



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:51 pm GMT

PDB ID : 1DDB
Title : STRUCTURE OF MOUSE BID, NMR, 20 STRUCTURES
Authors : McDonnell, J.M.; Fushman, D.; Milliman, C.; Korsmeyer, S.J.; Cowburn, D.
Deposited on : 1999-02-19

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

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : trunk28760
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

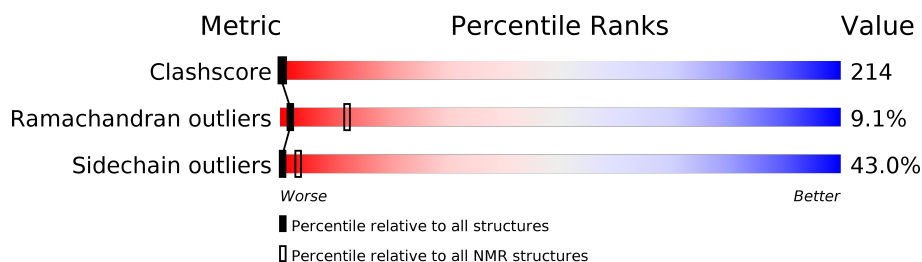
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



| Metric | Whole archive (#Entries) | NMR archive (#Entries) |
|-----------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore | 125131 | 11601 |
| Ramachandran outliers | 121729 | 10391 |
| Sidechain outliers | 121581 | 10367 |

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 195 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 14 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:16-A:40, A:82-A:114, A:124-A:185 (120) | 0.55 | 14 |

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

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

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

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2991 atoms, of which 1455 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (BID).

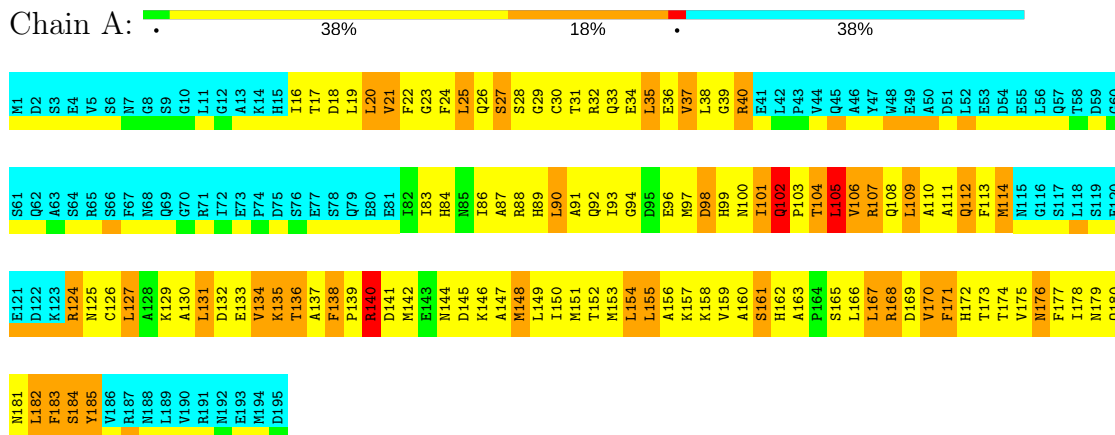
| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|----|-------|
| 1 | A | 195 | Total | C | H | N | O | S | 0 |
| | | | 2991 | 948 | 1455 | 272 | 306 | 10 | |

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



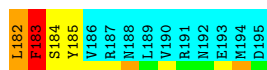
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

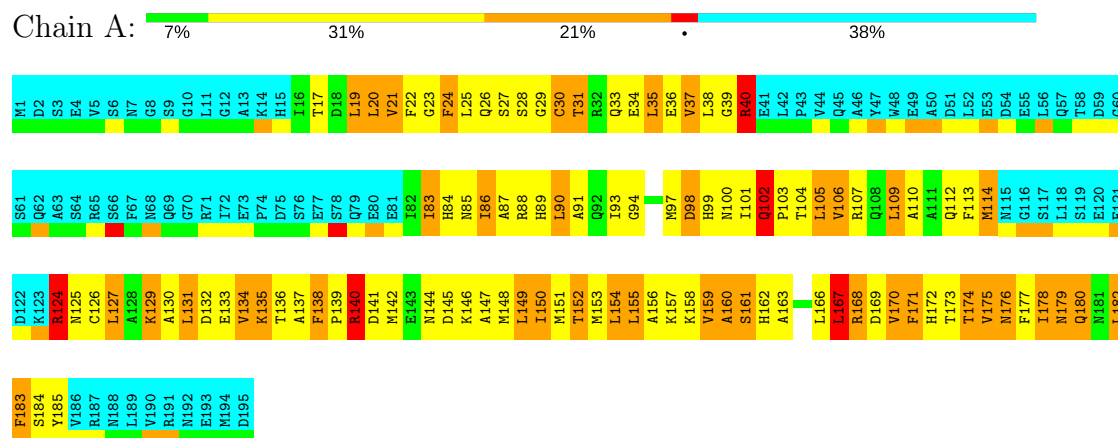
- Molecule 1: PROTEIN (BID)





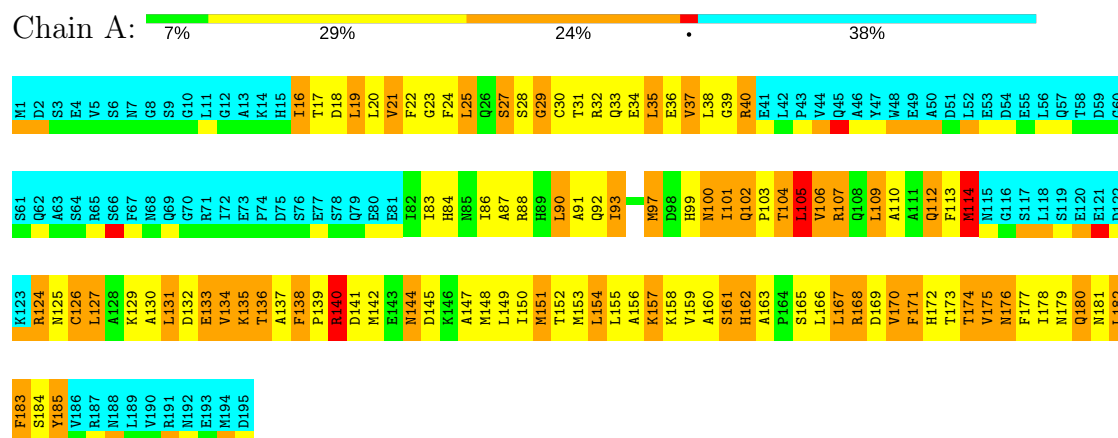
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



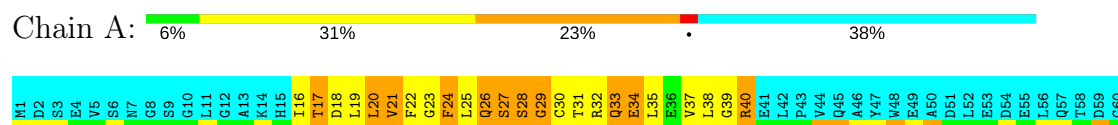
4.2.3 Score per residue for model 3

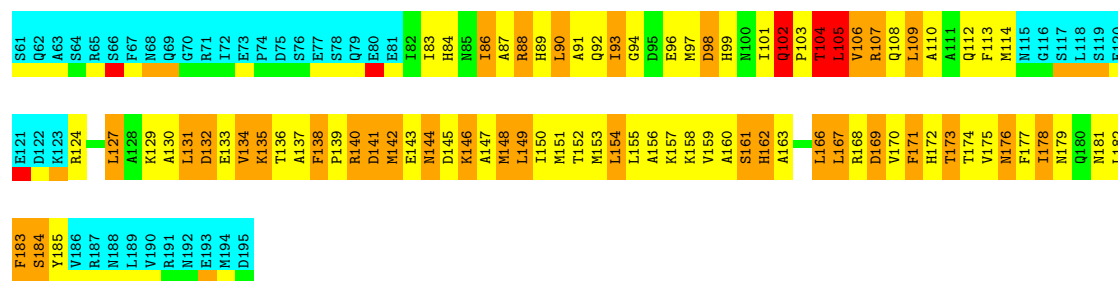
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

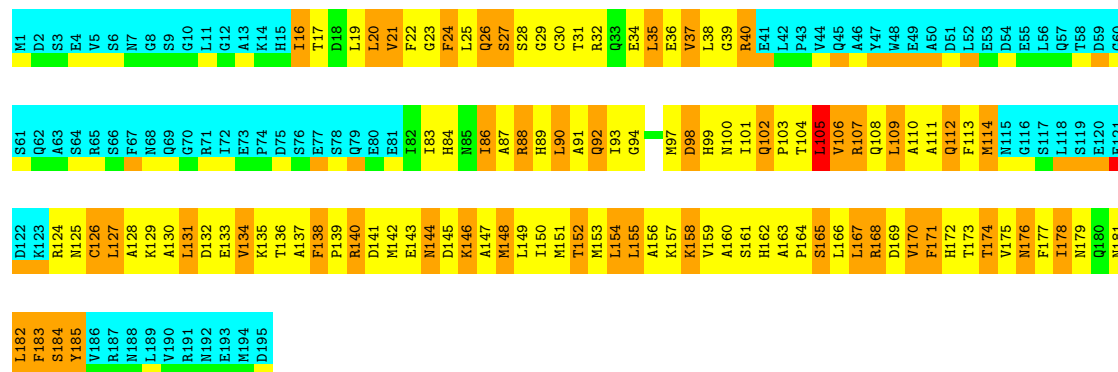




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

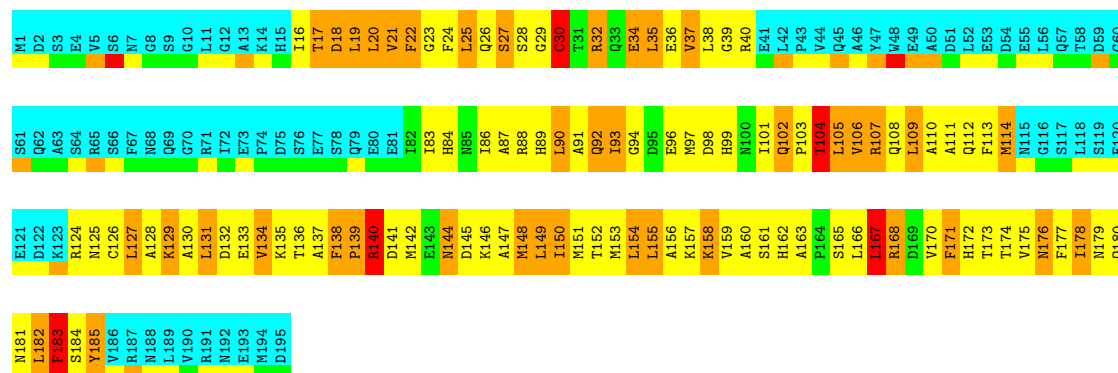
Chain A: 34% 23% 38%



4.2.6 Score per residue for model 6

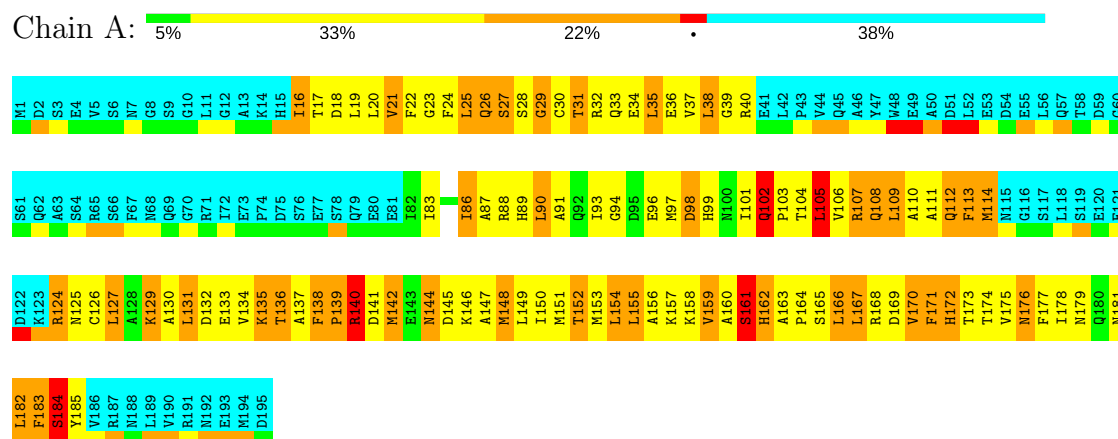
- Molecule 1: PROTEIN (BID)

Chain A: 5% 34% 21% 38%



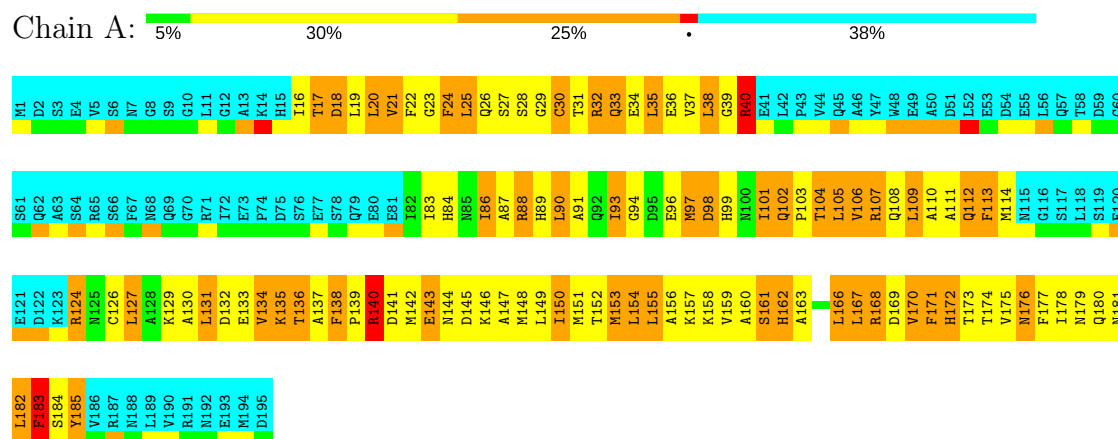
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



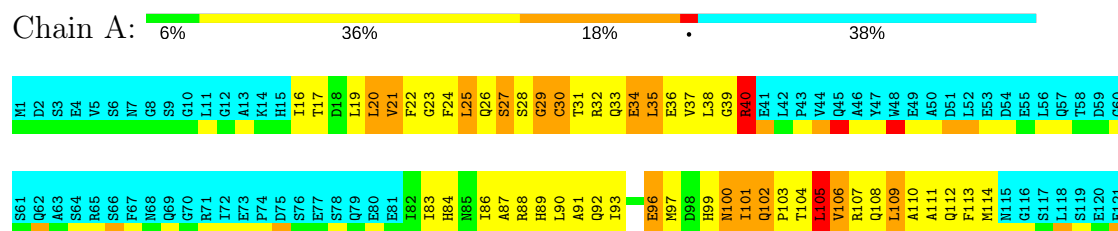
4.2.8 Score per residue for model 8

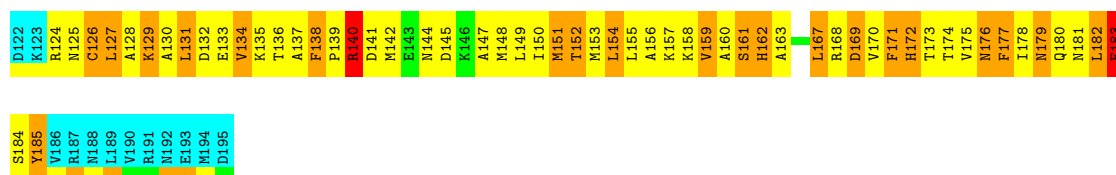
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.9 Score per residue for model 9

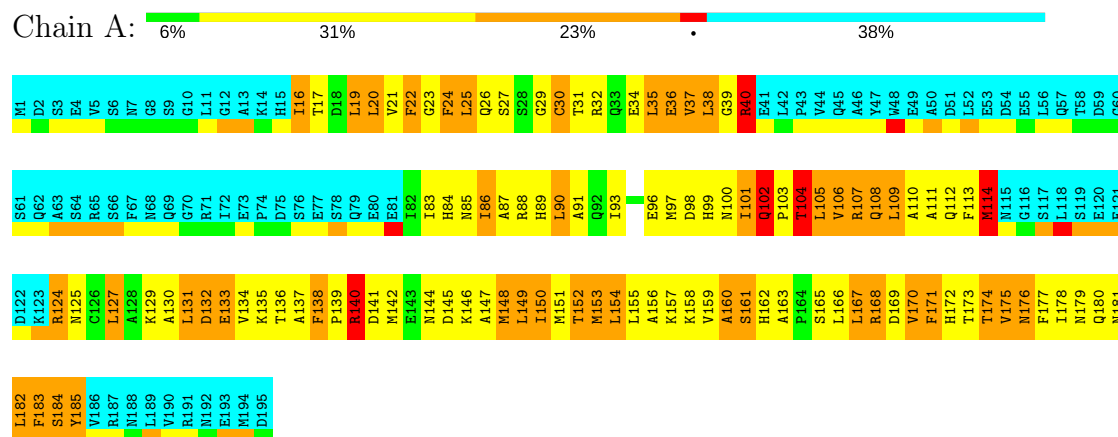
- Molecule 1: PROTEIN (BID)





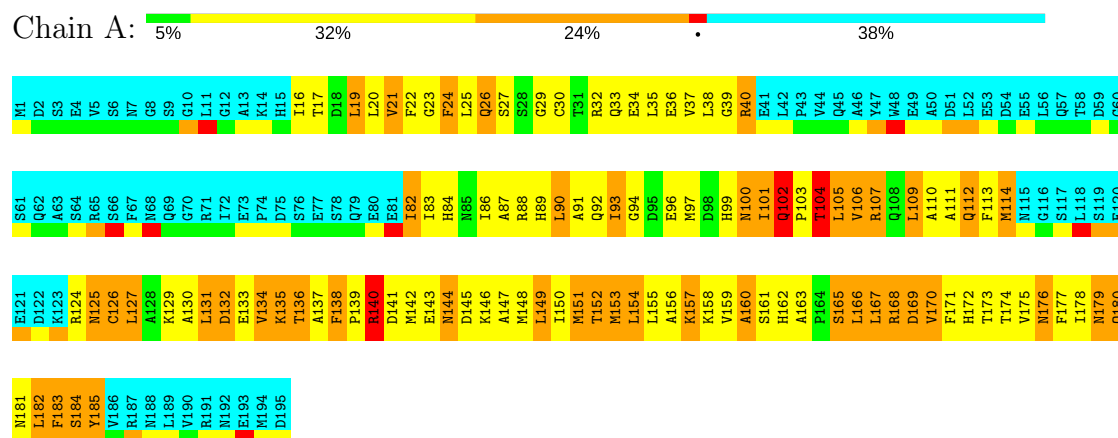
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.11 Score per residue for model 11

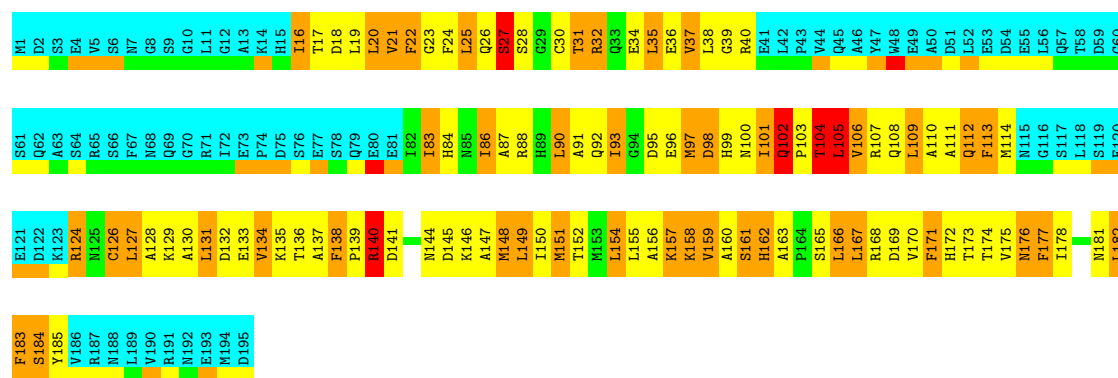
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

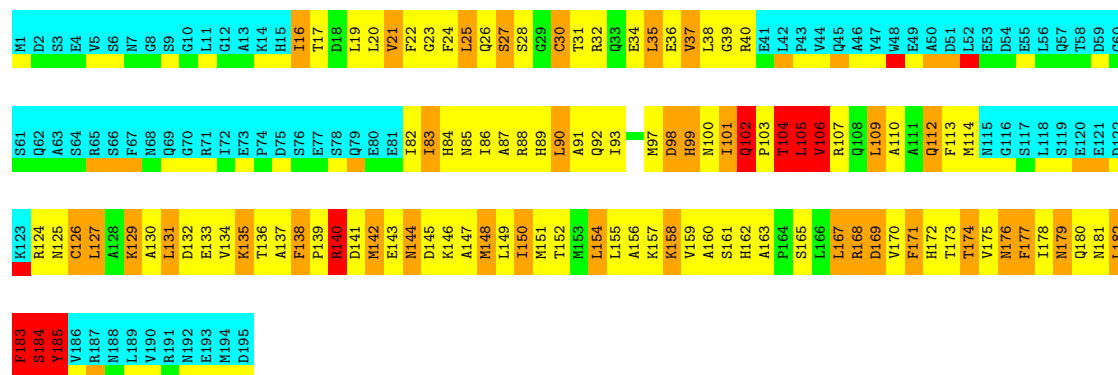




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

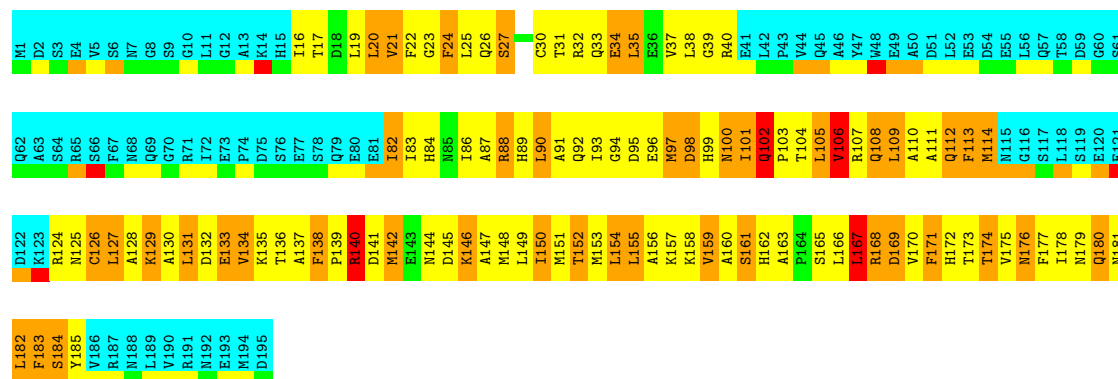
Chain A: 6% 33% 18% 38%



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

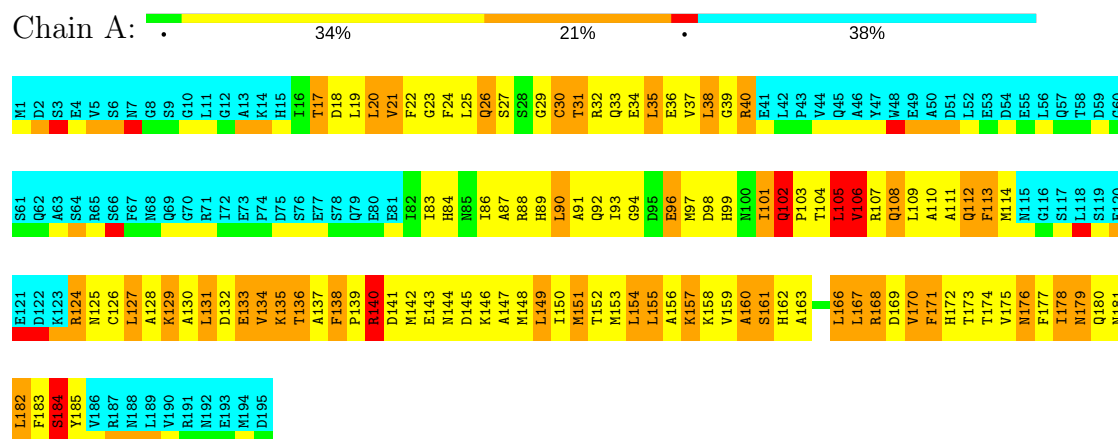
- Molecule 1: PROTEIN (BID)

Chain A: 34% 22% 38%



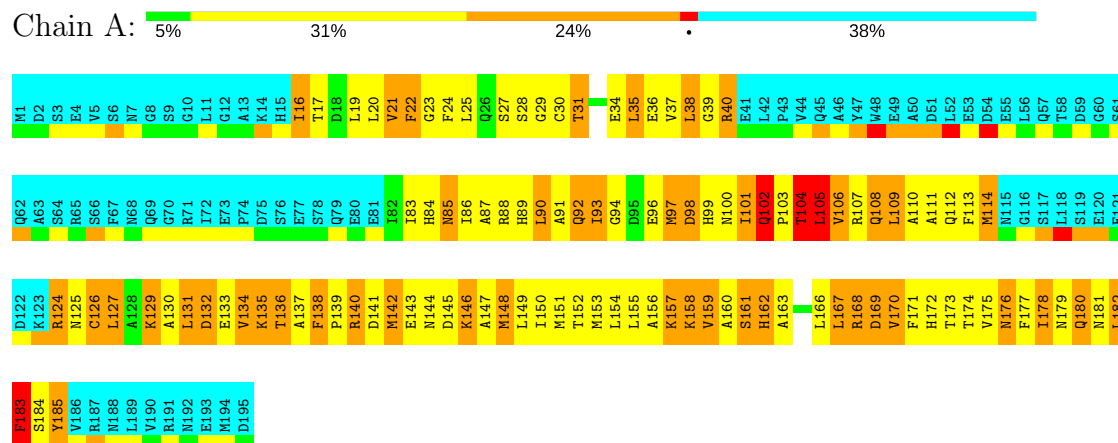
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



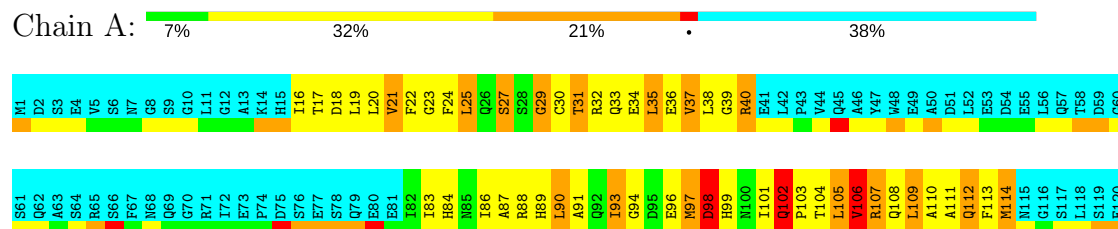
4.2.16 Score per residue for model 16

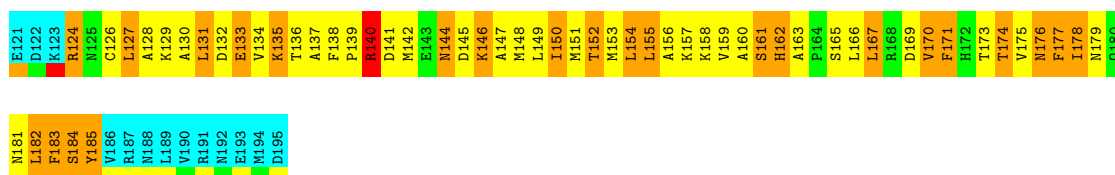
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

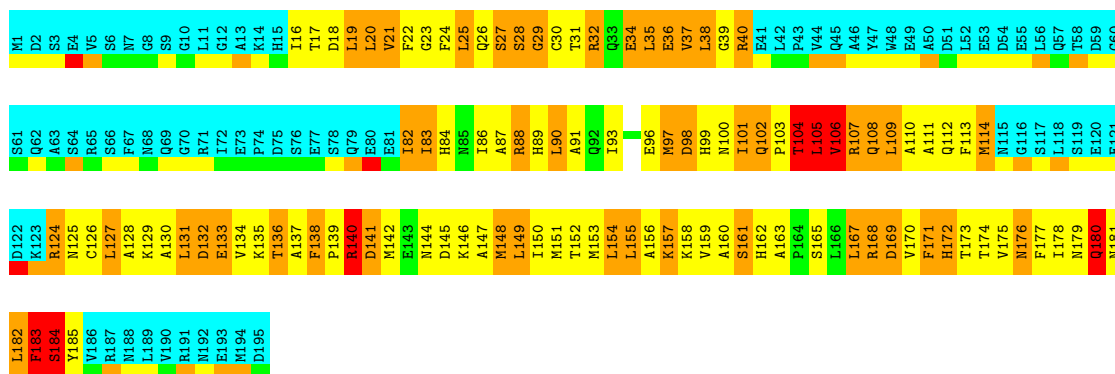




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

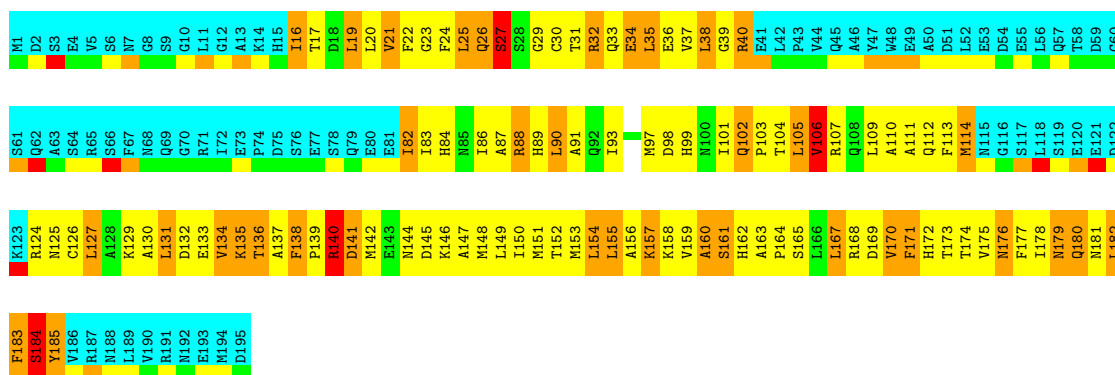
Chain A: . 30% 24% 38%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

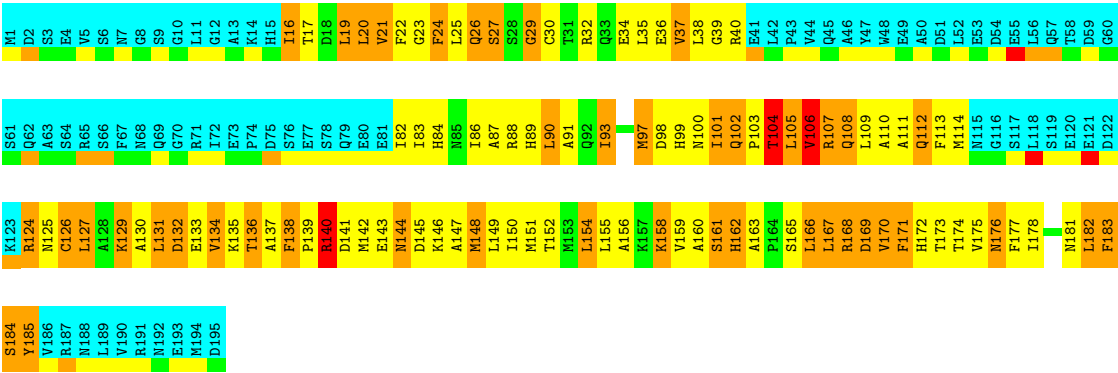
Chain A: 6% 34% 19% 38%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (BID)

Chain A: 8% 30% 23% 38%



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY*.

