



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 06:02 pm GMT

PDB ID : 1EZP  
Title : GLOBAL FOLD OF MALTODEXTRIN BINDING PROTEIN COM-  
PLEXED WITH BETA-CYCLODEXTRIN USING PEPTIDE ORIENTA-  
TIONS FROM DIPOLAR COUPLINGS  
Authors : Mueller, G.A.; Choy, W.Y.; Yang, D.; Forman-Kay, J.D.; Venters, R.A.; Kay,  
L.E.  
Deposited on : 2000-05-11

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
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

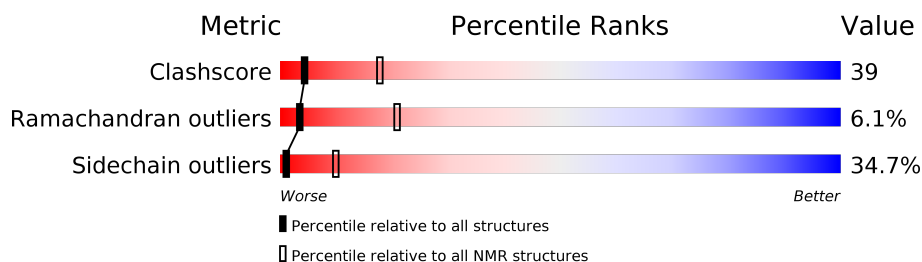
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

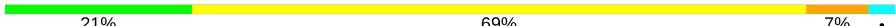
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	370	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:231, A:241-A:370 (358)	1.08	9

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	3, 6, 7, 8, 9
2	1, 4, 5, 10
Single-model clusters	2

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5735 atoms, of which 2858 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	370	Total	C	H	N	O	S	0
			5735	1851	2858	469	551	6	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

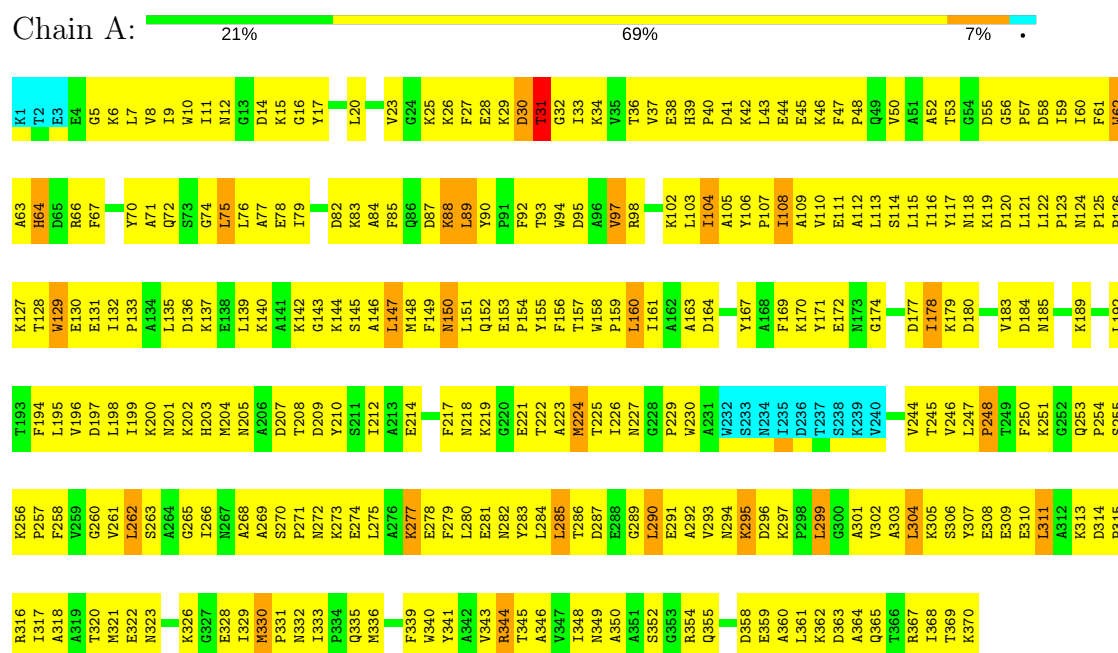
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	ENGINEERED	UNP P02928

## 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: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

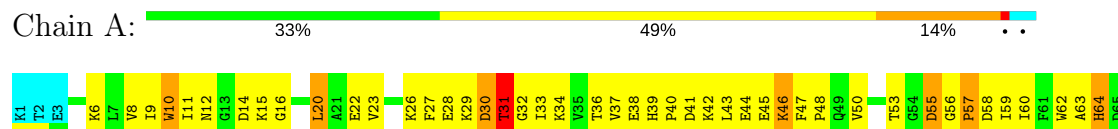


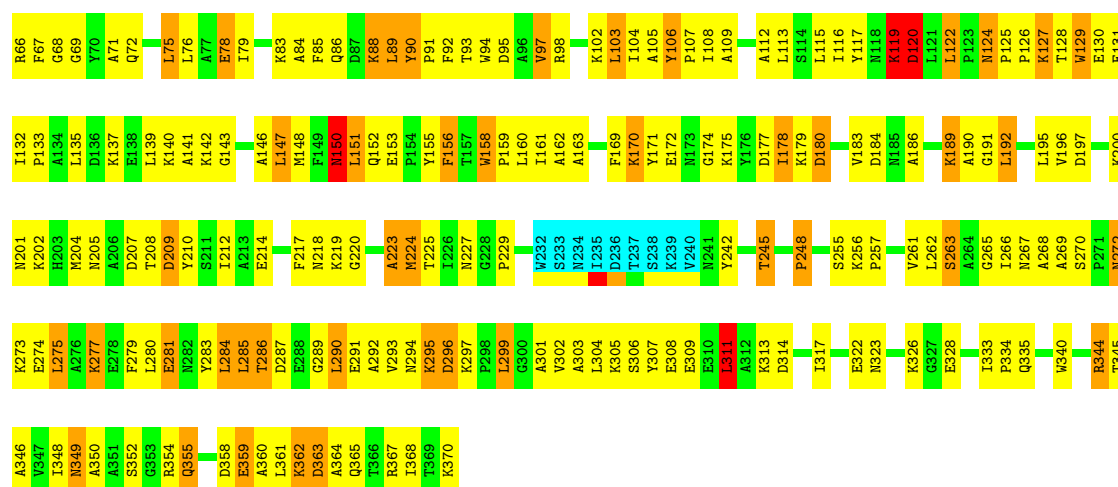
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

#### • Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

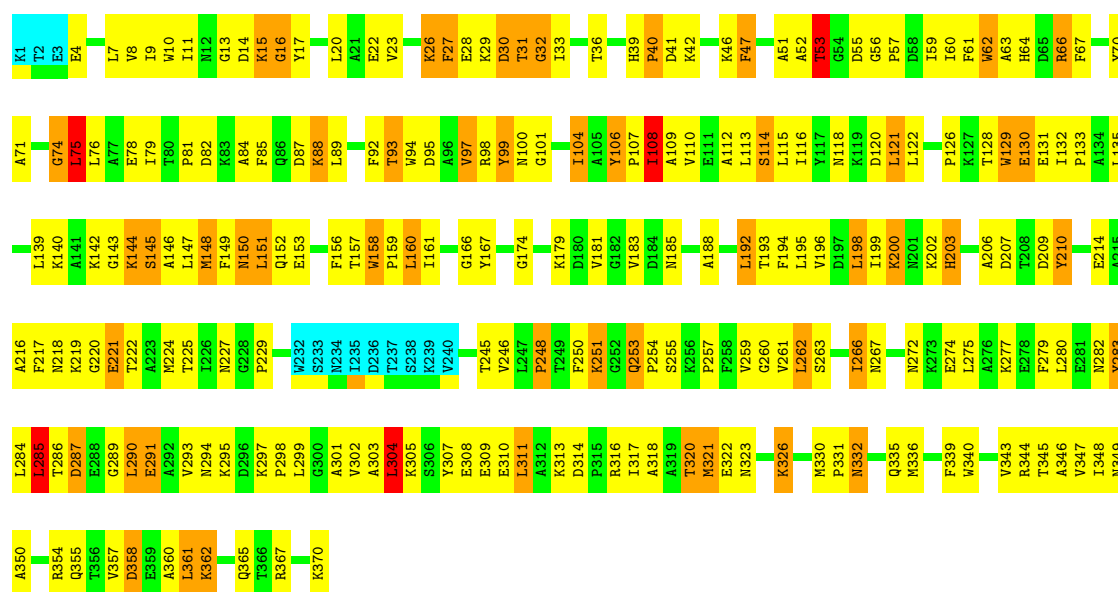




### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

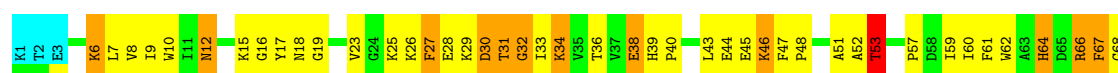
Chain A: 36% 45% 14% ..

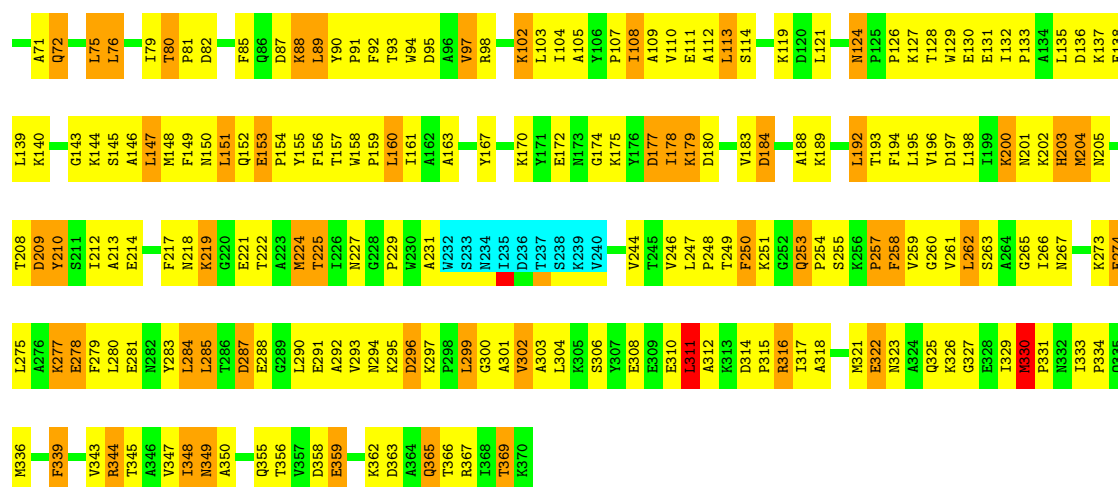


### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

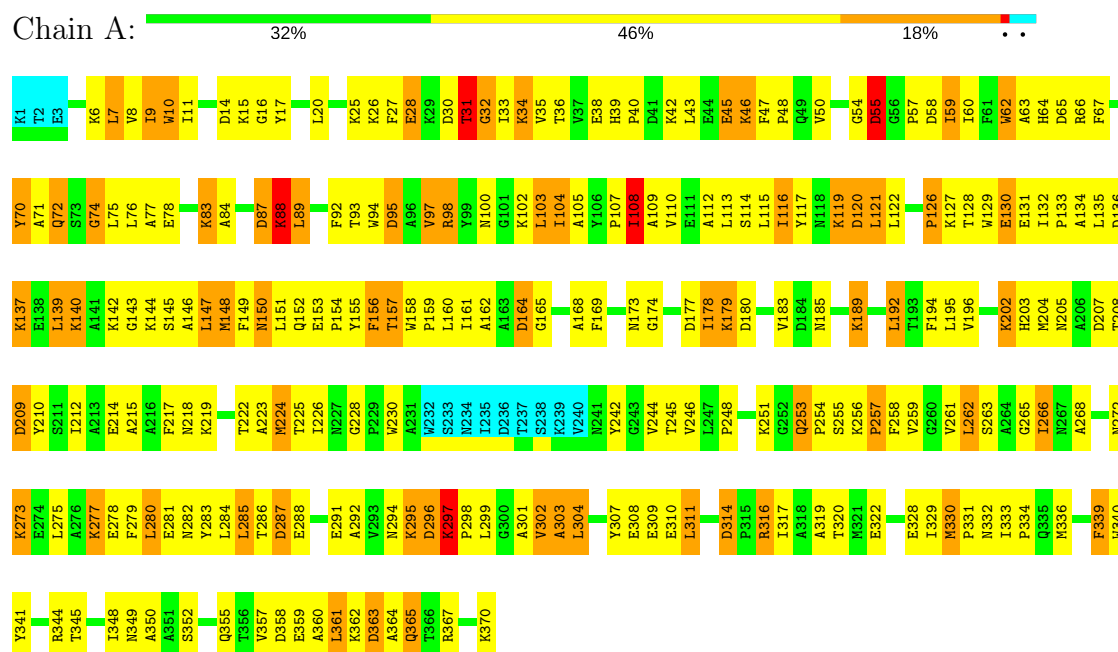
Chain A: 31% 48% 17% ..





