16:ASP:O	1:A:17:LYS:CG	0.44	2.65	4	1
1:A:64:GLU:O         1:A:65:THR:C         0.44         2.54         2         1           1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.33         1         1           1:A:72:LYS:O         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:5:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:26:VAL:BB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.43         5         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:66:VAL:O         0.44         2.47         3         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:66:VAL:O         0.44         2.13         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:60:VAL:HB         0.44         2.28         6         1           1:A:15:VAL:HG13         1:A:66:VAL:HB         0.4	1:A:15:SER:CB	1:A:56:VAL:CG2	0.44	2.91	5	1
1:A:15:SER:C         1:A:47:ALA:HB1         0.44         2.33         1         1           1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:62:ILE:HD12         0.44         1.88         5         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:LYS:HA         0.44         1.88         1         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.56         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:65:VAL:O         0.44         2.13         6         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.44         2.13         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:40:VAL:HB         0.44         1.90         1         1           1:A:71:THR:O         1:A:79:ILE:N	1:A:72:LYS:O	1:A:73:ARG:O	0.44	2.35	5	1
1:A:72:LYS:O         1:A:73:ARG:CB         0.44         2.64         3         1           1:A:8:VAL:CA         1:A:64:GLU:O         0.44         2.64         4         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         1.88         5         1           1:A:25:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:LYS:HA         0.44         1.88         1         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.56         3         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.47         3         1           1:A:210:VAL:HG11         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:65:VAL:O         0.44         2.13         6         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.44         2.13         6         1           1:A:26:VAL:HG         1:A:44:LYS:HG2         0.44         2.28         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:60:VAL:HB         0.44         1.90         1         1           1:A:71:THR:O         1:A:72:LYS:O <td< td=""><td>1:A:64:GLU:O</td><td>1:A:65:THR:C</td><td>0.44</td><td>2.54</td><td>2</td><td>1</td></td<>	1:A:64:GLU:O	1:A:65:THR:C	0.44	2.54	2	1
1:A:8:VAL:CA       1:A:64:GLU:O       0.44       2.64       4       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:HD12       0.44       1.88       5       1         1:A:45:TYR:HB3       1:A:62:ILE:CG1       0.44       2.43       5       1         1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:HA       0.44       1.88       1       1         1:A:26:VAL:C       1:A:45:TYR:OH       0.44       2.56       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:65:THR:HG21       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:65:VAL:O       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:65:VAL:O       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:H       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.28       6       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:79:ILE:N       0.44       2.36       4       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:16:ASP:OD1 <td>1:A:15:SER:C</td> <td>1:A:47:ALA:HB1</td> <td>0.44</td> <td>2.33</td> <td>1</td> <td>1</td>	1:A:15:SER:C	1:A:47:ALA:HB1	0.44	2.33	1	1
1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:HD12         0.44         1.88         5         1           1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:LYS:HA         0.44         1.88         1         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.56         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:61:LYS:HD3         0.44         1.87         4         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:56:VAL:O         0.44         2.13         6         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.44         2.13         6         1           1:A:26:VAL:N         1:A:44:LYS:HG2         0.44         2.28         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:60:VAL:HB         0.44         1.90         1         1           1:A:78:GLU:CG         1:A:79:ILE:N         0.44         2.80         3         1           1:A:71:THR:O         1:A:72:IYS:O         0.44         2.36         4         2           1:A:16:ASP:C         1:A:16:ASP:OD1 <td< td=""><td>1:A:72:LYS:O</td><td>1:A:73:ARG:CB</td><td>0.44</td><td>2.64</td><td>3</td><td>1</td></td<>	1:A:72:LYS:O	1:A:73:ARG:CB	0.44	2.64	3	1
1:A:45:TYR:HB3         1:A:62:ILE:CG1         0.44         2.43         5         1           1:A:28:THR:HA         1:A:43:LYS:HA         0.44         1.88         1         1           1:A:26:VAL:C         1:A:45:TYR:OH         0.44         2.56         3         1           1:A:9:TYR:CE1         1:A:65:THR:HG21         0.44         2.47         3         1           1:A:10:VAL:HG11         1:A:61:LYS:HD3         0.44         1.87         4         1           1:A:13:VAL:HA         1:A:66:VAL:O         0.44         2.13         6         1           1:A:34:LEU:HG         1:A:34:LEU:O         0.44         2.13         6         1           1:A:26:VAL:N         1:A:44:LYS:HG2         0.44         2.28         6         1           1:A:14:VAL:HG13         1:A:60:VAL:HB         0.44         1.90         1         1           1:A:78:GLU:CG         1:A:79:ILE:N         0.44         2.80         3         1           1:A:71:THR:O         1:A:72:LYS:O         0.44         2.36         4         2           1:A:10:VAL:HG22         1:A:31:LYS:N         0.44         1.88         6         1           1:A:59:ILE:O         1:A:79:ILE:HG23	1:A:8:VAL:CA	1:A:64:GLU:O	0.44	2.64	4	1