Of the 1000 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

| Software name | Classification | Version |
|----------------------------|--------------------|---------|
| DYANA | refinement | |
| XWINNMR | structure solution | |
| XEASY | structure solution | |
| DIANA | structure solution | |
| DYANA | structure solution | |
| THE ECEPP LIBRARY WAS USED | structure solution | |

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

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 953 | 946 | 972 | 411±20 |
| All | All | 19060 | 18920 | 19440 | 8229 |

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 214.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:CG | 1.32 | 1.75 | 12 | 18 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:HG3 | 1.28 | 1.20 | 12 | 5 |
| 1:A:152:THR:HG1 | 1:A:173:THR:C | 1.25 | 1.33 | 9 | 1 |
| 1:A:173:THR:C | 1:A:176:ASN:OD1 | 1.25 | 1.74 | 3 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:N | 1.25 | 1.43 | 4 | 13 |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:113:PHE:CD2 | 1.21 | 1.93 | 11 | 20 |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CD2 | 1.20 | 1.72 | 3 | 10 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:CD1 | 1.18 | 1.92 | 7 | 3 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:173:THR:O | 1.16 | 1.59 | 12 | 13 |
| 1:A:24:PHE:CG | 1:A:91:ALA:HB2 | 1.16 | 1.74 | 12 | 20 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:159:VAL:O | 1.14 | 1.65 | 3 | 7 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:160:ALA:N | 1.14 | 1.80 | 11 | 8 |
| 1:A:113:PHE:CD2 | 1:A:130:ALA:HB2 | 1.13 | 1.78 | 7 | 20 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:HG23 | 1.13 | 1.43 | 16 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CE2 | 1.12 | 1.78 | 13 | 11 |
| 1:A:24:PHE:CE2 | 1:A:91:ALA:HA | 1.10 | 1.79 | 10 | 20 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1.10 | 1.14 | 4 | 16 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:OG1 | 1.10 | 1.69 | 13 | 4 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:155:LEU:CD2 | 1.10 | 1.98 | 18 | 11 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:163:ALA:N | 1.09 | 1.83 | 16 | 12 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 1.09 | 1.06 | 6 | 2 |
| 1:A:173:THR:O | 1:A:176:ASN:ND2 | 1.09 | 1.84 | 3 | 14 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:173:THR:C | 1.09 | 1.90 | 9 | 4 |
| 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:138:PHE:CZ | 1.08 | 1.83 | 16 | 8 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:HG12 | 1.08 | 1.48 | 18 | 18 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CD2 | 1.07 | 1.82 | 7 | 18 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:HD11 | 1.07 | 1.81 | 2 | 10 |
| 1:A:134:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:CE2 | 1.07 | 1.84 | 1 | 15 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1.07 | 1.77 | 20 | 16 |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:171:PHE:CE1 | 1.07 | 1.84 | 3 | 20 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:CE1 | 1.07 | 1.84 | 8 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:HD11 | 1.06 | 1.18 | 2 | 6 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:CD2 | 1.06 | 1.85 | 16 | 6 |
| 1:A:159:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG23 | 1.06 | 1.24 | 8 | 1 |
| 1:A:155:LEU:H | 1:A:155:LEU:HD22 | 1.05 | 1.00 | 6 | 3 |
| 1:A:155:LEU:HD23 | 1:A:173:THR:HG22 | 1.05 | 1.18 | 5 | 3 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:181:ASN:N | 1.05 | 1.88 | 15 | 12 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1.05 | 1.80 | 15 | 16 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:CE2 | 1.05 | 1.85 | 12 | 6 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:CD | 1.05 | 1.94 | 20 | 17 |
| 1:A:155:LEU:HB2 | 1:A:173:THR:HG21 | 1.05 | 1.28 | 5 | 20 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:CD2 | 1.04 | 1.81 | 15 | 16 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:150:ILE:CG2 | 1.04 | 1.81 | 4 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG22 | 1:A:175:VAL:HG13 | 1.04 | 1.26 | 8 | 15 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:154:LEU:HG | 1.04 | 1.52 | 16 | 4 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:C | 1.04 | 1.73 | 11 | 7 |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CE1 | 1.04 | 1.87 | 6 | 8 |
| 1:A:155:LEU:HD22 | 1:A:155:LEU:H | 1.04 | 0.98 | 19 | 8 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:130:ALA:HB2 | 1.04 | 1.86 | 12 | 19 |
| 1:A:159:VAL:HG23 | 1:A:163:ALA:HB3 | 1.04 | 1.13 | 2 | 1 |
| 1:A:154:LEU:C | 1:A:154:LEU:HD22 | 1.03 | 1.74 | 12 | 9 |
| 1:A:134:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:CD2 | 1.03 | 1.89 | 4 | 13 |
| 1:A:159:VAL:HG13 | 1:A:163:ALA:HB3 | 1.03 | 1.09 | 5 | 6 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1.03 | 1.88 | 1 | 6 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1.03 | 1.09 | 9 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:HB2 | 1.03 | 1.12 | 18 | 11 |
| 1:A:160:ALA:CB | 1:A:170:VAL:HG11 | 1.02 | 1.84 | 17 | 6 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CZ | 1.02 | 1.88 | 5 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1.02 | 1.89 | 2 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:155:LEU:HD11 | 1.02 | 1.88 | 8 | 5 |
| 1:A:154:LEU:HD22 | 1:A:154:LEU:C | 1.02 | 1.72 | 4 | 7 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:CD2 | 1.02 | 1.84 | 5 | 15 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:171:PHE:CD2 | 1.01 | 1.90 | 14 | 16 |
| 1:A:159:VAL:HG13 | 1:A:163:ALA:CB | 1.01 | 1.84 | 13 | 6 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:109:LEU:HD12 | 1.01 | 1.74 | 4 | 4 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:HD21 | 1.01 | 1.91 | 13 | 9 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:163:ALA:HB3 | 1.01 | 1.83 | 13 | 4 |
| 1:A:155:LEU:CB | 1:A:173:THR:HG21 | 1.01 | 1.83 | 6 | 20 |
| 1:A:178:ILE:HD13 | 1:A:179:ASN:N | 1.01 | 1.70 | 15 | 4 |
| 1:A:159:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:CG2 | 1.00 | 1.86 | 8 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1.00 | 1.89 | 3 | 2 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:127:LEU:HD22 | 1.00 | 1.55 | 5 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:36:GLU:N | 1.00 | 1.71 | 13 | 5 |
| 1:A:171:PHE:O | 1:A:174:THR:OG1 | 1.00 | 1.80 | 3 | 2 |
| 1:A:182:LEU:O | 1:A:183:PHE:O | 1.00 | 1.80 | 18 | 5 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:HG23 | 1.00 | 1.57 | 9 | 5 |
| 1:A:154:LEU:HD12 | 1:A:155:LEU:N | 1.00 | 1.70 | 2 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.99 | 1.32 | 8 | 1 |
| 1:A:107:ARG:O | 1:A:111:ALA:HB2 | 0.99 | 1.57 | 7 | 8 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:N | 0.99 | 1.95 | 6 | 7 |
| 1:A:21:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.98 | 1.35 | 13 | 18 |
| 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:36:GLU:N | 0.98 | 1.70 | 3 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:134:VAL:HA | 0.98 | 1.35 | 13 | 12 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:CB | 0.98 | 2.12 | 13 | 10 |
| 1:A:159:VAL:HG13 | 1:A:163:ALA:O | 0.98 | 1.58 | 10 | 8 |
| 1:A:21:VAL:HG21 | 1:A:171:PHE:O | 0.98 | 1.59 | 10 | 2 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:162:HIS:N | 0.98 | 1.96 | 12 | 9 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:HG23 | 0.98 | 1.57 | 2 | 8 |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.98 | 1.94 | 2 | 6 |
| 1:A:159:VAL:CG2 | 1:A:163:ALA:HB3 | 0.98 | 1.87 | 2 | 4 |
| 1:A:167:LEU:HD13 | 1:A:168:ARG:H | 0.97 | 1.11 | 16 | 8 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.97 | 1.93 | 3 | 2 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.97 | 1.33 | 5 | 8 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HB2 | 0.97 | 1.90 | 18 | 10 |
| 1:A:155:LEU:CD2 | 1:A:155:LEU:H | 0.97 | 1.71 | 19 | 7 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.97 | 1.60 | 1 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:HB2 | 0.97 | 1.58 | 13 | 6 |
| 1:A:155:LEU:CG | 1:A:173:THR:HG21 | 0.97 | 1.90 | 18 | 12 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:163:ALA:N | 0.96 | 1.98 | 8 | 13 |
| 1:A:155:LEU:H | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.96 | 1.73 | 6 | 4 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.96 | 1.36 | 19 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:91:ALA:HB2 | 0.96 | 1.96 | 8 | 20 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:CD2 | 0.96 | 1.95 | 12 | 6 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.96 | 1.37 | 5 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:134:VAL:CA | 0.95 | 1.91 | 16 | 10 |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:113:PHE:CE2 | 0.95 | 2.19 | 12 | 19 |
| 1:A:32:ARG:O | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.95 | 1.61 | 1 | 6 |
| 1:A:159:VAL:HG11 | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.95 | 1.38 | 4 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:134:VAL:HG23 | 0.95 | 1.32 | 5 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:CG | 0.95 | 1.97 | 2 | 13 |
| 1:A:17:THR:HG21 | 1:A:179:ASN:N | 0.95 | 1.76 | 3 | 8 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.95 | 1.58 | 7 | 3 |
| 1:A:33:GLN:O | 1:A:37:VAL:HG23 | 0.95 | 1.61 | 19 | 8 |
| 1:A:160:ALA:HB3 | 1:A:170:VAL:HG11 | 0.95 | 1.34 | 18 | 4 |
| 1:A:155:LEU:HG | 1:A:173:THR:CG2 | 0.94 | 1.92 | 18 | 11 |
| 1:A:167:LEU:N | 1:A:167:LEU:HD12 | 0.94 | 1.76 | 18 | 5 |
| 1:A:151:MET:HA | 1:A:154:LEU:HD23 | 0.94 | 1.38 | 16 | 4 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.94 | 1.97 | 15 | 4 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:155:LEU:HD21 | 0.94 | 1.96 | 4 | 9 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:132:ASP:N | 0.94 | 1.76 | 18 | 2 |
| 1:A:155:LEU:HD22 | 1:A:155:LEU:N | 0.94 | 1.78 | 19 | 7 |
| 1:A:151:MET:HB2 | 1:A:177:PHE:CZ | 0.94 | 1.97 | 11 | 7 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.94 | 1.63 | 12 | 2 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:ILE:HG22 | 0.94 | 1.62 | 17 | 4 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.94 | 1.98 | 9 | 1 |
| 1:A:155:LEU:HG | 1:A:173:THR:HG21 | 0.94 | 1.38 | 18 | 7 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:110:ALA:N | 0.93 | 2.30 | 4 | 18 |
| 1:A:156:ALA:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 0.93 | 1.39 | 13 | 19 |
| 1:A:106:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.93 | 1.97 | 4 | 7 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:167:LEU:O | 0.93 | 1.62 | 20 | 11 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.93 | 1.99 | 5 | 2 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:154:LEU:HD21 | 0.93 | 1.37 | 2 | 2 |
| 1:A:22:PHE:O | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.93 | 1.63 | 3 | 4 |
| 1:A:21:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.93 | 1.41 | 10 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:N | 0.92 | 1.79 | 1 | 20 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:176:ASN:HB2 | 0.92 | 1.39 | 15 | 4 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:CB | 0.92 | 1.94 | 18 | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:106:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CZ | 0.92 | 1.99 | 18 | 19 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:SD | 0.92 | 2.04 | 15 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG23 | 1:A:163:ALA:CB | 0.92 | 1.93 | 2 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CB | 1:A:171:PHE:CD2 | 0.92 | 2.52 | 12 | 19 |
| 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CZ | 0.92 | 2.00 | 19 | 20 |
| 1:A:155:LEU:N | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.92 | 1.80 | 6 | 3 |
| 1:A:171:PHE:O | 1:A:174:THR:HG23 | 0.91 | 1.65 | 17 | 5 |
| 1:A:175:VAL:HA | 1:A:178:ILE:HD12 | 0.91 | 1.39 | 6 | 11 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:110:ALA:H | 0.91 | 1.77 | 6 | 2 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:N | 0.91 | 2.04 | 5 | 9 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 0.91 | 1.96 | 8 | 10 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:167:LEU:C | 0.91 | 1.86 | 17 | 17 |
| 1:A:128:ALA:O | 1:A:131:LEU:HD23 | 0.91 | 1.65 | 12 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.91 | 2.00 | 11 | 5 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:173:THR:HA | 0.91 | 1.43 | 17 | 11 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:135:LYS:CE | 0.91 | 1.96 | 18 | 1 |
| 1:A:83:ILE:O | 1:A:86:ILE:HG22 | 0.90 | 1.66 | 15 | 15 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.90 | 1.96 | 10 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:175:VAL:HG13 | 0.90 | 1.42 | 6 | 4 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.90 | 2.01 | 10 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.90 | 1.39 | 4 | 4 |
| 1:A:167:LEU:HD22 | 1:A:168:ARG:N | 0.90 | 1.82 | 20 | 6 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:134:VAL:HG23 | 0.90 | 1.97 | 6 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.90 | 1.39 | 15 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.90 | 2.55 | 8 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:148:MET:SD | 0.90 | 2.05 | 20 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.90 | 1.43 | 19 | 5 |
| 1:A:155:LEU:HD23 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.89 | 1.97 | 5 | 3 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:114:MET:N | 0.89 | 2.40 | 14 | 20 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.89 | 1.42 | 9 | 5 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:177:PHE:CG | 0.89 | 2.54 | 20 | 7 |
| 1:A:21:VAL:HB | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.89 | 1.97 | 10 | 19 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.89 | 2.03 | 6 | 3 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HB2 | 0.89 | 1.66 | 16 | 16 |
| 1:A:154:LEU:O | 1:A:154:LEU:HD22 | 0.89 | 1.68 | 7 | 10 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:136:THR:OG1 | 0.89 | 1.90 | 4 | 6 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:OG1 | 0.89 | 1.90 | 19 | 3 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:N | 0.89 | 1.83 | 5 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:38:LEU:HD12 | 0.89 | 1.43 | 6 | 7 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:135:LYS:HZ2 | 0.89 | 1.28 | 13 | 1 |
| 1:A:152:THR:HG23 | 1:A:174:THR:HA | 0.88 | 1.44 | 7 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:134:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.88 | 2.01 | 17 | 2 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.88 | 1.68 | 7 | 3 |
| 1:A:131:LEU:HD22 | 1:A:131:LEU:O | 0.88 | 1.68 | 13 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:133:GLU:HB2 | 0.88 | 1.43 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:N | 0.88 | 1.84 | 12 | 5 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.88 | 1.97 | 8 | 13 |
| 1:A:154:LEU:HD22 | 1:A:154:LEU:O | 0.88 | 1.69 | 6 | 6 |
| 1:A:21:VAL:CG2 | 1:A:171:PHE:O | 0.88 | 2.21 | 17 | 19 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:CG | 0.88 | 1.99 | 20 | 9 |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:38:LEU:HD12 | 0.87 | 1.43 | 1 | 10 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.87 | 2.57 | 16 | 10 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:HB | 0.87 | 1.69 | 3 | 9 |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:OG1 | 0.87 | 1.69 | 10 | 4 |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:91:ALA:HB2 | 0.87 | 2.04 | 7 | 20 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:O | 0.87 | 1.69 | 16 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:134:VAL:CG2 | 0.87 | 1.99 | 7 | 3 |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.87 | 2.05 | 5 | 8 |
| 1:A:148:MET:HE3 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.87 | 2.04 | 12 | 3 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.87 | 2.58 | 3 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.86 | 1.47 | 5 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:20:LEU:O | 0.86 | 1.70 | 9 | 3 |
| 1:A:21:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.86 | 1.29 | 8 | 18 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.86 | 2.57 | 2 | 11 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:154:LEU:HD21 | 0.86 | 2.00 | 2 | 4 |
| 1:A:144:ASN:ND2 | 1:A:145:ASP:H | 0.86 | 1.68 | 3 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HG23 | 1:A:97:MET:SD | 0.86 | 2.10 | 14 | 2 |
| 1:A:112:GLN:OE1 | 1:A:113:PHE:N | 0.86 | 2.08 | 20 | 5 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:HB3 | 0.85 | 1.48 | 9 | 12 |
| 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:169:ASP:CB | 0.85 | 1.99 | 10 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 0.85 | 2.01 | 6 | 13 |
| 1:A:154:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.85 | 2.02 | 14 | 11 |
| 1:A:131:LEU:HD22 | 1:A:131:LEU:C | 0.85 | 1.92 | 13 | 2 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.85 | 1.72 | 13 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:106:VAL:HG21 | 0.85 | 1.44 | 8 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HG22 | 1:A:153:MET:SD | 0.85 | 2.11 | 5 | 3 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:CA | 0.85 | 2.01 | 2 | 6 |
| 1:A:107:ARG:O | 1:A:111:ALA:CB | 0.85 | 2.24 | 7 | 12 |
| 1:A:134:VAL:HG11 | 1:A:151:MET:HG2 | 0.85 | 1.45 | 12 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.85 | 1.72 | 5 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.85 | 1.48 | 15 | 1 |
| 1:A:181:ASN:OD1 | 1:A:182:LEU:HD22 | 0.85 | 1.70 | 12 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:106:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:CG | 0.85 | 2.06 | 19 | 7 |
| 1:A:154:LEU:HD11 | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.84 | 1.48 | 2 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:112:GLN:NE2 | 0.84 | 1.87 | 11 | 2 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:134:VAL:HG21 | 0.84 | 1.49 | 7 | 2 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:183:PHE:CG | 0.84 | 2.27 | 12 | 3 |
| 1:A:106:VAL:HG13 | 1:A:151:MET:SD | 0.84 | 2.12 | 7 | 1 |
| 1:A:138:PHE:C | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.84 | 1.93 | 6 | 2 |
| 1:A:140:ARG:N | 1:A:144:ASN:CB | 0.84 | 2.41 | 8 | 14 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:148:MET:SD | 0.84 | 2.10 | 1 | 2 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:107:ARG:N | 0.84 | 1.85 | 13 | 14 |
| 1:A:127:LEU:HG | 1:A:173:THR:HG23 | 0.84 | 1.48 | 5 | 2 |
| 1:A:113:PHE:C | 1:A:113:PHE:CD1 | 0.84 | 2.51 | 8 | 12 |
| 1:A:152:THR:HG21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 0.84 | 1.49 | 4 | 9 |
| 1:A:140:ARG:C | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.83 | 2.30 | 3 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CG | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.83 | 2.02 | 13 | 20 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:174:THR:O | 0.83 | 1.96 | 5 | 6 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:101:ILE:HG23 | 0.83 | 1.72 | 13 | 4 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:N | 0.83 | 2.11 | 9 | 17 |
| 1:A:93:ILE:HD11 | 1:A:153:MET:CE | 0.83 | 2.03 | 19 | 2 |
| 1:A:38:LEU:CB | 1:A:171:PHE:CG | 0.83 | 2.61 | 15 | 17 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:87:ALA:HA | 0.83 | 1.49 | 3 | 12 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:130:ALA:CB | 0.83 | 2.60 | 12 | 17 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.83 | 2.08 | 8 | 4 |
| 1:A:154:LEU:HG | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.83 | 1.51 | 16 | 1 |
| 1:A:173:THR:O | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.83 | 1.74 | 16 | 19 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:CB | 0.83 | 2.04 | 13 | 13 |
| 1:A:137:ALA:HB3 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.83 | 2.08 | 2 | 17 |
| 1:A:173:THR:CA | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.83 | 2.26 | 3 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:20:LEU:C | 0.83 | 1.94 | 9 | 3 |
| 1:A:148:MET:HG3 | 1:A:149:LEU:N | 0.82 | 1.88 | 20 | 11 |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.82 | 1.49 | 13 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:HG | 0.82 | 1.48 | 11 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.82 | 1.50 | 17 | 8 |
| 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:134:VAL:HA | 0.82 | 1.49 | 5 | 2 |
| 1:A:21:VAL:N | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.82 | 2.42 | 20 | 19 |
| 1:A:182:LEU:O | 1:A:184:SER:N | 0.82 | 2.13 | 19 | 12 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:N | 0.82 | 1.89 | 20 | 15 |
| 1:A:114:MET:CG | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.82 | 2.05 | 3 | 1 |
| 1:A:102:GLN:H | 1:A:103:PRO:HD3 | 0.82 | 1.35 | 19 | 20 |
| 1:A:151:MET:CA | 1:A:154:LEU:HD23 | 0.82 | 2.04 | 17 | 3 |
| 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:107:ARG:HB3 | 0.82 | 1.51 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:178:ILE:HG23 | 1:A:182:LEU:O | 0.81 | 1.75 | 14 | 2 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:154:LEU:CG | 0.81 | 2.27 | 16 | 4 |
| 1:A:179:ASN:OD1 | 1:A:180:GLN:N | 0.81 | 2.13 | 2 | 2 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:HG23 | 0.81 | 1.75 | 1 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:127:LEU:HA | 0.81 | 2.09 | 13 | 20 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:148:MET:HA | 0.81 | 1.49 | 20 | 12 |
| 1:A:178:ILE:HD13 | 1:A:179:ASN:H | 0.81 | 1.36 | 2 | 3 |
| 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:101:ILE:O | 0.81 | 1.76 | 1 | 3 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.81 | 1.48 | 12 | 3 |
| 1:A:152:THR:O | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.81 | 2.28 | 5 | 3 |
| 1:A:134:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.81 | 2.64 | 12 | 13 |
| 1:A:148:MET:HE3 | 1:A:182:LEU:HD11 | 0.81 | 1.52 | 2 | 1 |
| 1:A:126:CYS:SG | 1:A:127:LEU:HD23 | 0.81 | 2.16 | 2 | 5 |
| 1:A:183:PHE:CG | 1:A:183:PHE:O | 0.81 | 2.33 | 17 | 6 |
| 1:A:93:ILE:HG22 | 1:A:153:MET:CE | 0.81 | 2.05 | 1 | 2 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:CG2 | 0.81 | 2.29 | 7 | 11 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:HG22 | 0.81 | 1.74 | 15 | 4 |
| 1:A:167:LEU:HD13 | 1:A:168:ARG:N | 0.81 | 1.91 | 12 | 10 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.80 | 1.52 | 8 | 4 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.80 | 2.49 | 11 | 6 |
| 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:C | 0.80 | 1.96 | 9 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:C | 0.80 | 1.97 | 10 | 2 |
| 1:A:152:THR:O | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.80 | 1.76 | 1 | 11 |
| 1:A:174:THR:O | 1:A:178:ILE:HD12 | 0.80 | 1.77 | 13 | 3 |
| 1:A:21:VAL:N | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.80 | 1.91 | 8 | 6 |
| 1:A:22:PHE:O | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.80 | 1.74 | 8 | 6 |
| 1:A:35:LEU:O | 1:A:35:LEU:HD22 | 0.80 | 1.77 | 17 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:C | 0.80 | 1.97 | 16 | 1 |
| 1:A:155:LEU:CG | 1:A:173:THR:CG2 | 0.80 | 2.60 | 17 | 11 |
| 1:A:182:LEU:HD13 | 1:A:182:LEU:N | 0.80 | 1.89 | 11 | 7 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.80 | 2.06 | 16 | 1 |
| 1:A:138:PHE:CD1 | 1:A:138:PHE:N | 0.80 | 2.49 | 6 | 10 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.79 | 2.64 | 18 | 6 |
| 1:A:155:LEU:CD2 | 1:A:173:THR:HG22 | 0.79 | 2.06 | 5 | 3 |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:HB2 | 0.79 | 1.53 | 6 | 7 |
| 1:A:131:LEU:N | 1:A:177:PHE:CZ | 0.79 | 2.50 | 8 | 15 |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:171:PHE:CZ | 0.79 | 2.11 | 11 | 17 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:CG | 0.79 | 2.13 | 9 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:127:LEU:HA | 0.79 | 2.13 | 8 | 10 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:CA | 0.79 | 2.07 | 4 | 11 |
| 1:A:114:MET:O | 1:A:114:MET:CG | 0.79 | 2.31 | 10 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:138:PHE:N | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.79 | 2.49 | 2 | 8 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:133:GLU:CB | 0.79 | 2.08 | 14 | 9 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:N | 0.79 | 2.15 | 6 | 14 |
| 1:A:183:PHE:CG | 1:A:184:SER:N | 0.79 | 2.50 | 18 | 4 |
| 1:A:114:MET:O | 1:A:114:MET:HG3 | 0.79 | 1.76 | 10 | 1 |
| 1:A:144:ASN:O | 1:A:147:ALA:HB3 | 0.78 | 1.78 | 6 | 18 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:HB3 | 0.78 | 1.55 | 15 | 4 |
| 1:A:151:MET:HB2 | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.78 | 2.12 | 12 | 15 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:HG | 0.78 | 1.55 | 11 | 3 |
| 1:A:35:LEU:C | 1:A:35:LEU:HD22 | 0.78 | 1.98 | 17 | 2 |
| 1:A:181:ASN:ND2 | 1:A:182:LEU:HD22 | 0.78 | 1.93 | 8 | 3 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:109:LEU:HD13 | 0.78 | 1.98 | 17 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:170:VAL:CG1 | 0.78 | 2.08 | 11 | 3 |
| 1:A:154:LEU:C | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.78 | 2.51 | 12 | 7 |
| 1:A:20:LEU:HA | 1:A:87:ALA:HB1 | 0.78 | 1.54 | 9 | 19 |
| 1:A:35:LEU:C | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.78 | 1.99 | 5 | 1 |
| 1:A:34:GLU:CG | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.78 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:154:LEU:C | 1:A:154:LEU:HD12 | 0.78 | 1.99 | 2 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:151:MET:HE3 | 0.78 | 1.79 | 20 | 11 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.77 | 2.00 | 12 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:167:LEU:O | 0.77 | 1.78 | 19 | 5 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.77 | 2.08 | 16 | 4 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:39:GLY:HA3 | 0.77 | 2.12 | 2 | 13 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.77 | 2.67 | 2 | 2 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:173:THR:O | 0.77 | 1.79 | 20 | 7 |
| 1:A:153:MET:SD | 1:A:153:MET:O | 0.77 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HB3 | 1:A:175:VAL:HG22 | 0.77 | 1.56 | 8 | 4 |
| 1:A:160:ALA:CB | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.77 | 2.09 | 7 | 7 |
| 1:A:140:ARG:CB | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.77 | 2.08 | 6 | 6 |
| 1:A:177:PHE:HB3 | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.77 | 1.54 | 19 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.77 | 2.14 | 6 | 1 |
| 1:A:167:LEU:H | 1:A:167:LEU:HD12 | 0.77 | 1.38 | 18 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:CG2 | 0.77 | 2.09 | 19 | 9 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:O | 0.77 | 1.78 | 16 | 1 |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.77 | 1.54 | 5 | 5 |
| 1:A:127:LEU:N | 1:A:127:LEU:HD13 | 0.77 | 1.94 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HZ | 1:A:155:LEU:HD11 | 0.77 | 1.40 | 5 | 5 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:160:ALA:H | 0.77 | 1.39 | 7 | 5 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.77 | 1.79 | 20 | 7 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HG | 0.77 | 2.15 | 13 | 4 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.77 | 2.14 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:HG12 | 0.76 | 1.80 | 8 | 2 |
| 1:A:152:THR:HG23 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.76 | 2.14 | 18 | 5 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.76 | 1.79 | 10 | 8 |
| 1:A:159:VAL:HG22 | 1:A:163:ALA:HB3 | 0.76 | 1.58 | 10 | 6 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:174:THR:N | 0.76 | 2.18 | 9 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:151:MET:HG2 | 0.76 | 1.56 | 6 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CE2 | 1:A:91:ALA:CA | 0.76 | 2.67 | 10 | 19 |
| 1:A:18:ASP:O | 1:A:21:VAL:HG23 | 0.76 | 1.81 | 8 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:133:GLU:CB | 0.76 | 2.11 | 12 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:107:ARG:HB2 | 0.76 | 1.56 | 3 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:182:LEU:HD22 | 0.76 | 1.80 | 11 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.76 | 2.16 | 16 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:35:LEU:O | 0.76 | 1.79 | 2 | 1 |
| 1:A:182:LEU:N | 1:A:182:LEU:HD13 | 0.76 | 1.92 | 20 | 7 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:CG | 0.76 | 2.63 | 6 | 1 |
| 1:A:21:VAL:O | 1:A:171:PHE:CZ | 0.76 | 2.39 | 8 | 11 |
| 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:THR:HG23 | 0.76 | 2.00 | 19 | 1 |
| 1:A:154:LEU:CD2 | 1:A:154:LEU:C | 0.75 | 2.50 | 4 | 9 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:174:THR:HA | 0.75 | 1.58 | 3 | 5 |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:CG | 0.75 | 2.01 | 12 | 7 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:174:THR:HA | 0.75 | 2.11 | 7 | 10 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.75 | 2.40 | 12 | 15 |
| 1:A:154:LEU:HG | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.75 | 1.57 | 17 | 2 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:CD | 0.75 | 2.35 | 6 | 8 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:101:ILE:HG22 | 0.75 | 1.80 | 10 | 8 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:151:MET:HB2 | 0.75 | 1.82 | 9 | 8 |
| 1:A:174:THR:N | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.75 | 2.18 | 3 | 1 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:CG1 | 0.75 | 2.35 | 9 | 18 |
| 1:A:154:LEU:CG | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.75 | 2.11 | 17 | 2 |
| 1:A:144:ASN:O | 1:A:147:ALA:N | 0.75 | 2.20 | 7 | 20 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CD2 | 0.75 | 2.63 | 3 | 7 |
| 1:A:38:LEU:C | 1:A:171:PHE:CD2 | 0.75 | 2.60 | 11 | 7 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.75 | 2.12 | 15 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CG | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.75 | 2.70 | 17 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:148:MET:CA | 0.75 | 2.11 | 20 | 5 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:39:GLY:CA | 0.75 | 2.69 | 16 | 7 |
| 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.75 | 2.16 | 19 | 20 |
| 1:A:155:LEU:CD2 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.75 | 2.65 | 5 | 3 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.75 | 2.17 | 13 | 5 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:131:LEU:C | 0.75 | 2.02 | 1 | 4 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:NE2 | 0.74 | 2.20 | 12 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:91:ALA:CA | 0.74 | 2.70 | 11 | 19 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.74 | 1.82 | 10 | 3 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:106:VAL:HG21 | 0.74 | 2.11 | 8 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:133:GLU:HB3 | 0.74 | 1.56 | 20 | 9 |
| 1:A:159:VAL:C | 1:A:163:ALA:H | 0.74 | 1.85 | 7 | 6 |
| 1:A:124:ARG:HB2 | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.74 | 1.57 | 15 | 1 |
| 1:A:97:MET:HB3 | 1:A:101:ILE:HD12 | 0.74 | 1.57 | 4 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CG | 0.74 | 2.17 | 19 | 13 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:176:ASN:ND2 | 0.74 | 1.96 | 15 | 7 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:CB | 0.74 | 2.35 | 12 | 20 |
| 1:A:148:MET:HA | 1:A:151:MET:HG2 | 0.74 | 1.60 | 9 | 10 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:135:LYS:NZ | 0.74 | 1.96 | 13 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:107:ARG:HB2 | 0.74 | 1.58 | 5 | 1 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.74 | 1.82 | 12 | 8 |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:83:ILE:CG2 | 0.74 | 2.12 | 12 | 2 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:127:LEU:HG | 0.74 | 1.82 | 11 | 13 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.74 | 2.41 | 9 | 13 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:CG1 | 0.74 | 2.36 | 9 | 2 |
| 1:A:106:VAL:HG23 | 1:A:107:ARG:H | 0.74 | 1.43 | 9 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:CA | 0.74 | 2.13 | 16 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG23 | 1:A:174:THR:OG1 | 0.74 | 1.83 | 10 | 4 |
| 1:A:144:ASN:ND2 | 1:A:145:ASP:N | 0.74 | 2.35 | 3 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CB | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.74 | 2.70 | 20 | 4 |
| 1:A:179:ASN:O | 1:A:180:GLN:O | 0.74 | 2.06 | 18 | 5 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:CG | 0.74 | 2.36 | 20 | 5 |
| 1:A:144:ASN:HD22 | 1:A:144:ASN:N | 0.74 | 1.78 | 5 | 3 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:91:ALA:CB | 0.73 | 2.71 | 19 | 20 |
| 1:A:139:PRO:C | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.73 | 2.04 | 1 | 13 |
| 1:A:175:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:O | 0.73 | 1.81 | 3 | 8 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.73 | 1.83 | 11 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:87:ALA:HA | 0.73 | 1.60 | 12 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:CG | 0.73 | 2.13 | 11 | 5 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:101:ILE:CG2 | 0.73 | 2.35 | 4 | 12 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.73 | 2.71 | 1 | 7 |
| 1:A:173:THR:C | 1:A:176:ASN:CG | 0.73 | 2.47 | 3 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:HD23 | 0.73 | 1.60 | 8 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:HG13 | 0.73 | 1.59 | 16 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG11 | 1:A:166:LEU:HB2 | 0.73 | 1.61 | 10 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG11 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.73 | 1.59 | 8 | 8 |
| 1:A:159:VAL:HG23 | 1:A:163:ALA:O | 0.73 | 1.84 | 8 | 2 |
| 1:A:179:ASN:OD1 | 1:A:179:ASN:C | 0.73 | 2.26 | 2 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.73 | 2.71 | 9 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.73 | 1.83 | 7 | 3 |
| 1:A:113:PHE:CD2 | 1:A:130:ALA:CB | 0.73 | 2.70 | 12 | 5 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:140:ARG:CB | 0.73 | 2.37 | 4 | 9 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:CB | 0.73 | 2.36 | 4 | 20 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:HB3 | 0.73 | 2.14 | 10 | 10 |
| 1:A:167:LEU:N | 1:A:167:LEU:CD1 | 0.73 | 2.51 | 12 | 4 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.73 | 2.36 | 12 | 4 |
| 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:169:ASP:CB | 0.73 | 2.14 | 1 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:91:ALA:CB | 0.73 | 2.72 | 7 | 19 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:CB | 0.73 | 2.37 | 16 | 9 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.73 | 1.61 | 16 | 1 |
| 1:A:167:LEU:CD1 | 1:A:168:ARG:H | 0.73 | 1.97 | 12 | 6 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.73 | 1.38 | 5 | 1 |
| 1:A:137:ALA:HB3 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.72 | 2.20 | 6 | 15 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.72 | 2.58 | 12 | 4 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:HD13 | 0.72 | 1.98 | 7 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.72 | 1.59 | 6 | 2 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.72 | 2.15 | 8 | 7 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:151:MET:SD | 0.72 | 2.47 | 9 | 4 |