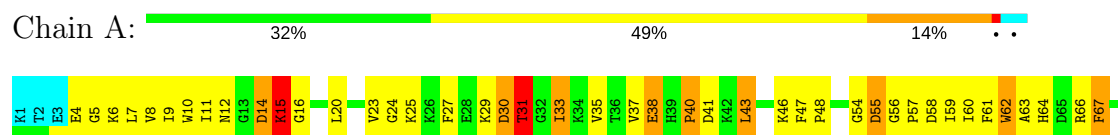
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

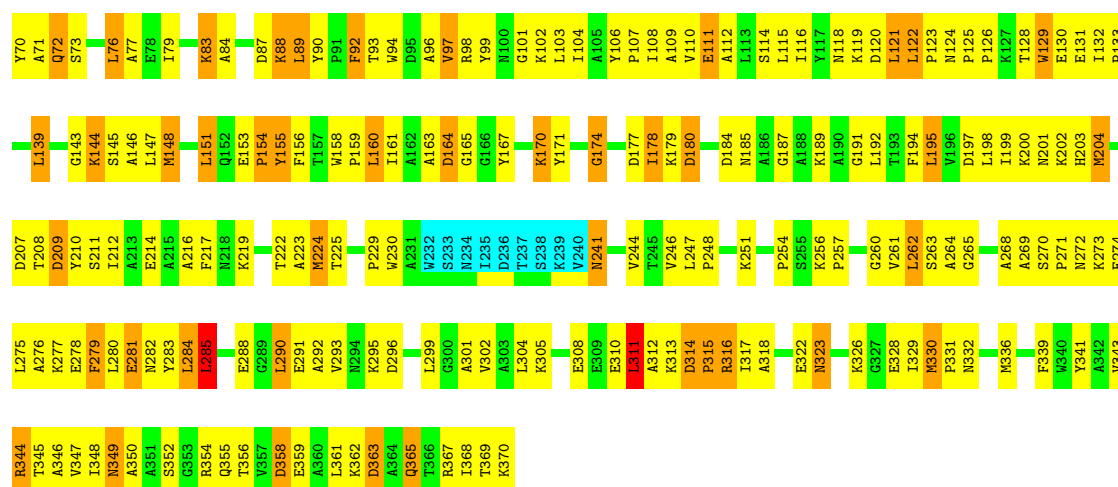
- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

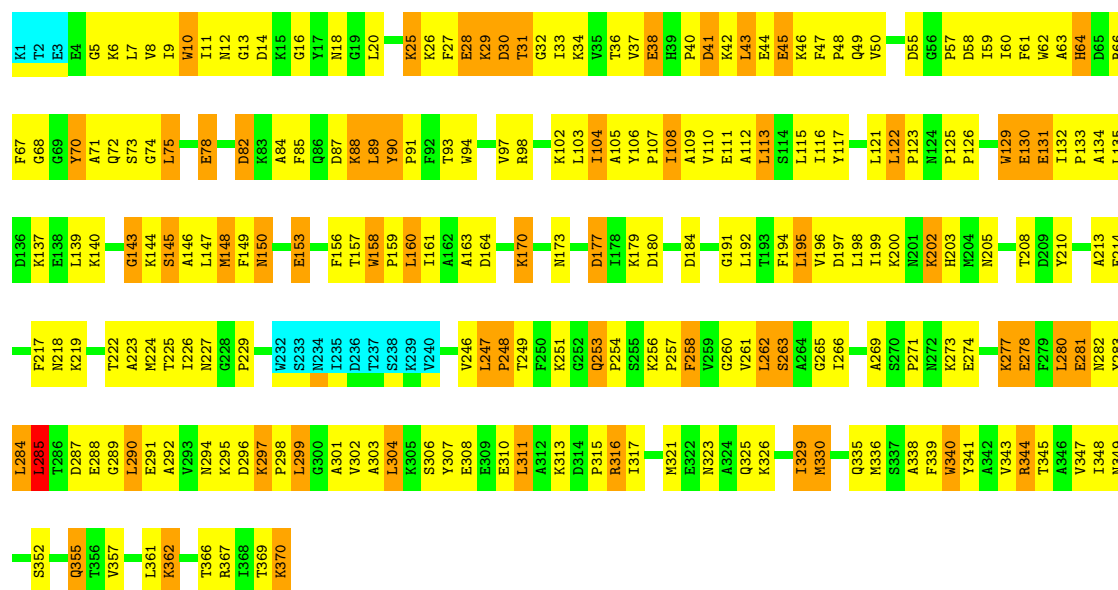




#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 35% 45% 16%



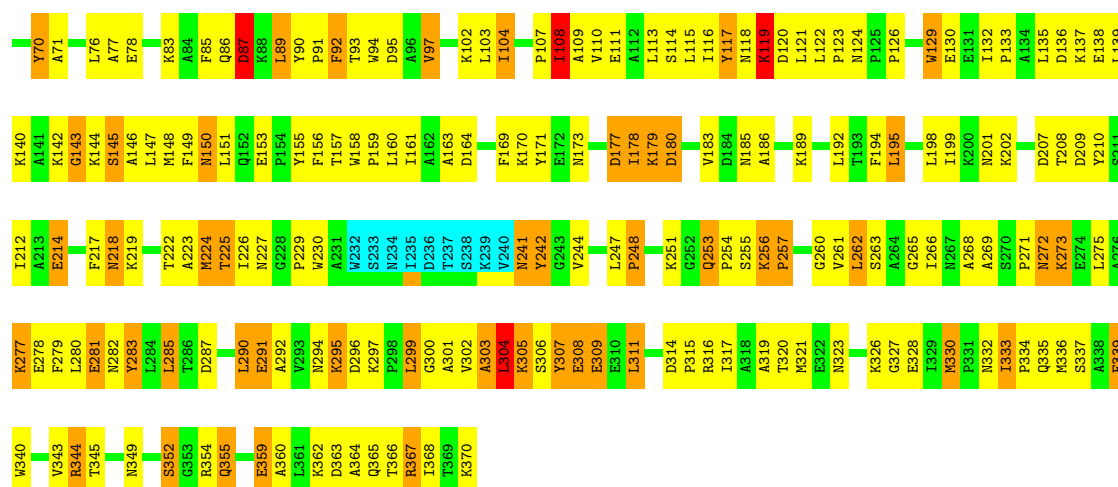
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 32% 46% 16%

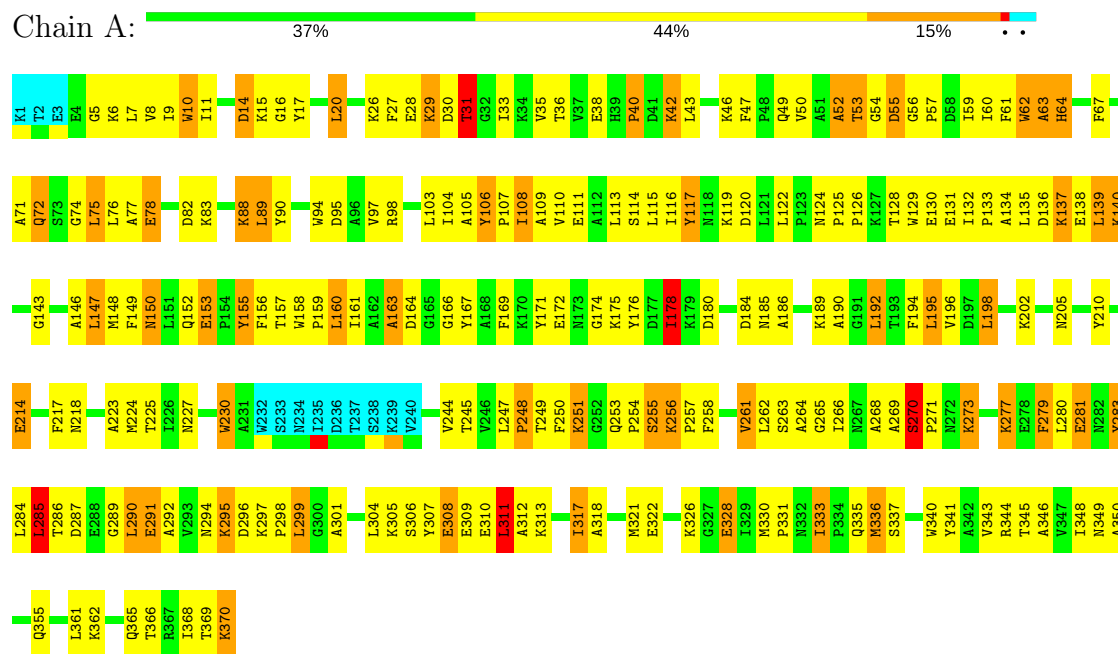






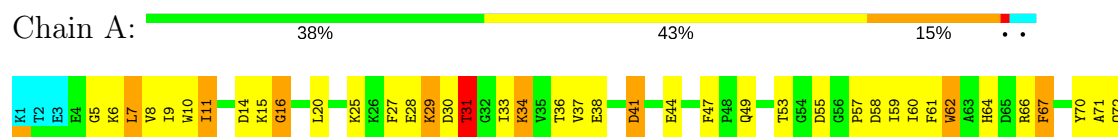
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

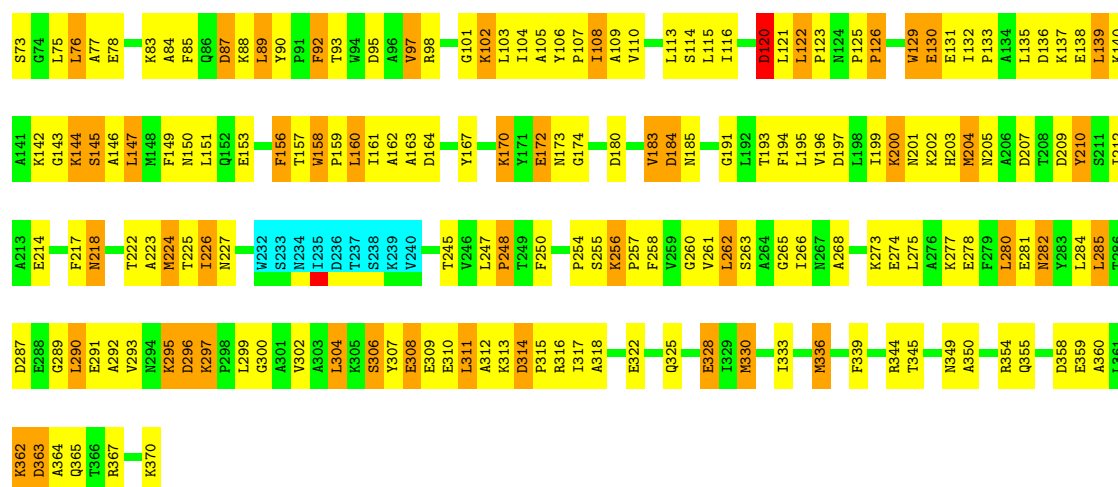
- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



#### 4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

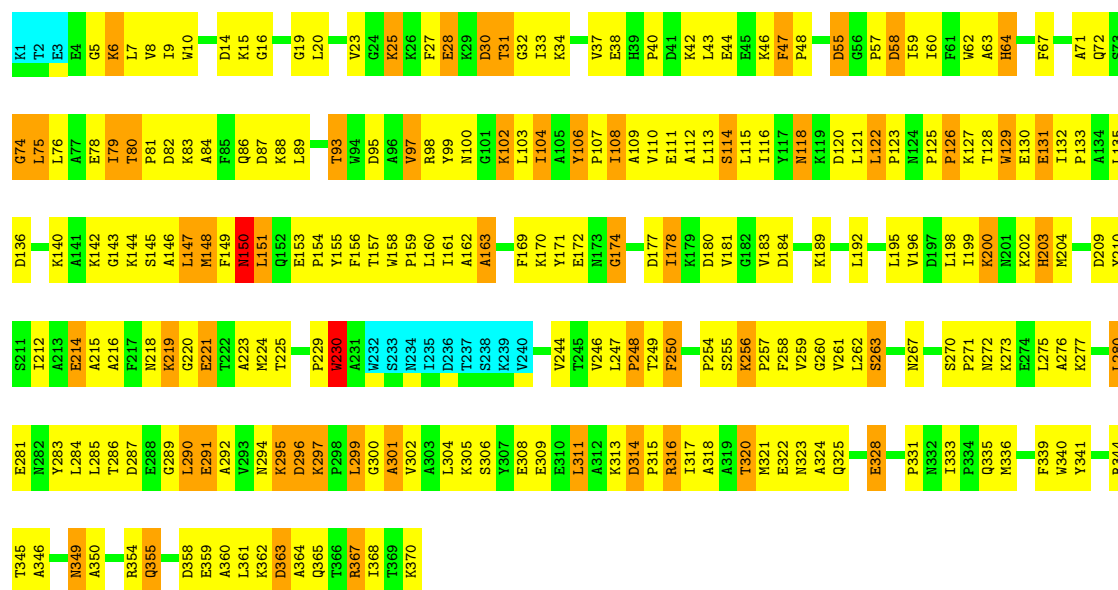




#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 33% 48% 15% • •



## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *simulated annealing from extended coordinates torsion angle dynamics and finish with cartesian dynamics*.