1:A:28:THR:HA       1:A:43:LYS:HA       0.44       1.88       1       1         1:A:26:VAL:C       1:A:45:TYR:OH       0.44       2.56       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:65:THR:HG21       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:61:LYS:HD3       0.44       1.87       4       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:79:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       1.88       6       1         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:60:VAL:HB <td>1:A:45:TYR:HB3</td> <td>1:A:62:ILE:HD12</td> <td>0.44</td> <td>1.88</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:45:TYR:HB3	1:A:62:ILE:HD12	0.44	1.88	5	1
1:A:26:VAL:C       1:A:45:TYR:OH       0.44       2.56       3       1         1:A:9:TYR:CE1       1:A:65:THR:HG21       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:61:LYS:HD3       0.44       1.87       4       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LEU:O       0.44       2.28       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB </td <td>1:A:45:TYR:HB3</td> <td>1:A:62:ILE:CG1</td> <td>0.44</td> <td>2.43</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:45:TYR:HB3	1:A:62:ILE:CG1	0.44	2.43	5	1
1:A:9:TYR:CE1       1:A:65:THR:HG21       0.44       2.47       3       1         1:A:10:VAL:HG11       1:A:61:LYS:HD3       0.44       1.87       4       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:26:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:79:ILE:N       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.36       4       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2<	1:A:28:THR:HA	1:A:43:LYS:HA	0.44	1.88	1	1
1:A:10:VAL:HG11       1:A:61:LYS:HD3       0.44       1.87       4       1         1:A:13:VAL:HA       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:79:ILE:N       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N <td>1:A:26:VAL:C</td> <td>1:A:45:TYR:OH</td> <td>0.44</td> <td>2.56</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:26:VAL:C	1:A:45:TYR:OH	0.44	2.56	3	1
1:A:13:VAL:HA       1:A:56:VAL:O       0.44       2.13       6       1         1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:63:MET:SD       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C	1:A:9:TYR:CE1	1:A:65:THR:HG21	0.44	2.47	3	1
1:A:34:LEU:HG       1:A:34:LEU:O       0.44       2.13       6       1         1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:79:ILE:N       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2	1:A:10:VAL:HG11	1:A:61:LYS:HD3	0.44	1.87	4	1
1:A:26:VAL:N       1:A:44:LYS:HG2       0.44       2.28       6       1         1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:47:ALA:HA <td>1:A:13:VAL:HA</td> <td>1:A:56:VAL:O</td> <td>0.44</td> <td>2.13</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:13:VAL:HA	1:A:56:VAL:O	0.44	2.13	6	1
1:A:14:VAL:HG13       1:A:60:VAL:HB       0.44       1.90       1       1         1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:3:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG	1:A:34:LEU:HG	1:A:34:LEU:O	0.44	2.13	6	1
1:A:78:GLU:CG       1:A:79:ILE:N       0.44       2.80       3       1         1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:3:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.32       1       1	1:A:26:VAL:N	1:A:44:LYS:HG2	0.44	2.28	6	1
1:A:71:THR:O       1:A:72:LYS:O       0.44       2.36       4       2         1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:14:VAL:HG13	1:A:60:VAL:HB	0.44	1.90	1	1
1:A:16:ASP:C       1:A:16:ASP:OD1       0.44       2.56       5       2         1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:78:GLU:CG	1:A:79:ILE:N	0.44	2.80	3	1
1:A:10:VAL:HG22       1:A:26:VAL:HG11       0.44       1.88       6       1         1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:71:THR:O	1:A:72:LYS:O	0.44	2.36	4	2
1:A:30:LYS:HG2       1:A:31:LYS:N       0.44       2.27       6       1         1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:9:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:16:ASP:C	1:A:16:ASP:OD1	0.44	2.56	5	2
1:A:59:ILE:O       1:A:79:ILE:HG23       0.44       2.13       3       1         1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:10:VAL:HG22	1:A:26:VAL:HG11	0.44	1.88	6	1
1:A:17:LYS:CB       1:A:55:LYS:O       0.44       2.65       4       1         1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:30:LYS:HG2	1:A:31:LYS:N	0.44	2.27	6	1
1:A:14:VAL:CG1       1:A:60:VAL:HB       0.44       2.43       1       1         1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:59:ILE:O	1:A:79:ILE:HG23	0.44	2.13	3	1
1:A:9:TYR:CE2       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.06       3       1         1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:17:LYS:CB	1:A:55:LYS:O	0.44	2.65	4	1
1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:14:VAL:CG1	1:A:60:VAL:HB	0.44	2.43	1	1
1:A:49:ASP:OD1       1:A:49:ASP:N       0.44       2.50       6       1         1:A:63:MET:SD       1:A:74:PHE:CD2       0.44       3.10       5       1         1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:9:TYR:CE2	1:A:74:PHE:CD2	0.44	3.06	3	1
1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:49:ASP:OD1	1:A:49:ASP:N	0.44	2.50	6	1
1:A:13:VAL:O       1:A:57:GLY:C       0.44       2.56       2       1         1:A:25:LEU:HG       1:A:44:LYS:HB2       0.44       1.90       1       1         1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:63:MET:SD	1:A:74:PHE:CD2	0.44	3.10	5	1
1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:13:VAL:O	1:A:57:GLY:C	0.44	2.56	2	1
1:A:22:ILE:C       1:A:47:ALA:HA       0.44       2.32       1       1         1:A:21:THR:CG2       1:A:49:ASP:CG       0.44       2.86       6       1	1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:HB2	0.44	1.90	1	1
1:A:21:THR:CG2 1:A:49:ASP:CG 0.44 2.86 6 1	1:A:22:ILE:C	1:A:47:ALA:HA	0.44	2.32		1
	1:A:21:THR:CG2	1:A:49:ASP:CG	0.44	2.86		1
1.11.11. VIII.O   1.11.40.11110.O   0.TT   4.00   U   1	1:A:14:VAL:O	1:A:23:THR:C	0.44	2.56	6	1