| 1:A:107:ARG:O | 1:A:111:ALA:HB3 | 0.72 | 1.85 | 5 | 4 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.72 | 2.13 | 8 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.72 | 1.61 | 11 | 7 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:183:PHE:CD2 | 0.72 | 2.42 | 13 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:135:LYS:HE3 | 0.72 | 1.60 | 18 | 1 |
| 1:A:176:ASN:ND2 | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.72 | 2.57 | 8 | 16 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:CD1 | 0.72 | 2.13 | 9 | 5 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:HB3 | 0.72 | 1.84 | 17 | 10 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.72 | 2.70 | 3 | 15 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:107:ARG:N | 0.72 | 2.53 | 13 | 13 |
| 1:A:86:ILE:C | 1:A:86:ILE:HD12 | 0.72 | 2.04 | 5 | 1 |
| 1:A:140:ARG:N | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.72 | 2.00 | 12 | 13 |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.72 | 2.19 | 3 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:107:ARG:CB | 0.72 | 2.15 | 10 | 4 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:134:VAL:HA | 0.72 | 2.15 | 16 | 7 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:136:THR:HG22 | 0.72 | 1.85 | 20 | 10 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.71 | 1.61 | 10 | 1 |
| 1:A:173:THR:O | 1:A:176:ASN:CG | 0.71 | 2.28 | 3 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.71 | 1.61 | 3 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HG | 0.71 | 2.20 | 18 | 8 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.71 | 1.85 | 4 | 9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:149:LEU:C | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.71 | 2.06 | 18 | 1 |
| 1:A:150:ILE:HG23 | 1:A:153:MET:CE | 0.71 | 2.16 | 16 | 3 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.71 | 2.73 | 5 | 5 |
| 1:A:144:ASN:O | 1:A:147:ALA:CB | 0.71 | 2.38 | 6 | 8 |
| 1:A:147:ALA:HA | 1:A:150:ILE:HD12 | 0.71 | 1.63 | 16 | 3 |
| 1:A:156:ALA:CB | 1:A:170:VAL:HG13 | 0.71 | 2.15 | 20 | 5 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.71 | 2.16 | 5 | 10 |
| 1:A:148:MET:CG | 1:A:149:LEU:N | 0.71 | 2.54 | 18 | 12 |
| 1:A:151:MET:N | 1:A:151:MET:SD | 0.71 | 2.63 | 12 | 5 |
| 1:A:167:LEU:HD12 | 1:A:167:LEU:H | 0.71 | 1.45 | 12 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:127:LEU:CA | 0.71 | 2.74 | 8 | 6 |
| 1:A:156:ALA:HB1 | 1:A:160:ALA:CB | 0.71 | 2.15 | 2 | 1 |
| 1:A:169:ASP:O | 1:A:173:THR:OG1 | 0.70 | 2.09 | 15 | 11 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:HD11 | 0.70 | 2.01 | 5 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.70 | 2.16 | 9 | 6 |
| 1:A:134:VAL:HG11 | 1:A:151:MET:CG | 0.70 | 2.16 | 9 | 4 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HD11 | 0.70 | 2.21 | 14 | 4 |
| 1:A:140:ARG:HB2 | 1:A:144:ASN:CG | 0.70 | 2.05 | 20 | 7 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:174:THR:HA | 0.70 | 1.87 | 10 | 14 |
| 1:A:112:GLN:HG2 | 1:A:113:PHE:N | 0.70 | 2.00 | 5 | 14 |
| 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:167:LEU:HD21 | 0.70 | 1.62 | 8 | 4 |
| 1:A:24:PHE:CG | 1:A:91:ALA:CB | 0.70 | 2.71 | 6 | 20 |
| 1:A:130:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HZ | 0.70 | 1.44 | 7 | 10 |
| 1:A:16:ILE:CG1 | 1:A:183:PHE:CZ | 0.70 | 2.75 | 1 | 2 |
| 1:A:182:LEU:N | 1:A:182:LEU:CD1 | 0.70 | 2.54 | 11 | 3 |
| 1:A:157:LYS:HA | 1:A:161:SER:CB | 0.70 | 2.17 | 16 | 5 |
| 1:A:155:LEU:CB | 1:A:173:THR:CG2 | 0.70 | 2.70 | 17 | 4 |
| 1:A:126:CYS:SG | 1:A:127:LEU:N | 0.70 | 2.65 | 7 | 2 |
| 1:A:151:MET:CB | 1:A:177:PHE:CZ | 0.70 | 2.74 | 9 | 5 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:107:ARG:H | 0.70 | 1.47 | 13 | 7 |
| 1:A:97:MET:SD | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.70 | 2.26 | 6 | 3 |
| 1:A:127:LEU:H | 1:A:127:LEU:HD13 | 0.70 | 1.44 | 5 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.70 | 1.63 | 16 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HZ | 1:A:155:LEU:HD21 | 0.70 | 1.45 | 11 | 5 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:134:VAL:HG23 | 0.70 | 1.64 | 6 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:134:VAL:CG2 | 0.70 | 2.15 | 5 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:39:GLY:HA3 | 0.69 | 2.22 | 3 | 5 |
| 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:84:HIS:ND1 | 0.69 | 2.02 | 6 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:CD | 0.69 | 2.31 | 18 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:151:MET:CE | 0.69 | 2.39 | 12 | 15 |
| 1:A:155:LEU:HB2 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.69 | 2.17 | 17 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:21:VAL:CG1 | 1:A:22:PHE:N | 0.69 | 2.55 | 15 | 19 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:113:PHE:CD2 | 0.69 | 2.22 | 7 | 3 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:HG2 | 0.69 | 1.63 | 20 | 6 |
| 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:169:ASP:HB3 | 0.69 | 1.63 | 10 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CZ | 0.69 | 2.21 | 20 | 8 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.69 | 2.17 | 10 | 5 |
| 1:A:171:PHE:O | 1:A:174:THR:CG2 | 0.69 | 2.41 | 17 | 2 |
| 1:A:160:ALA:HB2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 0.69 | 1.61 | 17 | 3 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:CG1 | 0.69 | 2.75 | 14 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.69 | 2.22 | 15 | 11 |
| 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.69 | 1.46 | 8 | 4 |
| 1:A:178:ILE:HD13 | 1:A:178:ILE:C | 0.69 | 2.08 | 15 | 1 |
| 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:34:GLU:H | 0.69 | 1.46 | 2 | 3 |
| 1:A:93:ILE:HD11 | 1:A:153:MET:HE3 | 0.69 | 1.64 | 19 | 1 |
| 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:PHE:N | 0.69 | 2.01 | 16 | 20 |
| 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:THR:HG22 | 0.69 | 2.08 | 10 | 3 |
| 1:A:106:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.69 | 2.23 | 10 | 5 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:160:ALA:CB | 0.69 | 2.41 | 1 | 7 |
| 1:A:173:THR:O | 1:A:176:ASN:CB | 0.69 | 2.40 | 13 | 11 |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.69 | 2.17 | 16 | 1 |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:152:THR:HG22 | 0.69 | 1.86 | 9 | 4 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:112:GLN:HE22 | 0.69 | 1.46 | 4 | 2 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:148:MET:SD | 0.69 | 2.28 | 9 | 2 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:160:ALA:CB | 0.69 | 2.39 | 10 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:N | 0.69 | 2.03 | 5 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:O | 0.69 | 2.46 | 6 | 6 |
| 1:A:159:VAL:HG11 | 1:A:166:LEU:HD13 | 0.69 | 1.65 | 17 | 1 |
| 1:A:153:MET:SD | 1:A:174:THR:HG22 | 0.69 | 2.28 | 3 | 1 |
| 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:169:ASP:HB2 | 0.69 | 1.64 | 10 | 1 |
| 1:A:127:LEU:CD1 | 1:A:127:LEU:N | 0.69 | 2.56 | 5 | 1 |
| 1:A:21:VAL:O | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.68 | 2.46 | 17 | 11 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.68 | 2.22 | 15 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HB3 | 0.68 | 2.23 | 11 | 3 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:140:ARG:HB2 | 0.68 | 1.88 | 4 | 6 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:HD13 | 0.68 | 2.09 | 15 | 3 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:CG2 | 0.68 | 2.76 | 19 | 3 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:155:LEU:HD21 | 0.68 | 1.88 | 1 | 5 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:CG | 0.68 | 2.19 | 12 | 4 |
| 1:A:176:ASN:CG | 1:A:177:PHE:N | 0.68 | 2.47 | 10 | 19 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:HB | 0.68 | 1.64 | 18 | 9 |
| 1:A:21:VAL:CG2 | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.68 | 2.17 | 8 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:165:SER:O | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.68 | 1.89 | 10 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HB | 1:A:151:MET:SD | 0.68 | 2.29 | 15 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.68 | 2.23 | 12 | 4 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HG22 | 0.68 | 2.23 | 19 | 2 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:HG2 | 0.68 | 2.19 | 6 | 1 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:175:VAL:CG1 | 0.68 | 2.41 | 3 | 11 |
| 1:A:152:THR:HA | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.68 | 1.64 | 2 | 3 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:CG | 0.67 | 2.18 | 16 | 14 |
| 1:A:134:VAL:CG1 | 1:A:151:MET:SD | 0.67 | 2.83 | 15 | 1 |
| 1:A:114:MET:HG2 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.67 | 1.66 | 3 | 1 |
| 1:A:149:LEU:HD12 | 1:A:150:ILE:N | 0.67 | 2.04 | 18 | 1 |
| 1:A:114:MET:HG3 | 1:A:114:MET:O | 0.67 | 1.89 | 14 | 1 |
| 1:A:172:HIS:O | 1:A:176:ASN:CB | 0.67 | 2.43 | 8 | 15 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.67 | 2.72 | 14 | 3 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.67 | 1.87 | 1 | 1 |
| 1:A:152:THR:HG21 | 1:A:177:PHE:CB | 0.67 | 2.19 | 20 | 4 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:CG | 0.67 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:101:ILE:O | 0.67 | 1.89 | 16 | 3 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:CB | 0.67 | 2.43 | 20 | 13 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:160:ALA:HB1 | 0.67 | 2.30 | 13 | 3 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:OE1 | 0.67 | 2.13 | 20 | 2 |
| 1:A:131:LEU:HB2 | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.67 | 1.65 | 19 | 1 |
| 1:A:183:PHE:CD1 | 1:A:183:PHE:C | 0.67 | 2.67 | 8 | 3 |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.67 | 1.65 | 17 | 9 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:151:MET:CG | 0.67 | 2.20 | 13 | 3 |
| 1:A:133:GLU:HA | 1:A:136:THR:HG22 | 0.67 | 1.66 | 17 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:171:PHE:CG | 0.67 | 2.25 | 19 | 2 |
| 1:A:21:VAL:CB | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.67 | 2.72 | 14 | 19 |
| 1:A:17:THR:HG21 | 1:A:179:ASN:CA | 0.67 | 2.19 | 3 | 6 |
| 1:A:130:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:CZ | 0.67 | 2.24 | 5 | 13 |
| 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:20:LEU:O | 0.67 | 1.88 | 18 | 2 |
| 1:A:114:MET:CB | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.67 | 2.20 | 19 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:107:ARG:HD3 | 0.67 | 1.67 | 4 | 1 |
| 1:A:146:LYS:CB | 1:A:185:TYR:OH | 0.67 | 2.42 | 5 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:22:PHE:N | 0.67 | 2.04 | 18 | 18 |
| 1:A:175:VAL:CA | 1:A:178:ILE:HD12 | 0.67 | 2.19 | 6 | 3 |
| 1:A:148:MET:HE3 | 1:A:182:LEU:CD1 | 0.67 | 2.19 | 2 | 1 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:CG | 0.67 | 2.32 | 16 | 8 |
| 1:A:21:VAL:N | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.67 | 2.05 | 2 | 19 |
| 1:A:107:ARG:HH21 | 1:A:108:GLN:CG | 0.67 | 2.03 | 18 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:CE | 0.67 | 2.20 | 11 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:HG2 | 0.67 | 1.89 | 19 | 12 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:160:ALA:HB2 | 0.67 | 1.90 | 13 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:133:GLU:HB3 | 0.67 | 1.67 | 9 | 2 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:168:ARG:N | 0.67 | 2.58 | 18 | 2 |
| 1:A:39:GLY:N | 1:A:171:PHE:CD2 | 0.66 | 2.63 | 11 | 6 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:HB3 | 0.66 | 1.90 | 20 | 7 |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:CB | 0.66 | 2.21 | 6 | 9 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:O | 0.66 | 2.43 | 16 | 2 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:127:LEU:CD2 | 0.66 | 2.44 | 11 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:19:LEU:CB | 0.66 | 2.21 | 7 | 1 |
| 1:A:24:PHE:O | 1:A:91:ALA:CB | 0.66 | 2.44 | 20 | 20 |
| 1:A:35:LEU:O | 1:A:39:GLY:N | 0.66 | 2.28 | 11 | 17 |
| 1:A:139:PRO:CA | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.66 | 2.20 | 4 | 2 |
| 1:A:145:ASP:CG | 1:A:185:TYR:CD1 | 0.66 | 2.69 | 16 | 3 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:CB | 0.66 | 2.21 | 17 | 10 |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:91:ALA:HA | 0.66 | 2.23 | 10 | 13 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.66 | 2.79 | 13 | 6 |
| 1:A:144:ASN:CG | 1:A:145:ASP:N | 0.66 | 2.49 | 3 | 1 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.66 | 1.91 | 20 | 3 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:160:ALA:N | 0.66 | 2.06 | 7 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:168:ARG:N | 0.66 | 2.05 | 10 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:O | 0.66 | 2.49 | 6 | 5 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:175:VAL:HG22 | 0.66 | 1.91 | 14 | 14 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:HG23 | 0.66 | 1.90 | 19 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HE1 | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.66 | 1.48 | 5 | 2 |
| 1:A:101:ILE:CG2 | 1:A:101:ILE:O | 0.66 | 2.44 | 8 | 5 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:CB | 0.66 | 2.44 | 11 | 20 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.66 | 1.68 | 3 | 6 |
| 1:A:155:LEU:H | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.66 | 1.50 | 11 | 2 |
| 1:A:146:LYS:HB2 | 1:A:146:LYS:HZ2 | 0.66 | 1.50 | 14 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.66 | 2.78 | 15 | 3 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:174:THR:CA | 0.66 | 2.44 | 9 | 12 |
| 1:A:26:GLN:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.66 | 1.67 | 9 | 2 |
| 1:A:137:ALA:C | 1:A:139:PRO:HD3 | 0.65 | 2.11 | 5 | 19 |
| 1:A:176:ASN:ND2 | 1:A:177:PHE:N | 0.65 | 2.44 | 17 | 11 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.65 | 2.73 | 13 | 2 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.65 | 1.91 | 9 | 1 |
| 1:A:114:MET:HG3 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.65 | 1.68 | 20 | 4 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.65 | 2.20 | 13 | 3 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:CG | 0.65 | 2.43 | 20 | 9 |
| 1:A:113:PHE:HD2 | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.65 | 1.48 | 6 | 10 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:179:ASN:CB | 0.65 | 2.44 | 16 | 12 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:133:GLU:HB3 | 0.65 | 1.68 | 3 | 3 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.65 | 1.65 | 3 | 1 |
| 1:A:155:LEU:CD2 | 1:A:155:LEU:N | 0.65 | 2.49 | 19 | 2 |
| 1:A:180:GLN:HG3 | 1:A:182:LEU:H | 0.65 | 1.50 | 18 | 1 |
| 1:A:114:MET:HG3 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.65 | 1.69 | 8 | 3 |
| 1:A:127:LEU:O | 1:A:130:ALA:N | 0.65 | 2.28 | 12 | 15 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.65 | 2.44 | 12 | 4 |
| 1:A:127:LEU:CD1 | 1:A:176:ASN:CB | 0.65 | 2.74 | 14 | 9 |
| 1:A:172:HIS:O | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.65 | 2.13 | 3 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.65 | 2.21 | 5 | 1 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:HB2 | 0.65 | 1.91 | 19 | 16 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:126:CYS:O | 0.65 | 2.50 | 7 | 4 |
| 1:A:152:THR:HG23 | 1:A:174:THR:CA | 0.65 | 2.21 | 17 | 4 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:CG | 0.65 | 2.80 | 5 | 6 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:38:LEU:N | 0.65 | 2.60 | 10 | 12 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.65 | 2.26 | 3 | 3 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:CG2 | 0.65 | 2.45 | 13 | 5 |
| 1:A:128:ALA:HB2 | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.65 | 1.92 | 5 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.65 | 2.21 | 5 | 1 |
| 1:A:22:PHE:HA | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.65 | 2.27 | 19 | 10 |
| 1:A:113:PHE:HZ | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.65 | 2.05 | 5 | 7 |
| 1:A:145:ASP:OD2 | 1:A:185:TYR:CD1 | 0.65 | 2.50 | 16 | 5 |
| 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:83:ILE:HD12 | 0.65 | 1.69 | 18 | 1 |
| 1:A:142:MET:O | 1:A:146:LYS:CB | 0.65 | 2.45 | 17 | 8 |
| 1:A:183:PHE:CD2 | 1:A:183:PHE:O | 0.65 | 2.50 | 20 | 4 |
| 1:A:167:LEU:O | 1:A:170:VAL:HG12 | 0.65 | 1.91 | 8 | 2 |
| 1:A:138:PHE:N | 1:A:139:PRO:HD3 | 0.65 | 2.07 | 17 | 11 |
| 1:A:35:LEU:O | 1:A:39:GLY:HA3 | 0.65 | 1.91 | 11 | 16 |
| 1:A:127:LEU:CD1 | 1:A:176:ASN:HB2 | 0.64 | 2.22 | 1 | 12 |
| 1:A:107:ARG:HH21 | 1:A:108:GLN:CB | 0.64 | 2.05 | 18 | 1 |
| 1:A:102:GLN:N | 1:A:103:PRO:HD3 | 0.64 | 2.06 | 9 | 20 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.64 | 2.19 | 4 | 2 |
| 1:A:142:MET:N | 1:A:185:TYR:OH | 0.64 | 2.30 | 17 | 4 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.64 | 2.44 | 11 | 7 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:38:LEU:CD1 | 0.64 | 2.22 | 13 | 6 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 0.64 | 2.28 | 17 | 1 |
| 1:A:106:VAL:C | 1:A:151:MET:CE | 0.64 | 2.66 | 12 | 5 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:CG1 | 0.64 | 2.46 | 2 | 2 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:CB | 0.64 | 2.22 | 18 | 8 |
| 1:A:104:THR:CG2 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.64 | 2.81 | 8 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:152:THR:CB | 1:A:177:PHE:HB2 | 0.64 | 2.22 | 17 | 3 |
| 1:A:103:PRO:HD2 | 1:A:106:VAL:HB | 0.64 | 1.69 | 3 | 5 |
| 1:A:131:LEU:HG | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.64 | 1.70 | 11 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:83:ILE:HD12 | 0.64 | 2.22 | 18 | 1 |
| 1:A:35:LEU:O | 1:A:39:GLY:CA | 0.64 | 2.46 | 11 | 15 |
| 1:A:113:PHE:CG | 1:A:126:CYS:O | 0.64 | 2.51 | 15 | 8 |
| 1:A:21:VAL:HG21 | 1:A:171:PHE:C | 0.64 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.64 | 2.22 | 19 | 6 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.64 | 2.25 | 20 | 3 |
| 1:A:40:ARG:CG | 1:A:40:ARG:O | 0.64 | 2.46 | 10 | 2 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.64 | 2.23 | 12 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 0.64 | 1.68 | 11 | 2 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:CB | 0.64 | 2.46 | 5 | 2 |
| 1:A:168:ARG:O | 1:A:172:HIS:CB | 0.64 | 2.46 | 2 | 3 |
| 1:A:167:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:N | 0.64 | 2.61 | 5 | 4 |
| 1:A:34:GLU:CD | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.64 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:180:GLN:CG | 1:A:181:ASN:N | 0.64 | 2.60 | 18 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HD11 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.63 | 2.28 | 13 | 6 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:CG | 0.63 | 2.45 | 19 | 2 |
| 1:A:160:ALA:HB3 | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.63 | 1.69 | 8 | 2 |
| 1:A:145:ASP:OD2 | 1:A:185:TYR:CE1 | 0.63 | 2.51 | 19 | 3 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:C | 0.63 | 2.66 | 1 | 10 |
| 1:A:24:PHE:C | 1:A:24:PHE:CD1 | 0.63 | 2.71 | 10 | 10 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.63 | 2.28 | 17 | 4 |
| 1:A:140:ARG:O | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.63 | 2.31 | 3 | 1 |
| 1:A:177:PHE:CB | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.63 | 2.23 | 19 | 1 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:138:PHE:O | 0.63 | 2.29 | 7 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:34:GLU:C | 0.63 | 2.14 | 8 | 12 |
| 1:A:97:MET:CG | 1:A:98:ASP:N | 0.63 | 2.62 | 17 | 3 |
| 1:A:21:VAL:H | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.63 | 2.06 | 18 | 18 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:149:LEU:CD2 | 0.63 | 2.20 | 15 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:134:VAL:HB | 0.63 | 1.70 | 17 | 3 |
| 1:A:176:ASN:ND2 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.63 | 2.66 | 2 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CG | 1:A:114:MET:N | 0.63 | 2.66 | 8 | 19 |
| 1:A:134:VAL:CB | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.63 | 2.81 | 15 | 6 |
| 1:A:166:LEU:O | 1:A:170:VAL:N | 0.63 | 2.30 | 20 | 4 |
| 1:A:145:ASP:CG | 1:A:185:TYR:CE1 | 0.63 | 2.72 | 17 | 3 |
| 1:A:26:GLN:CA | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.63 | 2.23 | 20 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:105:LEU:O | 0.63 | 1.94 | 10 | 1 |
| 1:A:172:HIS:O | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.63 | 1.93 | 8 | 11 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:HB3 | 0.63 | 1.93 | 20 | 19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:HA | 0.63 | 1.70 | 16 | 4 |
| 1:A:185:TYR:CD1 | 1:A:185:TYR:C | 0.63 | 2.72 | 13 | 2 |
| 1:A:150:ILE:HG23 | 1:A:153:MET:HE2 | 0.63 | 1.69 | 7 | 1 |
| 1:A:151:MET:SD | 1:A:154:LEU:HD23 | 0.63 | 2.33 | 2 | 1 |
| 1:A:151:MET:SD | 1:A:151:MET:N | 0.63 | 2.70 | 3 | 1 |
| 1:A:156:ALA:HB1 | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.63 | 1.68 | 2 | 1 |
| 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:LEU:HD22 | 0.63 | 1.71 | 18 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HB | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.63 | 2.24 | 12 | 10 |
| 1:A:168:ARG:CG | 1:A:169:ASP:N | 0.63 | 2.60 | 3 | 12 |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.63 | 1.93 | 15 | 1 |
| 1:A:152:THR:CA | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.63 | 2.24 | 2 | 5 |
| 1:A:125:ASN:O | 1:A:129:LYS:N | 0.63 | 2.32 | 5 | 13 |
| 1:A:127:LEU:O | 1:A:130:ALA:HB3 | 0.63 | 1.94 | 12 | 3 |
| 1:A:25:LEU:O | 1:A:29:GLY:N | 0.63 | 2.31 | 15 | 5 |
| 1:A:31:THR:CB | 1:A:34:GLU:HB2 | 0.63 | 2.24 | 2 | 2 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:148:MET:CE | 0.63 | 2.24 | 20 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:138:PHE:CZ | 0.63 | 2.29 | 12 | 2 |
| 1:A:135:LYS:CE | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.63 | 2.47 | 18 | 1 |
| 1:A:160:ALA:CB | 1:A:170:VAL:CG1 | 0.62 | 2.73 | 8 | 6 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:175:VAL:HG12 | 0.62 | 1.94 | 8 | 8 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:126:CYS:C | 0.62 | 2.72 | 7 | 6 |
| 1:A:39:GLY:N | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.62 | 2.66 | 11 | 9 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:133:GLU:HG3 | 0.62 | 1.71 | 17 | 1 |
| 1:A:159:VAL:CA | 1:A:163:ALA:HB3 | 0.62 | 2.22 | 4 | 5 |
| 1:A:140:ARG:O | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.62 | 1.93 | 4 | 3 |
| 1:A:145:ASP:O | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.62 | 1.94 | 9 | 1 |
| 1:A:107:ARG:CZ | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.62 | 2.23 | 19 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HB | 0.62 | 1.71 | 8 | 1 |
| 1:A:154:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.62 | 2.78 | 8 | 5 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:107:ARG:HD3 | 0.62 | 1.70 | 19 | 1 |
| 1:A:21:VAL:CG1 | 1:A:171:PHE:O | 0.62 | 2.48 | 8 | 1 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:163:ALA:O | 0.62 | 2.47 | 16 | 9 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:184:SER:CB | 0.62 | 2.47 | 20 | 7 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.62 | 2.30 | 15 | 4 |
| 1:A:84:HIS:O | 1:A:87:ALA:HB3 | 0.62 | 1.93 | 13 | 18 |
| 1:A:93:ILE:HD11 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.62 | 1.72 | 15 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.62 | 1.71 | 16 | 1 |
| 1:A:155:LEU:HD13 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.62 | 2.25 | 4 | 4 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:CE2 | 0.62 | 2.82 | 14 | 2 |
| 1:A:139:PRO:C | 1:A:144:ASN:CB | 0.62 | 2.68 | 4 | 4 |
| 1:A:93:ILE:HD12 | 1:A:97:MET:HG2 | 0.62 | 1.72 | 16 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:171:PHE:HE1 | 0.62 | 1.50 | 2 | 3 |
| 1:A:145:ASP:HA | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.62 | 2.30 | 16 | 1 |
| 1:A:106:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.62 | 2.30 | 4 | 8 |
| 1:A:134:VAL:O | 1:A:138:PHE:CG | 0.62 | 2.53 | 2 | 5 |
| 1:A:21:VAL:CB | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.62 | 2.23 | 10 | 3 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:148:MET:N | 0.62 | 2.48 | 18 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:34:GLU:CG | 0.62 | 2.78 | 8 | 3 |
| 1:A:140:ARG:N | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.62 | 2.08 | 14 | 13 |
| 1:A:24:PHE:O | 1:A:91:ALA:HB3 | 0.62 | 1.94 | 1 | 18 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:39:GLY:HA3 | 0.62 | 2.29 | 3 | 3 |
| 1:A:178:ILE:O | 1:A:183:PHE:HA | 0.62 | 1.95 | 18 | 4 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:171:PHE:CG | 0.62 | 2.29 | 10 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HB3 | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.61 | 2.30 | 19 | 5 |
| 1:A:134:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:HD2 | 0.61 | 1.53 | 14 | 2 |
| 1:A:152:THR:CB | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.61 | 2.82 | 11 | 3 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:ILE:CG1 | 0.61 | 2.48 | 16 | 5 |
| 1:A:150:ILE:HG23 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.61 | 1.71 | 16 | 1 |
| 1:A:138:PHE:CD2 | 1:A:147:ALA:CB | 0.61 | 2.83 | 5 | 1 |
| 1:A:144:ASN:ND2 | 1:A:144:ASN:N | 0.61 | 2.47 | 5 | 1 |
| 1:A:87:ALA:O | 1:A:90:LEU:HB2 | 0.61 | 1.95 | 12 | 20 |
| 1:A:127:LEU:O | 1:A:177:PHE:HE1 | 0.61 | 1.77 | 18 | 12 |
| 1:A:159:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.61 | 1.69 | 15 | 3 |
| 1:A:135:LYS:HG3 | 1:A:139:PRO:HA | 0.61 | 1.71 | 7 | 1 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:177:PHE:HB2 | 0.61 | 2.26 | 8 | 6 |
| 1:A:31:THR:HB | 1:A:34:GLU:HB2 | 0.61 | 1.71 | 2 | 3 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.61 | 1.72 | 10 | 2 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:154:LEU:HB3 | 0.61 | 1.95 | 5 | 13 |
| 1:A:34:GLU:HG2 | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.61 | 1.70 | 16 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:CG | 0.61 | 2.25 | 20 | 3 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.61 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:HE2 | 0.61 | 1.72 | 20 | 13 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:161:SER:N | 0.61 | 2.34 | 2 | 9 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:168:ARG:HA | 0.61 | 1.72 | 16 | 1 |
| 1:A:150:ILE:HG23 | 1:A:153:MET:HE3 | 0.61 | 1.73 | 4 | 1 |
| 1:A:176:ASN:O | 1:A:179:ASN:OD1 | 0.61 | 2.18 | 13 | 3 |
| 1:A:153:MET:O | 1:A:157:LYS:CB | 0.61 | 2.49 | 17 | 2 |
| 1:A:93:ILE:HD11 | 1:A:153:MET:SD | 0.61 | 2.36 | 19 | 2 |
| 1:A:124:ARG:HB3 | 1:A:172:HIS:CE1 | 0.61 | 2.29 | 6 | 2 |
| 1:A:134:VAL:CG2 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.61 | 2.25 | 7 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:151:MET:HB3 | 0.61 | 1.70 | 13 | 6 |
| 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:154:LEU:HD11 | 0.61 | 1.71 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.61 | 1.70 | 12 | 1 |
| 1:A:178:ILE:HG23 | 1:A:184:SER:H | 0.61 | 1.55 | 19 | 2 |
| 1:A:142:MET:CG | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.61 | 2.83 | 6 | 1 |
| 1:A:167:LEU:CD1 | 1:A:168:ARG:N | 0.61 | 2.63 | 7 | 6 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:176:ASN:CB | 0.61 | 2.26 | 7 | 5 |
| 1:A:144:ASN:N | 1:A:144:ASN:HD22 | 0.61 | 1.93 | 17 | 4 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:HG2 | 0.61 | 1.72 | 6 | 1 |
| 1:A:151:MET:SD | 1:A:154:LEU:HD12 | 0.61 | 2.35 | 6 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:H | 0.61 | 1.55 | 5 | 1 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:148:MET:H | 0.61 | 1.93 | 18 | 1 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:HD12 | 0.61 | 1.94 | 14 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HA | 1:A:171:PHE:CZ | 0.61 | 2.31 | 13 | 13 |
| 1:A:168:ARG:HG3 | 1:A:169:ASP:N | 0.61 | 2.10 | 16 | 12 |
| 1:A:102:GLN:CG | 1:A:102:GLN:O | 0.61 | 2.48 | 18 | 3 |
| 1:A:131:LEU:CG | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.61 | 2.24 | 18 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG11 | 1:A:166:LEU:CD1 | 0.61 | 2.22 | 4 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HG12 | 1:A:183:PHE:CZ | 0.61 | 2.31 | 1 | 2 |
| 1:A:137:ALA:CB | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.60 | 2.84 | 8 | 7 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:CB | 0.60 | 2.23 | 4 | 6 |
| 1:A:26:GLN:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 0.60 | 1.70 | 10 | 3 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.60 | 2.78 | 3 | 1 |
| 1:A:97:MET:SD | 1:A:150:ILE:HG23 | 0.60 | 2.36 | 10 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:130:ALA:HB1 | 0.60 | 1.72 | 8 | 7 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 0.60 | 1.72 | 8 | 5 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:CB | 0.60 | 2.49 | 18 | 20 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:O | 0.60 | 2.49 | 16 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:113:PHE:C | 0.60 | 2.75 | 6 | 8 |
| 1:A:183:PHE:CD1 | 1:A:183:PHE:O | 0.60 | 2.54 | 12 | 2 |
| 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.60 | 2.11 | 7 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.60 | 2.83 | 15 | 5 |
| 1:A:134:VAL:HG11 | 1:A:151:MET:SD | 0.60 | 2.35 | 15 | 1 |
| 1:A:170:VAL:CG1 | 1:A:171:PHE:N | 0.60 | 2.64 | 10 | 18 |
| 1:A:24:PHE:HD1 | 1:A:25:LEU:N | 0.60 | 1.93 | 2 | 14 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.60 | 2.25 | 2 | 6 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.60 | 2.80 | 2 | 2 |
| 1:A:34:GLU:O | 1:A:38:LEU:N | 0.60 | 2.31 | 16 | 3 |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.60 | 1.96 | 9 | 3 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:127:LEU:CG | 0.60 | 2.49 | 11 | 2 |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.60 | 2.26 | 2 | 3 |
| 1:A:134:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.60 | 2.32 | 7 | 2 |
| 1:A:127:LEU:HG | 1:A:173:THR:CG2 | 0.60 | 2.23 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:HG22 | 0.60 | 1.73 | 19 | 4 |
| 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:HZ | 0.60 | 1.52 | 19 | 2 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:20:LEU:C | 0.60 | 2.70 | 5 | 1 |
| 1:A:181:ASN:CG | 1:A:182:LEU:HD22 | 0.60 | 2.17 | 7 | 6 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:112:GLN:HG3 | 0.60 | 2.16 | 14 | 2 |
| 1:A:21:VAL:CG1 | 1:A:171:PHE:CD2 | 0.60 | 2.79 | 14 | 1 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:N | 0.60 | 2.34 | 12 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:CD2 | 0.60 | 2.30 | 1 | 2 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:38:LEU:HD22 | 0.60 | 2.27 | 18 | 1 |
| 1:A:106:VAL:C | 1:A:151:MET:HE1 | 0.60 | 2.17 | 15 | 1 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:GLN:N | 0.60 | 2.33 | 20 | 9 |
| 1:A:175:VAL:CG1 | 1:A:175:VAL:O | 0.60 | 2.49 | 1 | 9 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.60 | 2.32 | 2 | 2 |
| 1:A:22:PHE:O | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.60 | 2.49 | 8 | 1 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.60 | 2.31 | 11 | 4 |
| 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:127:LEU:N | 0.60 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:HD13 | 0.60 | 2.16 | 16 | 4 |
| 1:A:108:GLN:O | 1:A:112:GLN:HB3 | 0.60 | 1.97 | 9 | 2 |
| 1:A:21:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.60 | 1.57 | 10 | 1 |
| 1:A:183:PHE:CD1 | 1:A:184:SER:N | 0.60 | 2.70 | 18 | 1 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:CB | 0.60 | 2.50 | 11 | 11 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:109:LEU:C | 0.60 | 2.70 | 9 | 6 |
| 1:A:179:ASN:ND2 | 1:A:179:ASN:C | 0.60 | 2.54 | 13 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.60 | 2.27 | 19 | 4 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.60 | 2.95 | 20 | 1 |
| 1:A:26:GLN:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.60 | 1.71 | 7 | 1 |
| 1:A:111:ALA:O | 1:A:114:MET:CG | 0.59 | 2.50 | 10 | 3 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:173:THR:HB | 0.59 | 1.96 | 17 | 4 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:154:LEU:N | 0.59 | 2.34 | 2 | 9 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:HD3 | 0.59 | 1.95 | 5 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:HD13 | 0.59 | 1.74 | 18 | 1 |
| 1:A:139:PRO:HA | 1:A:144:ASN:CG | 0.59 | 2.18 | 8 | 8 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:154:LEU:HD21 | 0.59 | 1.75 | 14 | 3 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:CB | 0.59 | 2.50 | 19 | 9 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:181:ASN:CB | 0.59 | 2.50 | 15 | 2 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:136:THR:CG2 | 0.59 | 2.49 | 13 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:22:PHE:H | 0.59 | 1.57 | 16 | 18 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.59 | 2.80 | 18 | 4 |
| 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:168:ARG:HB2 | 0.59 | 1.73 | 8 | 1 |
| 1:A:150:ILE:O | 1:A:153:MET:CG | 0.59 | 2.50 | 15 | 6 |
| 1:A:155:LEU:HD12 | 1:A:155:LEU:H | 0.59 | 1.57 | 16 | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:142:MET:O | 1:A:185:TYR:OH | 0.59 | 2.21 | 5 | 2 |
| 1:A:142:MET:CB | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.59 | 2.85 | 1 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:N | 0.59 | 2.13 | 10 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CB | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.59 | 2.85 | 14 | 2 |
| 1:A:130:ALA:C | 1:A:134:VAL:HG12 | 0.59 | 2.18 | 4 | 10 |
| 1:A:152:THR:HG21 | 1:A:177:PHE:CG | 0.59 | 2.33 | 20 | 2 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:148:MET:SD | 0.59 | 2.91 | 9 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:O | 0.59 | 1.97 | 6 | 1 |
| 1:A:142:MET:HB2 | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.59 | 2.32 | 6 | 1 |
| 1:A:156:ALA:CA | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.59 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.59 | 1.74 | 2 | 1 |
| 1:A:182:LEU:CD1 | 1:A:182:LEU:N | 0.59 | 2.65 | 20 | 6 |
| 1:A:21:VAL:CB | 1:A:175:VAL:HG21 | 0.59 | 2.20 | 14 | 6 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:181:ASN:OD1 | 0.59 | 1.97 | 15 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 0.59 | 1.73 | 13 | 3 |
| 1:A:154:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:N | 0.59 | 2.59 | 2 | 3 |
| 1:A:112:GLN:HG2 | 1:A:113:PHE:H | 0.59 | 1.56 | 1 | 10 |
| 1:A:160:ALA:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.59 | 1.73 | 11 | 1 |
| 1:A:167:LEU:N | 1:A:167:LEU:HD13 | 0.59 | 2.12 | 5 | 2 |
| 1:A:107:ARG:CZ | 1:A:150:ILE:CG2 | 0.59 | 2.80 | 19 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:153:MET:SD | 0.59 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:140:ARG:CA | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.59 | 2.27 | 12 | 8 |
| 1:A:22:PHE:O | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.59 | 2.50 | 17 | 2 |
| 1:A:178:ILE:CD1 | 1:A:179:ASN:N | 0.59 | 2.62 | 6 | 3 |
| 1:A:167:LEU:HD12 | 1:A:167:LEU:N | 0.59 | 2.11 | 3 | 2 |
| 1:A:106:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.59 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:32:ARG:O | 1:A:35:LEU:HG | 0.59 | 1.97 | 14 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.59 | 2.32 | 20 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:171:PHE:CZ | 0.59 | 2.86 | 11 | 3 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.59 | 2.86 | 8 | 1 |