Of the 243 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.5
CNS	refinement	0.5

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	2779	2760	2757	217±16
All	All	27790	27600	27570	2171

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 39.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HG21	1.10	1.23	7	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:HG23	1.05	1.26	8	2
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HG2	1.05	1.20	4	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	1.05	1.25	7	4
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	1.04	1.27	7	8
1:A:111:GLU:HG2	1:A:229:PRO:HG2	1.04	1.26	10	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD3	1.01	1.29	5	2
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:HB2	1.00	1.33	8	4
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB3	1.00	1.34	9	7
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:HA	0.98	1.30	8	5
1:A:367:ARG:HD2	1:A:368:ILE:HG13	0.98	1.35	7	1
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:HG23	0.98	1.35	2	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB2	0.97	1.59	7	6
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB2	0.96	1.33	9	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD13	0.96	1.35	3	2
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:HG21	0.96	1.33	9	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB2	0.95	1.38	5	6
1:A:253:GLN:HG2	1:A:254:PRO:HD2	0.93	1.39	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HB2	0.92	1.39	2	7
1:A:253:GLN:HG3	1:A:254:PRO:HD2	0.92	1.38	2	2
1:A:148:MET:H	1:A:224:MET:HB3	0.91	1.25	2	4
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG21	0.91	1.41	6	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:HB3	0.91	1.43	5	4
1:A:259:VAL:HG12	1:A:329:ILE:HA	0.91	1.42	4	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HG3	0.91	1.43	9	2
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:HG2	0.90	1.42	1	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG23	0.89	1.40	10	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:208:THR:HB	0.88	1.43	1	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:HB2	0.88	1.46	8	4
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:HA3	0.88	1.43	9	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD23	0.86	1.46	9	3
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG23	0.86	2.05	9	2
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.86	2.06	8	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG12	0.86	1.45	1	2
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB3	0.86	1.45	9	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HG23	0.85	1.46	4	1
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:HB2	0.85	1.47	10	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.84	1.47	8	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:HA2	0.84	2.07	8	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:284:LEU:HD22	0.83	1.49	5	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:195:LEU:HD22	0.83	1.49	8	1
1:A:136:ASP:HB3	1:A:140:LYS:HD2	0.83	1.49	10	1
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:HD3	0.83	1.49	8	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD13	0.83	1.49	4	2
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HG	0.83	1.49	2	1
1:A:119:LYS:HD2	1:A:121:LEU:HD22	0.83	1.50	4	1
1:A:88:LYS:HD3	1:A:306:SER:HB2	0.83	1.51	3	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:60:ILE:HD12	0.82	1.34	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA2	0.82	2.09	7	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD21	0.82	1.48	5	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD12	0.82	1.51	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.82	1.49	1	2
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:HD3	0.81	1.51	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HB	0.81	1.53	4	7
1:A:149:PHE:CD2	1:A:226:ILE:HD12	0.81	2.11	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:HB2	0.81	1.51	9	4
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG12	0.80	1.76	5	2
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	2.07	1	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HB	0.80	1.54	3	1
1:A:285:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HD11	0.80	1.54	6	2
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	1.54	5	2
1:A:210:TYR:O	1:A:214:GLU:HB2	0.80	1.75	2	10
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HG23	0.79	2.12	5	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD2	0.79	2.07	6	1
1:A:67:PHE:HE2	1:A:105:ALA:HA	0.79	1.35	8	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:HG22	0.79	1.37	7	1
1:A:150:ASN:HB2	1:A:153:GLU:HB2	0.79	1.54	3	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:226:ILE:HG22	0.79	1.51	4	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.79	1.54	7	5
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:HD21	0.79	1.51	2	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:HE1	0.79	1.36	6	1
1:A:65:ASP:HB3	1:A:331:PRO:HG3	0.79	1.55	4	1
1:A:217:PHE:HD2	1:A:225:THR:HA	0.79	1.37	2	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:HD2	0.79	1.77	7	9
1:A:9:ILE:HG13	1:A:37:VAL:HA	0.79	1.50	9	2
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB3	0.78	1.77	6	3
1:A:176:TYR:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.78	2.13	8	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD13	0.78	1.51	7	2
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB3	0.78	1.52	6	1
1:A:311:LEU:CD2	1:A:317:ILE:HG21	0.78	2.08	9	2
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HG23	0.78	1.56	1	2
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HD12	0.77	1.53	1	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:37:VAL:HA	0.77	2.10	9	2
1:A:311:LEU:CB	1:A:317:ILE:HG21	0.77	2.05	7	1
1:A:109:ALA:N	1:A:302:VAL:HG11	0.77	1.94	7	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD12	0.77	1.79	3	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD13	0.77	1.55	2	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.77	1.79	3	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG13	0.76	1.54	9	2
1:A:67:PHE:HE2	1:A:265:GLY:HA3	0.76	1.39	4	3
1:A:62:TRP:O	1:A:262:LEU:HG	0.76	1.81	3	3
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HG2	0.76	2.15	2	3
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:HD11	0.76	1.57	3	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG22	0.76	1.82	9	2
1:A:90:TYR:CD2	1:A:92:PHE:HB2	0.75	2.16	9	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB3	0.75	1.56	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HA	0.75	2.10	7	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:HB2	0.75	1.58	10	2
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD13	0.75	1.59	4	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CG	0.75	2.08	4	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HA	0.75	1.59	7	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:HB2	0.75	1.81	4	9
1:A:170:LYS:HG3	1:A:180:ASP:HB3	0.75	1.55	1	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HB2	0.75	1.59	1	3
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.75	1.59	5	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	2.16	8	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:HB	0.74	1.58	4	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:HD2	0.74	1.59	7	3
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE2	0.74	2.18	6	2
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB2	0.74	1.82	7	3
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:OG1	0.74	1.82	7	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HB2	0.74	1.83	4	3
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HB2	0.74	1.60	9	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HD12	0.74	2.17	3	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB2	0.74	1.83	10	4
1:A:27:PHE:CD1	1:A:33:ILE:HG21	0.74	2.18	7	2
1:A:16:GLY:HA3	1:A:293:VAL:HG23	0.74	1.57	2	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	1.57	4	4
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:HD21	0.74	1.43	10	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD2	0.74	1.43	10	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.74	2.12	9	1
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB2	0.73	1.83	7	1
1:A:359:GLU:O	1:A:363:ASP:HB2	0.73	1.83	7	6
1:A:110:VAL:HG21	1:A:301:ALA:HB3	0.73	1.61	8	1
1:A:134:ALA:HA	1:A:137:LYS:HD3	0.73	1.60	4	1
1:A:297:LYS:HD2	1:A:299:LEU:HD22	0.73	1.58	6	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:15:LYS:HB3	0.73	1.61	5	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG21	0.73	1.99	5	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:CD	0.73	2.12	8	2
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.73	1.84	7	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB3	0.73	1.84	2	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:224:MET:HG3	0.73	1.60	5	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD2	0.73	2.13	10	3
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:ND2	0.73	1.98	10	1
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG23	0.73	2.14	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CB	0.72	2.14	10	7
1:A:89:LEU:HA	1:A:304:LEU:HG	0.72	1.59	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:ALA:O	1:A:296:ASP:HB2	0.72	1.85	1	7
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HD12	0.72	1.59	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB2	0.72	1.60	10	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD13	0.72	1.84	3	2
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.72	2.15	7	4
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:CB	0.72	2.15	8	1
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HB2	0.72	1.60	9	3
1:A:50:VAL:O	1:A:53:THR:HG22	0.72	1.85	1	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD12	0.72	2.14	2	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:262:LEU:O	0.72	1.85	3	8
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:HD23	0.72	1.61	5	1
1:A:225:THR:C	1:A:226:ILE:HD13	0.72	2.05	9	1
1:A:272:ASN:HD22	1:A:275:LEU:HD13	0.72	1.45	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD13	0.72	2.14	7	3
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.72	2.14	8	1
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:HE2	0.71	1.45	3	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HG21	0.71	2.20	1	2
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:HG23	0.71	1.60	1	2
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD12	0.71	1.84	4	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:HG3	0.71	1.59	9	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:CB	0.71	2.14	3	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:HE2	0.71	1.62	8	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD2	0.71	2.16	8	1
1:A:110:VAL:HA	1:A:260:GLY:O	0.71	1.85	9	5
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HB2	0.71	1.86	10	6
1:A:72:GLN:HB3	1:A:104:ILE:HD13	0.71	1.62	5	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:HG23	0.71	2.21	9	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:H	0.71	1.45	9	4
1:A:67:PHE:CE2	1:A:105:ALA:HA	0.71	2.20	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA2	0.71	2.21	7	2
1:A:285:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD11	0.71	2.15	6	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD22	0.71	1.85	8	1
1:A:299:LEU:O	1:A:316:ARG:HB3	0.71	1.86	3	2
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.71	1.85	3	3
1:A:10:TRP:O	1:A:60:ILE:HG13	0.70	1.86	7	2
1:A:58:ASP:OD2	1:A:267:ASN:HB2	0.70	1.86	10	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG13	0.70	1.63	4	1
1:A:217:PHE:CB	1:A:225:THR:HG23	0.70	2.13	8	2
1:A:90:TYR:HD2	1:A:92:PHE:HB2	0.70	1.44	9	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG22	0.70	1.85	10	4
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:HB2	0.70	1.87	4	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HD3	0.70	1.86	7	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG3	0.70	1.62	8	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.69	2.17	1	2
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.69	1.63	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG23	0.69	1.64	7	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:317:ILE:HD13	0.69	2.17	7	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:HG2	0.69	2.21	2	1
1:A:147:LEU:O	1:A:147:LEU:HD12	0.69	1.87	6	2
1:A:176:TYR:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.69	2.21	8	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG23	0.69	1.87	9	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:290:LEU:O	0.69	1.87	3	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CG2	0.69	2.17	1	7
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:CB	0.69	2.17	9	2
1:A:117:TYR:CZ	1:A:125:PRO:HG3	0.69	2.22	8	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CG	0.69	2.18	10	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:HB3	0.69	2.17	8	8
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HB2	0.69	1.63	2	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG2	0.69	2.17	4	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.69	2.18	3	3
1:A:349:ASN:HD22	1:A:355:GLN:HG3	0.69	1.46	1	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HG2	0.69	1.64	1	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.88	1	1
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:CG2	0.69	2.14	2	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:HG3	0.69	1.64	9	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:CD1	0.69	2.17	3	5
1:A:112:ALA:C	1:A:113:LEU:HD12	0.69	2.08	4	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.68	2.18	4	2
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD22	0.68	2.18	8	1
1:A:345:THR:CA	1:A:349:ASN:HB2	0.68	2.18	8	2
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:HA3	0.68	1.65	6	1
1:A:296:ASP:OD2	1:A:297:LYS:HE2	0.68	1.88	4	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:VAL:HA	0.68	1.62	7	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG3	0.68	2.18	9	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA3	0.68	2.23	3	2
1:A:112:ALA:O	1:A:229:PRO:HD3	0.68	1.88	6	3
1:A:111:GLU:HA	1:A:229:PRO:HG2	0.68	1.63	5	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HG2	0.68	1.88	10	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HG2	0.68	1.88	1	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD2	0.68	2.22	10	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CZ2	0.68	2.23	3	2
1:A:362:LYS:O	1:A:365:GLN:HG3	0.68	1.89	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB2	0.68	1.88	8	5
1:A:256:LYS:NZ	1:A:328:GLU:HG3	0.68	2.03	8	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.68	1.66	1	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:HD12	0.68	1.64	7	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:CD	0.68	2.19	10	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:O	0.68	1.89	9	6
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HA	0.68	1.65	4	3
1:A:9:ILE:HG12	1:A:36:THR:O	0.68	1.89	4	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG13	0.67	1.64	9	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HG2	0.67	1.89	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG12	0.67	1.67	6	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CB	0.67	2.18	1	8
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB2	0.67	2.16	5	6
1:A:257:PRO:O	1:A:328:GLU:HB2	0.67	1.88	4	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:CD1	0.67	2.19	7	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:CE3	0.67	2.22	9	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.67	1.90	3	4
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:CB	0.67	2.19	6	2
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:OG	0.67	1.89	3	4
1:A:349:ASN:ND2	1:A:355:GLN:HG3	0.67	2.04	3	2
1:A:301:ALA:H	1:A:317:ILE:HG21	0.67	1.50	5	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:OG	0.67	1.90	10	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:CG	0.67	2.19	10	1
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:HB2	0.67	1.66	5	4
1:A:258:PHE:HB3	1:A:330:MET:HB3	0.67	1.65	6	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG23	0.66	1.67	3	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:HZ3	0.66	1.51	3	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:CD2	0.66	2.19	4	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD1	0.66	2.20	3	2
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HD11	0.66	1.91	3	1
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:HD13	0.66	1.67	1	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:HG12	0.66	1.67	7	2
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:NH1	0.66	2.06	7	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG3	0.66	1.91	3	6
1:A:361:LEU:O	1:A:365:GLN:HB2	0.66	1.91	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HA	0.66	2.26	3	1
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CB	0.66	2.19	3	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:40:PRO:HG2	0.66	1.68	6	2
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:HD2	0.66	1.66	2	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CD1	0.66	2.26	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG13	0.66	1.91	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HD12	1:A:14:ASP:HB2	0.66	1.66	8	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:248:PRO:HD2	0.65	2.06	8	2
1:A:136:ASP:O	1:A:140:LYS:HB2	0.65	1.91	7	2
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:C	0.65	2.11	9	2
1:A:311:LEU:CD1	1:A:314:ASP:HB2	0.65	2.20	1	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.65	1.51	7	2
1:A:129:TRP:O	1:A:133:PRO:HD3	0.65	1.90	9	3
1:A:5:GLY:C	1:A:33:ILE:HG23	0.65	2.11	9	2
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE3	0.65	2.27	7	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CB	0.65	2.19	2	5
1:A:99:TYR:CG	1:A:104:ILE:HD11	0.65	2.26	5	1
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HD11	0.65	2.12	3	1
1:A:322:GLU:O	1:A:325:GLN:HB2	0.65	1.92	3	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:CG2	0.65	2.14	7	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.65	1.69	5	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD12	0.65	1.69	2	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG12	0.65	1.92	8	3
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD11	0.65	1.66	8	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG12	0.65	1.92	10	1
1:A:316:ARG:H	1:A:316:ARG:HD2	0.65	1.51	6	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:H	0.65	1.50	7	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:CB	0.65	2.20	5	10
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HB2	0.65	1.92	2	2
1:A:79:ILE:H	1:A:79:ILE:HD13	0.65	1.50	10	1
1:A:298:PRO:HG2	1:A:316:ARG:HH12	0.64	1.52	6	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:HD2	0.64	1.52	6	2
1:A:134:ALA:O	1:A:137:LYS:HG2	0.64	1.91	8	3
1:A:209:ASP:CB	1:A:212:ILE:HD13	0.64	2.22	4	1
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:HD12	0.64	1.69	6	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:324:ALA:HB1	0.64	1.69	10	1
1:A:150:ASN:CB	1:A:153:GLU:HB2	0.64	2.21	3	1
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HB	0.64	2.27	1	1
1:A:286:THR:O	1:A:290:LEU:HB2	0.64	1.93	8	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HB3	0.64	2.22	10	4
1:A:117:TYR:CE1	1:A:125:PRO:HG3	0.64	2.28	8	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:H	0.64	1.51	10	2
1:A:71:ALA:C	1:A:76:LEU:HB2	0.64	2.13	7	3
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG1	0.64	2.20	1	2
1:A:99:TYR:OH	1:A:332:ASN:HB2	0.64	1.92	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:14:ASP:HB2	0.64	2.23	8	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD11	0.64	1.68	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:CB	0.64	2.23	10	1
1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:LYS:HE3	0.64	1.67	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG23	0.64	1.70	5	2
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CG	0.64	2.23	8	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG22	0.64	2.08	4	1
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:CE3	0.64	2.26	7	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB2	0.64	1.93	6	2
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HA	0.64	1.68	1	1
1:A:28:GLU:HB3	1:A:33:ILE:O	0.64	1.93	2	3
1:A:163:ALA:HA	1:A:254:PRO:O	0.64	1.93	7	3
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:CB	0.64	2.23	9	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HA	0.64	1.93	1	5
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HG	0.64	1.68	10	1
1:A:164:ASP:HB2	1:A:253:GLN:HB3	0.64	1.68	4	1
1:A:275:LEU:O	1:A:279:PHE:HB2	0.64	1.93	3	2
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB2	0.64	2.22	2	6
1:A:9:ILE:HD11	1:A:35:VAL:HB	0.64	1.70	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HG3	0.64	1.92	10	3
1:A:147:LEU:HB3	1:A:224:MET:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:214:GLU:O	1:A:218:ASN:HB2	0.64	1.91	7	3
1:A:47:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.63	2.27	3	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:36:THR:O	0.63	1.93	7	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	0.63	1.69	10	2
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HA	0.63	1.93	6	2
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG12	0.63	2.23	6	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:N	0.63	2.09	1	1
1:A:115:LEU:HB3	1:A:245:THR:O	0.63	1.93	9	4
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD12	0.63	1.70	7	1
1:A:161:ILE:HG13	1:A:191:GLY:HA3	0.63	1.69	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:CG2	0.63	2.24	4	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HG2	0.63	1.92	4	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CG	0.63	2.21	9	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:59:ILE:HD11	0.63	1.70	10	3
1:A:99:TYR:CD1	1:A:104:ILE:HD11	0.63	2.28	5	1
1:A:191:GLY:O	1:A:195:LEU:HB2	0.63	1.93	5	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CD1	0.63	2.23	1	3
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HB2	0.63	1.93	8	2
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HD2	0.63	1.94	9	1
1:A:297:LYS:CG	1:A:298:PRO:HD2	0.63	2.24	2	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HB2	0.63	2.18	2	3
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CA	0.63	2.23	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD1	0.63	2.24	4	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG23	0.63	2.24	4	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CG2	0.62	2.24	3	2
1:A:171:TYR:CZ	1:A:174:GLY:HA2	0.62	2.29	1	1
1:A:156:PHE:C	1:A:159:PRO:HD2	0.62	2.15	9	3
1:A:109:ALA:HB1	1:A:111:GLU:OE2	0.62	1.93	6	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CD1	0.62	2.24	8	2
1:A:200:LYS:O	1:A:204:MET:HG2	0.62	1.94	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.62	1.95	3	4
1:A:33:ILE:HG23	1:A:279:PHE:HE2	0.62	1.52	1	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HG22	0.62	1.70	9	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CG1	0.62	2.24	4	4
1:A:148:MET:N	1:A:224:MET:HB3	0.62	2.05	2	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CA	0.62	2.19	8	3