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:25:LEU:C	1:A:45:TYR:CD1	0.44	2.91	5	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:GLU:HB3	0.44	2.47	2	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:45:TYR:N	0.44	2.28	1	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:VAL:N	0.44	2.28	1	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:LYS:HG2	0.44	2.13	4	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:77:VAL:CB	0.44	2.42	4	1
1:A:77:VAL:O	1:A:78:GLU:HG3	0.44	2.13	4	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ASP:CG	0.44	2.56	6	1
1:A:63:MET:HB2	1:A:74:PHE:HB2	0.44	1.90	5	1
1:A:59:ILE:O	1:A:80:VAL:CG1	0.44	2.65	5	1
1:A:52:ASN:O	1:A:53:GLU:CD	0.44	2.57	2	1
1:A:60:VAL:O	1:A:61:LYS:HB3	0.44	2.12	2	1
1:A:48:HIS:O	1:A:48:HIS:CD2	0.44	2.71	3	1
1:A:61:LYS:HG3	1:A:79:ILE:CG2	0.44	2.43	3	1
1:A:12:ARG:N	1:A:25:LEU:O	0.43	2.51	4	1
1:A:9:TYR:CE1	1:A:62:ILE:HG23	0.43	2.45	4	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:44:LYS:HB3	0.43	2.43	6	1
1:A:34:LEU:HA	1:A:37:LYS:O	0.43	2.13	6	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:49:ASP:OD1	0.43	2.58	6	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:77:VAL:HB	0.43	1.90	5	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:45:TYR:HB3	0.43	2.39	5	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:40:LYS:HB3	0.43	2.13	2	1
1:A:63:MET:HG2	1:A:76:LEU:HB2	0.43	1.89	2	2
1:A:23:THR:OG1	1:A:46:LYS:HG2	0.43	2.13	1	1
1:A:60:VAL:HG13	1:A:78:GLU:CA	0.43	2.43	3	1
1:A:70:ALA:O	1:A:71:THR:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:41:TYR:CD1	0.43	2.48	6	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:45:TYR:HD1	0.43	2.26	5	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:SER:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:53:GLU:OE1	1:A:53:GLU:HA	0.43	2.12	3	1
1:A:10:VAL:N	1:A:45:TYR:HE2	0.43	2.07	6	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:61:LYS:O	0.43	2.14	6	2
1:A:37:LYS:O	1:A:39:VAL:HG12	0.43	2.14	5	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:49:ASP:O	0.43	2.71	3	1
1:A:68:LEU:O	1:A:69:SER:C	0.43	2.57	5	1
1:A:27:GLU:C	1:A:28:THR:CG2	0.43	2.83	2	1
1:A:64:GLU:CD	1:A:64:GLU:O	0.43	2.56	2	1
1:A:44:LYS:N	1:A:45:TYR:CE2	0.43	2.85	1	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:HIS:HB2	0.43	2.12	4	1
1:A:53:GLU:O	1:A:55:LYS:HG2	0.43	2.14	4	1
1:A:61:LYS:HB2	1:A:78:GLU:C	0.43	2.34	4	1
	1.11.10.010.0	0.10	C 1: 1		