| 1:A:181:ASN:C | 1:A:182:LEU:HD13 | 0.59 | 2.18 | 12 | 10 |
| 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:138:PHE:HE1 | 0.59 | 1.53 | 13 | 2 |
| 1:A:128:ALA:N | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.59 | 2.36 | 5 | 2 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.59 | 2.51 | 11 | 14 |
| 1:A:159:VAL:HG12 | 1:A:163:ALA:O | 0.59 | 1.98 | 12 | 3 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:20:LEU:HD22 | 0.59 | 1.97 | 6 | 5 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:131:LEU:C | 0.59 | 2.67 | 13 | 3 |
| 1:A:178:ILE:O | 1:A:183:PHE:N | 0.59 | 2.36 | 11 | 2 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:CA | 0.58 | 2.51 | 8 | 3 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:PHE:N | 0.58 | 2.35 | 3 | 12 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.58 | 1.75 | 16 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:153:MET:SD | 1:A:153:MET:C | 0.58 | 2.82 | 16 | 2 |
| 1:A:146:LYS:CB | 1:A:146:LYS:HZ2 | 0.58 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CB | 1:A:151:MET:SD | 0.58 | 2.92 | 15 | 1 |
| 1:A:160:ALA:HB2 | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.58 | 1.75 | 10 | 4 |
| 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:THR:CG2 | 0.58 | 2.69 | 19 | 3 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.58 | 2.80 | 10 | 1 |
| 1:A:27:SER:CB | 1:A:88:ARG:O | 0.58 | 2.51 | 11 | 19 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.58 | 1.75 | 9 | 8 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:25:LEU:N | 0.58 | 2.70 | 2 | 13 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.58 | 2.28 | 4 | 2 |
| 1:A:159:VAL:HG22 | 1:A:163:ALA:CB | 0.58 | 2.27 | 10 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:105:LEU:C | 0.58 | 2.18 | 12 | 1 |
| 1:A:142:MET:HG3 | 1:A:185:TYR:CD2 | 0.58 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:CE1 | 0.58 | 2.76 | 8 | 1 |
| 1:A:152:THR:CB | 1:A:174:THR:HA | 0.58 | 2.26 | 3 | 9 |
| 1:A:134:VAL:CG1 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.58 | 2.29 | 9 | 7 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:160:ALA:C | 0.58 | 2.40 | 11 | 13 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:N | 0.58 | 2.34 | 16 | 12 |
| 1:A:125:ASN:O | 1:A:129:LYS:CB | 0.58 | 2.51 | 2 | 7 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.58 | 2.23 | 17 | 4 |
| 1:A:182:LEU:O | 1:A:183:PHE:C | 0.58 | 2.42 | 20 | 17 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:H | 0.58 | 1.59 | 19 | 6 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.58 | 2.28 | 16 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:112:GLN:NE2 | 0.58 | 2.64 | 11 | 2 |
| 1:A:146:LYS:N | 1:A:185:TYR:OH | 0.58 | 2.36 | 11 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CE2 | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.58 | 2.77 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HZ1 | 1:A:148:MET:N | 0.58 | 1.96 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.58 | 2.28 | 18 | 1 |
| 1:A:167:LEU:C | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.58 | 2.18 | 16 | 1 |
| 1:A:130:ALA:HA | 1:A:133:GLU:CG | 0.58 | 2.29 | 17 | 1 |
| 1:A:155:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:HG21 | 0.58 | 1.76 | 3 | 1 |
| 1:A:172:HIS:O | 1:A:176:ASN:N | 0.58 | 2.36 | 9 | 8 |
| 1:A:28:SER:O | 1:A:29:GLY:C | 0.58 | 2.42 | 4 | 2 |
| 1:A:167:LEU:HD12 | 1:A:168:ARG:H | 0.58 | 1.59 | 7 | 4 |
| 1:A:154:LEU:CG | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.58 | 2.27 | 16 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HG13 | 1:A:183:PHE:CZ | 0.58 | 2.34 | 1 | 2 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:24:PHE:C | 0.58 | 2.76 | 2 | 10 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.58 | 2.21 | 17 | 2 |
| 1:A:154:LEU:C | 1:A:154:LEU:CD1 | 0.58 | 2.72 | 2 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HG22 | 1:A:160:ALA:N | 0.58 | 2.13 | 2 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD11 | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.58 | 2.27 | 2 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:CB | 0.58 | 2.52 | 20 | 3 |
| 1:A:158:LYS:HG3 | 1:A:159:VAL:HG23 | 0.58 | 1.76 | 3 | 1 |
| 1:A:30:CYS:HB3 | 1:A:34:GLU:CB | 0.58 | 2.28 | 4 | 6 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:CD1 | 0.58 | 2.86 | 14 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG23 | 1:A:171:PHE:O | 0.58 | 1.96 | 2 | 14 |
| 1:A:26:GLN:HG3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 0.58 | 1.76 | 13 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:38:LEU:N | 0.57 | 2.14 | 8 | 3 |
| 1:A:102:GLN:N | 1:A:103:PRO:CD | 0.57 | 2.67 | 3 | 19 |
| 1:A:127:LEU:HB2 | 1:A:176:ASN:ND2 | 0.57 | 2.13 | 9 | 6 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:131:LEU:O | 0.57 | 1.99 | 11 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:135:LYS:NZ | 0.57 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:182:LEU:C | 1:A:183:PHE:O | 0.57 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:174:THR:OG1 | 1:A:175:VAL:N | 0.57 | 2.35 | 7 | 12 |
| 1:A:38:LEU:HG | 1:A:171:PHE:CG | 0.57 | 2.34 | 16 | 1 |
| 1:A:139:PRO:HA | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.57 | 1.76 | 4 | 2 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.57 | 2.22 | 17 | 3 |
| 1:A:178:ILE:HG23 | 1:A:184:SER:N | 0.57 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:175:VAL:CG1 | 0.57 | 2.24 | 6 | 1 |
| 1:A:159:VAL:CB | 1:A:163:ALA:HB3 | 0.57 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CG | 1:A:167:LEU:HB2 | 0.57 | 2.29 | 18 | 1 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:179:ASN:HB2 | 0.57 | 1.99 | 15 | 6 |
| 1:A:102:GLN:H | 1:A:103:PRO:CD | 0.57 | 2.11 | 15 | 16 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:161:SER:HB2 | 0.57 | 1.99 | 7 | 4 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:H | 0.57 | 1.59 | 20 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD11 | 1:A:30:CYS:H | 0.57 | 1.59 | 1 | 1 |
| 1:A:167:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:H | 0.57 | 2.09 | 12 | 5 |
| 1:A:21:VAL:CG2 | 1:A:175:VAL:HB | 0.57 | 2.29 | 2 | 12 |
| 1:A:101:ILE:CG2 | 1:A:107:ARG:NE | 0.57 | 2.67 | 4 | 1 |
| 1:A:109:LEU:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.57 | 1.60 | 7 | 1 |
| 1:A:156:ALA:C | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.57 | 2.20 | 2 | 1 |
| 1:A:107:ARG:NH2 | 1:A:108:GLN:CG | 0.57 | 2.67 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HB3 | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.57 | 2.30 | 8 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD11 | 1:A:30:CYS:CB | 0.57 | 2.30 | 16 | 2 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.57 | 2.00 | 12 | 2 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:145:ASP:N | 0.57 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:181:ASN:HB2 | 0.57 | 1.98 | 13 | 7 |
| 1:A:102:GLN:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 0.57 | 1.75 | 14 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:106:VAL:CG2 | 0.57 | 2.26 | 8 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:171:PHE:O | 0.57 | 2.00 | 8 | 1 |
| 1:A:124:ARG:CB | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.57 | 2.29 | 15 | 1 |
| 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:34:GLU:N | 0.57 | 2.13 | 2 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:CB | 0.57 | 2.53 | 13 | 2 |
| 1:A:140:ARG:CB | 1:A:144:ASN:CB | 0.57 | 2.83 | 11 | 4 |
| 1:A:156:ALA:HB2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 0.57 | 1.77 | 20 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:CB | 0.57 | 2.30 | 8 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:HB2 | 0.57 | 2.00 | 19 | 10 |
| 1:A:154:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.57 | 2.29 | 20 | 3 |
| 1:A:134:VAL:HB | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.56 | 2.35 | 15 | 2 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:151:MET:HG3 | 0.56 | 2.00 | 15 | 1 |
| 1:A:112:GLN:CG | 1:A:113:PHE:N | 0.56 | 2.67 | 2 | 13 |
| 1:A:97:MET:SD | 1:A:107:ARG:CZ | 0.56 | 2.93 | 2 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:HG | 0.56 | 2.35 | 8 | 2 |
| 1:A:131:LEU:CA | 1:A:177:PHE:CZ | 0.56 | 2.88 | 12 | 6 |
| 1:A:125:ASN:O | 1:A:129:LYS:HB2 | 0.56 | 2.01 | 15 | 9 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:144:ASN:O | 0.56 | 2.37 | 18 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CE2 | 1:A:153:MET:HG2 | 0.56 | 2.36 | 8 | 1 |
| 1:A:137:ALA:CB | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.56 | 2.88 | 2 | 14 |
| 1:A:142:MET:HA | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.56 | 2.35 | 19 | 4 |
| 1:A:174:THR:C | 1:A:176:ASN:H | 0.56 | 2.04 | 10 | 11 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:OD2 | 0.56 | 2.24 | 18 | 2 |
| 1:A:155:LEU:C | 1:A:159:VAL:HG23 | 0.56 | 2.18 | 9 | 5 |
| 1:A:174:THR:O | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.56 | 2.00 | 16 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:29:GLY:HA3 | 0.56 | 1.77 | 4 | 5 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:174:THR:OG1 | 0.56 | 2.54 | 13 | 1 |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:113:PHE:CG | 0.56 | 2.56 | 11 | 2 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:HB3 | 0.56 | 2.00 | 3 | 4 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HD13 | 0.56 | 2.30 | 19 | 2 |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:CD2 | 0.56 | 2.31 | 18 | 1 |
| 1:A:32:ARG:HA | 1:A:35:LEU:HD11 | 0.56 | 1.76 | 14 | 2 |
| 1:A:157:LYS:HA | 1:A:161:SER:HB2 | 0.56 | 1.78 | 16 | 4 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:HG22 | 0.56 | 2.16 | 15 | 2 |
| 1:A:138:PHE:N | 1:A:139:PRO:CD | 0.56 | 2.68 | 17 | 5 |
| 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:107:ARG:NE | 0.56 | 2.16 | 4 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:136:THR:HG23 | 0.56 | 2.01 | 13 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HD22 | 1:A:84:HIS:ND1 | 0.56 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:130:ALA:HB1 | 0.56 | 2.30 | 16 | 5 |
| 1:A:106:VAL:CA | 1:A:138:PHE:CZ | 0.56 | 2.88 | 4 | 6 |
| 1:A:155:LEU:HD13 | 1:A:173:THR:HG22 | 0.56 | 1.77 | 4 | 1 |
| 1:A:153:MET:O | 1:A:157:LYS:N | 0.56 | 2.34 | 17 | 2 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:23:GLY:N | 0.56 | 2.38 | 12 | 20 |
| 1:A:154:LEU:HG | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.56 | 2.30 | 17 | 2 |
| 1:A:35:LEU:C | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.56 | 2.73 | 5 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:35:LEU:C | 1:A:35:LEU:HD13 | 0.56 | 2.20 | 3 | 1 |
| 1:A:168:ARG:O | 1:A:172:HIS:HB2 | 0.56 | 2.00 | 6 | 2 |
| 1:A:135:LYS:CE | 1:A:148:MET:HB3 | 0.56 | 2.31 | 7 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:133:GLU:HB2 | 0.56 | 1.78 | 14 | 6 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:153:MET:N | 0.56 | 2.68 | 11 | 8 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:HB3 | 0.56 | 1.78 | 12 | 3 |
| 1:A:185:TYR:CD1 | 1:A:185:TYR:O | 0.56 | 2.58 | 15 | 2 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:179:ASN:HB3 | 0.56 | 2.01 | 2 | 7 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:CG2 | 0.56 | 2.54 | 19 | 3 |
| 1:A:153:MET:CE | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.56 | 2.30 | 3 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HA | 0.56 | 2.31 | 6 | 2 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:CD1 | 0.56 | 2.53 | 20 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:183:PHE:CE2 | 0.56 | 2.34 | 14 | 2 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:SD | 0.56 | 2.64 | 12 | 5 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.56 | 1.76 | 10 | 3 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:CG2 | 0.56 | 2.68 | 15 | 2 |
| 1:A:145:ASP:OD1 | 1:A:185:TYR:CZ | 0.56 | 2.59 | 16 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HB | 1:A:138:PHE:CZ | 0.56 | 2.36 | 9 | 2 |
| 1:A:114:MET:SD | 1:A:159:VAL:HG22 | 0.56 | 2.40 | 1 | 2 |
| 1:A:134:VAL:O | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.56 | 2.58 | 5 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:134:VAL:CA | 0.56 | 2.80 | 8 | 4 |
| 1:A:111:ALA:O | 1:A:114:MET:HG3 | 0.56 | 2.01 | 10 | 3 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:CZ | 0.56 | 2.36 | 9 | 3 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:151:MET:HE1 | 0.56 | 2.01 | 15 | 5 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.56 | 2.84 | 15 | 4 |
| 1:A:167:LEU:HD13 | 1:A:167:LEU:N | 0.56 | 2.16 | 13 | 3 |
| 1:A:16:ILE:HG12 | 1:A:83:ILE:HG21 | 0.56 | 1.77 | 9 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CD1 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.56 | 2.89 | 17 | 8 |
| 1:A:151:MET:HB2 | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.56 | 2.36 | 14 | 2 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:HB2 | 0.56 | 2.01 | 9 | 9 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.56 | 2.28 | 15 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:181:ASN:CA | 0.56 | 2.54 | 15 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:35:LEU:N | 0.56 | 2.69 | 15 | 4 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:173:THR:HG23 | 0.56 | 1.78 | 16 | 1 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:HG13 | 0.56 | 1.99 | 9 | 2 |
| 1:A:149:LEU:CD1 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.56 | 2.84 | 19 | 1 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:HB | 0.56 | 2.01 | 7 | 3 |
| 1:A:159:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:CD1 | 0.56 | 2.31 | 2 | 1 |
| 1:A:32:ARG:O | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.55 | 2.55 | 8 | 4 |
| 1:A:144:ASN:O | 1:A:148:MET:N | 0.55 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:177:PHE:HB2 | 0.55 | 1.78 | 2 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:35:LEU:CD2 | 1:A:35:LEU:C | 0.55 | 2.75 | 7 | 3 |
| 1:A:102:GLN:O | 1:A:102:GLN:CG | 0.55 | 2.53 | 9 | 1 |
| 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:93:ILE:N | 0.55 | 2.16 | 16 | 3 |
| 1:A:24:PHE:CE1 | 1:A:29:GLY:HA3 | 0.55 | 2.36 | 7 | 6 |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:83:ILE:HG23 | 0.55 | 1.78 | 18 | 2 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.55 | 2.22 | 19 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.55 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:133:GLU:HA | 1:A:136:THR:OG1 | 0.55 | 2.01 | 12 | 5 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:CB | 0.55 | 2.54 | 6 | 7 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:140:ARG:CG | 0.55 | 2.54 | 4 | 6 |
| 1:A:156:ALA:CB | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.55 | 2.31 | 2 | 1 |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:LEU:HD13 | 0.55 | 1.77 | 18 | 1 |
| 1:A:185:TYR:C | 1:A:185:TYR:CD1 | 0.55 | 2.79 | 9 | 3 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:183:PHE:CD1 | 0.55 | 2.60 | 11 | 3 |
| 1:A:82:ILE:HG22 | 1:A:83:ILE:N | 0.55 | 2.16 | 18 | 3 |
| 1:A:20:LEU:HG | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.55 | 1.79 | 12 | 4 |
| 1:A:24:PHE:CE2 | 1:A:153:MET:SD | 0.55 | 3.00 | 3 | 1 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:136:THR:N | 0.55 | 2.38 | 6 | 8 |
| 1:A:17:THR:HG22 | 1:A:18:ASP:N | 0.55 | 2.17 | 6 | 2 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:126:CYS:HB3 | 0.55 | 2.36 | 11 | 5 |
| 1:A:35:LEU:CD2 | 1:A:36:GLU:N | 0.55 | 2.61 | 13 | 4 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:108:GLN:CB | 0.55 | 2.84 | 17 | 1 |
| 1:A:88:ARG:CG | 1:A:89:HIS:N | 0.55 | 2.69 | 18 | 2 |
| 1:A:114:MET:SD | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.55 | 2.41 | 2 | 1 |
| 1:A:31:THR:O | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.55 | 2.55 | 14 | 1 |
| 1:A:160:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.55 | 1.62 | 12 | 3 |
| 1:A:103:PRO:HD2 | 1:A:106:VAL:HG22 | 0.55 | 1.79 | 12 | 4 |
| 1:A:179:ASN:C | 1:A:179:ASN:ND2 | 0.55 | 2.60 | 11 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:87:ALA:HA | 0.55 | 1.79 | 20 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:87:ALA:O | 0.55 | 2.02 | 12 | 1 |
| 1:A:142:MET:HG3 | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.55 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:N | 0.55 | 2.40 | 5 | 4 |
| 1:A:138:PHE:CD2 | 1:A:147:ALA:HB1 | 0.55 | 2.36 | 5 | 1 |
| 1:A:146:LYS:NZ | 1:A:146:LYS:CB | 0.55 | 2.70 | 14 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:CG | 0.55 | 2.55 | 4 | 8 |
| 1:A:127:LEU:O | 1:A:130:ALA:CB | 0.55 | 2.55 | 12 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:C | 0.55 | 2.45 | 19 | 2 |
| 1:A:106:VAL:HG13 | 1:A:151:MET:CE | 0.55 | 2.32 | 5 | 2 |
| 1:A:153:MET:O | 1:A:157:LYS:HB3 | 0.55 | 2.02 | 2 | 1 |
| 1:A:183:PHE:CD1 | 1:A:184:SER:O | 0.55 | 2.60 | 18 | 1 |
| 1:A:126:CYS:O | 1:A:129:LYS:HB2 | 0.55 | 2.02 | 15 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:177:PHE:C | 1:A:181:ASN:HB3 | 0.55 | 2.21 | 15 | 1 |
| 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:169:ASP:HB2 | 0.55 | 1.77 | 11 | 1 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:HG22 | 0.55 | 2.02 | 10 | 2 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:HG13 | 0.55 | 2.01 | 2 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CG2 | 1:A:153:MET:SD | 0.55 | 2.94 | 5 | 1 |
| 1:A:26:GLN:HE22 | 1:A:88:ARG:HH21 | 0.55 | 1.44 | 14 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:O | 0.55 | 2.25 | 4 | 9 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:173:THR:C | 0.55 | 2.21 | 20 | 3 |
| 1:A:145:ASP:HB3 | 1:A:185:TYR:CG | 0.55 | 2.37 | 16 | 1 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.55 | 2.31 | 5 | 5 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:130:ALA:CB | 0.55 | 2.32 | 13 | 12 |
| 1:A:25:LEU:CB | 1:A:171:PHE:CZ | 0.55 | 2.90 | 11 | 4 |
| 1:A:153:MET:C | 1:A:153:MET:SD | 0.55 | 2.85 | 4 | 1 |
| 1:A:132:ASP:C | 1:A:136:THR:HG1 | 0.55 | 1.87 | 13 | 1 |
| 1:A:127:LEU:O | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.55 | 2.59 | 18 | 4 |
| 1:A:97:MET:CE | 1:A:150:ILE:HD11 | 0.55 | 2.32 | 3 | 1 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:167:LEU:HD21 | 0.55 | 2.32 | 10 | 1 |
| 1:A:140:ARG:HB3 | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.54 | 1.79 | 6 | 4 |
| 1:A:135:LYS:HZ2 | 1:A:148:MET:HB3 | 0.54 | 1.62 | 18 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:29:GLY:CA | 0.54 | 2.32 | 20 | 2 |
| 1:A:83:ILE:HD13 | 1:A:83:ILE:O | 0.54 | 2.02 | 18 | 2 |
| 1:A:169:ASP:O | 1:A:173:THR:CB | 0.54 | 2.55 | 3 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:168:ARG:CA | 0.54 | 2.32 | 16 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:90:LEU:HB2 | 0.54 | 2.33 | 16 | 4 |
| 1:A:36:GLU:O | 1:A:40:ARG:CB | 0.54 | 2.55 | 1 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:168:ARG:N | 0.54 | 2.17 | 12 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:134:VAL:N | 0.54 | 2.17 | 10 | 1 |
| 1:A:152:THR:O | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.54 | 2.02 | 5 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:134:VAL:N | 0.54 | 2.17 | 11 | 4 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:176:ASN:ND2 | 0.54 | 2.70 | 3 | 3 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:171:PHE:O | 0.54 | 2.02 | 18 | 3 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:107:ARG:CD | 0.54 | 2.31 | 19 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD22 | 1:A:135:LYS:CG | 0.54 | 2.32 | 18 | 1 |
| 1:A:83:ILE:HG23 | 1:A:84:HIS:CD2 | 0.54 | 2.36 | 4 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:135:LYS:CE | 0.54 | 2.31 | 13 | 1 |
| 1:A:97:MET:SD | 1:A:150:ILE:CD1 | 0.54 | 2.96 | 11 | 3 |
| 1:A:151:MET:CB | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.54 | 2.88 | 3 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:N | 0.54 | 2.40 | 18 | 15 |
| 1:A:167:LEU:HD12 | 1:A:168:ARG:N | 0.54 | 2.17 | 7 | 3 |
| 1:A:142:MET:O | 1:A:146:LYS:HB2 | 0.54 | 2.03 | 17 | 4 |
| 1:A:131:LEU:CA | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.54 | 2.90 | 3 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:147:ALA:HA | 1:A:150:ILE:CD1 | 0.54 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:153:MET:HE2 | 0.54 | 2.02 | 3 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD12 | 1:A:155:LEU:CA | 0.54 | 2.32 | 2 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE2 | 1:A:39:GLY:HA3 | 0.54 | 2.38 | 15 | 7 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:CG | 0.54 | 2.46 | 13 | 3 |
| 1:A:133:GLU:CA | 1:A:136:THR:HG22 | 0.54 | 2.32 | 17 | 1 |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:153:MET:SD | 0.54 | 2.66 | 17 | 3 |
| 1:A:40:ARG:O | 1:A:40:ARG:CG | 0.54 | 2.54 | 9 | 1 |
| 1:A:24:PHE:HE2 | 1:A:153:MET:HG2 | 0.54 | 1.63 | 8 | 1 |
| 1:A:152:THR:C | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.54 | 2.22 | 1 | 8 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:151:MET:CB | 0.54 | 2.55 | 9 | 5 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 0.54 | 2.37 | 17 | 1 |
| 1:A:29:GLY:CA | 1:A:91:ALA:HB1 | 0.54 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:84:HIS:NE2 | 0.54 | 2.18 | 1 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:HG | 0.54 | 2.03 | 2 | 3 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:153:MET:SD | 0.54 | 2.42 | 6 | 1 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.54 | 2.02 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CB | 1:A:175:VAL:HG22 | 0.54 | 2.32 | 8 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.54 | 2.74 | 13 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:107:ARG:CB | 0.54 | 2.32 | 3 | 2 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:112:GLN:CG | 0.54 | 2.69 | 12 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:151:MET:HE2 | 0.54 | 2.03 | 5 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HB | 1:A:151:MET:HE2 | 0.54 | 1.80 | 1 | 3 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:184:SER:O | 0.54 | 2.25 | 19 | 2 |
| 1:A:131:LEU:CB | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.54 | 2.91 | 2 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:108:GLN:HB3 | 0.54 | 1.79 | 16 | 1 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:136:THR:CG2 | 0.54 | 2.56 | 6 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:83:ILE:CG2 | 0.54 | 2.33 | 17 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:25:LEU:CD1 | 0.54 | 2.91 | 3 | 2 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.54 | 2.96 | 10 | 1 |
| 1:A:30:CYS:HB3 | 1:A:34:GLU:CG | 0.53 | 2.33 | 8 | 6 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:CE | 0.53 | 2.86 | 19 | 12 |
| 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:LEU:N | 0.53 | 2.18 | 10 | 9 |
| 1:A:148:MET:HE1 | 1:A:181:ASN:ND2 | 0.53 | 2.17 | 6 | 1 |
| 1:A:149:LEU:HD21 | 1:A:181:ASN:ND2 | 0.53 | 2.18 | 7 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:168:ARG:CA | 0.53 | 2.33 | 18 | 1 |
| 1:A:166:LEU:O | 1:A:170:VAL:HB | 0.53 | 2.03 | 14 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:105:LEU:O | 0.53 | 2.52 | 13 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HG | 1:A:36:GLU:N | 0.53 | 2.18 | 10 | 3 |
| 1:A:152:THR:HG1 | 1:A:174:THR:N | 0.53 | 1.89 | 9 | 1 |
| 1:A:130:ALA:CB | 1:A:177:PHE:HZ | 0.53 | 2.16 | 7 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:107:ARG:HD3 | 0.53 | 1.79 | 4 | 1 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:CD1 | 0.53 | 2.71 | 13 | 2 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:162:HIS:HB2 | 0.53 | 2.03 | 11 | 3 |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:112:GLN:OE1 | 0.53 | 2.26 | 20 | 1 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.53 | 2.56 | 2 | 2 |
| 1:A:24:PHE:CD1 | 1:A:25:LEU:HD13 | 0.53 | 2.38 | 3 | 2 |
| 1:A:127:LEU:HB2 | 1:A:176:ASN:CG | 0.53 | 2.23 | 18 | 2 |
| 1:A:142:MET:CG | 1:A:185:TYR:OH | 0.53 | 2.57 | 13 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:HE2 | 0.53 | 1.52 | 3 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:153:MET:CE | 0.53 | 2.33 | 3 | 1 |
| 1:A:124:ARG:C | 1:A:124:ARG:CD | 0.53 | 2.76 | 8 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:134:VAL:CB | 0.53 | 2.33 | 8 | 3 |
| 1:A:93:ILE:HG22 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.53 | 1.79 | 1 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CG | 0.53 | 2.87 | 19 | 1 |
| 1:A:94:GLY:O | 1:A:157:LYS:CE | 0.53 | 2.56 | 7 | 1 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:148:MET:HB3 | 0.53 | 2.18 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:CA | 1:A:153:MET:HG3 | 0.53 | 2.34 | 8 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HD22 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.53 | 2.39 | 20 | 2 |
| 1:A:160:ALA:HB2 | 1:A:167:LEU:HA | 0.53 | 1.80 | 3 | 3 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:177:PHE:CG | 0.53 | 2.38 | 4 | 6 |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:HD21 | 0.53 | 1.81 | 15 | 2 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:CG | 0.53 | 2.57 | 13 | 3 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:135:LYS:NZ | 0.53 | 2.72 | 12 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:CZ | 0.53 | 2.92 | 3 | 2 |
| 1:A:153:MET:SD | 1:A:174:THR:CG2 | 0.53 | 2.97 | 3 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.53 | 2.33 | 9 | 3 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:ILE:HG12 | 0.53 | 2.04 | 9 | 5 |
| 1:A:155:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.53 | 2.34 | 16 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HG | 1:A:171:PHE:CD1 | 0.53 | 2.37 | 16 | 1 |
| 1:A:37:VAL:HB | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.53 | 1.81 | 11 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CG | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.53 | 2.87 | 13 | 1 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:HB3 | 0.53 | 2.03 | 2 | 4 |
| 1:A:129:LYS:O | 1:A:133:GLU:CD | 0.53 | 2.47 | 17 | 1 |
| 1:A:131:LEU:N | 1:A:177:PHE:HZ | 0.53 | 2.01 | 12 | 1 |
| 1:A:40:ARG:HG3 | 1:A:40:ARG:O | 0.53 | 2.04 | 9 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:CB | 0.53 | 2.33 | 1 | 1 |
| 1:A:32:ARG:C | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.53 | 2.23 | 1 | 2 |
| 1:A:22:PHE:HA | 1:A:171:PHE:CZ | 0.53 | 2.39 | 10 | 10 |
| 1:A:150:ILE:O | 1:A:153:MET:HG2 | 0.53 | 2.04 | 14 | 3 |
| 1:A:127:LEU:CD1 | 1:A:176:ASN:CG | 0.53 | 2.75 | 12 | 4 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:HB2 | 0.53 | 2.04 | 2 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:85:ASN:O | 1:A:88:ARG:CG | 0.53 | 2.57 | 13 | 4 |
| 1:A:114:MET:CG | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.53 | 2.83 | 3 | 1 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.53 | 2.33 | 3 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:151:MET:CG | 0.53 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:HE2 | 0.53 | 1.55 | 6 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:22:PHE:N | 0.53 | 2.18 | 10 | 1 |
| 1:A:177:PHE:HA | 1:A:180:GLN:OE1 | 0.53 | 2.04 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CG | 1:A:167:LEU:O | 0.52 | 2.57 | 16 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD13 | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.52 | 2.39 | 10 | 7 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:127:LEU:HB3 | 0.52 | 2.39 | 8 | 1 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:CD1 | 0.52 | 2.57 | 14 | 1 |
| 1:A:21:VAL:CG2 | 1:A:171:PHE:C | 0.52 | 2.78 | 4 | 12 |
| 1:A:174:THR:O | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.52 | 2.57 | 16 | 2 |
| 1:A:34:GLU:HG2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.52 | 1.81 | 15 | 1 |
| 1:A:165:SER:OG | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.52 | 2.04 | 17 | 1 |
| 1:A:110:ALA:C | 1:A:113:PHE:CD2 | 0.52 | 2.80 | 14 | 3 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:178:ILE:HB | 0.52 | 2.35 | 14 | 9 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.52 | 2.39 | 19 | 2 |
| 1:A:21:VAL:CA | 1:A:175:VAL:CG2 | 0.52 | 2.88 | 20 | 5 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:127:LEU:CD1 | 0.52 | 2.57 | 1 | 3 |
| 1:A:26:GLN:HG3 | 1:A:27:SER:N | 0.52 | 2.19 | 11 | 5 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:39:GLY:CA | 0.52 | 2.91 | 3 | 1 |
| 1:A:142:MET:N | 1:A:185:TYR:CZ | 0.52 | 2.77 | 6 | 1 |
| 1:A:139:PRO:HA | 1:A:148:MET:CE | 0.52 | 2.34 | 13 | 1 |
| 1:A:114:MET:SD | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.52 | 2.44 | 12 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:135:LYS:CG | 0.52 | 2.87 | 18 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG13 | 1:A:148:MET:HG2 | 0.52 | 1.81 | 19 | 4 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.52 | 2.84 | 4 | 6 |
| 1:A:138:PHE:C | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.52 | 2.47 | 20 | 2 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:133:GLU:OE1 | 0.52 | 2.58 | 9 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:HA | 0.52 | 1.81 | 6 | 2 |
| 1:A:167:LEU:O | 1:A:170:VAL:N | 0.52 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HB3 | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.52 | 2.40 | 8 | 2 |
| 1:A:34:GLU:HG3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.52 | 1.80 | 16 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HD21 | 1:A:84:HIS:HA | 0.52 | 1.80 | 4 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:135:LYS:NZ | 0.52 | 2.20 | 12 | 1 |
| 1:A:156:ALA:CB | 1:A:160:ALA:CB | 0.52 | 2.86 | 2 | 1 |
| 1:A:106:VAL:C | 1:A:151:MET:HE3 | 0.52 | 2.25 | 12 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:107:ARG:CD | 0.52 | 2.33 | 4 | 1 |
| 1:A:156:ALA:HA | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.52 | 2.34 | 18 | 4 |
| 1:A:89:HIS:CD2 | 1:A:93:ILE:CG2 | 0.52 | 2.93 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:CD1 | 0.52 | 2.35 | 10 | 4 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:113:PHE:CE2 | 0.52 | 2.40 | 7 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:20:LEU:O | 0.52 | 2.53 | 5 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HB | 0.52 | 1.80 | 2 | 6 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.52 | 2.35 | 10 | 3 |
| 1:A:37:VAL:O | 1:A:40:ARG:CG | 0.52 | 2.58 | 9 | 1 |
| 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.52 | 1.64 | 14 | 2 |
| 1:A:31:THR:O | 1:A:34:GLU:N | 0.52 | 2.43 | 9 | 11 |
| 1:A:142:MET:CB | 1:A:185:TYR:OH | 0.52 | 2.57 | 10 | 4 |
| 1:A:167:LEU:CD2 | 1:A:168:ARG:N | 0.52 | 2.65 | 20 | 4 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.52 | 2.85 | 4 | 4 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:173:THR:CB | 0.52 | 2.58 | 18 | 3 |
| 1:A:156:ALA:C | 1:A:160:ALA:H | 0.52 | 2.05 | 11 | 1 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:CG2 | 0.52 | 2.55 | 1 | 1 |
| 1:A:114:MET:O | 1:A:114:MET:SD | 0.51 | 2.68 | 14 | 2 |
| 1:A:128:ALA:O | 1:A:131:LEU:CD2 | 0.51 | 2.58 | 14 | 2 |
| 1:A:131:LEU:CA | 1:A:148:MET:SD | 0.51 | 2.98 | 15 | 1 |
| 1:A:127:LEU:CD1 | 1:A:173:THR:HA | 0.51 | 2.35 | 16 | 2 |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:153:MET:SD | 0.51 | 3.04 | 3 | 1 |
| 1:A:167:LEU:HD13 | 1:A:168:ARG:HD2 | 0.51 | 1.81 | 2 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:35:LEU:C | 0.51 | 2.25 | 2 | 1 |
| 1:A:145:ASP:O | 1:A:148:MET:HG2 | 0.51 | 2.05 | 14 | 3 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:107:ARG:HB3 | 0.51 | 1.81 | 11 | 1 |
| 1:A:184:SER:O | 1:A:185:TYR:C | 0.51 | 2.49 | 6 | 3 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:135:LYS:CE | 0.51 | 2.59 | 19 | 1 |
| 1:A:149:LEU:HD21 | 1:A:181:ASN:HD22 | 0.51 | 1.65 | 7 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.51 | 1.81 | 6 | 7 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:174:THR:CA | 0.51 | 2.36 | 15 | 5 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:HB3 | 0.51 | 2.06 | 15 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:180:GLN:HG2 | 0.51 | 2.35 | 19 | 1 |
| 1:A:155:LEU:HB3 | 1:A:173:THR:HG21 | 0.51 | 1.75 | 2 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 0.51 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:159:VAL:C | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.51 | 2.26 | 4 | 7 |
| 1:A:159:VAL:C | 1:A:161:SER:N | 0.51 | 2.63 | 2 | 4 |
| 1:A:145:ASP:OD1 | 1:A:185:TYR:CE1 | 0.51 | 2.63 | 16 | 1 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:181:ASN:OD1 | 0.51 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:134:VAL:HB | 0.51 | 2.36 | 17 | 2 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:140:ARG:O | 0.51 | 2.29 | 7 | 2 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:NE2 | 0.51 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:155:LEU:CG | 0.51 | 2.94 | 8 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:181:ASN:CG | 0.51 | 2.26 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:149:LEU:HB2 | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.51 | 1.82 | 15 | 1 |
| 1:A:152:THR:CB | 1:A:173:THR:O | 0.51 | 2.57 | 9 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:108:GLN:CB | 0.51 | 2.35 | 16 | 4 |
| 1:A:134:VAL:CG1 | 1:A:151:MET:HG2 | 0.51 | 2.29 | 12 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:134:VAL:CA | 0.51 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HG3 | 1:A:139:PRO:CA | 0.51 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:161:SER:CB | 0.51 | 2.58 | 2 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:127:LEU:CD1 | 0.51 | 2.86 | 5 | 2 |
| 1:A:176:ASN:HA | 1:A:179:ASN:ND2 | 0.51 | 2.20 | 2 | 2 |
| 1:A:142:MET:O | 1:A:146:LYS:CG | 0.51 | 2.58 | 6 | 2 |
| 1:A:141:ASP:O | 1:A:145:ASP:HB3 | 0.51 | 2.04 | 4 | 6 |
| 1:A:135:LYS:HE2 | 1:A:148:MET:CB | 0.51 | 2.36 | 13 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CG | 1:A:110:ALA:N | 0.51 | 2.74 | 14 | 10 |
| 1:A:157:LYS:HA | 1:A:161:SER:HB3 | 0.51 | 1.81 | 9 | 4 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:20:LEU:C | 0.51 | 2.26 | 11 | 5 |
| 1:A:25:LEU:HD13 | 1:A:171:PHE:HE1 | 0.51 | 1.65 | 5 | 5 |
| 1:A:38:LEU:CG | 1:A:171:PHE:CG | 0.51 | 2.93 | 16 | 1 |
| 1:A:24:PHE:O | 1:A:27:SER:OG | 0.51 | 2.29 | 20 | 2 |
| 1:A:134:VAL:O | 1:A:138:PHE:CD2 | 0.51 | 2.64 | 2 | 4 |
| 1:A:159:VAL:C | 1:A:163:ALA:N | 0.51 | 2.59 | 12 | 5 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:138:PHE:CD2 | 0.51 | 2.83 | 12 | 3 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.51 | 2.46 | 11 | 2 |
| 1:A:160:ALA:CA | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.51 | 2.35 | 11 | 1 |
| 1:A:128:ALA:HB1 | 1:A:180:GLN:CD | 0.51 | 2.26 | 9 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:CB | 0.51 | 2.59 | 19 | 1 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:181:ASN:ND2 | 0.51 | 2.74 | 6 | 2 |
| 1:A:176:ASN:ND2 | 1:A:177:PHE:H | 0.51 | 2.03 | 7 | 6 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:105:LEU:N | 0.51 | 2.73 | 15 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.51 | 1.82 | 7 | 4 |
| 1:A:135:LYS:HB2 | 1:A:148:MET:HG2 | 0.51 | 1.82 | 17 | 1 |
| 1:A:148:MET:CA | 1:A:151:MET:HG2 | 0.51 | 2.33 | 9 | 3 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:CB | 0.51 | 2.36 | 12 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CA | 1:A:87:ALA:HB1 | 0.51 | 2.33 | 12 | 1 |
| 1:A:111:ALA:O | 1:A:114:MET:HG2 | 0.51 | 2.06 | 9 | 2 |
| 1:A:93:ILE:HG22 | 1:A:153:MET:HE2 | 0.51 | 1.82 | 6 | 1 |
| 1:A:181:ASN:CG | 1:A:182:LEU:H | 0.50 | 2.09 | 13 | 7 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:CG1 | 0.50 | 2.59 | 5 | 3 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.50 | 2.94 | 15 | 4 |