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.93	4	2
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HD13	0.62	1.70	4	3
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HG13	0.62	2.14	5	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:HD21	0.62	2.24	8	1
1:A:305:LYS:O	1:A:309:GLU:HB2	0.62	1.95	8	2
1:A:62:TRP:C	1:A:262:LEU:HG	0.62	2.15	3	3
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD22	0.62	1.72	1	1
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HG21	0.62	1.54	9	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:103:LEU:O	0.62	1.94	1	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:N	0.62	2.10	6	2
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD21	0.62	1.72	8	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:66:ARG:HD2	0.62	2.29	9	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:CB	0.62	2.25	6	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG12	0.62	1.72	5	2
1:A:194:PHE:O	1:A:198:LEU:HB2	0.62	1.95	8	1
1:A:126:PRO:CG	1:A:131:GLU:HG3	0.62	2.24	10	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:VAL:HA	0.62	2.25	10	2
1:A:117:TYR:HD2	1:A:245:THR:HG1	0.62	1.38	1	1
1:A:304:LEU:HG	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.69	2	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:N	0.62	2.10	10	2
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:HB1	0.61	1.72	3	1
1:A:246:VAL:HB	1:A:322:GLU:HG3	0.61	1.70	3	1
1:A:64:HIS:NE2	1:A:105:ALA:HB1	0.61	2.10	4	1
1:A:119:LYS:CD	1:A:121:LEU:HD22	0.61	2.25	4	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:CB	0.61	2.25	9	1
1:A:128:THR:HG23	1:A:131:GLU:HB2	0.61	1.71	1	2
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.61	1.95	7	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HB	1:A:301:ALA:HB3	0.61	1.71	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB3	0.61	1.96	4	1
1:A:261:VAL:HG22	1:A:330:MET:CE	0.61	2.25	5	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:262:LEU:O	0.61	1.94	10	2
1:A:108:ILE:O	1:A:302:VAL:HG21	0.61	1.95	4	2
1:A:355:GLN:HE21	1:A:360:ALA:HB2	0.61	1.55	4	1
1:A:248:PRO:O	1:A:254:PRO:HB3	0.61	1.96	6	1
1:A:166:GLY:O	1:A:256:LYS:HD3	0.61	1.95	8	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:HA	0.61	2.20	8	2
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:HG12	0.61	1.72	7	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.61	1.95	1	2
1:A:81:PRO:HA	1:A:85:PHE:CD2	0.61	2.29	2	1
1:A:166:GLY:HA2	1:A:185:ASN:HD21	0.61	1.56	8	1
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HD3	0.61	1.73	2	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:HE1	0.61	1.55	4	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB3	0.61	1.95	5	5
1:A:209:ASP:N	1:A:212:ILE:HD12	0.61	2.09	1	1
1:A:285:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD11	0.61	2.26	8	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:HA	0.61	1.72	9	4
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG13	0.60	1.73	2	3
1:A:303:ALA:CB	1:A:311:LEU:HG	0.60	2.26	2	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.60	1.73	7	1
1:A:259:VAL:CG1	1:A:329:ILE:HA	0.60	2.26	3	1
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ILE:HD13	0.60	1.96	7	4
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:OG	0.60	1.94	2	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG13	0.60	2.25	2	1
1:A:111:GLU:O	1:A:260:GLY:HA3	0.60	1.96	10	3
1:A:140:LYS:HA	1:A:144:LYS:O	0.60	1.96	7	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:223:ALA:HB2	0.60	1.71	9	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.12	6	2
1:A:72:GLN:CG	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.27	3	2
1:A:150:ASN:ND2	1:A:153:GLU:HB2	0.60	2.12	2	2
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HG3	0.60	1.73	2	1
1:A:6:LYS:HA	1:A:34:LYS:O	0.60	1.97	6	2
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CG1	0.60	2.26	8	1
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:HD3	0.60	2.10	10	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HA	0.60	1.72	10	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD11	0.60	2.31	7	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:33:ILE:HG21	0.60	2.31	3	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CB	0.60	2.27	4	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:CG2	0.60	2.25	7	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD23	1:A:245:THR:HG23	0.60	1.72	9	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.60	2.31	2	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HB	0.60	1.73	4	2
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HE2	0.60	1.71	3	1
1:A:303:ALA:HB2	1:A:311:LEU:HG	0.60	1.74	2	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HB2	0.60	2.32	8	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:N	0.60	2.12	9	2
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:H	0.60	1.38	4	1
1:A:298:PRO:HB2	1:A:314:ASP:OD2	0.60	1.96	4	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CG	0.60	2.27	1	1
1:A:283:TYR:O	1:A:289:GLY:HA3	0.60	1.97	2	2
1:A:128:THR:O	1:A:131:GLU:HG2	0.60	1.97	4	1
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:OG1	0.60	1.97	7	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:HB2	0.59	1.96	10	3
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:CD1	0.59	2.26	2	1
1:A:62:TRP:O	1:A:263:SER:N	0.59	2.34	1	10
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB2	0.59	1.73	2	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:HB2	0.59	1.98	4	3
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:HB2	0.59	1.74	10	1
1:A:330:MET:SD	1:A:331:PRO:HD2	0.59	2.37	3	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG22	0.59	1.98	4	2
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG13	0.59	2.27	2	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG22	0.59	1.96	2	3
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:HB1	0.59	1.74	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.59	2.33	3	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:CZ3	0.59	2.32	3	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:37:VAL:HG22	0.59	1.74	6	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CD1	0.59	2.28	8	1
1:A:349:ASN:O	1:A:355:GLN:HB2	0.59	1.97	8	4
1:A:113:LEU:HD23	1:A:227:ASN:C	0.59	2.17	8	2
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HG13	0.59	2.33	2	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HG	0.59	1.75	8	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HD22	0.59	1.58	3	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:PRO:HD3	0.59	1.73	2	2
1:A:116:ILE:HD12	1:A:225:THR:O	0.59	1.96	2	1
1:A:104:ILE:H	1:A:104:ILE:HD13	0.59	1.56	6	1
1:A:259:VAL:CB	1:A:324:ALA:HB1	0.59	2.28	10	1
1:A:364:ALA:O	1:A:367:ARG:HG3	0.59	1.97	10	2
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CD	0.59	2.28	9	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HB	0.59	1.98	7	5
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:HG3	0.59	1.98	8	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:HD23	0.59	1.58	10	1
1:A:113:LEU:HG	1:A:228:GLY:CA	0.59	2.28	4	1
1:A:209:ASP:H	1:A:212:ILE:HD12	0.58	1.58	1	1
1:A:283:TYR:CD1	1:A:284:LEU:HD23	0.58	2.33	10	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:HE3	0.58	1.58	9	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:289:GLY:HA2	0.58	1.75	1	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HD11	0.58	1.75	8	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HB	0.58	1.73	3	3
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:O	0.58	1.99	6	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:CB	0.58	2.28	10	3
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD2	0.58	1.99	8	1
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:CG2	0.58	2.28	10	2
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:HG22	0.58	1.75	7	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.58	1.76	10	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:H	0.58	1.58	9	1
1:A:146:ALA:HA	1:A:222:THR:HB	0.58	1.75	3	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.58	2.29	3	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG13	0.58	1.75	2	1
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HB2	0.58	1.99	6	1
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HG2	0.58	1.99	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.58	1.75	2	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:HD3	0.58	2.27	8	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HG21	0.58	1.57	1	2
1:A:159:PRO:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.58	1.76	2	1
1:A:123:PRO:O	1:A:125:PRO:HD3	0.58	1.98	10	3
1:A:258:PHE:HA	1:A:328:GLU:O	0.58	1.98	8	4
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:NE1	0.58	2.13	8	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD23	0.58	2.14	10	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:36:THR:OG1	0.58	1.99	9	1
1:A:219:LYS:HG2	1:A:221:GLU:HG3	0.58	1.74	3	1
1:A:255:SER:O	1:A:257:PRO:HD3	0.58	1.99	3	3
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG13	0.58	1.99	4	2
1:A:109:ALA:O	1:A:261:VAL:HA	0.58	1.99	5	5
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:HD2	0.57	1.76	6	1
1:A:350:ALA:CA	1:A:355:GLN:HB3	0.57	2.26	5	1
1:A:189:LYS:HD2	1:A:361:LEU:HD12	0.57	1.76	4	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:135:LEU:HD11	0.57	1.75	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.57	2.33	7	1
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:HB3	0.57	1.98	3	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.57	1.99	2	3
1:A:163:ALA:CA	1:A:255:SER:HA	0.57	2.29	8	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:O	0.57	1.98	7	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA3	0.57	2.29	4	2
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:CD	0.57	2.25	8	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CG	0.57	2.28	9	2
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:CE2	0.57	2.33	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD12	0.57	1.99	1	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:CB	0.57	2.28	8	2
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:HD2	0.57	2.13	9	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:H	0.57	1.58	1	1
1:A:217:PHE:CZ	1:A:227:ASN:HB3	0.57	2.35	1	1
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	5	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HD13	0.57	1.59	4	2
1:A:109:ALA:CA	1:A:302:VAL:HG11	0.57	2.28	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:CE	0.57	2.29	7	1
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HB3	0.57	2.00	3	2
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HB	0.57	2.25	1	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.57	2.33	2	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG2	0.57	2.28	2	1
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG3	0.57	2.29	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CD1	0.57	2.30	6	3
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:CG2	0.57	2.29	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:CB	0.57	2.25	9	1
1:A:177:ASP:HB2	1:A:180:ASP:OD2	0.57	1.99	3	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:HB3	0.57	1.75	3	2
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD12	0.57	1.76	1	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB2	0.57	2.00	8	4
1:A:116:ILE:HG13	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	6	1
1:A:129:TRP:HD1	1:A:248:PRO:HG2	0.57	1.58	2	2
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ARG:HG2	0.57	1.99	4	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HE2	0.57	1.99	4	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:277:LYS:HE3	0.57	1.77	2	1
1:A:189:LYS:NZ	1:A:362:LYS:HB3	0.57	2.14	4	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HD21	0.57	1.60	1	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:HA2	0.57	2.35	10	2
1:A:225:THR:O	1:A:226:ILE:HD13	0.57	2.00	7	1
1:A:7:LEU:O	1:A:36:THR:HG22	0.57	1.99	7	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:HG2	0.56	1.75	6	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.56	2.00	4	2
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.56	2.29	3	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	3	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:ALA:O	1:A:189:LYS:HG3	0.56	2.00	1	1
1:A:130:GLU:C	1:A:133:PRO:HD2	0.56	2.21	5	6
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HB2	0.56	2.34	6	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG12	0.56	1.99	4	2
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD13	0.56	1.77	5	1
1:A:316:ARG:HD2	1:A:316:ARG:H	0.56	1.59	5	1
1:A:7:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD2	0.56	2.00	4	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HD2	0.56	2.01	4	1
1:A:156:PHE:HZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	1.60	9	1
1:A:25:LYS:HD2	1:A:34:LYS:HE3	0.56	1.77	9	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:HB3	0.56	1.61	1	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:155:TYR:CE2	0.56	2.35	8	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:CG1	0.56	2.30	7	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD13	0.56	2.20	2	2
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB3	0.56	1.78	9	4
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CB	0.56	2.30	3	2
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.56	2.30	2	2
1:A:7:LEU:CG	1:A:59:ILE:HD11	0.56	2.30	8	1
1:A:246:VAL:CG1	1:A:322:GLU:HB3	0.56	2.30	4	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG23	0.56	1.76	7	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD13	0.56	2.29	2	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	2.36	9	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HD3	0.56	1.76	9	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:160:LEU:HG	0.56	2.36	8	1
1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:HD22	0.56	2.16	9	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:CD2	0.56	2.36	9	2
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:H	0.56	1.60	10	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:H	0.55	1.61	2	2
1:A:50:VAL:HG23	1:A:55:ASP:HB2	0.55	1.78	8	1
1:A:266:ILE:O	1:A:266:ILE:HG23	0.55	2.01	9	3
1:A:250:PHE:HZ	1:A:255:SER:HB2	0.55	1.60	10	1
1:A:230:TRP:HA	1:A:230:TRP:CE3	0.55	2.35	10	2
1:A:164:ASP:CB	1:A:253:GLN:HB3	0.55	2.31	4	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.55	2.00	8	5
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.55	2.31	5	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG22	0.55	2.02	4	1
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HB2	0.55	2.01	9	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HD2	0.55	2.36	1	1
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:CG	0.55	2.30	2	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:301:ALA:HB3	0.55	2.30	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:ASP:CG	1:A:212:ILE:HG12	0.55	2.21	7	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:208:THR:HB	0.55	2.25	1	1
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HG2	0.55	2.01	2	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD23	0.55	2.32	5	1
1:A:311:LEU:O	1:A:318:ALA:HB2	0.55	2.01	10	1
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:N	0.55	2.00	4	1
1:A:295:LYS:HG3	1:A:296:ASP:N	0.55	2.17	4	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:CD	0.55	2.30	7	2
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:CG2	0.55	2.30	1	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:NE1	0.55	2.15	1	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CZ	0.55	2.37	2	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD22	0.55	1.78	8	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:CE1	0.55	2.36	4	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:HG23	0.55	2.36	7	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:HD12	0.55	1.77	6	2
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:CD1	0.55	2.31	6	1
1:A:25:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.55	2.01	9	2
1:A:63:ALA:HB3	1:A:66:ARG:HG2	0.55	1.77	4	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HB2	0.55	1.79	9	1
1:A:266:ILE:HG23	1:A:266:ILE:O	0.55	2.02	7	3
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:HG22	0.55	1.78	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HA	0.55	1.78	3	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:160:LEU:HD13	0.55	2.37	1	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:294:ASN:HD22	0.55	1.62	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CG	0.55	2.31	6	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:CB	0.55	2.27	8	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB3	0.55	1.77	4	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:318:ALA:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CB	0.55	2.55	1	5
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HB	0.55	2.01	6	3
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:HB3	0.55	1.78	10	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HG2	0.55	2.02	4	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:38:GLU:OE2	1:A:43:LEU:HD21	0.54	2.00	3	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HG2	0.54	2.02	4	5
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:O	0.54	2.02	2	3
1:A:72:GLN:HA	1:A:76:LEU:HB3	0.54	1.79	4	1
1:A:194:PHE:HA	1:A:197:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.54	1.62	4	7
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HD13	0.54	1.63	4	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LYS:O	1:A:87:ASP:HB2	0.54	2.02	7	4
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CZ2	0.54	2.37	8	1
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:HD3	0.54	1.79	9	2
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:HB	0.54	2.32	4	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB3	0.54	2.02	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:75:LEU:N	0.54	2.18	10	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.77	7	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.54	1.78	1	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG21	0.54	1.78	6	4
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.54	2.38	2	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.79	10	1
1:A:355:GLN:OE1	1:A:360:ALA:HB2	0.54	2.02	7	1
1:A:229:PRO:HA	1:A:316:ARG:HH12	0.54	1.62	2	1
1:A:106:TYR:HB2	1:A:264:ALA:HB3	0.54	1.80	5	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:OD1	0.54	2.03	5	1
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:CG2	0.54	2.32	10	1
1:A:67:PHE:CG	1:A:263:SER:HB3	0.54	2.38	10	1
1:A:170:LYS:CG	1:A:180:ASP:HB3	0.54	2.32	1	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD22	0.54	2.33	1	2
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:O	0.54	2.02	9	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:N	0.54	2.18	6	1
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:HD12	0.54	2.03	5	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD23	0.54	2.32	4	1
1:A:299:LEU:HG	1:A:300:GLY:H	0.54	1.63	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.54	2.03	9	1
1:A:170:LYS:HD2	1:A:180:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:262:LEU:O	0.54	2.03	4	2
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG2	0.54	1.79	6	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB3	0.54	2.02	5	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:294:ASN:HD21	0.54	2.16	1	1
1:A:289:GLY:O	1:A:292:ALA:HB3	0.54	2.03	1	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:N	0.54	2.18	2	2
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:N	0.54	2.17	5	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD22	0.54	2.22	4	1
1:A:363:ASP:HA	1:A:366:THR:OG1	0.54	2.02	7	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:151:LEU:HA	0.53	2.38	3	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:HB3	0.53	2.03	1	3
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:N	0.53	2.18	4	2
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:CG2	0.53	2.33	9	2
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:HB2	0.53	1.78	4	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HB	0.53	2.03	7	1
1:A:265:GLY:O	1:A:266:ILE:HD13	0.53	2.03	6	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:191:GLY:C	0.53	2.24	5	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:224:MET:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:CD1	0.53	2.33	9	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:HD23	0.53	1.80	2	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.53	2.33	10	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HD13	0.53	2.31	4	1
1:A:277:LYS:HD3	1:A:281:GLU:OE1	0.53	2.03	3	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG22	0.53	1.80	3	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD3	0.53	2.04	5	3
1:A:333:ILE:HG23	1:A:336:MET:HB2	0.53	1.78	8	1
1:A:88:LYS:O	1:A:89:LEU:HD12	0.53	2.04	2	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:CD	0.53	2.34	6	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD21	0.53	2.38	7	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.53	2.04	1	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:212:ILE:HD12	1:A:212:ILE:N	0.53	2.18	4	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG2	0.53	1.80	4	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD11	0.53	2.39	7	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:OE1	0.53	2.04	7	1
1:A:146:ALA:CA	1:A:222:THR:HB	0.53	2.34	3	2
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD11	0.53	1.81	6	3
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HD12	0.53	2.34	10	3
1:A:10:TRP:CG	1:A:40:PRO:HD3	0.53	2.39	5	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:102:LYS:HE3	0.53	2.18	10	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:CB	0.53	2.33	10	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:HB2	0.53	2.04	4	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG12	0.53	1.81	7	1
1:A:354:ARG:O	1:A:355:GLN:HG3	0.53	2.04	2	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:ND2	0.53	2.19	6	3
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:263:SER:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD13	0.53	2.24	2	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:O	0.53	2.04	5	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:HD1	0.53	1.64	4	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.53	1.81	9	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:C	0.53	2.24	9	1
1:A:47:PHE:N	1:A:48:PRO:HD2	0.52	2.19	6	6
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD12	0.52	2.04	6	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:288:GLU:HG2	0.52	2.19	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CB	0.52	2.32	4	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD3	0.52	2.19	7	1
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:HG13	0.52	2.24	9	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.52	2.20	10	9
1:A:144:LYS:HG3	1:A:145:SER:H	0.52	1.63	5	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB3	0.52	1.80	8	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HD3	0.52	1.81	8	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG22	0.52	2.04	10	1
1:A:79:ILE:N	1:A:79:ILE:HD13	0.52	2.19	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:CB	0.52	2.87	8	7