Continued from previous page...

Atom 1		Clash(Å)	Distance ( & )	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\text{\AA})$	Worst	Total
1:A:29:TYR:CE2	1:A:39:VAL:HG11	0.43	2.47	5	1
1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:CG	0.43	2.85	5	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:75:ARG:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:50:GLU:O	1:A:50:GLU:HG3	0.43	2.12	1	1
1:A:22:ILE:CG2	1:A:23:THR:N	0.43	2.82	3	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:38:ARG:HB3	0.43	2.43	3	1
1:A:15:SER:HA	1:A:22:ILE:O	0.43	2.14	6	1
1:A:81:GLU:OE1	1:A:81:GLU:CA	0.43	2.66	5	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:54:ALA:CB	0.43	2.66	2	1
1:A:63:MET:O	1:A:74:PHE:C	0.43	2.57	3	1
1:A:54:ALA:O	1:A:55:LYS:HG3	0.43	2.14	4	1
1:A:13:VAL:O	1:A:56:VAL:C	0.43	2.56	6	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:LEU:HG	0.43	2.13	1	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:HIS:HB3	0.43	2.14	1	1
1:A:7:LYS:HB2	1:A:63:MET:SD	0.43	2.53	3	1
1:A:43:LYS:C	1:A:44:LYS:HG2	0.43	2.34	4	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:53:GLU:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:18:MET:CG	1:A:18:MET:O	0.43	2.67	5	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:75:ARG:HG3	0.43	1.91	5	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:26:VAL:CG2	0.43	2.96	2	1
1:A:77:VAL:O	1:A:78:GLU:HG2	0.43	2.13	2	1
1:A:62:ILE:CG2	1:A:76:LEU:HB3	0.43	2.43	1	1
1:A:20:LYS:C	1:A:21:THR:CG2	0.43	2.86	4	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:49:ASP:N	0.43	2.27	6	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:76:LEU:O	0.43	2.12	6	1
1:A:59:ILE:HG21	1:A:80:VAL:CG1	0.43	2.44	6	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:43:LYS:CD	0.43	2.96	5	1
1:A:50:GLU:OE1	1:A:50:GLU:C	0.43	2.57	5	1
1:A:49:ASP:HB2	1:A:54:ALA:HB2	0.43	1.91	2	1
1:A:17:LYS:H	1:A:48:HIS:N	0.43	2.12	1	1
1:A:52:ASN:C	1:A:53:GLU:HG2	0.43	2.34	3	1
1:A:63:MET:HA	1:A:75:ARG:CA	0.43	2.44	5	2
1:A:27:GLU:HB3	1:A:41:TYR:HB3	0.43	1.91	5	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:15:SER:O	0.43	2.13	1	1
1:A:72:LYS:O	1:A:73:ARG:HB2	0.43	2.13	3	1
1:A:7:LYS:HB3	1:A:65:THR:HA	0.42	1.90	4	1
1:A:9:TYR:N	1:A:63:MET:HG3	0.42	2.28	6	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:81:GLU:HB2	0.42	1.91	6	1
1:A:71:THR:O	1:A:72:LYS:CB	0.42	2.65	5	1
1:A:47:ALA:HA	1:A:74:PHE:CZ	0.42	2.49	2	1
	in the state of th	1	Í.		