| 1:A:113:PHE:CB | 1:A:126:CYS:O | 0.50 | 2.60 | 15 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:C | 0.50 | 2.25 | 16 | 1 |
| 1:A:135:LYS:C | 1:A:136:THR:HG23 | 0.50 | 2.26 | 13 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:112:GLN:NE2 | 0.50 | 2.21 | 10 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.50 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HD12 | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.50 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:97:MET:HB3 | 1:A:101:ILE:HD11 | 0.50 | 1.84 | 10 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:171:PHE:CA | 0.50 | 2.36 | 14 | 3 |
| 1:A:160:ALA:C | 1:A:162:HIS:N | 0.50 | 2.65 | 12 | 5 |
| 1:A:175:VAL:HA | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.50 | 2.37 | 4 | 2 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:133:GLU:N | 0.50 | 2.45 | 2 | 5 |
| 1:A:173:THR:O | 1:A:176:ASN:N | 0.50 | 2.40 | 13 | 1 |
| 1:A:107:ARG:NH2 | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.50 | 2.19 | 19 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:151:MET:HG3 | 0.50 | 1.83 | 6 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HG | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.50 | 1.83 | 2 | 1 |
| 1:A:34:GLU:O | 1:A:37:VAL:N | 0.50 | 2.45 | 17 | 4 |
| 1:A:152:THR:HA | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.50 | 2.35 | 17 | 3 |
| 1:A:131:LEU:HB2 | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.50 | 2.41 | 11 | 2 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:168:ARG:HA | 0.50 | 2.35 | 16 | 1 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:181:ASN:CG | 0.50 | 2.79 | 20 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CG | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.50 | 2.36 | 20 | 2 |
| 1:A:22:PHE:C | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.50 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:132:ASP:N | 0.50 | 2.21 | 6 | 2 |
| 1:A:148:MET:HE1 | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.50 | 2.36 | 3 | 1 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.50 | 2.07 | 7 | 2 |
| 1:A:152:THR:C | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.50 | 2.78 | 5 | 2 |
| 1:A:94:GLY:HA2 | 1:A:153:MET:CE | 0.50 | 2.36 | 4 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.50 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:88:ARG:CG | 0.50 | 2.37 | 17 | 3 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:150:ILE:CG1 | 0.50 | 2.58 | 19 | 1 |
| 1:A:142:MET:HB2 | 1:A:185:TYR:CZ | 0.50 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CA | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.50 | 2.95 | 2 | 1 |
| 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:CD1 | 0.50 | 2.74 | 18 | 2 |
| 1:A:142:MET:HA | 1:A:185:TYR:CZ | 0.50 | 2.41 | 5 | 5 |
| 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:GLN:CG | 0.50 | 2.79 | 13 | 5 |
| 1:A:176:ASN:ND2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 0.50 | 2.05 | 9 | 2 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.50 | 2.06 | 2 | 2 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:174:THR:C | 0.50 | 2.50 | 5 | 2 |
| 1:A:94:GLY:N | 1:A:153:MET:SD | 0.50 | 2.84 | 5 | 2 |
| 1:A:93:ILE:CG1 | 1:A:153:MET:SD | 0.50 | 2.99 | 19 | 1 |
| 1:A:151:MET:HB3 | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.50 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HG12 | 1:A:183:PHE:CE2 | 0.50 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CG1 | 1:A:148:MET:HA | 0.50 | 2.37 | 5 | 2 |
| 1:A:127:LEU:CG | 1:A:173:THR:HG23 | 0.50 | 2.37 | 18 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.50 | 2.36 | 18 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CB | 1:A:35:LEU:HD13 | 0.50 | 2.37 | 18 | 1 |
| 1:A:34:GLU:HG3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 0.50 | 1.83 | 18 | 1 |
| 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:33:GLN:HG3 | 0.50 | 1.83 | 8 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:167:LEU:HD13 | 0.50 | 1.82 | 19 | 2 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:100:ASN:N | 0.50 | 2.45 | 14 | 10 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:CE2 | 0.50 | 2.42 | 1 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.50 | 1.82 | 18 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CB | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.50 | 2.36 | 3 | 3 |
| 1:A:148:MET:HE3 | 1:A:177:PHE:CG | 0.50 | 2.41 | 12 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CA | 1:A:177:PHE:HE1 | 0.50 | 2.19 | 2 | 1 |
| 1:A:104:THR:OG1 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.50 | 2.61 | 8 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:126:CYS:HB2 | 0.50 | 2.42 | 14 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HB | 1:A:183:PHE:CZ | 0.50 | 2.42 | 16 | 4 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.50 | 2.35 | 16 | 1 |
| 1:A:142:MET:O | 1:A:146:LYS:HB3 | 0.50 | 2.06 | 17 | 2 |
| 1:A:112:GLN:CD | 1:A:113:PHE:N | 0.50 | 2.65 | 17 | 2 |
| 1:A:128:ALA:CB | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.50 | 2.60 | 5 | 2 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.50 | 2.27 | 12 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CD1 | 1:A:83:ILE:CG2 | 0.50 | 2.88 | 12 | 2 |
| 1:A:158:LYS:C | 1:A:162:HIS:CB | 0.50 | 2.80 | 6 | 2 |
| 1:A:146:LYS:CA | 1:A:185:TYR:OH | 0.50 | 2.60 | 5 | 1 |
| 1:A:150:ILE:O | 1:A:153:MET:HG3 | 0.50 | 2.07 | 11 | 4 |
| 1:A:145:ASP:OD1 | 1:A:185:TYR:CD1 | 0.50 | 2.65 | 17 | 2 |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:167:LEU:HD21 | 0.50 | 1.82 | 17 | 1 |
| 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:169:ASP:HB3 | 0.50 | 1.80 | 1 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:134:VAL:HG23 | 0.50 | 1.78 | 7 | 1 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:182:LEU:HD11 | 0.50 | 2.34 | 2 | 1 |
| 1:A:173:THR:C | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.50 | 2.26 | 20 | 17 |
| 1:A:135:LYS:HG2 | 1:A:135:LYS:O | 0.50 | 2.07 | 9 | 6 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:CG | 0.50 | 2.90 | 11 | 4 |
| 1:A:97:MET:HG3 | 1:A:150:ILE:HD11 | 0.50 | 1.83 | 13 | 1 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:38:LEU:CD2 | 0.50 | 2.90 | 13 | 2 |
| 1:A:133:GLU:CA | 1:A:136:THR:OG1 | 0.50 | 2.60 | 12 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HD22 | 1:A:84:HIS:CD2 | 0.50 | 2.41 | 1 | 1 |
| 1:A:27:SER:HG | 1:A:88:ARG:C | 0.50 | 2.09 | 19 | 1 |
| 1:A:156:ALA:CA | 1:A:160:ALA:CB | 0.50 | 2.90 | 2 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CE | 1:A:135:LYS:CA | 0.50 | 2.90 | 18 | 1 |
| 1:A:182:LEU:C | 1:A:184:SER:N | 0.49 | 2.65 | 17 | 4 |
| 1:A:38:LEU:CB | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.49 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CG | 1:A:139:PRO:HA | 0.49 | 2.37 | 7 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:89:HIS:CD2 | 1:A:93:ILE:HG13 | 0.49 | 2.42 | 5 | 3 |
| 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:153:MET:SD | 0.49 | 2.47 | 8 | 1 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:161:SER:HB3 | 0.49 | 2.07 | 16 | 5 |
| 1:A:131:LEU:CB | 1:A:148:MET:SD | 0.49 | 3.00 | 15 | 1 |
| 1:A:151:MET:C | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.49 | 2.78 | 15 | 3 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:CG2 | 0.49 | 2.53 | 15 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:ILE:HG13 | 0.49 | 2.07 | 15 | 2 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:VAL:HB | 0.49 | 2.07 | 4 | 5 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:171:PHE:CB | 0.49 | 2.38 | 9 | 8 |
| 1:A:22:PHE:CD2 | 1:A:39:GLY:C | 0.49 | 2.86 | 16 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:131:LEU:O | 0.49 | 2.59 | 11 | 1 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:160:ALA:CA | 0.49 | 2.57 | 11 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:90:LEU:CB | 0.49 | 2.90 | 1 | 2 |
| 1:A:35:LEU:O | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.49 | 2.55 | 2 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:HD23 | 0.49 | 1.85 | 18 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.49 | 2.59 | 14 | 3 |
| 1:A:124:ARG:HH21 | 1:A:180:GLN:HG2 | 0.49 | 1.68 | 14 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:106:VAL:HG21 | 0.49 | 1.84 | 15 | 2 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:SD | 0.49 | 2.93 | 15 | 1 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:92:GLN:HG3 | 0.49 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:127:LEU:HA | 0.49 | 2.42 | 17 | 3 |
| 1:A:112:GLN:NE2 | 1:A:133:GLU:CD | 0.49 | 2.66 | 1 | 1 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:157:LYS:CE | 0.49 | 2.61 | 19 | 1 |
| 1:A:162:HIS:C | 1:A:164:PRO:HD3 | 0.49 | 2.27 | 5 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CG | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.49 | 2.39 | 2 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HB | 1:A:175:VAL:CB | 0.49 | 2.38 | 10 | 1 |
| 1:A:34:GLU:OE2 | 1:A:38:LEU:CG | 0.49 | 2.60 | 14 | 1 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:162:HIS:C | 0.49 | 2.49 | 16 | 3 |
| 1:A:159:VAL:C | 1:A:163:ALA:O | 0.49 | 2.50 | 9 | 3 |
| 1:A:174:THR:C | 1:A:176:ASN:N | 0.49 | 2.66 | 10 | 3 |
| 1:A:97:MET:HE2 | 1:A:101:ILE:HG21 | 0.49 | 1.84 | 15 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD11 | 1:A:30:CYS:HB2 | 0.49 | 1.85 | 16 | 3 |
| 1:A:151:MET:HB3 | 1:A:177:PHE:CZ | 0.49 | 2.40 | 9 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HD11 | 1:A:83:ILE:HG13 | 0.49 | 1.84 | 6 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:107:ARG:CB | 0.49 | 2.60 | 5 | 1 |
| 1:A:165:SER:C | 1:A:166:LEU:HD23 | 0.49 | 2.27 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.49 | 1.82 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:CG | 0.49 | 2.38 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:O | 1:A:97:MET:HG2 | 0.49 | 2.08 | 15 | 3 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:151:MET:SD | 0.49 | 2.48 | 15 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HG21 | 0.49 | 2.43 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.49 | 1.85 | 3 | 2 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.49 | 2.30 | 11 | 4 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:36:GLU:HA | 0.49 | 2.43 | 17 | 2 |
| 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:104:THR:O | 0.49 | 2.08 | 9 | 1 |
| 1:A:177:PHE:CD1 | 1:A:177:PHE:N | 0.49 | 2.80 | 3 | 1 |
| 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.49 | 2.43 | 8 | 1 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:99:HIS:N | 0.49 | 2.46 | 17 | 18 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:173:THR:OG1 | 0.49 | 2.31 | 4 | 2 |
| 1:A:169:ASP:O | 1:A:173:THR:N | 0.49 | 2.46 | 3 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.49 | 1.83 | 18 | 1 |
| 1:A:145:ASP:OD1 | 1:A:185:TYR:CG | 0.49 | 2.66 | 4 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:177:PHE:HE2 | 0.49 | 1.68 | 11 | 1 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:160:ALA:CB | 0.49 | 3.01 | 9 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HB3 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.49 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:124:ARG:CB | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.49 | 2.75 | 15 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CB | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.49 | 2.38 | 20 | 2 |
| 1:A:142:MET:HA | 1:A:185:TYR:OH | 0.49 | 2.07 | 13 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CB | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.49 | 2.95 | 6 | 9 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:177:PHE:HB2 | 0.49 | 2.08 | 17 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:PHE:CB | 0.49 | 2.61 | 6 | 4 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.49 | 1.85 | 3 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HE1 | 1:A:126:CYS:HG | 0.49 | 1.51 | 7 | 1 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:174:THR:HG22 | 0.49 | 2.07 | 14 | 1 |
| 1:A:128:ALA:CA | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.49 | 2.61 | 5 | 2 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:135:LYS:CG | 0.49 | 2.60 | 9 | 1 |
| 1:A:110:ALA:CA | 1:A:113:PHE:CE2 | 0.49 | 2.96 | 7 | 1 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:148:MET:SD | 0.48 | 2.71 | 2 | 4 |
| 1:A:17:THR:HG21 | 1:A:179:ASN:HA | 0.48 | 1.84 | 16 | 2 |
| 1:A:149:LEU:HD22 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.48 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:172:HIS:O | 1:A:176:ASN:CA | 0.48 | 2.61 | 8 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:38:LEU:CD1 | 0.48 | 2.91 | 7 | 3 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:87:ALA:O | 0.48 | 2.61 | 16 | 3 |
| 1:A:154:LEU:HD23 | 1:A:158:LYS:HD3 | 0.48 | 1.84 | 1 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:19:LEU:HB2 | 0.48 | 1.84 | 7 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG22 | 1:A:171:PHE:CB | 0.48 | 2.39 | 14 | 4 |
| 1:A:24:PHE:CE2 | 1:A:91:ALA:CB | 0.48 | 2.96 | 15 | 9 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:178:ILE:HG13 | 0.48 | 2.36 | 16 | 1 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:174:THR:HG23 | 0.48 | 2.09 | 7 | 3 |
| 1:A:165:SER:O | 1:A:166:LEU:HD22 | 0.48 | 2.07 | 11 | 2 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:HB2 | 0.48 | 2.08 | 11 | 2 |
| 1:A:112:GLN:NE2 | 1:A:133:GLU:OE2 | 0.48 | 2.46 | 1 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.48 | 2.89 | 12 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HA | 1:A:113:PHE:HD2 | 0.48 | 1.66 | 14 | 3 |
| 1:A:145:ASP:HA | 1:A:185:TYR:CD2 | 0.48 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:151:MET:CB | 0.48 | 2.91 | 12 | 2 |
| 1:A:106:VAL:HG23 | 1:A:107:ARG:N | 0.48 | 2.19 | 9 | 1 |
| 1:A:114:MET:HB3 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.48 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:134:VAL:CA | 0.48 | 2.62 | 5 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CE | 1:A:135:LYS:HA | 0.48 | 2.38 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:127:LEU:N | 0.48 | 2.81 | 8 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:148:MET:SD | 0.48 | 3.01 | 19 | 4 |
| 1:A:155:LEU:N | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.48 | 2.51 | 6 | 4 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:176:ASN:HD21 | 0.48 | 1.66 | 4 | 1 |
| 1:A:140:ARG:CB | 1:A:144:ASN:CG | 0.48 | 2.79 | 11 | 1 |
| 1:A:37:VAL:O | 1:A:40:ARG:HG3 | 0.48 | 2.08 | 9 | 1 |
| 1:A:140:ARG:N | 1:A:144:ASN:CG | 0.48 | 2.67 | 3 | 1 |
| 1:A:180:GLN:OE1 | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.48 | 2.62 | 3 | 1 |
| 1:A:19:LEU:CD1 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.48 | 2.95 | 6 | 1 |
| 1:A:168:ARG:O | 1:A:172:HIS:N | 0.48 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:97:MET:C | 1:A:99:HIS:N | 0.48 | 2.67 | 17 | 18 |
| 1:A:36:GLU:O | 1:A:40:ARG:O | 0.48 | 2.31 | 18 | 4 |
| 1:A:82:ILE:O | 1:A:82:ILE:HD13 | 0.48 | 2.09 | 14 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HG | 1:A:84:HIS:CD2 | 0.48 | 2.43 | 16 | 2 |
| 1:A:35:LEU:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.48 | 1.69 | 4 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HB2 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.48 | 2.42 | 17 | 2 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:28:SER:N | 0.48 | 2.46 | 18 | 2 |
| 1:A:32:ARG:CA | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.48 | 2.39 | 1 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:180:GLN:CG | 0.48 | 2.92 | 19 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HA | 1:A:151:MET:HE1 | 0.48 | 1.84 | 7 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:177:PHE:HE1 | 0.48 | 1.68 | 2 | 1 |
| 1:A:137:ALA:C | 1:A:138:PHE:CD1 | 0.48 | 2.87 | 10 | 1 |
| 1:A:156:ALA:C | 1:A:159:VAL:O | 0.48 | 2.49 | 10 | 1 |
| 1:A:160:ALA:HB1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 0.48 | 1.82 | 8 | 1 |
| 1:A:142:MET:CA | 1:A:185:TYR:OH | 0.48 | 2.61 | 17 | 5 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.48 | 2.40 | 14 | 2 |
| 1:A:133:GLU:CA | 1:A:133:GLU:OE1 | 0.48 | 2.61 | 15 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:HG3 | 0.48 | 2.07 | 20 | 1 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:184:SER:OG | 0.48 | 2.32 | 5 | 2 |
| 1:A:32:ARG:HA | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.48 | 1.85 | 1 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:107:ARG:HB2 | 0.48 | 1.83 | 10 | 2 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:151:MET:HE3 | 0.48 | 1.85 | 5 | 1 |
| 1:A:86:ILE:CD1 | 1:A:86:ILE:C | 0.48 | 2.76 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:127:LEU:N | 1:A:127:LEU:CD1 | 0.48 | 2.67 | 18 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:NE2 | 0.48 | 2.47 | 8 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:127:LEU:CA | 0.48 | 2.94 | 8 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.48 | 2.37 | 16 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:107:ARG:HB3 | 0.48 | 1.86 | 16 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HB | 1:A:183:PHE:CE2 | 0.48 | 2.43 | 16 | 3 |
| 1:A:146:LYS:HB2 | 1:A:185:TYR:CZ | 0.48 | 2.44 | 12 | 2 |
| 1:A:114:MET:HB2 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.48 | 1.84 | 7 | 3 |
| 1:A:125:ASN:O | 1:A:129:LYS:CG | 0.48 | 2.62 | 3 | 2 |
| 1:A:140:ARG:H | 1:A:144:ASN:CG | 0.48 | 2.12 | 3 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:CB | 0.48 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:151:MET:HG2 | 0.48 | 2.08 | 14 | 6 |
| 1:A:83:ILE:O | 1:A:86:ILE:CG1 | 0.48 | 2.62 | 13 | 4 |
| 1:A:23:GLY:O | 1:A:26:GLN:HG3 | 0.48 | 2.08 | 7 | 5 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:HB3 | 0.48 | 2.09 | 4 | 1 |
| 1:A:140:ARG:HB2 | 1:A:144:ASN:CB | 0.48 | 2.39 | 20 | 5 |
| 1:A:126:CYS:O | 1:A:129:LYS:HB3 | 0.48 | 2.09 | 18 | 3 |
| 1:A:157:LYS:C | 1:A:157:LYS:CD | 0.48 | 2.82 | 3 | 1 |
| 1:A:26:GLN:OE1 | 1:A:88:ARG:NE | 0.48 | 2.47 | 19 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:151:MET:HE1 | 0.48 | 2.39 | 5 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CZ | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.48 | 2.43 | 5 | 1 |
| 1:A:149:LEU:C | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.48 | 2.80 | 18 | 1 |
| 1:A:108:GLN:O | 1:A:111:ALA:HB3 | 0.48 | 2.09 | 7 | 3 |
| 1:A:107:ARG:CD | 1:A:107:ARG:C | 0.48 | 2.82 | 17 | 2 |
| 1:A:146:LYS:NZ | 1:A:146:LYS:CA | 0.48 | 2.77 | 14 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG2 | 1:A:98:ASP:N | 0.48 | 2.23 | 15 | 1 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:137:ALA:N | 0.48 | 2.47 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HG3 | 1:A:148:MET:CB | 0.48 | 2.39 | 6 | 1 |
| 1:A:182:LEU:O | 1:A:184:SER:O | 0.48 | 2.32 | 6 | 1 |
| 1:A:94:GLY:CA | 1:A:157:LYS:HD2 | 0.48 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:146:LYS:HZ1 | 1:A:146:LYS:HA | 0.47 | 1.69 | 14 | 1 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.47 | 2.91 | 10 | 2 |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:HG23 | 0.47 | 1.85 | 13 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.47 | 2.38 | 16 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:CG | 0.47 | 2.94 | 13 | 2 |
| 1:A:37:VAL:CG1 | 1:A:167:LEU:HD22 | 0.47 | 2.39 | 3 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CB | 0.47 | 2.39 | 19 | 1 |
| 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:88:ARG:CA | 0.47 | 2.39 | 6 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:153:MET:SD | 0.47 | 3.02 | 6 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CD | 1:A:139:PRO:HA | 0.47 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:152:THR:CB | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.47 | 2.97 | 2 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:131:LEU:HG | 1:A:180:GLN:OE1 | 0.47 | 2.09 | 18 | 1 |
| 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:88:ARG:O | 0.47 | 2.09 | 15 | 2 |
| 1:A:33:GLN:O | 1:A:37:VAL:CG2 | 0.47 | 2.61 | 15 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:34:GLU:HB3 | 0.47 | 2.39 | 4 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CA | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.47 | 2.97 | 20 | 1 |
| 1:A:158:LYS:CD | 1:A:158:LYS:N | 0.47 | 2.77 | 9 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CG1 | 1:A:107:ARG:HG2 | 0.47 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.47 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:134:VAL:HB | 0.47 | 1.87 | 8 | 1 |
| 1:A:21:VAL:CA | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.47 | 2.39 | 20 | 11 |
| 1:A:26:GLN:CD | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.47 | 2.82 | 4 | 1 |
| 1:A:124:ARG:C | 1:A:126:CYS:N | 0.47 | 2.68 | 11 | 1 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:CB | 0.47 | 2.62 | 9 | 1 |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:152:THR:CG2 | 0.47 | 2.61 | 9 | 1 |
| 1:A:142:MET:CA | 1:A:185:TYR:CZ | 0.47 | 2.97 | 1 | 1 |
| 1:A:34:GLU:OE1 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.47 | 2.09 | 19 | 1 |
| 1:A:178:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:O | 0.47 | 2.62 | 10 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:CD1 | 0.47 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HG13 | 0.47 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:98:ASP:OD1 | 1:A:99:HIS:N | 0.47 | 2.47 | 15 | 3 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:104:THR:CG2 | 0.47 | 2.63 | 18 | 3 |
| 1:A:145:ASP:OD1 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.47 | 2.62 | 13 | 1 |
| 1:A:29:GLY:O | 1:A:30:CYS:O | 0.47 | 2.32 | 1 | 1 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:144:ASN:CB | 0.47 | 2.63 | 6 | 1 |
| 1:A:183:PHE:C | 1:A:183:PHE:CD1 | 0.47 | 2.86 | 19 | 4 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:178:ILE:CG2 | 0.47 | 2.91 | 13 | 1 |
| 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:137:ALA:HB1 | 0.47 | 1.85 | 20 | 1 |
| 1:A:128:ALA:CB | 1:A:180:GLN:CD | 0.47 | 2.82 | 9 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:183:PHE:CD1 | 0.47 | 2.45 | 6 | 2 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:140:ARG:C | 0.47 | 2.53 | 6 | 1 |
| 1:A:109:LEU:H | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.47 | 2.21 | 7 | 1 |
| 1:A:33:GLN:O | 1:A:37:VAL:HB | 0.47 | 2.09 | 2 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:131:LEU:O | 0.47 | 2.09 | 10 | 1 |
| 1:A:140:ARG:C | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.47 | 2.30 | 1 | 6 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:THR:HG22 | 0.47 | 2.10 | 17 | 1 |
| 1:A:136:THR:HG23 | 1:A:136:THR:O | 0.47 | 2.10 | 17 | 1 |
| 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.47 | 2.40 | 12 | 1 |
| 1:A:147:ALA:C | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.47 | 2.30 | 9 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:107:ARG:HD3 | 0.47 | 2.39 | 19 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:C | 0.47 | 2.88 | 10 | 2 |
| 1:A:110:ALA:CA | 1:A:113:PHE:CD2 | 0.47 | 2.96 | 7 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:180:GLN:CG | 1:A:182:LEU:H | 0.47 | 2.21 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:127:LEU:HA | 0.47 | 2.45 | 8 | 2 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:177:PHE:CB | 0.47 | 2.93 | 15 | 3 |
| 1:A:160:ALA:HB2 | 1:A:170:VAL:CG1 | 0.47 | 2.35 | 17 | 3 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:34:GLU:CD | 0.47 | 2.93 | 18 | 10 |
| 1:A:91:ALA:O | 1:A:94:GLY:N | 0.47 | 2.48 | 2 | 9 |
| 1:A:34:GLU:CD | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.47 | 2.29 | 15 | 1 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.47 | 2.48 | 10 | 2 |
| 1:A:26:GLN:N | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.47 | 2.24 | 11 | 3 |
| 1:A:89:HIS:NE2 | 1:A:93:ILE:CG1 | 0.47 | 2.78 | 5 | 2 |
| 1:A:181:ASN:OD1 | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.47 | 2.61 | 13 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HD13 | 0.47 | 2.45 | 7 | 2 |
| 1:A:156:ALA:C | 1:A:160:ALA:CB | 0.47 | 2.83 | 11 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:148:MET:HE1 | 0.47 | 1.87 | 20 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CB | 1:A:35:LEU:CB | 0.47 | 2.93 | 17 | 2 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:133:GLU:HB3 | 0.47 | 2.40 | 12 | 1 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:181:ASN:ND2 | 0.47 | 2.87 | 12 | 1 |
| 1:A:152:THR:OG1 | 1:A:153:MET:CE | 0.47 | 2.62 | 3 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CZ | 1:A:155:LEU:CG | 0.47 | 2.97 | 19 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.47 | 2.40 | 19 | 1 |
| 1:A:126:CYS:SG | 1:A:127:LEU:CD2 | 0.47 | 3.03 | 6 | 2 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:151:MET:SD | 0.47 | 2.98 | 7 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG23 | 1:A:174:THR:HG1 | 0.47 | 1.68 | 10 | 2 |
| 1:A:151:MET:HA | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.47 | 2.38 | 2 | 1 |
| 1:A:152:THR:CA | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.47 | 2.98 | 5 | 1 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:174:THR:O | 0.47 | 2.62 | 5 | 1 |
| 1:A:124:ARG:CA | 1:A:127:LEU:CD2 | 0.47 | 2.93 | 18 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD11 | 1:A:30:CYS:N | 0.47 | 2.25 | 1 | 1 |
| 1:A:98:ASP:O | 1:A:99:HIS:C | 0.47 | 2.54 | 7 | 3 |
| 1:A:24:PHE:CE1 | 1:A:91:ALA:CB | 0.47 | 2.98 | 19 | 3 |
| 1:A:24:PHE:CD2 | 1:A:91:ALA:N | 0.47 | 2.83 | 2 | 5 |
| 1:A:165:SER:C | 1:A:166:LEU:HD13 | 0.47 | 2.29 | 20 | 1 |
| 1:A:31:THR:O | 1:A:34:GLU:CB | 0.47 | 2.63 | 18 | 6 |
| 1:A:125:ASN:OD1 | 1:A:126:CYS:N | 0.47 | 2.48 | 19 | 1 |
| 1:A:175:VAL:HG13 | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.47 | 1.87 | 6 | 1 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:160:ALA:O | 0.47 | 2.68 | 2 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.47 | 1.83 | 13 | 2 |
| 1:A:112:GLN:CD | 1:A:113:PHE:H | 0.47 | 2.05 | 20 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HG12 | 0.47 | 2.44 | 20 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 0.47 | 2.44 | 5 | 2 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:CD2 | 0.47 | 2.98 | 1 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:HG3 | 0.47 | 2.09 | 19 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CZ | 1:A:91:ALA:HA | 0.47 | 2.43 | 19 | 2 |
| 1:A:113:PHE:HE2 | 1:A:130:ALA:CB | 0.47 | 2.20 | 5 | 3 |
| 1:A:102:GLN:O | 1:A:102:GLN:NE2 | 0.47 | 2.48 | 2 | 1 |
| 1:A:155:LEU:N | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.47 | 2.25 | 5 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HE2 | 1:A:135:LYS:HA | 0.47 | 1.86 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:C | 1:A:113:PHE:HD1 | 0.46 | 2.07 | 14 | 1 |
| 1:A:167:LEU:O | 1:A:170:VAL:HB | 0.46 | 2.10 | 13 | 3 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:148:MET:SD | 0.46 | 2.50 | 15 | 1 |
| 1:A:30:CYS:CB | 1:A:34:GLU:HG2 | 0.46 | 2.40 | 6 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CG | 1:A:105:LEU:O | 0.46 | 2.64 | 12 | 2 |
| 1:A:184:SER:O | 1:A:185:TYR:O | 0.46 | 2.34 | 6 | 1 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:184:SER:C | 0.46 | 2.54 | 2 | 1 |
| 1:A:131:LEU:N | 1:A:177:PHE:CE2 | 0.46 | 2.83 | 5 | 1 |
| 1:A:104:THR:CG2 | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.46 | 2.39 | 12 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CG | 1:A:138:PHE:CZ | 0.46 | 2.98 | 12 | 1 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:177:PHE:HD2 | 0.46 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:152:THR:HA | 1:A:155:LEU:HD21 | 0.46 | 1.87 | 5 | 1 |
| 1:A:83:ILE:CG1 | 1:A:84:HIS:N | 0.46 | 2.78 | 5 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HG | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.46 | 2.45 | 8 | 1 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:HB | 0.46 | 2.10 | 8 | 4 |
| 1:A:31:THR:O | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.46 | 2.11 | 14 | 1 |
| 1:A:144:ASN:O | 1:A:145:ASP:C | 0.46 | 2.52 | 4 | 12 |
| 1:A:178:ILE:CD1 | 1:A:178:ILE:C | 0.46 | 2.76 | 15 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:CZ | 0.46 | 2.46 | 15 | 3 |
| 1:A:124:ARG:CA | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.46 | 2.38 | 10 | 2 |
| 1:A:106:VAL:C | 1:A:108:GLN:N | 0.46 | 2.68 | 20 | 3 |
| 1:A:155:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:HG23 | 0.46 | 1.87 | 16 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:134:VAL:HA | 0.46 | 1.86 | 12 | 1 |
| 1:A:97:MET:CE | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.46 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:CB | 0.46 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HZ2 | 1:A:148:MET:H | 0.46 | 1.52 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:CD1 | 0.46 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CG1 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.46 | 2.40 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CB | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.46 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:114:MET:CG | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.46 | 2.41 | 15 | 2 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:104:THR:HB | 0.46 | 2.10 | 10 | 6 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:107:ARG:HG2 | 0.46 | 2.10 | 18 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:83:ILE:CD1 | 0.46 | 2.92 | 18 | 1 |
| 1:A:160:ALA:CB | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.46 | 2.92 | 8 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD12 | 1:A:154:LEU:C | 0.46 | 2.31 | 14 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:LEU:N | 0.46 | 2.26 | 16 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:126:CYS:HB3 | 0.46 | 2.45 | 11 | 2 |
| 1:A:134:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CE2 | 0.46 | 2.45 | 20 | 2 |
| 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:LEU:H | 0.46 | 1.69 | 17 | 8 |
| 1:A:25:LEU:CG | 1:A:171:PHE:CE1 | 0.46 | 2.98 | 18 | 3 |
| 1:A:93:ILE:CG2 | 1:A:150:ILE:HG13 | 0.46 | 2.40 | 6 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CD | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.46 | 2.63 | 18 | 1 |
| 1:A:158:LYS:N | 1:A:158:LYS:CD | 0.46 | 2.78 | 13 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:36:GLU:CA | 0.46 | 2.38 | 13 | 4 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:105:LEU:O | 0.46 | 2.60 | 11 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HA | 1:A:151:MET:CE | 0.46 | 2.40 | 5 | 3 |
| 1:A:86:ILE:CG2 | 1:A:87:ALA:N | 0.46 | 2.79 | 7 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CD2 | 1:A:93:ILE:CG1 | 0.46 | 2.99 | 5 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:114:MET:CA | 0.46 | 2.99 | 14 | 1 |
| 1:A:176:ASN:OD1 | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.46 | 2.69 | 15 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HG | 1:A:153:MET:CE | 0.46 | 2.40 | 17 | 2 |
| 1:A:94:GLY:HA2 | 1:A:153:MET:SD | 0.46 | 2.50 | 16 | 2 |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:148:MET:SD | 0.46 | 2.51 | 11 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:CG | 0.46 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:149:LEU:HD23 | 1:A:149:LEU:C | 0.46 | 2.31 | 3 | 1 |
| 1:A:140:ARG:HB2 | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.46 | 1.87 | 6 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CG2 | 1:A:153:MET:CE | 0.46 | 2.93 | 6 | 1 |
| 1:A:153:MET:C | 1:A:157:LYS:HD3 | 0.46 | 2.30 | 7 | 1 |
| 1:A:34:GLU:HG3 | 1:A:38:LEU:CD2 | 0.46 | 2.41 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:CB | 0.46 | 2.41 | 8 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.46 | 1.88 | 14 | 1 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:CG2 | 0.46 | 2.57 | 15 | 1 |
| 1:A:175:VAL:HA | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.46 | 2.40 | 16 | 1 |
| 1:A:133:GLU:C | 1:A:136:THR:OG1 | 0.46 | 2.54 | 12 | 2 |
| 1:A:133:GLU:O | 1:A:136:THR:CB | 0.46 | 2.63 | 6 | 1 |
| 1:A:124:ARG:CD | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.46 | 2.79 | 16 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.46 | 2.38 | 10 | 1 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:HG | 0.46 | 2.31 | 19 | 3 |
| 1:A:133:GLU:OE1 | 1:A:136:THR:HG22 | 0.46 | 2.11 | 15 | 1 |
| 1:A:157:LYS:NZ | 1:A:157:LYS:O | 0.46 | 2.46 | 18 | 2 |
| 1:A:157:LYS:CA | 1:A:161:SER:HB2 | 0.46 | 2.41 | 16 | 2 |
| 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:147:ALA:HB1 | 0.46 | 1.71 | 2 | 2 |
| 1:A:89:HIS:CE1 | 1:A:93:ILE:HD12 | 0.46 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG3 | 1:A:98:ASP:N | 0.46 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:CA | 0.46 | 2.41 | 12 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:113:PHE:HE2 | 0.46 | 1.70 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:134:VAL:CB | 1:A:138:PHE:CZ | 0.46 | 2.99 | 9 | 2 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:177:PHE:HA | 0.46 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:32:ARG:HA | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.46 | 2.41 | 1 | 1 |
| 1:A:40:ARG:CD | 1:A:40:ARG:O | 0.46 | 2.63 | 1 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CE1 | 1:A:25:LEU:CD1 | 0.46 | 2.99 | 3 | 2 |
| 1:A:160:ALA:HB2 | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.46 | 2.40 | 10 | 1 |
| 1:A:34:GLU:OE2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.45 | 2.10 | 14 | 1 |
| 1:A:160:ALA:O | 1:A:162:HIS:N | 0.45 | 2.49 | 7 | 4 |
| 1:A:154:LEU:HG | 1:A:155:LEU:N | 0.45 | 2.26 | 17 | 2 |
| 1:A:101:ILE:CG2 | 1:A:107:ARG:HB3 | 0.45 | 2.40 | 16 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:N | 0.45 | 2.49 | 9 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:84:HIS:HE1 | 0.45 | 1.70 | 10 | 1 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:182:LEU:HG | 0.45 | 2.50 | 14 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HA | 1:A:112:GLN:HG2 | 0.45 | 1.88 | 15 | 2 |
| 1:A:149:LEU:HD22 | 1:A:152:THR:OG1 | 0.45 | 2.10 | 15 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HG13 | 1:A:153:MET:SD | 0.45 | 2.51 | 15 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HG | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.45 | 2.41 | 12 | 3 |
| 1:A:103:PRO:CD | 1:A:106:VAL:HB | 0.45 | 2.41 | 3 | 2 |
| 1:A:134:VAL:O | 1:A:138:PHE:CZ | 0.45 | 2.69 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:134:VAL:HG13 | 0.45 | 1.87 | 14 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG3 | 1:A:101:ILE:CG1 | 0.45 | 2.41 | 16 | 4 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:HG3 | 0.45 | 2.11 | 4 | 2 |
| 1:A:24:PHE:CE1 | 1:A:29:GLY:CA | 0.45 | 2.99 | 9 | 1 |
| 1:A:97:MET:CG | 1:A:153:MET:CE | 0.45 | 2.94 | 1 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:157:LYS:NZ | 0.45 | 2.79 | 7 | 1 |
| 1:A:94:GLY:O | 1:A:157:LYS:HE3 | 0.45 | 2.12 | 7 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HB3 | 1:A:108:GLN:CB | 0.45 | 2.42 | 8 | 3 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:102:GLN:HB3 | 0.45 | 2.11 | 10 | 5 |
| 1:A:173:THR:CA | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.45 | 2.41 | 13 | 5 |
| 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:84:HIS:CD2 | 0.45 | 2.47 | 14 | 1 |
| 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 0.45 | 1.68 | 15 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HA | 1:A:134:VAL:CG1 | 0.45 | 2.42 | 17 | 2 |