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:CG	0.52	2.25	5	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:365:GLN:NE2	0.52	2.20	4	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD13	0.52	1.81	4	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG21	0.52	1.80	7	1
1:A:358:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HE3	0.52	2.03	3	1
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:CD2	0.52	2.33	2	2
1:A:284:LEU:O	1:A:285:LEU:HD12	0.52	2.05	2	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:O	0.52	2.04	6	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HD12	0.52	2.39	6	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD2	0.52	2.19	8	1
1:A:129:TRP:HE1	1:A:248:PRO:HD2	0.52	1.63	10	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CA	0.52	2.34	10	1
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:CG	0.52	2.33	3	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.35	3	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HD12	0.52	1.81	6	4
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD23	0.52	2.05	4	2
1:A:249:THR:CG2	1:A:254:PRO:HD3	0.52	2.29	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB3	0.52	2.34	7	1
1:A:294:ASN:OD1	1:A:302:VAL:HG11	0.52	2.05	2	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TRP:CD1	0.52	2.39	6	1
1:A:111:GLU:HG3	1:A:260:GLY:HA3	0.52	1.82	5	1
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:HD1	0.52	1.46	8	1
1:A:294:ASN:ND2	1:A:298:PRO:HG3	0.52	2.20	4	1
1:A:217:PHE:CE2	1:A:225:THR:HB	0.52	2.40	1	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:266:ILE:O	0.52	2.05	1	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:N	0.52	2.43	5	7
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.52	1.64	2	1
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:CG	0.52	2.35	6	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CE2	0.52	2.40	6	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:301:ALA:O	0.52	2.04	4	2
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:CB	0.52	2.34	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HG3	0.52	1.81	9	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:199:ILE:HG23	0.52	2.35	5	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:284:LEU:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HB2	0.52	1.80	7	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:93:THR:HG21	0.52	1.82	3	1
1:A:302:VAL:HG11	1:A:304:LEU:HD12	0.52	1.82	1	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HG	0.52	2.32	2	1
1:A:159:PRO:O	1:A:255:SER:HB2	0.52	2.05	7	2
1:A:314:ASP:OD2	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.05	5	1
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:HD13	0.52	2.04	8	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:HE2	0.52	1.60	8	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HG2	0.52	2.04	4	1
1:A:55:ASP:OD2	1:A:75:LEU:HD12	0.52	2.05	4	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:CG2	0.52	2.29	4	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:ASP:HB2	0.52	1.80	9	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HB	0.52	1.81	3	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CG1	0.52	2.34	5	2
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG22	0.52	1.81	1	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:38:GLU:HB3	0.52	2.40	6	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD22	0.52	2.26	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CA	0.52	2.34	7	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:102:LYS:HG2	0.52	1.82	9	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HA	0.51	2.36	3	1
1:A:11:ILE:O	1:A:40:PRO:HD2	0.51	2.05	1	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.51	2.35	2	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG3	0.51	2.04	8	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HG13	0.51	1.81	8	1
1:A:154:PRO:HB3	1:A:340:TRP:HH2	0.51	1.65	4	1
1:A:226:ILE:HD13	1:A:226:ILE:N	0.51	2.20	9	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB2	0.51	1.82	9	1
1:A:145:SER:HB3	1:A:222:THR:HG21	0.51	1.82	2	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.51	2.39	2	1
1:A:308:GLU:C	1:A:311:LEU:HG	0.51	2.24	6	1
1:A:344:ARG:HD3	1:A:348:ILE:HG13	0.51	1.82	8	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG22	0.51	1.80	4	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:O	0.51	2.04	9	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:226:ILE:HG22	0.51	1.81	9	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HG3	0.51	2.05	1	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG21	0.51	1.81	5	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:CB	0.51	2.35	4	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:34:LYS:O	0.51	2.05	7	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:HG2	0.51	1.82	2	1
1:A:129:TRP:HB2	1:A:249:THR:O	0.51	2.05	6	1
1:A:315:PRO:HG2	1:A:316:ARG:CD	0.51	2.35	5	1
1:A:72:GLN:OE1	1:A:72:GLN:HA	0.51	2.04	10	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD23	0.51	1.82	9	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HD2	0.51	1.82	3	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:174:GLY:HA2	0.51	2.06	1	1
1:A:297:LYS:O	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.05	1	1
1:A:196:VAL:HG12	1:A:200:LYS:HD2	0.51	1.83	2	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.51	2.06	8	3
1:A:25:LYS:O	1:A:28:GLU:HG3	0.51	2.04	10	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:170:LYS:HD3	1:A:180:ASP:HB3	0.51	1.81	7	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HD11	0.51	1.81	9	1
1:A:94:TRP:CA	1:A:97:VAL:HG12	0.51	2.28	1	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:CG2	0.51	2.36	5	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:223:ALA:HB2	0.51	2.36	5	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HD12	0.51	2.05	5	1
1:A:314:ASP:OD1	1:A:317:ILE:HG13	0.51	2.06	5	1
1:A:83:LYS:HE2	1:A:281:GLU:OE1	0.51	2.05	5	1
1:A:363:ASP:O	1:A:366:THR:HG22	0.51	2.06	3	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.51	2.06	1	2
1:A:184:ASP:HB3	1:A:365:GLN:HG3	0.51	1.83	10	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HG12	0.51	2.41	4	1
1:A:113:LEU:HG	1:A:227:ASN:O	0.51	2.06	3	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.51	2.05	7	2
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HG	0.51	1.82	6	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:41:ASP:HB2	0.51	2.05	5	1
1:A:163:ALA:C	1:A:255:SER:HA	0.51	2.26	8	1
1:A:147:LEU:O	1:A:147:LEU:HD13	0.51	2.06	4	1
1:A:272:ASN:ND2	1:A:275:LEU:HB2	0.51	2.20	7	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:107:PRO:HD2	0.51	2.41	9	1
1:A:108:ILE:CB	1:A:262:LEU:HB3	0.51	2.27	9	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:CD2	0.51	2.35	9	1
1:A:9:ILE:O	1:A:10:TRP:HD1	0.51	1.89	3	2
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CB	0.51	2.35	6	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD13	0.51	1.83	10	2
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG13	0.51	2.36	4	1
1:A:349:ASN:C	1:A:355:GLN:HB3	0.51	2.26	4	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB3	0.51	1.83	9	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HB	0.51	1.83	9	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:CG	0.51	2.27	1	1
1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:HD13	0.51	2.21	2	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:NE	0.51	2.21	6	1
1:A:41:ASP:H	1:A:43:LEU:HD12	0.51	1.65	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HA	0.51	1.83	10	2
1:A:90:TYR:CD1	1:A:92:PHE:HB2	0.51	2.41	5	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:279:PHE:CE2	0.51	2.41	8	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:268:ALA:HB3	0.51	1.80	8	1
1:A:90:TYR:CE2	1:A:92:PHE:HB2	0.50	2.41	7	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG22	0.50	1.83	2	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	0.50	1.83	6	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:117:TYR:CD2	0.50	2.40	7	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG3	0.50	1.83	9	1
1:A:330:MET:CE	1:A:331:PRO:HD2	0.50	2.36	3	1
1:A:356:THR:HG23	1:A:359:GLU:HB2	0.50	1.82	3	1
1:A:301:ALA:HA	1:A:317:ILE:HG13	0.50	1.83	2	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CD1	0.50	2.36	6	1
1:A:370:LYS:OXT	1:A:370:LYS:HG3	0.50	2.06	6	1
1:A:108:ILE:C	1:A:302:VAL:HG21	0.50	2.25	4	2
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HB2	0.50	2.04	2	2
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:N	0.50	2.21	6	2
1:A:196:VAL:HA	1:A:199:ILE:HD12	0.50	1.81	6	1
1:A:125:PRO:HG2	1:A:131:GLU:OE2	0.50	2.06	5	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:349:ASN:OD1	0.50	2.07	8	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:N	0.50	2.20	7	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:N	0.50	2.22	1	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:218:ASN:N	0.50	2.80	6	1
1:A:10:TRP:HA	1:A:38:GLU:O	0.50	2.06	5	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:ALA:HB2	0.50	2.06	1	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HB	0.50	1.82	1	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:267:ASN:HA	0.50	1.82	2	1
1:A:303:ALA:O	1:A:308:GLU:HB2	0.50	2.06	2	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:333:ILE:HG21	0.50	2.41	8	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:304:LEU:N	0.50	2.21	4	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	7	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:CG2	0.50	2.17	7	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD23	0.50	2.42	3	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:CG2	0.50	2.36	3	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:CD1	0.50	2.31	2	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB3	0.50	2.36	7	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TRP:HD1	1:A:63:ALA:H	0.50	1.50	7	2
1:A:333:ILE:O	1:A:336:MET:HG2	0.50	2.06	9	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:108:ILE:O	0.50	2.06	3	2
1:A:150:ASN:C	1:A:151:LEU:HD13	0.50	2.26	1	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:200:LYS:HE3	0.50	2.36	2	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:94:TRP:CZ2	0.50	2.41	4	1
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:HE3	0.50	1.65	7	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:CG	0.50	2.37	2	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:94:TRP:HZ2	0.50	2.25	2	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:HD21	0.50	1.65	6	1
1:A:330:MET:HG2	1:A:331:PRO:HD2	0.50	1.84	4	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.37	3	2
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:CD1	0.49	2.36	1	1
1:A:51:ALA:HA	1:A:56:GLY:HA3	0.49	1.84	2	1
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HG2	0.49	1.83	6	1
1:A:157:THR:HA	1:A:195:LEU:HD21	0.49	1.84	8	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD22	0.49	2.07	8	1
1:A:124:ASN:O	1:A:126:PRO:HD3	0.49	2.07	1	3
1:A:147:LEU:CD1	1:A:224:MET:HG3	0.49	2.33	5	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD2	0.49	2.21	8	1
1:A:250:PHE:O	1:A:250:PHE:HD1	0.49	1.89	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:40:PRO:HG3	0.49	1.83	3	1
1:A:132:ILE:HG12	1:A:147:LEU:CD2	0.49	2.37	2	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:104:ILE:HD13	0.49	2.22	4	1
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:HG2	0.49	1.83	3	1
1:A:64:HIS:ND1	1:A:263:SER:HB3	0.49	2.23	4	2
1:A:178:ILE:HG23	1:A:178:ILE:O	0.49	2.06	10	1
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:N	0.49	2.23	10	1
1:A:28:GLU:HG3	1:A:34:LYS:HG3	0.49	1.83	4	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:139:LEU:HD11	0.49	2.38	7	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD22	0.49	2.37	3	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.49	2.75	2	4
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HA	0.49	2.30	2	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HE3	0.49	1.83	2	1
1:A:214:GLU:HG2	1:A:217:PHE:CE2	0.49	2.42	8	1
1:A:119:LYS:C	1:A:121:LEU:H	0.49	2.11	7	2
1:A:308:GLU:CG	1:A:321:MET:HE1	0.49	2.37	3	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:122:LEU:O	0.49	2.08	1	1
1:A:286:THR:HG23	1:A:289:GLY:H	0.49	1.66	8	2
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HB2	0.49	2.38	4	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.49	2.08	3	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:284:LEU:HD11	1:A:293:VAL:HG11	0.49	1.83	1	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HB3	0.49	1.84	5	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD13	0.49	2.38	8	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG23	0.49	1.83	3	1
1:A:311:LEU:HG	1:A:317:ILE:CD1	0.49	2.38	3	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:255:SER:OG	0.49	2.08	4	2
1:A:184:ASP:CG	1:A:362:LYS:HA	0.49	2.28	6	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:OH	0.49	2.08	5	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:TRP:HE1	0.49	2.20	5	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.36	8	1
1:A:202:LYS:HA	1:A:202:LYS:NZ	0.49	2.23	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HB3	0.49	2.07	4	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:NZ	0.49	2.23	9	1
1:A:178:ILE:HG23	1:A:179:LYS:N	0.49	2.23	1	2
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:CD1	0.49	2.24	8	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:40:PRO:HD3	0.49	1.67	10	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB2	0.49	2.07	10	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:324:ALA:CB	0.49	2.38	10	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:267:ASN:HD22	0.49	2.21	10	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG23	0.49	1.83	2	1
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD23	0.49	2.08	6	1
1:A:302:VAL:CB	1:A:304:LEU:HD23	0.49	2.36	5	1
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:HD23	0.49	2.08	10	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:324:ALA:HB1	0.49	2.37	10	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CA	0.48	2.38	3	1
1:A:181:VAL:CG1	1:A:183:VAL:HG23	0.48	2.38	2	1
1:A:59:ILE:C	1:A:60:ILE:HG13	0.48	2.28	5	1
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.48	1.67	4	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:HG13	0.48	1.84	7	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG22	0.48	2.08	4	5
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:HE1	0.48	1.67	8	1
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:ALA:HB3	0.48	2.07	10	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.48	2.08	7	1
1:A:359:GLU:HA	1:A:363:ASP:OD2	0.48	2.08	7	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB3	0.48	1.85	3	1
1:A:355:GLN:NE2	1:A:360:ALA:HB2	0.48	2.23	1	3
1:A:208:THR:OG1	1:A:213:ALA:HB2	0.48	2.08	6	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.48	1.85	6	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:O	0.48	2.07	5	2
1:A:215:ALA:O	1:A:219:LYS:HB2	0.48	2.09	4	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.48	2.30	7	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG23	0.48	2.09	7	1
1:A:308:GLU:HG2	1:A:321:MET:HE1	0.48	1.86	3	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG12	0.48	2.07	3	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:97:VAL:O	0.48	2.08	1	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB3	0.48	2.08	5	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CE2	0.48	2.43	8	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:279:PHE:HZ	0.48	2.22	2	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG13	0.48	1.85	5	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD23	0.48	2.29	5	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG22	0.48	2.07	5	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:OD1	0.48	1.91	7	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:CA	0.48	2.29	9	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.48	2.08	3	1
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:HB	0.48	1.85	1	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG12	0.48	2.09	1	2
1:A:188:ALA:O	1:A:192:LEU:HB2	0.48	2.08	2	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:283:TYR:HE1	0.48	2.21	4	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.08	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:CG2	0.48	2.38	7	1
1:A:68:GLY:O	1:A:104:ILE:HD11	0.48	2.08	1	1
1:A:253:GLN:CG	1:A:254:PRO:HD2	0.48	2.28	6	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:C	0.48	2.29	4	1
1:A:94:TRP:HZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.48	1.69	4	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HD12	0.48	1.86	7	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:229:PRO:HB3	0.48	2.08	3	1
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:CB	0.48	2.92	10	8
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG12	0.48	2.39	5	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:92:PHE:HB2	0.48	2.43	5	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.48	2.09	10	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD2	0.48	3.02	9	1
1:A:348:ILE:HD13	1:A:348:ILE:O	0.48	2.09	3	1
1:A:290:LEU:CG	1:A:294:ASN:HD21	0.48	2.22	1	1
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.48	2.09	8	2
1:A:98:ARG:O	1:A:98:ARG:HG3	0.48	2.09	10	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:HB3	0.48	1.83	4	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG12	0.48	1.86	3	2
1:A:47:PHE:CE1	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HD12	0.48	2.43	1	3
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:CG2	0.48	2.38	1	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:O	0.48	2.08	2	1
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:HA3	0.48	2.09	2	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:61:PHE:HB2	0.48	1.86	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:O	0.48	2.08	10	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:OG	0.48	2.07	4	1
1:A:117:TYR:HD2	1:A:245:THR:OG1	0.47	1.91	1	1
1:A:214:GLU:CG	1:A:218:ASN:HB2	0.47	2.32	6	1
1:A:42:LYS:HE3	1:A:43:LEU:HB3	0.47	1.85	8	1
1:A:94:TRP:CZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.47	2.44	4	1
1:A:121:LEU:HD23	1:A:121:LEU:C	0.47	2.30	4	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HD23	0.47	1.86	4	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:202:LYS:HE2	0.47	2.09	9	1
1:A:300:GLY:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	3	1
1:A:96:ALA:HB2	1:A:329:ILE:HD11	0.47	1.85	5	1
1:A:370:LYS:HG3	1:A:370:LYS:OXT	0.47	2.09	8	1
1:A:297:LYS:O	1:A:297:LYS:HG2	0.47	2.08	4	1
1:A:189:LYS:HZ1	1:A:362:LYS:HB3	0.47	1.68	4	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HG2	0.47	2.44	7	2
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:CG2	0.47	2.27	10	1
1:A:317:ILE:H	1:A:317:ILE:HD12	0.47	1.69	7	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:HG2	0.47	2.09	3	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:HB2	0.47	1.87	1	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.47	2.39	1	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.40	6	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CE	0.47	2.40	7	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:CA	0.47	2.97	7	2
1:A:348:ILE:HD13	1:A:348:ILE:C	0.47	2.30	3	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:108:ILE:O	0.47	2.10	1	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:303:ALA:N	0.47	2.24	1	2
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:H	0.47	1.68	2	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:CG	0.47	2.39	6	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:183:VAL:HG23	0.47	2.38	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HG22	0.47	2.09	4	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG12	0.47	1.87	7	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:285:LEU:HD11	0.47	2.09	9	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HG12	0.47	2.08	9	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.47	2.10	3	1
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.30	3	2
1:A:181:VAL:HB	1:A:365:GLN:NE2	0.47	2.25	2	1
1:A:195:LEU:HD23	1:A:199:ILE:HD11	0.47	1.86	6	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HG23	0.47	2.40	6	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HG	0.47	2.10	6	1
1:A:344:ARG:CA	1:A:348:ILE:HD12	0.47	2.39	6	2
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HB2	0.47	2.37	5	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:223:ALA:HB2	0.47	1.86	5	2
1:A:316:ARG:CD	1:A:316:ARG:H	0.47	2.23	5	1
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	8	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CB	0.47	2.34	9	2
1:A:169:PHE:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.47	2.45	10	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:HG2	0.47	2.44	10	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:328:GLU:HG2	0.47	2.10	7	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:255:SER:HB3	0.47	2.33	9	1
1:A:81:PRO:HB3	1:A:85:PHE:CD2	0.47	2.45	3	1
1:A:298:PRO:CG	1:A:316:ARG:HH12	0.47	2.22	6	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:HE1	0.47	1.68	4	3
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HG	0.47	1.86	7	2
1:A:202:LYS:HG3	1:A:203:HIS:H	0.47	1.69	2	1
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:OG1	0.47	2.10	4	1
1:A:64:HIS:CA	1:A:263:SER:HB2	0.47	2.23	9	1
1:A:292:ALA:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.47	2.36	5	1
1:A:302:VAL:HG23	1:A:302:VAL:O	0.47	2.11	10	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG23	0.47	2.10	7	1
1:A:71:ALA:O	1:A:76:LEU:HB2	0.47	2.09	7	2
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HG3	0.46	1.85	3	2
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.46	2.63	10	7
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	0.46	2.09	2	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.46	2.45	6	1
1:A:164:ASP:OD2	1:A:253:GLN:HB3	0.46	2.10	8	1
1:A:250:PHE:CZ	1:A:255:SER:HB2	0.46	2.44	10	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:147:LEU:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:227:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:329:ILE:O	1:A:330:MET:O	0.46	2.33	3	1
1:A:10:TRP:N	1:A:59:ILE:O	0.46	2.48	1	4
1:A:52:ALA:C	1:A:53:THR:HG23	0.46	2.30	8	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:38:GLU:HB3	0.46	2.46	10	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:HB2	0.46	2.10	9	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:78:GLU:CA	1:A:104:ILE:HG22	0.46	2.40	1	1
1:A:287:ASP:HB2	1:A:291:GLU:OE2	0.46	2.10	1	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:N	0.46	2.83	6	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD22	0.46	2.40	9	1
1:A:62:TRP:CE2	1:A:67:PHE:CD2	0.46	3.03	3	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HB	0.46	2.33	3	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:CD2	0.46	2.30	5	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:CB	0.46	2.39	4	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:O	0.46	2.33	5	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:283:TYR:HD2	0.46	1.71	5	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG13	0.46	2.10	5	1
1:A:128:THR:HB	1:A:130:GLU:HG2	0.46	1.87	10	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:144:LYS:CB	0.46	2.41	4	1