 $Continued\ from\ previous\ page...$ 

Atom 1		Clash ( Å )	Distance(A)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HG11	0.42	1.91	4	1
1:A:52:ASN:O	1:A:53:GLU:C	0.42	2.56	6	1
1:A:61:LYS:HB2	1:A:77:VAL:CB	0.42	2.43	6	1
1:A:60:VAL:HG22	1:A:78:GLU:CD	0.42	2.35	3	1
1:A:42:SER:OG	1:A:42:SER:O	0.42	2.37	4	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:HG23	0.42	1.91	4	1
1:A:60:VAL:HG23	1:A:80:VAL:HG13	0.42	1.90	4	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:61:LYS:CD	0.42	2.96	4	1
1:A:15:SER:CB	1:A:56:VAL:CG1	0.42	2.94	5	1
1:A:21:THR:HG1	1:A:48:HIS:HA	0.42	1.73	5	1
1:A:9:TYR:CD2	1:A:45:TYR:HE2	0.42	2.32	5	1
1:A:11:GLY:C	1:A:60:VAL:CG1	0.42	2.79	2	1
1:A:26:VAL:O	1:A:45:TYR:CZ	0.42	2.72	5	1
1:A:69:SER:O	1:A:70:ALA:O	0.42	2.38	2	1
1:A:62:ILE:HD12	1:A:74:PHE:HB2	0.42	1.91	3	1
1:A:7:LYS:C	1:A:8:VAL:HG23	0.42	2.34	3	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:77:VAL:CG1	0.42	2.97	4	2
1:A:26:VAL:HG23	1:A:45:TYR:HE1	0.42	1.73	1	1
1:A:31:LYS:HA	1:A:39:VAL:CG1	0.42	2.43	4	1
1:A:7:LYS:HA	1:A:7:LYS:CE	0.42	2.45	6	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:56:VAL:HA	0.42	1.92	5	1
1:A:61:LYS:CD	1:A:77:VAL:HG12	0.42	2.45	5	1
1:A:81:GLU:O	1:A:81:GLU:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:81:GLU:O	1:A:81:GLU:HG3	0.42	2.14	5	1
1:A:23:THR:HG22	1:A:24:VAL:HG12	0.42	1.91	1	1
1:A:32:HIS:HE2	1:A:36:GLY:N	0.42	2.13	3	1
1:A:49:ASP:CA	1:A:53:GLU:OE2	0.42	2.68	3	1
1:A:34:LEU:O	1:A:36:GLY:N	0.42	2.52	6	1
1:A:36:GLY:O	1:A:37:LYS:HD2	0.42	2.15	6	1
1:A:6:ARG:CG	1:A:6:ARG:NH1	0.42	2.80	2	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:46:LYS:C	0.42	2.57	1	1
1:A:61:LYS:C	1:A:62:ILE:HG13	0.42	2.35	1	1
1:A:21:THR:CB	1:A:48:HIS:CD2	0.42	3.02	4	1
1:A:62:ILE:CA	1:A:75:ARG:C	0.42	2.89	6	1
1:A:17:LYS:HA	1:A:48:HIS:HA	0.42	1.91	1	1
1:A:76:LEU:CD1	1:A:77:VAL:H	0.42	2.27	1	1
1:A:43:LYS:O	1:A:45:TYR:CE1	0.42	2.72	5	1
1:A:18:MET:CE	1:A:18:MET:HA	0.42	2.45	1	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:25:LEU:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:6:ARG:O	1:A:7:LYS:C	0.41	2.57	4	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:57:GLY:N	0.41	2.29	5	1
- : <b>-</b>					