| 1:A:158:LYS:NZ | 1:A:158:LYS:CB | 0.45 | 2.78 | 20 | 1 |
| 1:A:96:GLU:C | 1:A:96:GLU:CD | 0.45 | 2.75 | 9 | 1 |
| 1:A:124:ARG:NH1 | 1:A:172:HIS:CE1 | 0.45 | 2.84 | 1 | 1 |
| 1:A:148:MET:HE2 | 1:A:182:LEU:CD2 | 0.45 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:26:GLN:N | 1:A:35:LEU:HD22 | 0.45 | 2.27 | 19 | 1 |
| 1:A:128:ALA:HB2 | 1:A:180:GLN:HG3 | 0.45 | 1.88 | 6 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CG | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.45 | 2.44 | 8 | 1 |
| 1:A:152:THR:CG2 | 1:A:177:PHE:CD1 | 0.45 | 2.97 | 3 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CB | 1:A:138:PHE:CZ | 0.45 | 3.00 | 10 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:124:ARG:CB | 1:A:172:HIS:CE1 | 0.45 | 2.98 | 6 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:PHE:HB2 | 0.45 | 2.12 | 18 | 2 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:131:LEU:C | 0.45 | 2.30 | 18 | 1 |
| 1:A:168:ARG:CD | 1:A:169:ASP:N | 0.45 | 2.80 | 18 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HG3 | 1:A:172:HIS:CE1 | 0.45 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:87:ALA:CA | 0.45 | 2.34 | 19 | 4 |
| 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:N | 0.45 | 2.26 | 15 | 1 |
| 1:A:159:VAL:CA | 1:A:163:ALA:H | 0.45 | 2.25 | 19 | 3 |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:155:LEU:HD22 | 0.45 | 1.88 | 16 | 1 |
| 1:A:34:GLU:HA | 1:A:37:VAL:HG12 | 0.45 | 1.88 | 16 | 1 |
| 1:A:126:CYS:O | 1:A:129:LYS:CB | 0.45 | 2.65 | 7 | 3 |
| 1:A:144:ASN:N | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.45 | 2.65 | 17 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:107:ARG:O | 0.45 | 2.11 | 1 | 1 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:112:GLN:NE2 | 0.45 | 2.69 | 1 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:109:LEU:H | 0.45 | 2.18 | 5 | 1 |
| 1:A:154:LEU:O | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.45 | 2.62 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD2 | 1:A:135:LYS:HG3 | 0.45 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:91:ALA:O | 1:A:153:MET:HE2 | 0.45 | 2.11 | 8 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:O | 0.45 | 2.12 | 8 | 3 |
| 1:A:160:ALA:C | 1:A:162:HIS:H | 0.45 | 2.15 | 7 | 4 |
| 1:A:34:GLU:CG | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.45 | 2.40 | 15 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CD2 | 1:A:93:ILE:HG12 | 0.45 | 2.46 | 4 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CD1 | 1:A:126:CYS:CB | 0.45 | 3.00 | 17 | 2 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:HB2 | 0.45 | 2.11 | 9 | 1 |
| 1:A:140:ARG:O | 1:A:145:ASP:OD1 | 0.45 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:158:LYS:HG2 | 0.45 | 2.11 | 7 | 1 |
| 1:A:100:ASN:O | 1:A:107:ARG:NE | 0.45 | 2.50 | 2 | 1 |
| 1:A:178:ILE:O | 1:A:183:PHE:CA | 0.45 | 2.65 | 2 | 1 |
| 1:A:86:ILE:HD12 | 1:A:86:ILE:O | 0.45 | 2.11 | 5 | 1 |
| 1:A:156:ALA:C | 1:A:160:ALA:HB2 | 0.45 | 2.32 | 11 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CG | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.45 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:112:GLN:NE2 | 1:A:133:GLU:OE1 | 0.45 | 2.50 | 9 | 1 |
| 1:A:180:GLN:NE2 | 1:A:181:ASN:CB | 0.45 | 2.80 | 3 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG22 | 1:A:135:LYS:HZ1 | 0.45 | 1.72 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:HB2 | 0.45 | 1.89 | 18 | 1 |
| 1:A:178:ILE:HD12 | 1:A:178:ILE:H | 0.45 | 1.71 | 14 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HB2 | 1:A:126:CYS:O | 0.45 | 2.12 | 15 | 1 |
| 1:A:176:ASN:HA | 1:A:179:ASN:OD1 | 0.45 | 2.12 | 11 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HB | 1:A:151:MET:CE | 0.45 | 2.42 | 1 | 3 |
| 1:A:160:ALA:N | 1:A:163:ALA:O | 0.45 | 2.50 | 9 | 2 |
| 1:A:26:GLN:HB2 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.45 | 2.42 | 18 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:34:GLU:O | 1:A:37:VAL:HG12 | 0.45 | 2.11 | 3 | 2 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:135:LYS:HG3 | 0.45 | 2.12 | 19 | 1 |
| 1:A:149:LEU:CD1 | 1:A:178:ILE:HG12 | 0.45 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:107:ARG:NH1 | 1:A:150:ILE:HG21 | 0.45 | 2.27 | 2 | 1 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:161:SER:HB2 | 0.45 | 2.12 | 2 | 1 |
| 1:A:140:ARG:HB3 | 1:A:143:GLU:CG | 0.45 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:159:VAL:O | 1:A:162:HIS:CA | 0.45 | 2.63 | 9 | 5 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:134:VAL:HA | 0.45 | 2.42 | 6 | 1 |
| 1:A:158:LYS:HA | 1:A:162:HIS:CD2 | 0.45 | 2.47 | 10 | 1 |
| 1:A:157:LYS:O | 1:A:162:HIS:CD2 | 0.45 | 2.70 | 18 | 1 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:151:MET:CG | 0.44 | 2.65 | 15 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HE2 | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.44 | 1.64 | 13 | 1 |
| 1:A:150:ILE:HA | 1:A:153:MET:CE | 0.44 | 2.42 | 1 | 1 |
| 1:A:114:MET:HB3 | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.44 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:83:ILE:HG21 | 0.44 | 1.87 | 10 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 0.44 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:114:MET:SD | 1:A:114:MET:O | 0.44 | 2.75 | 17 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:87:ALA:O | 0.44 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:158:LYS:C | 1:A:162:HIS:HB2 | 0.44 | 2.32 | 11 | 1 |
| 1:A:104:THR:CG2 | 1:A:104:THR:O | 0.44 | 2.65 | 20 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.44 | 1.88 | 20 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HB2 | 1:A:148:MET:SD | 0.44 | 2.52 | 19 | 2 |
| 1:A:106:VAL:CG1 | 1:A:107:ARG:NH1 | 0.44 | 2.80 | 19 | 1 |
| 1:A:98:ASP:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 0.44 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:CD1 | 0.44 | 2.84 | 5 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HB3 | 1:A:173:THR:HG23 | 0.44 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HG3 | 1:A:139:PRO:HB3 | 0.44 | 1.88 | 7 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:175:VAL:HA | 0.44 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:HD23 | 0.44 | 1.81 | 10 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:H | 0.44 | 1.66 | 18 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CD | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.44 | 2.86 | 18 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HD2 | 1:A:130:ALA:CB | 0.44 | 2.21 | 8 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CZ | 1:A:153:MET:CE | 0.44 | 2.99 | 8 | 1 |
| 1:A:131:LEU:N | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.44 | 2.86 | 6 | 2 |
| 1:A:124:ARG:NH2 | 1:A:180:GLN:OE1 | 0.44 | 2.50 | 14 | 1 |
| 1:A:168:ARG:HG2 | 1:A:169:ASP:N | 0.44 | 2.27 | 14 | 1 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.44 | 2.89 | 16 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HG13 | 1:A:94:GLY:N | 0.44 | 2.27 | 16 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG3 | 1:A:153:MET:CE | 0.44 | 2.43 | 1 | 1 |
| 1:A:83:ILE:HG22 | 1:A:84:HIS:N | 0.44 | 2.28 | 1 | 1 |
| 1:A:141:ASP:N | 1:A:144:ASN:ND2 | 0.44 | 2.66 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:153:MET:SD | 0.44 | 2.76 | 19 | 2 |
| 1:A:22:PHE:O | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.44 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:142:MET:CG | 1:A:143:GLU:N | 0.44 | 2.80 | 8 | 1 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:157:LYS:C | 0.44 | 2.56 | 8 | 1 |
| 1:A:160:ALA:HB3 | 1:A:170:VAL:CG2 | 0.44 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:34:GLU:OE1 | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.44 | 2.12 | 15 | 1 |
| 1:A:140:ARG:CA | 1:A:144:ASN:HB2 | 0.44 | 2.42 | 11 | 2 |
| 1:A:154:LEU:CD2 | 1:A:158:LYS:HD3 | 0.44 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:LEU:HG | 0.44 | 2.12 | 1 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:131:LEU:C | 0.44 | 2.75 | 1 | 2 |
| 1:A:25:LEU:O | 1:A:28:SER:O | 0.44 | 2.35 | 1 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HD2 | 1:A:135:LYS:O | 0.44 | 2.13 | 19 | 1 |
| 1:A:148:MET:CE | 1:A:181:ASN:OD1 | 0.44 | 2.66 | 7 | 1 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:161:SER:N | 0.44 | 2.47 | 2 | 1 |
| 1:A:107:ARG:O | 1:A:107:ARG:CG | 0.44 | 2.66 | 15 | 2 |
| 1:A:135:LYS:HE2 | 1:A:148:MET:CG | 0.44 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG21 | 1:A:148:MET:N | 0.44 | 2.28 | 20 | 1 |
| 1:A:147:ALA:HA | 1:A:150:ILE:HD11 | 0.44 | 1.89 | 9 | 1 |
| 1:A:180:GLN:OE1 | 1:A:182:LEU:HD21 | 0.44 | 2.12 | 3 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HA | 1:A:151:MET:SD | 0.44 | 2.52 | 2 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:CA | 0.44 | 2.66 | 4 | 1 |
| 1:A:155:LEU:HD13 | 1:A:155:LEU:N | 0.44 | 2.27 | 17 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HA | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.44 | 2.48 | 9 | 2 |
| 1:A:27:SER:CB | 1:A:88:ARG:HB2 | 0.44 | 2.43 | 1 | 2 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:17:THR:N | 0.44 | 2.80 | 6 | 2 |
| 1:A:130:ALA:C | 1:A:134:VAL:CG1 | 0.44 | 2.85 | 2 | 1 |
| 1:A:124:ARG:O | 1:A:124:ARG:CG | 0.44 | 2.66 | 8 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.44 | 2.39 | 14 | 1 |
| 1:A:171:PHE:HA | 1:A:174:THR:CG2 | 0.44 | 2.43 | 14 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:108:GLN:HG2 | 0.44 | 2.43 | 4 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HG2 | 1:A:172:HIS:CE1 | 0.44 | 2.48 | 4 | 1 |
| 1:A:27:SER:CB | 1:A:88:ARG:CG | 0.44 | 2.96 | 7 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HA | 1:A:112:GLN:CG | 0.44 | 2.42 | 7 | 1 |
| 1:A:148:MET:O | 1:A:177:PHE:HE2 | 0.44 | 1.93 | 18 | 1 |
| 1:A:168:ARG:HD3 | 1:A:169:ASP:N | 0.44 | 2.28 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CG | 1:A:178:ILE:HD13 | 0.44 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CG | 1:A:35:LEU:HD13 | 0.44 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:HA2 | 1:A:97:MET:HE2 | 0.44 | 1.88 | 8 | 1 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:98:ASP:C | 0.44 | 2.56 | 13 | 12 |
| 1:A:151:MET:O | 1:A:154:LEU:CD2 | 0.44 | 2.66 | 16 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:CB | 0.44 | 2.95 | 16 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:88:ARG:HG3 | 1:A:89:HIS:N | 0.44 | 2.27 | 18 | 2 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:133:GLU:CB | 0.44 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HB3 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.44 | 1.72 | 3 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CD1 | 1:A:153:MET:SD | 0.44 | 3.05 | 19 | 1 |
| 1:A:106:VAL:HA | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.44 | 1.89 | 5 | 1 |
| 1:A:96:GLU:O | 1:A:99:HIS:CB | 0.43 | 2.65 | 15 | 4 |
| 1:A:107:ARG:HD2 | 1:A:154:LEU:CG | 0.43 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:177:PHE:CG | 0.43 | 2.47 | 11 | 1 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:133:GLU:HG2 | 0.43 | 2.12 | 17 | 1 |
| 1:A:114:MET:O | 1:A:114:MET:HG2 | 0.43 | 2.12 | 9 | 1 |
| 1:A:125:ASN:CG | 1:A:126:CYS:N | 0.43 | 2.70 | 19 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD23 | 1:A:158:LYS:HD2 | 0.43 | 1.89 | 6 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CZ | 1:A:35:LEU:CD2 | 0.43 | 3.01 | 5 | 1 |
| 1:A:146:LYS:O | 1:A:149:LEU:HG | 0.43 | 2.13 | 18 | 1 |
| 1:A:140:ARG:HB3 | 1:A:143:GLU:HG2 | 0.43 | 1.90 | 8 | 1 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:98:ASP:OD2 | 0.43 | 2.36 | 14 | 1 |
| 1:A:148:MET:SD | 1:A:182:LEU:CG | 0.43 | 3.06 | 11 | 2 |
| 1:A:145:ASP:CB | 1:A:185:TYR:CG | 0.43 | 3.00 | 16 | 1 |
| 1:A:173:THR:HA | 1:A:176:ASN:HB3 | 0.43 | 1.90 | 16 | 2 |
| 1:A:111:ALA:CB | 1:A:154:LEU:HD11 | 0.43 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:150:ILE:O | 1:A:154:LEU:N | 0.43 | 2.51 | 3 | 1 |
| 1:A:154:LEU:CD2 | 1:A:158:LYS:HG2 | 0.43 | 2.44 | 11 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:150:ILE:HD12 | 0.43 | 1.90 | 1 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.43 | 2.42 | 18 | 2 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:107:ARG:HB2 | 0.43 | 2.13 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LEU:CD1 | 1:A:132:ASP:N | 0.43 | 2.67 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:20:LEU:C | 0.43 | 2.34 | 18 | 1 |
| 1:A:103:PRO:HD2 | 1:A:106:VAL:CG2 | 0.43 | 2.44 | 12 | 1 |
| 1:A:96:GLU:HG3 | 1:A:97:MET:N | 0.43 | 2.29 | 9 | 1 |
| 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:THR:OG1 | 0.43 | 2.54 | 3 | 2 |
| 1:A:132:ASP:HA | 1:A:135:LYS:CG | 0.43 | 2.43 | 19 | 1 |
| 1:A:29:GLY:O | 1:A:161:SER:OG | 0.43 | 2.36 | 10 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.43 | 3.01 | 5 | 2 |
| 1:A:134:VAL:O | 1:A:135:LYS:HE2 | 0.43 | 2.13 | 18 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:153:MET:HE2 | 0.43 | 2.13 | 15 | 1 |
| 1:A:145:ASP:HA | 1:A:148:MET:HE3 | 0.43 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:147:ALA:CA | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.43 | 2.44 | 9 | 1 |
| 1:A:138:PHE:HB2 | 1:A:147:ALA:HB3 | 0.43 | 1.90 | 7 | 2 |
| 1:A:146:LYS:HB2 | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.43 | 2.49 | 7 | 1 |
| 1:A:170:VAL:O | 1:A:173:THR:N | 0.43 | 2.52 | 18 | 1 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:179:ASN:N | 0.43 | 2.77 | 14 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:177:PHE:C | 1:A:181:ASN:CB | 0.43 | 2.86 | 15 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CD1 | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.43 | 2.44 | 16 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CG2 | 1:A:148:MET:HA | 0.43 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:150:ILE:HB | 0.43 | 1.89 | 9 | 1 |
| 1:A:97:MET:HE2 | 1:A:150:ILE:HD11 | 0.43 | 1.91 | 3 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:134:VAL:CG2 | 0.43 | 2.86 | 6 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:CA | 0.43 | 2.96 | 6 | 1 |
| 1:A:135:LYS:NZ | 1:A:145:ASP:HA | 0.43 | 2.29 | 7 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HD3 | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.43 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HG | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.43 | 1.87 | 18 | 1 |
| 1:A:21:VAL:CG1 | 1:A:175:VAL:HB | 0.43 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.43 | 1.90 | 8 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HB2 | 1:A:148:MET:CE | 0.43 | 2.43 | 3 | 2 |
| 1:A:106:VAL:CA | 1:A:151:MET:HE1 | 0.43 | 2.44 | 15 | 2 |
| 1:A:159:VAL:CG1 | 1:A:160:ALA:N | 0.43 | 2.74 | 7 | 3 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:HA | 0.43 | 2.14 | 4 | 2 |
| 1:A:149:LEU:HD23 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.43 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:142:MET:SD | 1:A:185:TYR:CD1 | 0.43 | 3.12 | 20 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.43 | 1.90 | 17 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 0.43 | 2.43 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:133:GLU:CB | 0.43 | 2.93 | 12 | 1 |
| 1:A:107:ARG:C | 1:A:107:ARG:CD | 0.43 | 2.85 | 1 | 1 |
| 1:A:173:THR:HA | 1:A:176:ASN:OD1 | 0.43 | 2.07 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:C | 1:A:137:ALA:N | 0.43 | 2.70 | 5 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:178:ILE:HD12 | 0.43 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:32:ARG:HA | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.43 | 2.42 | 14 | 1 |
| 1:A:157:LYS:CA | 1:A:161:SER:CB | 0.43 | 2.96 | 16 | 2 |
| 1:A:94:GLY:CA | 1:A:153:MET:SD | 0.43 | 3.07 | 4 | 1 |
| 1:A:175:VAL:O | 1:A:179:ASN:OD1 | 0.43 | 2.36 | 19 | 1 |
| 1:A:16:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:CG | 0.43 | 3.02 | 6 | 1 |
| 1:A:174:THR:O | 1:A:178:ILE:HG23 | 0.43 | 2.13 | 2 | 1 |
| 1:A:176:ASN:O | 1:A:179:ASN:CG | 0.43 | 2.57 | 2 | 1 |
| 1:A:156:ALA:HA | 1:A:159:VAL:O | 0.43 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:134:VAL:C | 1:A:135:LYS:HE2 | 0.43 | 2.34 | 18 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.43 | 2.49 | 14 | 2 |
| 1:A:156:ALA:O | 1:A:160:ALA:HB3 | 0.43 | 2.14 | 11 | 2 |
| 1:A:97:MET:CB | 1:A:101:ILE:HG13 | 0.43 | 2.43 | 17 | 1 |
| 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:88:ARG:CB | 0.43 | 2.44 | 6 | 1 |
| 1:A:167:LEU:C | 1:A:169:ASP:N | 0.43 | 2.71 | 2 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:178:ILE:HG21 | 0.43 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:138:PHE:CD2 | 1:A:147:ALA:HB3 | 0.43 | 2.49 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:125:ASN:O | 1:A:129:LYS:HB3 | 0.43 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:153:MET:HG3 | 0.43 | 1.89 | 8 | 1 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:108:GLN:HB3 | 0.43 | 2.44 | 16 | 2 |
| 1:A:140:ARG:HD3 | 1:A:141:ASP:N | 0.43 | 2.29 | 13 | 1 |
| 1:A:152:THR:HG1 | 1:A:174:THR:CA | 0.43 | 2.24 | 9 | 1 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:34:GLU:CG | 0.43 | 3.06 | 5 | 1 |
| 1:A:179:ASN:C | 1:A:180:GLN:O | 0.43 | 2.57 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:HA2 | 1:A:97:MET:CE | 0.42 | 2.44 | 8 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:153:MET:CE | 0.42 | 2.67 | 15 | 1 |
| 1:A:26:GLN:HG3 | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.42 | 2.44 | 9 | 2 |
| 1:A:166:LEU:CB | 1:A:169:ASP:HB2 | 0.42 | 2.43 | 12 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG2 | 1:A:150:ILE:HG23 | 0.42 | 1.90 | 6 | 1 |
| 1:A:157:LYS:CE | 1:A:157:LYS:HA | 0.42 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HB2 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.42 | 1.74 | 10 | 1 |
| 1:A:152:THR:CA | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.42 | 2.97 | 5 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HG | 1:A:167:LEU:C | 0.42 | 2.34 | 18 | 1 |
| 1:A:141:ASP:C | 1:A:145:ASP:OD2 | 0.42 | 2.58 | 7 | 2 |
| 1:A:124:ARG:HD3 | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.42 | 2.29 | 16 | 1 |
| 1:A:178:ILE:CG1 | 1:A:183:PHE:O | 0.42 | 2.68 | 4 | 1 |
| 1:A:135:LYS:C | 1:A:136:THR:CG2 | 0.42 | 2.87 | 13 | 1 |
| 1:A:145:ASP:HA | 1:A:148:MET:SD | 0.42 | 2.54 | 13 | 1 |
| 1:A:110:ALA:C | 1:A:113:PHE:CE2 | 0.42 | 2.92 | 11 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 0.42 | 1.90 | 19 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:HG3 | 0.42 | 1.85 | 8 | 2 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:154:LEU:HD22 | 0.42 | 1.90 | 14 | 1 |
| 1:A:93:ILE:CD1 | 1:A:153:MET:HE1 | 0.42 | 2.43 | 18 | 2 |
| 1:A:144:ASN:HA | 1:A:147:ALA:HB3 | 0.42 | 1.91 | 4 | 1 |
| 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:154:LEU:HD21 | 0.42 | 1.91 | 9 | 1 |
| 1:A:132:ASP:CA | 1:A:135:LYS:HG3 | 0.42 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:97:MET:SD | 0.42 | 2.77 | 19 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.42 | 1.74 | 6 | 1 |
| 1:A:154:LEU:HD21 | 1:A:158:LYS:HD2 | 0.42 | 1.91 | 7 | 1 |
| 1:A:169:ASP:OD1 | 1:A:173:THR:OG1 | 0.42 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:153:MET:N | 0.42 | 2.29 | 10 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:N | 0.42 | 2.29 | 5 | 1 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:31:THR:N | 0.42 | 2.91 | 5 | 1 |
| 1:A:166:LEU:O | 1:A:170:VAL:CB | 0.42 | 2.67 | 14 | 1 |
| 1:A:166:LEU:HB3 | 1:A:169:ASP:CB | 0.42 | 2.44 | 5 | 3 |
| 1:A:168:ARG:HB2 | 1:A:168:ARG:CZ | 0.42 | 2.44 | 16 | 1 |
| 1:A:146:LYS:HB2 | 1:A:185:TYR:CE1 | 0.42 | 2.50 | 12 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:HG2 | 0.42 | 2.14 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:135:LYS:HE2 | 0.42 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:134:VAL:CG2 | 0.42 | 2.40 | 6 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG2 | 1:A:150:ILE:CG2 | 0.42 | 2.44 | 6 | 1 |
| 1:A:83:ILE:HG13 | 1:A:84:HIS:N | 0.42 | 2.28 | 5 | 1 |
| 1:A:135:LYS:HE2 | 1:A:144:ASN:OD1 | 0.42 | 2.12 | 18 | 1 |
| 1:A:39:GLY:CA | 1:A:171:PHE:CE2 | 0.42 | 3.02 | 20 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:35:LEU:CA | 0.42 | 2.44 | 17 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CD2 | 0.42 | 3.03 | 10 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:167:LEU:HB2 | 0.42 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:94:GLY:HA2 | 1:A:153:MET:HE2 | 0.42 | 1.92 | 16 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CG2 | 1:A:107:ARG:CD | 0.42 | 2.98 | 4 | 2 |
| 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:17:THR:N | 0.42 | 2.30 | 5 | 3 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:101:ILE:HG12 | 0.42 | 2.14 | 17 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HG3 | 1:A:108:GLN:N | 0.42 | 2.30 | 9 | 2 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:105:LEU:HG | 0.42 | 2.14 | 12 | 1 |
| 1:A:19:LEU:CD1 | 1:A:84:HIS:NE2 | 0.42 | 2.82 | 1 | 1 |
| 1:A:152:THR:HG22 | 1:A:176:ASN:HD22 | 0.42 | 1.73 | 3 | 1 |
| 1:A:175:VAL:HG13 | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.42 | 2.45 | 6 | 1 |
| 1:A:142:MET:CB | 1:A:185:TYR:CZ | 0.42 | 3.02 | 6 | 1 |
| 1:A:181:ASN:ND2 | 1:A:181:ASN:O | 0.42 | 2.53 | 10 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD22 | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.42 | 1.92 | 18 | 1 |
| 1:A:27:SER:HB3 | 1:A:91:ALA:HB3 | 0.42 | 1.91 | 14 | 2 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:35:LEU:HB3 | 0.42 | 2.50 | 4 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE1 | 1:A:126:CYS:C | 0.42 | 2.93 | 13 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:GLY:HA3 | 0.42 | 1.91 | 20 | 1 |
| 1:A:108:GLN:O | 1:A:112:GLN:N | 0.42 | 2.53 | 5 | 1 |
| 1:A:127:LEU:N | 1:A:127:LEU:CD2 | 0.42 | 2.79 | 16 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CB | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.42 | 3.02 | 17 | 1 |
| 1:A:97:MET:CE | 1:A:150:ILE:HD13 | 0.42 | 2.45 | 1 | 1 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:CD2 | 0.42 | 2.73 | 10 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:HG2 | 0.42 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CB | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.42 | 2.97 | 13 | 2 |
| 1:A:131:LEU:O | 1:A:135:LYS:N | 0.42 | 2.49 | 17 | 2 |
| 1:A:155:LEU:H | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.42 | 2.25 | 11 | 1 |
| 1:A:127:LEU:CD2 | 1:A:173:THR:OG1 | 0.42 | 2.67 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CA | 1:A:112:GLN:HG2 | 0.42 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:168:ARG:HA | 0.42 | 1.90 | 12 | 1 |
| 1:A:114:MET:SD | 1:A:159:VAL:CG2 | 0.42 | 3.07 | 1 | 1 |
| 1:A:142:MET:HB3 | 1:A:185:TYR:CE2 | 0.42 | 2.48 | 1 | 1 |
| 1:A:177:PHE:HD1 | 1:A:177:PHE:N | 0.42 | 2.12 | 3 | 1 |
| 1:A:106:VAL:HG11 | 1:A:107:ARG:CZ | 0.42 | 2.44 | 19 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:31:THR:CG2 | 1:A:34:GLU:HB2 | 0.42 | 2.45 | 2 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG2 | 1:A:150:ILE:CG1 | 0.42 | 2.45 | 14 | 2 |
| 1:A:151:MET:CB | 1:A:154:LEU:HD23 | 0.42 | 2.45 | 17 | 2 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:92:GLN:CG | 0.42 | 2.68 | 16 | 1 |
| 1:A:35:LEU:N | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.42 | 2.28 | 4 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.42 | 1.91 | 1 | 1 |
| 1:A:148:MET:HE1 | 1:A:182:LEU:HD23 | 0.42 | 1.90 | 3 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HD3 | 1:A:151:MET:SD | 0.42 | 2.55 | 19 | 1 |
| 1:A:158:LYS:C | 1:A:162:HIS:HB3 | 0.42 | 2.35 | 6 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD1 | 1:A:168:ARG:CA | 0.42 | 2.98 | 10 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HG | 1:A:173:THR:OG1 | 0.42 | 2.14 | 5 | 1 |
| 1:A:154:LEU:CG | 1:A:155:LEU:N | 0.41 | 2.83 | 14 | 1 |
| 1:A:83:ILE:O | 1:A:86:ILE:HG12 | 0.41 | 2.15 | 18 | 2 |
| 1:A:34:GLU:O | 1:A:38:LEU:HG | 0.41 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:97:MET:CE | 1:A:153:MET:HB2 | 0.41 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:107:ARG:CG | 1:A:108:GLN:N | 0.41 | 2.81 | 9 | 2 |
| 1:A:135:LYS:HE3 | 1:A:135:LYS:C | 0.41 | 2.36 | 19 | 1 |
| 1:A:149:LEU:HD11 | 1:A:178:ILE:CG1 | 0.41 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.41 | 2.50 | 6 | 1 |
| 1:A:166:LEU:CB | 1:A:169:ASP:HB3 | 0.41 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:132:ASP:CA | 0.41 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:168:ARG:HA | 0.41 | 1.92 | 18 | 1 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:111:ALA:N | 0.41 | 2.73 | 7 | 2 |
| 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:154:LEU:HD13 | 0.41 | 1.91 | 16 | 1 |
| 1:A:85:ASN:O | 1:A:88:ARG:HG2 | 0.41 | 2.15 | 13 | 1 |
| 1:A:160:ALA:N | 1:A:170:VAL:HG21 | 0.41 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:177:PHE:O | 1:A:180:GLN:HB3 | 0.41 | 2.16 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CA | 1:A:135:LYS:HE2 | 0.41 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:109:LEU:HD13 | 0.41 | 2.07 | 5 | 1 |
| 1:A:176:ASN:OD1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 0.41 | 1.98 | 15 | 1 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:150:ILE:HB | 0.41 | 2.15 | 4 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:173:THR:CG2 | 0.41 | 2.44 | 17 | 1 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:98:ASP:OD1 | 0.41 | 2.37 | 12 | 1 |
| 1:A:152:THR:HA | 1:A:155:LEU:HD13 | 0.41 | 1.93 | 9 | 1 |
| 1:A:157:LYS:CD | 1:A:157:LYS:O | 0.41 | 2.67 | 3 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:138:PHE:CZ | 0.41 | 3.01 | 2 | 2 |
| 1:A:162:HIS:O | 1:A:164:PRO:HD3 | 0.41 | 2.15 | 7 | 1 |
| 1:A:152:THR:HB | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.41 | 2.51 | 2 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HA | 1:A:127:LEU:CG | 0.41 | 2.45 | 10 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HE | 1:A:108:GLN:N | 0.41 | 2.12 | 18 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:151:MET:CE | 0.41 | 2.46 | 8 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:88:ARG:C | 1:A:90:LEU:N | 0.41 | 2.73 | 14 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CD1 | 1:A:30:CYS:HB2 | 0.41 | 2.45 | 16 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HA | 1:A:168:ARG:HA | 0.41 | 1.92 | 4 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HG12 | 1:A:107:ARG:CG | 0.41 | 2.46 | 13 | 1 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:184:SER:HB2 | 0.41 | 2.16 | 17 | 1 |
| 1:A:147:ALA:HA | 1:A:150:ILE:CG1 | 0.41 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:147:ALA:HA | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.41 | 1.92 | 9 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:171:PHE:HE1 | 0.41 | 1.71 | 1 | 1 |
| 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:HD13 | 0.41 | 2.29 | 18 | 1 |
| 1:A:16:ILE:HD12 | 1:A:84:HIS:CE1 | 0.41 | 2.50 | 8 | 1 |
| 1:A:106:VAL:CG2 | 1:A:107:ARG:H | 0.41 | 2.24 | 9 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HB2 | 1:A:126:CYS:C | 0.41 | 2.36 | 6 | 1 |
| 1:A:137:ALA:HB1 | 1:A:138:PHE:CE1 | 0.41 | 2.50 | 10 | 1 |
| 1:A:21:VAL:C | 1:A:171:PHE:CZ | 0.41 | 2.92 | 8 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CG2 | 1:A:107:ARG:HD3 | 0.41 | 2.45 | 4 | 2 |
| 1:A:85:ASN:O | 1:A:88:ARG:HG3 | 0.41 | 2.14 | 13 | 1 |
| 1:A:97:MET:HG3 | 1:A:150:ILE:CD1 | 0.41 | 2.46 | 13 | 1 |
| 1:A:129:LYS:O | 1:A:133:GLU:OE1 | 0.41 | 2.38 | 17 | 1 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.41 | 2.89 | 12 | 1 |
| 1:A:150:ILE:HG13 | 1:A:151:MET:N | 0.41 | 2.30 | 1 | 1 |
| 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:PHE:H | 0.41 | 1.76 | 10 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.41 | 2.45 | 18 | 2 |
| 1:A:97:MET:CB | 1:A:150:ILE:HD11 | 0.41 | 2.45 | 8 | 1 |
| 1:A:97:MET:CG | 1:A:150:ILE:HG12 | 0.41 | 2.45 | 14 | 1 |
| 1:A:153:MET:O | 1:A:157:LYS:HB2 | 0.41 | 2.16 | 1 | 2 |
| 1:A:104:THR:C | 1:A:105:LEU:CG | 0.41 | 2.88 | 20 | 1 |
| 1:A:147:ALA:O | 1:A:151:MET:HG2 | 0.41 | 2.16 | 17 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HD13 | 1:A:148:MET:CE | 0.41 | 2.46 | 1 | 1 |
| 1:A:102:GLN:O | 1:A:102:GLN:HG2 | 0.41 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:25:LEU:O | 1:A:29:GLY:CA | 0.41 | 2.69 | 2 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HD2 | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 14 | 1 |
| 1:A:93:ILE:O | 1:A:97:MET:HG2 | 0.41 | 2.16 | 11 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:108:GLN:N | 0.41 | 2.54 | 20 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:ILE:CG2 | 0.41 | 2.53 | 17 | 1 |
| 1:A:108:GLN:O | 1:A:112:GLN:CG | 0.41 | 2.69 | 12 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:168:ARG:CA | 0.41 | 2.44 | 12 | 1 |
| 1:A:112:GLN:OE1 | 1:A:133:GLU:OE1 | 0.41 | 2.39 | 9 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:107:ARG:HB2 | 0.41 | 2.46 | 1 | 1 |
| 1:A:97:MET:O | 1:A:100:ASN:C | 0.41 | 2.59 | 3 | 1 |
| 1:A:133:GLU:C | 1:A:135:LYS:N | 0.41 | 2.73 | 5 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HG3 | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 8 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:134:VAL:N | 0.41 | 2.83 | 8 | 1 |
| 1:A:21:VAL:O | 1:A:24:PHE:HB3 | 0.41 | 2.15 | 8 | 2 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:131:LEU:C | 0.41 | 2.59 | 11 | 3 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.41 | 2.16 | 16 | 1 |
| 1:A:140:ARG:CD | 1:A:141:ASP:N | 0.41 | 2.84 | 13 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CE | 1:A:148:MET:CG | 0.41 | 2.99 | 13 | 1 |
| 1:A:142:MET:HG2 | 1:A:185:TYR:OH | 0.41 | 2.16 | 13 | 1 |
| 1:A:26:GLN:CB | 1:A:35:LEU:HD12 | 0.41 | 2.42 | 13 | 1 |
| 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:35:LEU:H | 0.41 | 1.76 | 11 | 1 |
| 1:A:158:LYS:O | 1:A:162:HIS:C | 0.41 | 2.56 | 11 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HA | 1:A:163:ALA:CA | 0.41 | 2.46 | 11 | 1 |
| 1:A:27:SER:CB | 1:A:88:ARG:HG2 | 0.41 | 2.46 | 19 | 2 |
| 1:A:110:ALA:HB2 | 1:A:151:MET:HB3 | 0.41 | 1.91 | 12 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.41 | 2.40 | 9 | 2 |
| 1:A:153:MET:HE3 | 1:A:178:ILE:HD11 | 0.41 | 1.93 | 3 | 1 |
| 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:HD23 | 0.41 | 2.31 | 19 | 1 |
| 1:A:93:ILE:HD12 | 1:A:150:ILE:CD1 | 0.41 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HB3 | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 7 | 1 |
| 1:A:16:ILE:O | 1:A:19:LEU:HB2 | 0.41 | 2.16 | 7 | 1 |
| 1:A:106:VAL:HG12 | 1:A:107:ARG:HG2 | 0.41 | 1.91 | 2 | 1 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:HD12 | 0.41 | 2.16 | 2 | 1 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.41 | 2.69 | 5 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:38:LEU:N | 0.41 | 2.82 | 8 | 1 |
| 1:A:98:ASP:OD1 | 1:A:98:ASP:C | 0.41 | 2.59 | 14 | 1 |
| 1:A:124:ARG:HB2 | 1:A:172:HIS:NE2 | 0.41 | 2.30 | 15 | 1 |
| 1:A:89:HIS:CD2 | 1:A:93:ILE:HG23 | 0.41 | 2.50 | 15 | 1 |
| 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:127:LEU:H | 0.41 | 1.75 | 16 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:34:GLU:CD | 0.41 | 2.36 | 16 | 1 |
| 1:A:31:THR:O | 1:A:35:LEU:CD1 | 0.41 | 2.69 | 4 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HD2 | 1:A:154:LEU:HG | 0.41 | 1.92 | 13 | 1 |
| 1:A:83:ILE:CG2 | 1:A:84:HIS:N | 0.41 | 2.84 | 13 | 1 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:104:THR:OG1 | 0.41 | 2.39 | 11 | 1 |
| 1:A:166:LEU:CG | 1:A:169:ASP:HB2 | 0.41 | 2.46 | 11 | 1 |
| 1:A:35:LEU:CD1 | 1:A:36:GLU:N | 0.41 | 2.63 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:137:ALA:N | 0.41 | 2.54 | 5 | 1 |
| 1:A:137:ALA:C | 1:A:139:PRO:CD | 0.41 | 2.87 | 5 | 1 |
| 1:A:176:ASN:O | 1:A:179:ASN:HB3 | 0.40 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:139:PRO:C | 1:A:144:ASN:HB3 | 0.40 | 2.35 | 4 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:139:PRO:HB3 | 0.40 | 2.17 | 20 | 1 |
| 1:A:89:HIS:O | 1:A:93:ILE:CB | 0.40 | 2.70 | 20 | 1 |
| 1:A:165:SER:C | 1:A:166:LEU:HD12 | 0.40 | 2.36 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:127:LEU:C | 1:A:129:LYS:N | 0.40 | 2.74 | 1 | 1 |
| 1:A:114:MET:HG3 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.40 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:24:PHE:CE1 | 1:A:91:ALA:HB1 | 0.40 | 2.50 | 19 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CG1 | 1:A:148:MET:HB2 | 0.40 | 2.45 | 6 | 1 |
| 1:A:134:VAL:CG2 | 1:A:151:MET:CE | 0.40 | 2.98 | 6 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:30:CYS:H | 0.40 | 1.76 | 7 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CZ | 1:A:36:GLU:HA | 0.40 | 2.51 | 18 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:134:VAL:HB | 0.40 | 1.93 | 15 | 1 |
| 1:A:148:MET:HB3 | 1:A:181:ASN:ND2 | 0.40 | 2.32 | 15 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE2 | 1:A:35:LEU:O | 0.40 | 2.74 | 4 | 1 |
| 1:A:35:LEU:CD1 | 1:A:35:LEU:H | 0.40 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CD2 | 1:A:167:LEU:HG | 0.40 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG22 | 1:A:175:VAL:CG1 | 0.40 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:97:MET:SD | 1:A:150:ILE:HG13 | 0.40 | 2.56 | 17 | 1 |
| 1:A:83:ILE:HD13 | 1:A:86:ILE:HG22 | 0.40 | 1.92 | 12 | 1 |
| 1:A:88:ARG:CZ | 1:A:88:ARG:HB2 | 0.40 | 2.46 | 9 | 1 |
| 1:A:179:ASN:C | 1:A:179:ASN:OD1 | 0.40 | 2.59 | 3 | 1 |
| 1:A:113:PHE:HB2 | 1:A:126:CYS:HB2 | 0.40 | 1.92 | 6 | 1 |
| 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:102:GLN:O | 0.40 | 2.15 | 7 | 1 |
| 1:A:23:GLY:O | 1:A:26:GLN:CG | 0.40 | 2.69 | 7 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:112:GLN:HE22 | 0.40 | 1.74 | 10 | 1 |
| 1:A:134:VAL:HG11 | 1:A:148:MET:HA | 0.40 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:113:PHE:CE2 | 1:A:155:LEU:HG | 0.40 | 2.51 | 8 | 1 |
| 1:A:30:CYS:HB3 | 1:A:34:GLU:HG2 | 0.40 | 1.93 | 8 | 1 |
| 1:A:178:ILE:HA | 1:A:182:LEU:N | 0.40 | 2.31 | 15 | 1 |
| 1:A:107:ARG:HG3 | 1:A:154:LEU:HG | 0.40 | 1.93 | 4 | 1 |
| 1:A:166:LEU:CD1 | 1:A:169:ASP:HB2 | 0.40 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:138:PHE:HZ | 0.40 | 2.23 | 20 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:178:ILE:CD1 | 0.40 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:159:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.40 | 1.92 | 17 | 1 |
| 1:A:142:MET:HB2 | 1:A:185:TYR:OH | 0.40 | 2.16 | 3 | 1 |
| 1:A:135:LYS:CG | 1:A:148:MET:HB3 | 0.40 | 2.45 | 6 | 1 |
| 1:A:169:ASP:OD1 | 1:A:170:VAL:N | 0.40 | 2.54 | 18 | 1 |
| 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:167:LEU:CD2 | 0.40 | 2.47 | 14 | 1 |
| 1:A:25:LEU:O | 1:A:29:GLY:HA2 | 0.40 | 2.17 | 16 | 1 |
| 1:A:151:MET:CB | 1:A:177:PHE:CE1 | 0.40 | 3.04 | 17 | 1 |
| 1:A:27:SER:OG | 1:A:88:ARG:HB2 | 0.40 | 2.17 | 12 | 1 |
| 1:A:131:LEU:HG | 1:A:148:MET:SD | 0.40 | 2.57 | 9 | 1 |
| 1:A:96:GLU:CG | 1:A:97:MET:N | 0.40 | 2.84 | 9 | 1 |
| 1:A:157:LYS:C | 1:A:157:LYS:HD2 | 0.40 | 2.37 | 3 | 1 |
| 1:A:150:ILE:HA | 1:A:153:MET:HE3 | 0.40 | 1.92 | 19 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:141:ASP:C | 1:A:145:ASP:CB | 0.40 | 2.90 | 6 | 1 |
| 1:A:109:LEU:CD2 | 1:A:112:GLN:HE22 | 0.40 | 2.29 | 10 | 1 |
| 1:A:36:GLU:O | 1:A:40:ARG:CD | 0.40 | 2.69 | 10 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CG | 1:A:171:PHE:HB2 | 0.40 | 2.47 | 16 | 1 |
| 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:88:ARG:HH21 | 0.40 | 1.76 | 4 | 1 |
| 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.40 | 2.78 | 7 | 1 |
| 1:A:83:ILE:HG23 | 1:A:84:HIS:N | 0.40 | 2.32 | 2 | 1 |
| 1:A:166:LEU:CD2 | 1:A:169:ASP:CB | 0.40 | 2.88 | 10 | 1 |