1:A:275:LEU:O	1:A:278:GLU:HG3	0.46	2.11	3	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:59:ILE:HG21	0.46	1.87	5	2
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CD1	0.46	2.41	6	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:CD1	0.46	2.40	6	1
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:HD13	0.46	2.11	10	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HG23	0.46	2.11	7	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:ND2	0.46	2.24	3	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:H	0.46	2.09	3	1
1:A:88:LYS:CD	1:A:306:SER:HB2	0.46	2.35	3	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.46	2.30	6	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HG	0.46	2.41	6	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.46	2.11	9	2
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:GLN:N	0.46	2.26	1	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG23	0.46	2.11	4	1
1:A:349:ASN:O	1:A:352:SER:HB2	0.46	2.11	7	1
1:A:355:GLN:HG3	1:A:360:ALA:HB2	0.46	1.86	9	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG2	0.46	2.11	3	1
1:A:297:LYS:HG2	1:A:298:PRO:HD2	0.46	1.88	8	2
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG23	0.46	2.11	6	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:154:PRO:HD2	0.46	1.87	5	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB2	0.46	2.11	10	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:263:SER:HB3	0.46	2.45	10	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:ND2	0.46	2.26	9	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.46	1.87	3	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD12	0.46	1.87	10	2
1:A:33:ILE:HD13	1:A:33:ILE:N	0.46	2.26	5	1
1:A:129:TRP:HE3	1:A:132:ILE:HG12	0.46	1.70	8	1
1:A:344:ARG:HH11	1:A:344:ARG:HG3	0.46	1.71	7	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:H	0.46	2.21	9	2
1:A:274:GLU:O	1:A:278:GLU:HG2	0.45	2.11	3	1
1:A:297:LYS:HG3	1:A:298:PRO:HD2	0.45	1.87	2	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HD2	0.45	2.10	2	1
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.45	2.46	5	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.63	8	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:CD	0.45	2.35	4	3
1:A:205:ASN:HB3	1:A:207:ASP:OD2	0.45	2.10	9	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HG	0.45	2.11	3	1
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HB2	0.45	1.88	5	1
1:A:111:GLU:HB2	1:A:229:PRO:HG3	0.45	1.88	7	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HB3	0.45	2.47	3	1
1:A:28:GLU:N	1:A:33:ILE:HB	0.45	2.27	2	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.45	2.78	6	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:H	0.45	1.70	8	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:227:ASN:HB2	0.45	2.45	7	1
1:A:193:THR:O	1:A:196:VAL:HG12	0.45	2.12	9	1
1:A:310:GLU:O	1:A:312:ALA:N	0.45	2.50	3	4
1:A:283:TYR:CZ	1:A:284:LEU:HD13	0.45	2.47	2	1
1:A:10:TRP:O	1:A:11:ILE:HG23	0.45	2.12	6	1
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB3	0.45	2.11	5	2
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HG12	0.45	1.88	8	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:153:GLU:HG3	0.45	2.11	10	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ALA:N	0.45	2.77	9	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:40:PRO:HD3	0.45	2.42	5	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.91	8	1
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:CD2	0.45	2.24	10	1
1:A:9:ILE:O	1:A:38:GLU:HB2	0.45	2.11	9	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:PHE:CZ	0.45	3.00	2	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:LYS:HG3	0.45	2.11	5	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HB2	0.45	2.11	10	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:CG1	0.45	2.38	4	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:315:PRO:CD	0.45	2.95	5	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.45	2.47	8	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:156:PHE:CE2	0.45	3.04	10	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.45	2.12	3	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	0.45	1.89	9	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:95:ASP:N	0.45	2.85	3	1
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:CB	0.45	2.42	1	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB2	0.45	2.32	1	2
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HD12	0.45	2.12	6	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG21	0.45	1.88	5	1
1:A:65:ASP:CB	1:A:331:PRO:HG3	0.45	2.36	4	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HG21	0.45	2.42	5	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG13	0.45	2.11	10	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:327:GLY:C	0.45	2.15	7	1
1:A:64:HIS:N	1:A:261:VAL:O	0.44	2.49	2	6
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:284:LEU:C	1:A:290:LEU:HD23	0.44	2.33	5	1
1:A:314:ASP:CG	1:A:318:ALA:HB2	0.44	2.33	5	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:NE1	0.44	2.27	8	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HD3	0.44	2.12	4	1
1:A:362:LYS:HG3	1:A:363:ASP:N	0.44	2.26	4	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD1	0.44	3.05	7	1
1:A:333:ILE:HD11	1:A:335:GLN:NE2	0.44	2.27	7	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:CD1	0.44	2.38	3	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:62:TRP:HE1	0.44	2.17	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG22	0.44	1.88	8	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:N	0.44	2.80	7	3
1:A:283:TYR:CG	1:A:284:LEU:N	0.44	2.86	4	1
1:A:317:ILE:HA	1:A:320:THR:CG2	0.44	2.43	4	1
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HD12	0.44	2.31	4	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:CD2	0.44	2.42	3	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HG13	0.44	2.48	2	1
1:A:156:PHE:CG	1:A:157:THR:N	0.44	2.85	2	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD1	0.44	2.41	8	1
1:A:311:LEU:CA	1:A:315:PRO:HG2	0.44	2.41	10	1
1:A:158:TRP:HH2	1:A:168:ALA:HB2	0.44	1.73	4	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:37:VAL:O	0.44	2.12	9	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:O	0.44	2.71	3	2
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ALA:H	0.44	2.19	10	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.44	2.65	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:CB	0.44	3.00	7	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:CB	0.44	2.42	1	1
1:A:344:ARG:HD2	1:A:345:THR:HG23	0.44	1.88	1	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:HG23	0.44	2.42	2	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.44	2.27	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG13	0.44	2.12	3	1
1:A:340:TRP:O	1:A:344:ARG:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:299:LEU:CD1	1:A:300:GLY:H	0.44	2.25	10	1
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG3	0.44	2.12	7	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:HG22	0.44	1.89	1	1
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD23	0.44	2.12	2	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:359:GLU:HG2	0.44	2.13	5	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG13	0.44	1.89	10	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG12	0.44	2.12	4	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HB2	0.44	2.43	4	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:HG13	0.44	2.12	7	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:261:VAL:O	1:A:261:VAL:HG13	0.44	2.13	9	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:122:LEU:O	0.44	2.65	1	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG13	0.44	2.13	2	1
1:A:200:LYS:HA	1:A:204:MET:HA	0.44	1.88	5	1
1:A:244:VAL:O	1:A:244:VAL:HG13	0.44	2.13	8	2
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CA	0.44	2.43	4	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HB2	0.44	1.90	7	1
1:A:348:ILE:HG23	1:A:349:ASN:N	0.44	2.28	3	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.44	2.40	2	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:C	0.44	2.33	5	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:59:ILE:HD11	0.44	2.42	8	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CG1	0.44	2.43	8	2
1:A:153:GLU:CB	1:A:155:TYR:CE2	0.43	3.00	8	1
1:A:302:VAL:CG2	1:A:317:ILE:HG21	0.43	2.43	10	1
1:A:340:TRP:HA	1:A:340:TRP:CE3	0.43	2.47	4	1
1:A:290:LEU:HG	1:A:294:ASN:ND2	0.43	2.28	1	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:CG1	0.43	2.42	2	1
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB3	0.43	2.42	6	1
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD12	0.43	2.33	6	1
1:A:329:ILE:HG23	1:A:329:ILE:O	0.43	2.13	6	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:344:ARG:N	0.43	2.28	8	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:13:GLY:H	0.43	1.72	7	1
1:A:88:LYS:C	1:A:89:LEU:HD12	0.43	2.33	2	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:OH	0.43	2.13	6	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:67:PHE:CZ	0.43	2.48	5	2
1:A:308:GLU:OE2	1:A:321:MET:HE2	0.43	2.13	10	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.43	2.49	10	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:CD2	0.43	2.44	9	1
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:PRO:HG2	0.43	1.89	3	1
1:A:279:PHE:HE1	1:A:283:TYR:CE1	0.43	2.31	3	1
1:A:366:THR:O	1:A:369:THR:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:N	0.43	2.23	9	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:HB2	0.43	1.88	1	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG21	0.43	1.90	2	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:160:LEU:CB	1:A:195:LEU:HD21	0.43	2.32	5	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:33:ILE:HG13	0.43	2.43	5	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD1	0.43	3.02	5	1
1:A:303:ALA:C	1:A:304:LEU:HD12	0.43	2.34	4	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CD	0.43	2.33	9	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:NZ	0.43	2.28	8	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:161:ILE:O	1:A:161:ILE:HG22	0.43	2.14	2	1
1:A:280:LEU:CG	1:A:284:LEU:HD13	0.43	2.44	6	1
1:A:302:VAL:O	1:A:308:GLU:HG3	0.43	2.13	5	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:64:HIS:H	0.43	2.32	8	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:192:LEU:O	0.43	2.13	4	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:248:PRO:HG2	0.43	2.48	7	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:CE2	0.43	3.06	7	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD22	0.43	2.34	9	1
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD13	0.43	2.44	1	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:172:GLU:O	1:A:172:GLU:HG3	0.43	2.14	8	1
1:A:11:ILE:N	1:A:40:PRO:HD3	0.43	2.28	8	1
1:A:314:ASP:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.43	1.88	7	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD1	0.43	2.49	1	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CB	0.43	2.67	2	3
1:A:170:LYS:HB3	1:A:177:ASP:OD2	0.43	2.13	6	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:262:LEU:O	0.43	2.67	9	2
1:A:149:PHE:CG	1:A:156:PHE:CE2	0.43	3.07	4	1
1:A:257:PRO:HB2	1:A:323:ASN:OD1	0.43	2.13	3	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:148:MET:CB	1:A:216:ALA:HB3	0.43	2.43	5	1
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:CD	0.43	2.44	4	3
1:A:115:LEU:HD22	1:A:247:LEU:HA	0.43	1.91	8	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:36:THR:HB	0.43	1.91	8	1
1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:HD12	0.43	2.29	4	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HA	0.43	2.44	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:278:GLU:OE1	1:A:278:GLU:HA	0.43	2.14	9	1
1:A:90:TYR:HD2	1:A:93:THR:N	0.42	2.12	3	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:103:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.42	1.91	1	1
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:N	0.42	2.29	2	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:HH2	0.42	1.74	2	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.90	6	1
1:A:365:GLN:O	1:A:368:ILE:HG13	0.42	2.14	5	1
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:CA	0.42	3.02	9	1
1:A:67:PHE:CB	1:A:263:SER:HB3	0.42	2.44	3	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:HG22	0.42	1.88	2	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:308:GLU:CA	0.42	2.44	2	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:CD	0.42	2.39	2	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:OD1	0.42	2.14	6	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:NE1	0.42	2.19	6	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:223:ALA:HB2	0.42	2.44	5	2
1:A:114:SER:OG	1:A:319:ALA:HB1	0.42	2.14	7	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:C	0.42	2.34	7	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:CG2	0.42	2.43	7	1
1:A:62:TRP:NE1	1:A:67:PHE:HB2	0.42	2.28	3	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HG2	0.42	2.49	1	1
1:A:45:GLU:O	1:A:48:PRO:HG2	0.42	2.13	4	2
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.42	2.87	5	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:HE1	0.42	1.91	7	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:133:PRO:HG3	0.42	2.49	9	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:HD22	0.42	1.74	9	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:206:ALA:HB1	0.42	1.92	2	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:145:SER:HA	0.42	1.90	6	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:HB2	0.42	2.14	6	1
1:A:192:LEU:HG	1:A:361:LEU:HD23	0.42	1.91	4	1
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:HH11	0.42	1.74	7	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:34:LYS:HG2	0.42	1.90	3	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:304:LEU:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:CB	0.42	3.02	8	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:CB	0.42	2.43	10	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:HG23	0.42	2.50	8	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:HD1	0.42	2.30	8	1
1:A:126:PRO:HG2	1:A:131:GLU:HB3	0.42	1.90	4	1
1:A:302:VAL:O	1:A:303:ALA:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:285:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CG1	0.42	2.45	3	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:75:LEU:O	1:A:75:LEU:HD12	0.42	2.14	1	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG13	0.42	2.43	2	1
1:A:256:LYS:HZ2	1:A:328:GLU:HG3	0.42	1.73	8	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.42	2.15	8	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:N	0.42	2.30	4	1
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLU:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:229:PRO:CB	1:A:316:ARG:HB3	0.42	2.44	6	1
1:A:47:PHE:HA	1:A:50:VAL:HG12	0.42	1.92	6	1
1:A:124:ASN:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.42	1.91	5	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:183:VAL:HG23	0.42	1.91	10	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:40:PRO:HD3	0.42	2.47	10	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:CG1	0.42	2.42	7	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB2	0.42	2.15	9	1
1:A:62:TRP:HE1	1:A:66:ARG:C	0.42	2.19	3	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:HG23	0.42	1.92	3	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:360:ALA:HB1	0.42	1.91	2	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:315:PRO:CD	0.42	2.44	5	1
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG2	0.42	2.45	8	2
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:CG	0.42	2.39	9	1
1:A:183:VAL:HB	1:A:365:GLN:CD	0.42	2.35	3	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CG2	0.42	2.68	2	1
1:A:158:TRP:CA	1:A:161:ILE:HG12	0.42	2.44	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD23	0.42	1.88	6	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:HG	0.42	2.15	4	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:CB	0.42	2.44	4	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HE2	0.42	1.91	7	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG12	0.41	2.14	1	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.88	2	1
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:H	0.41	1.75	2	2
1:A:171:TYR:N	1:A:171:TYR:CD1	0.41	2.88	8	1
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:CD	0.41	2.83	10	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.41	2.50	4	1
1:A:296:ASP:C	1:A:297:LYS:HG3	0.41	2.35	9	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:97:VAL:HG13	0.41	2.50	9	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:258:PHE:O	1:A:323:ASN:HB3	0.41	2.14	3	1
1:A:127:LYS:CE	1:A:128:THR:HB	0.41	2.45	1	1
1:A:274:GLU:O	1:A:277:LYS:HG3	0.41	2.14	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD23	0.41	2.45	2	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:HD2	0.41	2.28	5	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:284:LEU:HD22	0.41	2.35	5	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:228:GLY:HA3	0.41	2.45	4	1
1:A:169:PHE:HE1	1:A:339:PHE:HE2	0.41	1.58	4	1
1:A:330:MET:CG	1:A:331:PRO:HD2	0.41	2.45	4	1
1:A:320:THR:HA	1:A:323:ASN:HD21	0.41	1.75	7	1
1:A:336:MET:O	1:A:339:PHE:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:124:ASN:N	1:A:124:ASN:HD22	0.41	2.13	1	1
1:A:69:GLY:O	1:A:72:GLN:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:CG2	0.41	3.04	7	1
1:A:163:ALA:HB1	1:A:253:GLN:O	0.41	2.16	7	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.41	2.15	9	1
1:A:181:VAL:HG12	1:A:183:VAL:HG23	0.41	1.91	2	1
1:A:318:ALA:O	1:A:321:MET:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:HD13	0.41	1.91	6	1
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:H	0.41	1.76	5	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:299:LEU:HD11	0.41	1.91	8	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:CG	0.41	3.03	10	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:94:TRP:HA	0.41	2.50	4	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:HG22	0.41	1.92	7	1
1:A:361:LEU:O	1:A:361:LEU:HD13	0.41	2.16	1	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.41	2.89	2	2
1:A:333:ILE:HG23	1:A:333:ILE:O	0.41	2.15	10	1
1:A:121:LEU:CG	1:A:121:LEU:O	0.41	2.68	4	1
1:A:110:VAL:H	1:A:301:ALA:HA	0.41	1.75	3	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HA	0.41	1.91	2	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CD1	0.41	2.45	6	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB3	0.41	2.33	6	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:317:ILE:HG22	0.41	1.92	5	1
1:A:99:TYR:O	1:A:100:ASN:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:149:PHE:N	0.41	2.88	10	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	4	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD2	0.41	3.00	9	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:H	0.41	1.75	1	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD1	0.41	1.76	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:VAL:HG22	1:A:260:GLY:N	0.41	2.29	2	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:122:LEU:HD11	0.41	2.51	6	1
1:A:63:ALA:CA	1:A:262:LEU:HA	0.41	2.22	8	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:HB2	0.41	2.51	8	1
1:A:108:ILE:N	1:A:108:ILE:CD1	0.41	2.83	4	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:314:ASP:HB2	0.41	1.90	1	1
1:A:341:TYR:HA	1:A:344:ARG:HH11	0.41	1.75	6	1
1:A:254:PRO:CG	1:A:326:LYS:HD3	0.41	2.46	8	1
1:A:151:LEU:N	1:A:151:LEU:CD1	0.41	2.80	1	1
1:A:183:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD11	0.41	1.93	1	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:H	0.41	2.19	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:10:TRP:N	0.41	2.30	2	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:N	0.41	2.31	2	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.41	2.50	6	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD21	0.41	1.93	6	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:248:PRO:HD3	0.41	2.45	5	1
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:CA	0.41	2.22	8	1
1:A:89:LEU:CG	1:A:94:TRP:HE1	0.41	2.28	8	1
1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:PRO:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:161:ILE:CG1	1:A:161:ILE:O	0.41	2.67	4	1
1:A:277:LYS:HG3	1:A:278:GLU:N	0.41	2.31	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:217:PHE:CE1	0.41	3.09	4	1
1:A:258:PHE:CB	1:A:330:MET:HG2	0.41	2.46	9	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:CH2	0.41	2.51	2	1
1:A:321:MET:HG3	1:A:325:GLN:HG2	0.41	1.93	10	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CE1	0.41	2.51	4	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:139:LEU:HD11	0.41	1.93	7	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	7	1
1:A:66:ARG:NH1	1:A:66:ARG:HG2	0.40	2.31	2	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:150:ASN:N	0.40	2.88	4	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:179:LYS:HG2	0.40	2.15	4	1
1:A:113:LEU:CG	1:A:228:GLY:HA3	0.40	2.46	4	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:CG	0.40	3.04	4	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HB2	0.40	1.91	7	1
1:A:6:LYS:HA	1:A:33:ILE:CG2	0.40	2.46	8	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG22	0.40	1.93	10	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:N	0.40	2.54	10	1
1:A:146:ALA:C	1:A:222:THR:HB	0.40	2.36	7	1
1:A:222:THR:C	1:A:224:MET:H	0.40	2.19	7	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:HG2	0.40	1.93	2	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:CG2	0.40	2.25	6	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:CE2	0.40	2.51	5	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:CA	0.40	2.69	8	1
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:O	0.40	2.69	8	1
1:A:35:VAL:HG22	1:A:279:PHE:HE1	0.40	1.76	8	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:328:GLU:HG3	0.40	1.73	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	8	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.40	2.84	4	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:339:PHE:HE2	0.40	2.34	4	1
1:A:5:GLY:O	1:A:33:ILE:HG23	0.40	2.17	9	1
1:A:333:ILE:CG2	1:A:334:PRO:HD2	0.40	2.46	1	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:CG	0.40	2.60	2	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:CB	0.40	2.70	2	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:O	0.40	2.17	10	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HG13	0.40	2.37	4	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HD12	0.40	2.16	7	1
1:A:156:PHE:CA	1:A:159:PRO:HG2	0.40	2.45	3	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:HG23	0.40	2.49	5	1
1:A:368:ILE:HG13	1:A:369:THR:N	0.40	2.31	5	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:140:LYS:O	0.40	2.16	8	1
1:A:40:PRO:CA	1:A:43:LEU:HG	0.40	2.45	8	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:57:PRO:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:263:SER:O	0.40	2.74	10	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:CD1	0.40	2.47	7	1
1:A:158:TRP:CB	1:A:159:PRO:HD3	0.40	2.45	9	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	357/370 (96%)	280±3 (79±1%)	55±4 (15±1%)	22±3 (6±1%)	3	21
All	All	3570/3700 (96%)	2804 (79%)	547 (15%)	219 (6%)	3	21