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
		` ′	,	Worst	Total
1:A:76:LEU:HG	1:A:77:VAL:N	0.41	2.30	1	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:62:ILE:HD11	0.41	2.15	1	1
1:A:22:ILE:O	1:A:46:LYS:CA	0.41	2.68	3	1
1:A:63:MET:C	1:A:64:GLU:HG2	0.41	2.34	3	1
1:A:41:TYR:O	1:A:42:SER:HB3	0.41	2.14	4	1
1:A:26:VAL:H	1:A:43:LYS:CA	0.41	2.29	4	1
1:A:42:SER:OG	1:A:43:LYS:N	0.41	2.53	5	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:GLU:N	0.41	2.30	1	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:38:ARG:O	0.41	2.16	3	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:36:GLY:HA2	0.41	2.50	3	1
1:A:35:TYR:C	1:A:37:LYS:N	0.41	2.74	6	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:O	0.41	2.39	5	1
1:A:17:LYS:HB2	1:A:55:LYS:O	0.41	2.15	2	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:44:LYS:CB	0.41	2.98	1	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:30:LYS:HB3	0.41	2.50	3	1
1:A:8:VAL:H	1:A:63:MET:HB2	0.41	1.73	3	1
1:A:79:ILE:CG1	1:A:80:VAL:N	0.41	2.83	3	1
1:A:11:GLY:N	1:A:61:LYS:CA	0.41	2.73	6	1
1:A:11:GLY:N	1:A:24:VAL:CG2	0.41	2.83	1	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ILE:CG1	0.41	2.69	1	1
1:A:43:LYS:O	1:A:44:LYS:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:80:VAL:O	0.41	2.14	4	1
1:A:65:THR:HG23	1:A:74:PHE:CA	0.41	2.46	4	1
1:A:66:ARG:O	1:A:67:PRO:O	0.41	2.38	4	1
1:A:28:THR:OG1	1:A:29:TYR:N	0.41	2.52	5	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:60:VAL:C	0.41	2.36	5	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:79:ILE:CA	0.41	2.46	5	1
1:A:27:GLU:HB2	1:A:42:SER:OG	0.41	2.16	1	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:60:VAL:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:9:TYR:OH	1:A:45:TYR:HB3	0.41	2.16	4	1
1:A:28:THR:O	1:A:41:TYR:HA	0.41	2.16	6	1
1:A:64:GLU:HG3	1:A:74:PHE:C	0.41	2.36	6	1
1:A:73:ARG:C	1:A:74:PHE:CG	0.41	2.93	6	1
1:A:29:TYR:O	1:A:39:VAL:HG21	0.41	2.16	3	1
1:A:70:ALA:O	1:A:71:THR:HB	0.41	2.15	3	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HG11	0.41	1.85	4	1
1:A:71:THR:O	1:A:72:LYS:HB2	0.41	2.15	5	1
1:A:22:ILE:C	1:A:23:THR:OG1	0.41	2.55	2	1
1:A:24:VAL:HB	1:A:60:VAL:HG11	0.41	1.93	2	1
1:A:28:THR:HG23	1:A:40:LYS:CB	0.41	2.44	1	1
1:A:15:SER:HA	1:A:22:ILE:CB	0.41	2.46	3	1
		J. 11	C + i 1		



Continued from previous page...

Continued from pre		Clash (Å)	D:=t====( % )	Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}( ext{Å})$	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Worst	Total
1:A:28:THR:HG23	1:A:41:TYR:O	0.41	2.16	3	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HG21	0.41	1.91	6	2
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ILE:HG13	0.41	2.14	6	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:45:TYR:O	0.41	2.15	3	1
1:A:36:GLY:O	1:A:37:LYS:CD	0.41	2.68	6	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:39:VAL:HB	0.41	2.50	6	1
1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:HG2	0.41	2.36	6	1
1:A:61:LYS:HD3	1:A:78:GLU:O	0.41	2.16	5	1
1:A:6:ARG:O	1:A:7:LYS:HG3	0.41	2.15	2	1
1:A:15:SER:HA	1:A:47:ALA:HB1	0.41	1.93	1	1
1:A:62:ILE:HG21	1:A:74:PHE:CE2	0.41	2.51	1	1
1:A:64:GLU:HG3	1:A:75:ARG:H	0.41	1.76	3	1
1:A:61:LYS:HD2	1:A:77:VAL:HB	0.41	1.92	4	1
1:A:23:THR:H	1:A:47:ALA:N	0.41	2.13	2	1
1:A:15:SER:O	1:A:23:THR:CB	0.40	2.65	6	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:44:LYS:CG	0.40	2.45	6	1
1:A:18:MET:O	1:A:19:ASP:CB	0.40	2.68	5	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:44:LYS:HA	0.40	2.45	1	1
1:A:18:MET:HG3	1:A:20:LYS:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:62:ILE:CG2	0.40	2.46	5	1
1:A:40:LYS:C	1:A:41:TYR:CD1	0.40	2.95	5	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:80:VAL:HG13	0.40	1.94	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:65:THR:HA	0.40	2.16	5	1
1:A:63:MET:HG3	1:A:75:ARG:C	0.40	2.37	2	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:HB	0.40	2.15	1	1
1:A:15:SER:HA	1:A:22:ILE:CG2	0.40	2.41	3	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:75:ARG:C	0.40	2.37	6	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:37:LYS:O	0.40	2.75	5	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:40:LYS:H	0.40	2.29	5	1
1:A:26:VAL:CB	1:A:45:TYR:CE1	0.40	3.04	5	1
1:A:15:SER:O	1:A:47:ALA:CB	0.40	2.69	1	1
1:A:60:VAL:HA	1:A:79:ILE:HG22	0.40	1.93	1	1
1:A:25:LEU:HB2	1:A:44:LYS:HD2	0.40	1.93	3	1
1:A:51:HIS:C	1:A:52:ASN:OD1	0.40	2.60	4	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:45:TYR:C	0.40	2.34	6	1
1:A:25:LEU:HG	1:A:44:LYS:HB3	0.40	1.93	6	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:25:LEU:HB2	0.40	1.93	5	1
1:A:29:TYR:C	1:A:41:TYR:O	0.40	2.60	2	1
1:A:51:HIS:O	1:A:52:ASN:HB3	0.40	2.16	2	1
1:A:27:GLU:HB3	1:A:41:TYR:C	0.40	2.35	1	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:56:VAL:HA	0.40	2.46	1	1
		1	1	1	



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:59:ILE:O	1:A:59:ILE:HG23	0.40	2.16	4	1
1:A:7:LYS:HB3	1:A:65:THR:CA	0.40	2.46	4	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:80:VAL:CG1	0.40	2.46	4	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:48:HIS:HA	0.40	2.17	5	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:77:VAL:HB	0.40	2.46	5	1
1:A:8:VAL:CA	1:A:63:MET:CB	0.40	2.99	2	1
1:A:39:VAL:HG22	1:A:41:TYR:N	0.40	2.32	3	1
1:A:27:GLU:CB	1:A:43:LYS:H	0.40	2.29	3	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	78/81 (96%)	18±1 (22±2%)	16±3 (20±4%)	45±3 (58±4%)	0 0
All	All	468/486 (96%)	105 (22%)	93 (20%)	270 (58%)	0 0

All 69 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	77	VAL	6
1	A	21	THR	6
1	A	22	ILE	6
1	A	10	VAL	6
1	A	40	LYS	6
1	A	25	LEU	6
1	A	63	MET	6
1	A	79	ILE	6
1	A	34	LEU	6
1	A	41	TYR	6
1	A	23	THR	6
1	A	14	VAL	6
1	A	8	VAL	6
1	A	9	TYR	6



Continued from previous page...

Mol         Chain         Res         Type         N           1         A         26         VAL           1         A         42         SER           1         A         80         VAL           1         A         47         ALA           1         A         39         VAL           1         A         24         VAL	Models (Total)  6  6  6  6
1     A     42     SER       1     A     80     VAL       1     A     47     ALA       1     A     39     VAL	6
1 A 80 VAL 1 A 47 ALA 1 A 39 VAL	6
1 A 47 ALA 1 A 39 VAL	
1 A 39 VAL	()
	6
	6
1 A 28 THR	6
1 A 62 ILE	6
1 A 44 LYS	5
1 A 32 HIS	5
1 A 18 MET	5
1 A 17 LYS	5
1 A 76 LEU	5
1 A 54 ALA	5
1 A 27 GLU	5
1 A 56 VAL	5
1 A 55 LYS	5
1 A 29 TYR	5
1 A 51 HIS	5
1 A 57 GLY	4
1 A 13 VAL	4
1 A 72 LYS	4
1 A 78 GLU	4
1 A 81 GLU	4
1 A 58 ASP	4
1 A 33 PRO	4
1 A 61 LYS	4
1 A 16 ASP	4
1 A 12 ARG	3
1 A 35 TYR	3
1 A 70 ALA	3
1 A 83 ALA	3
1 A 7 LYS	3
1 A 19 ASP	3
1 A 60 VAL	2
1 A 67 PRO	2
1 A 6 ARG	2
1 A 38 ARG	2
1 A 69 SER	2
1 A 64 GLU	2
1 A 30 LYS	2
1 A 43 LYS	2



Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	SER	1
1	A	37	LYS	1
1	A	46	LYS	1
1	A	45	TYR	1
1	A	71	THR	1
1	A	49	ASP	1
1	A	31	LYS	1
1	A	36	GLY	1
1	A	68	LEU	1
1	A	73	ARG	1
1	A	75	ARG	1
1	A	65	THR	1
1	A	48	HIS	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	71/74 (96%)	41±3 (58±5%)	30±3 (42±5%)	0 4
All	All	426/444 (96%)	247 (58%)	179 (42%)	0 4

All 59 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	25	LEU	6
1	A	78	GLU	6
1	A	30	LYS	6
1	A	16	ASP	6
1	A	32	HIS	5
1	A	24	VAL	5
1	A	31	LYS	5
1	A	50	GLU	5
1	A	79	ILE	5
1	A	15	SER	4
1	A	12	ARG	4
1	A	17	LYS	4



Continued from previous page...

Mol	nued fron Chain	m Res	Type	Models (Total)
1	A	13	VAL	4
1	A	37	LYS	4
1	A	76	LEU	4
1	A	63	MET	4
1	A	74	PHE	4
1	A	64	GLU	4
1	A	81	GLU	4
1	A	20	LYS	4
1	A	53	GLU	3
1	A	44	LYS	3
1	A	19	ASP	3
1	A	10	VAL	3
1	A	45	TYR	3
1	A	40	LYS	3
1	A	75	ARG	3
1	A	34	LEU	3
1	A	7	LYS	3
1	A	6	ARG	3
1	A	22	ILE	3
1	A	68	LEU	3
1	A	69	SER	3
1	A	65	THR	3
1	A	62	ILE	3
1	A	60	VAL	2
1	A	18	MET	2
1	A	35	TYR	2
1	A	58	ASP	2
1	A	71	THR	2
1	A	49	ASP	2
1	A	52	ASN	2
1	A	38	ARG	2
1	A	9	TYR	2
1	A	73	ARG	2
1	A	55	LYS	2
1	A	39	VAL	2
1	A	26	VAL	2
1	A	48	HIS	2
1	A	56	VAL	2
1	A	51	HIS	2
1	A	28	THR	2
1	A	21	THR	1
1	A	46	LYS	1



Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	GLU	1
1	A	80	VAL	1
1	A	72	LYS	1
1	A	66	ARG	1
1	A	82	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 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 (i)

There are no chain breaks in this entry.



# 7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided