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|-------------|-------------|----|
| 1 | A | 120/195 (62%) | 87±3 (72±2%) | 22±3 (18±3%) | 11±2 (9±2%) | 2 | 12 |
| All | All | 2400/3900 (62%) | 1739 (72%) | 442 (18%) | 219 (9%) | 2 | 12 |

All 25 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 | 102 | GLN | 20 |
| 1 | A | 105 | LEU | 20 |
| 1 | A | 140 | ARG | 20 |
| 1 | A | 183 | PHE | 18 |
| 1 | A | 106 | VAL | 16 |
| 1 | A | 40 | ARG | 15 |
| 1 | A | 27 | SER | 12 |
| 1 | A | 184 | SER | 12 |
| 1 | A | 104 | THR | 11 |
| 1 | A | 98 | ASP | 11 |
| 1 | A | 114 | MET | 9 |
| 1 | A | 180 | GLN | 8 |
| 1 | A | 29 | GLY | 7 |
| 1 | A | 160 | ALA | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 185 | TYR | 5 |
| 1 | A | 124 | ARG | 5 |
| 1 | A | 159 | VAL | 5 |
| 1 | A | 30 | CYS | 5 |
| 1 | A | 82 | ILE | 3 |
| 1 | A | 167 | LEU | 3 |
| 1 | A | 161 | SER | 2 |
| 1 | A | 139 | PRO | 2 |
| 1 | A | 175 | VAL | 2 |
| 1 | A | 17 | THR | 1 |
| 1 | A | 16 | ILE | 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 | 105/170 (62%) | 60±4 (57±4%) | 45±4 (43±4%) | 0 3 |
| All | All | 2100/3400 (62%) | 1196 (57%) | 904 (43%) | 0 3 |

All 97 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 | 131 | LEU | 20 |
| 1 | A | 182 | LEU | 20 |
| 1 | A | 127 | LEU | 20 |
| 1 | A | 161 | SER | 20 |
| 1 | A | 167 | LEU | 20 |
| 1 | A | 176 | ASN | 20 |
| 1 | A | 90 | LEU | 19 |
| 1 | A | 138 | PHE | 19 |
| 1 | A | 154 | LEU | 19 |
| 1 | A | 21 | VAL | 19 |
| 1 | A | 171 | PHE | 18 |
| 1 | A | 35 | LEU | 17 |
| 1 | A | 140 | ARG | 16 |
| 1 | A | 109 | LEU | 16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 32 | ARG | 15 |
| 1 | A | 134 | VAL | 15 |
| 1 | A | 40 | ARG | 14 |
| 1 | A | 170 | VAL | 13 |
| 1 | A | 168 | ARG | 13 |
| 1 | A | 101 | ILE | 12 |
| 1 | A | 20 | LEU | 12 |
| 1 | A | 107 | ARG | 12 |
| 1 | A | 92 | GLN | 12 |
| 1 | A | 157 | LYS | 11 |
| 1 | A | 155 | LEU | 11 |
| 1 | A | 37 | VAL | 11 |
| 1 | A | 112 | GLN | 11 |
| 1 | A | 135 | LYS | 11 |
| 1 | A | 102 | GLN | 11 |
| 1 | A | 129 | LYS | 11 |
| 1 | A | 104 | THR | 11 |
| 1 | A | 25 | LEU | 11 |
| 1 | A | 106 | VAL | 10 |
| 1 | A | 96 | GLU | 10 |
| 1 | A | 124 | ARG | 10 |
| 1 | A | 136 | THR | 10 |
| 1 | A | 28 | SER | 10 |
| 1 | A | 169 | ASP | 10 |
| 1 | A | 105 | LEU | 10 |
| 1 | A | 148 | MET | 10 |
| 1 | A | 149 | LEU | 9 |
| 1 | A | 152 | THR | 9 |
| 1 | A | 143 | GLU | 9 |
| 1 | A | 144 | ASN | 9 |
| 1 | A | 162 | HIS | 9 |
| 1 | A | 126 | CYS | 9 |
| 1 | A | 19 | LEU | 9 |
| 1 | A | 165 | SER | 9 |
| 1 | A | 97 | MET | 9 |
| 1 | A | 26 | GLN | 9 |
| 1 | A | 24 | PHE | 9 |
| 1 | A | 16 | ILE | 9 |
| 1 | A | 93 | ILE | 9 |
| 1 | A | 132 | ASP | 8 |
| 1 | A | 166 | LEU | 8 |
| 1 | A | 150 | ILE | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 18 | ASP | 8 |
| 1 | A | 108 | GLN | 8 |
| 1 | A | 178 | ILE | 8 |
| 1 | A | 183 | PHE | 8 |
| 1 | A | 185 | TYR | 8 |
| 1 | A | 174 | THR | 7 |
| 1 | A | 158 | LYS | 7 |
| 1 | A | 146 | LYS | 7 |
| 1 | A | 38 | LEU | 7 |
| 1 | A | 86 | ILE | 7 |
| 1 | A | 88 | ARG | 6 |
| 1 | A | 184 | SER | 6 |
| 1 | A | 179 | ASN | 6 |
| 1 | A | 133 | GLU | 6 |
| 1 | A | 31 | THR | 6 |
| 1 | A | 114 | MET | 6 |
| 1 | A | 34 | GLU | 6 |
| 1 | A | 100 | ASN | 6 |
| 1 | A | 151 | MET | 5 |
| 1 | A | 113 | PHE | 5 |
| 1 | A | 22 | PHE | 5 |
| 1 | A | 83 | ILE | 5 |
| 1 | A | 27 | SER | 5 |
| 1 | A | 180 | GLN | 5 |
| 1 | A | 142 | MET | 5 |
| 1 | A | 30 | CYS | 5 |
| 1 | A | 98 | ASP | 4 |
| 1 | A | 33 | GLN | 4 |
| 1 | A | 177 | PHE | 4 |
| 1 | A | 172 | HIS | 4 |
| 1 | A | 17 | THR | 4 |
| 1 | A | 82 | ILE | 3 |
| 1 | A | 141 | ASP | 3 |
| 1 | A | 153 | MET | 3 |
| 1 | A | 36 | GLU | 3 |
| 1 | A | 99 | HIS | 2 |
| 1 | A | 85 | ASN | 2 |
| 1 | A | 159 | VAL | 1 |
| 1 | A | 125 | ASN | 1 |
| 1 | A | 175 | VAL | 1 |
| 1 | A | 173 | THR | 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

No chemical shift data were provided