All 66 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	143	GLY	10
1	A	31	THR	10
1	A	257	PRO	10
1	A	16	GLY	10
1	A	311	LEU	10
1	A	97	VAL	9
1	A	248	PRO	8
1	A	108	ILE	8
1	A	32	GLY	7
1	A	150	ASN	7
1	A	178	ILE	7
1	A	174	GLY	7
1	A	120	ASP	5
1	A	285	LEU	5
1	A	88	LYS	5
1	A	55	ASP	5
1	A	126	PRO	5
1	A	315	PRO	4
1	A	53	THR	4
1	A	74	GLY	4
1	A	163	ALA	3
1	A	41	ASP	3
1	A	302	VAL	3
1	A	40	PRO	3
1	A	54	GLY	3
1	A	5	GLY	3
1	A	119	LYS	3
1	A	75	LEU	3
1	A	101	GLY	3
1	A	304	LEU	3
1	A	154	PRO	3
1	A	63	ALA	2
1	A	220	GLY	2
1	A	303	ALA	2
1	A	82	ASP	2
1	A	331	PRO	2
1	A	241	ASN	2
1	A	205	ASN	2
1	A	165	GLY	2
1	A	56	GLY	2
1	A	15	LYS	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	230	TRP	2
1	A	330	MET	1
1	A	254	PRO	1
1	A	297	LYS	1
1	A	104	ILE	1
1	A	166	GLY	1
1	A	272	ASN	1
1	A	332	ASN	1
1	A	301	ALA	1
1	A	270	SER	1
1	A	271	PRO	1
1	A	313	LYS	1
1	A	87	ASP	1
1	A	223	ALA	1
1	A	123	PRO	1
1	A	221	GLU	1
1	A	326	LYS	1
1	A	100	ASN	1
1	A	72	GLN	1
1	A	327	GLY	1
1	A	59	ILE	1
1	A	52	ALA	1
1	A	268	ALA	1
1	A	121	LEU	1
1	A	57	PRO	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	285/297 (96%)	186±6 (65±2%)	99±6 (35±2%)	1	10
All	All	2850/2970 (96%)	1861 (65%)	989 (35%)	1	10

All 227 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	195	LEU	10
1	A	299	LEU	10
1	A	103	LEU	9
1	A	280	LEU	9
1	A	370	LYS	9
1	A	285	LEU	9
1	A	148	MET	9
1	A	160	LEU	9
1	A	367	ARG	9
1	A	89	LEU	9
1	A	202	LYS	8
1	A	336	MET	8
1	A	102	LYS	8
1	A	290	LEU	8
1	A	129	TRP	8
1	A	192	LEU	8
1	A	330	MET	8
1	A	98	ARG	8
1	A	273	LYS	8
1	A	46	LYS	7
1	A	30	ASP	7
1	A	219	LYS	7
1	A	42	LYS	7
1	A	203	HIS	7
1	A	251	LYS	7
1	A	15	LYS	7
1	A	256	LYS	7
1	A	277	LYS	7
1	A	88	LYS	7
1	A	55	ASP	7
1	A	322	GLU	7
1	A	122	LEU	7
1	A	75	LEU	7
1	A	140	LYS	7
1	A	38	GLU	7
1	A	262	LEU	7
1	A	339	PHE	7
1	A	153	GLU	7
1	A	344	ARG	7
1	A	29	LYS	7
1	A	180	ASP	6
1	A	64	HIS	6
1	A	78	GLU	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	28	GLU	6
1	A	194	PHE	6
1	A	25	LYS	6
1	A	295	LYS	6
1	A	14	ASP	6
1	A	70	TYR	6
1	A	313	LYS	6
1	A	92	PHE	6
1	A	151	LEU	6
1	A	147	LEU	6
1	A	200	LYS	6
1	A	6	LYS	6
1	A	309	GLU	6
1	A	31	THR	6
1	A	179	LYS	6
1	A	170	LYS	6
1	A	44	GLU	6
1	A	20	LEU	6
1	A	281	GLU	6
1	A	177	ASP	6
1	A	316	ARG	6
1	A	142	LYS	6
1	A	296	ASP	6
1	A	224	MET	6
1	A	198	LEU	6
1	A	340	TRP	6
1	A	17	TYR	5
1	A	120	ASP	5
1	A	363	ASP	5
1	A	189	LYS	5
1	A	204	MET	5
1	A	253	GLN	5
1	A	274	GLU	5
1	A	119	LYS	5
1	A	185	ASN	5
1	A	306	SER	5
1	A	95	ASP	5
1	A	121	LEU	5
1	A	305	LYS	5
1	A	145	SER	5
1	A	352	SER	5
1	A	34	LYS	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	47	PHE	5
1	A	66	ARG	5
1	A	137	LYS	5
1	A	284	LEU	5
1	A	62	TRP	5
1	A	314	ASP	5
1	A	87	ASP	5
1	A	335	GLN	5
1	A	209	ASP	5
1	A	144	LYS	5
1	A	113	LEU	5
1	A	297	LYS	5
1	A	201	ASN	5
1	A	361	LEU	5
1	A	362	LYS	5
1	A	135	LEU	5
1	A	207	ASP	5
1	A	164	ASP	5
1	A	354	ARG	5
1	A	326	LYS	5
1	A	83	LYS	5
1	A	218	ASN	5
1	A	130	GLU	4
1	A	49	GLN	4
1	A	321	MET	4
1	A	158	TRP	4
1	A	230	TRP	4
1	A	365	GLN	4
1	A	355	GLN	4
1	A	39	HIS	4
1	A	26	LYS	4
1	A	27	PHE	4
1	A	270	SER	4
1	A	172	GLU	4
1	A	150	ASN	4
1	A	127	LYS	4
1	A	43	LEU	4
1	A	304	LEU	4
1	A	275	LEU	4
1	A	104	ILE	4
1	A	124	ASN	4
1	A	307	TYR	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	291	GLU	4
1	A	106	TYR	4
1	A	311	LEU	4
1	A	45	GLU	4
1	A	152	GLN	4
1	A	138	GLU	4
1	A	349	ASN	4
1	A	341	TYR	4
1	A	10	TRP	4
1	A	139	LEU	4
1	A	328	GLU	4
1	A	114	SER	3
1	A	287	ASP	3
1	A	272	ASN	3
1	A	156	PHE	3
1	A	167	TYR	3
1	A	263	SER	3
1	A	173	ASN	3
1	A	82	ASP	3
1	A	86	GLN	3
1	A	205	ASN	3
1	A	131	GLU	3
1	A	128	THR	3
1	A	214	GLU	3
1	A	85	PHE	3
1	A	72	GLN	3
1	A	175	LYS	3
1	A	76	LEU	3
1	A	184	ASP	3
1	A	332	ASN	3
1	A	90	TYR	3
1	A	288	GLU	3
1	A	117	TYR	3
1	A	67	PHE	3
1	A	73	SER	3
1	A	279	PHE	3
1	A	359	GLU	3
1	A	308	GLU	3
1	A	210	TYR	3
1	A	18	ASN	3
1	A	108	ILE	3
1	A	358	ASP	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	53	THR	3
1	A	310	GLU	3
1	A	283	TYR	3
1	A	247	LEU	3
1	A	197	ASP	3
1	A	4	GLU	3
1	A	250	PHE	2
1	A	323	ASN	2
1	A	7	LEU	2
1	A	266	ILE	2
1	A	286	THR	2
1	A	178	ILE	2
1	A	325	GLN	2
1	A	333	ILE	2
1	A	337	SER	2
1	A	155	TYR	2
1	A	80	THR	2
1	A	225	THR	2
1	A	227	ASN	2
1	A	282	ASN	2
1	A	93	THR	2
1	A	157	THR	2
1	A	111	GLU	2
1	A	320	THR	2
1	A	245	THR	2
1	A	258	PHE	2
1	A	278	GLU	2
1	A	169	PHE	2
1	A	193	THR	2
1	A	41	ASP	2
1	A	242	TYR	2
1	A	241	ASN	2
1	A	36	THR	2
1	A	79	ILE	1
1	A	255	SER	1
1	A	368	ILE	1
1	A	9	ILE	1
1	A	11	ILE	1
1	A	149	PHE	1
1	A	261	VAL	1
1	A	329	ILE	1
1	A	317	ILE	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	12	ASN	1
1	A	136	ASP	1
1	A	183	VAL	1
1	A	33	ILE	1
1	A	118	ASN	1
1	A	348	ILE	1
1	A	116	ILE	1
1	A	221	GLU	1
1	A	226	ILE	1
1	A	294	ASN	1
1	A	58	ASP	1
1	A	366	THR	1
1	A	100	ASN	1
1	A	99	TYR	1
1	A	267	ASN	1
1	A	369	THR	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

### 6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

### 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

### 6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.



## 6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided