



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 11:09 pm GMT

PDB ID : 2KLF  
Title : PERE NMR structure of maltodextrin-binding protein  
Authors : Madl, T.; Bermel, W.; Zangger, K.  
Deposited on : 2009-07-02

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

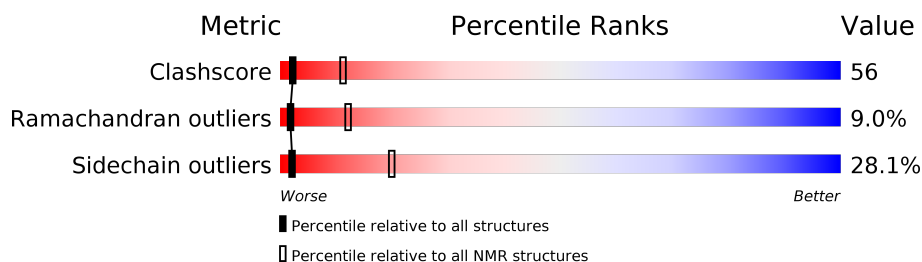
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

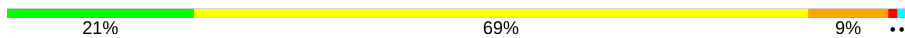
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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 1 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:3-A:370 (368)	1.08	1

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	1, 3, 5, 7
2	4, 8, 9
3	2, 6, 10

### 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 Maltose-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:

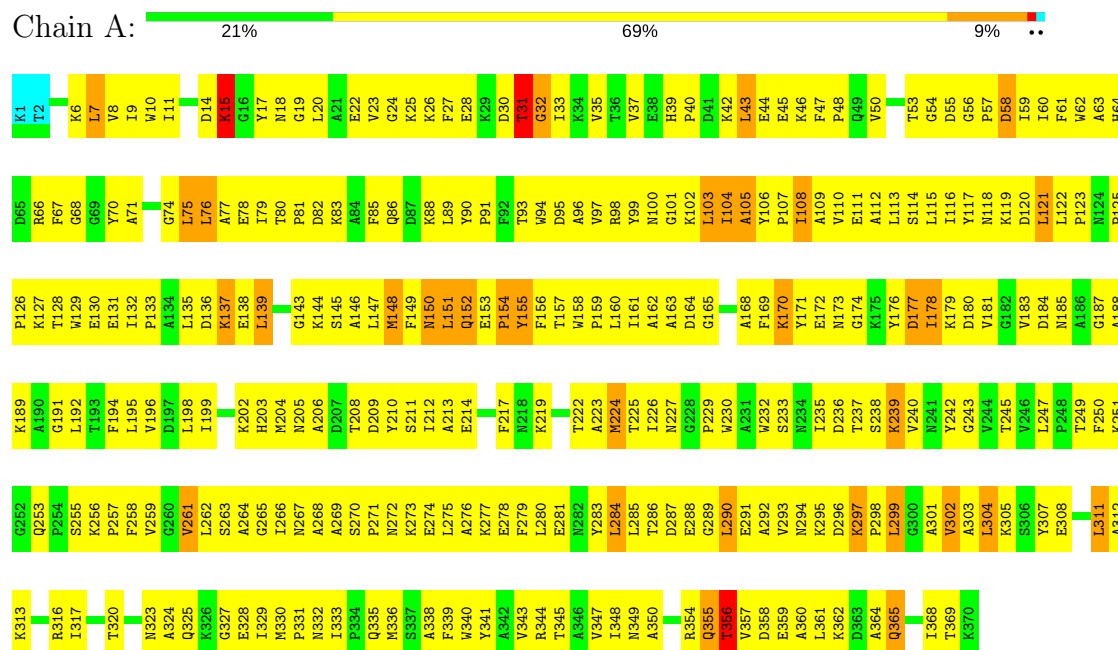
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	ENGINEERED	UNP P0AEX9

## 4 Residue-property plots [i](#)

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

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

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

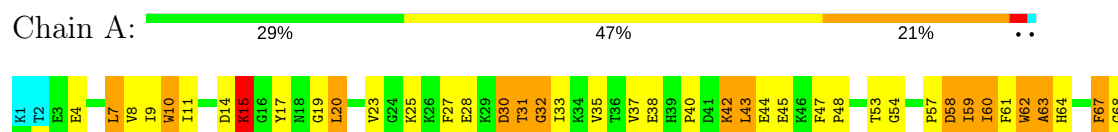


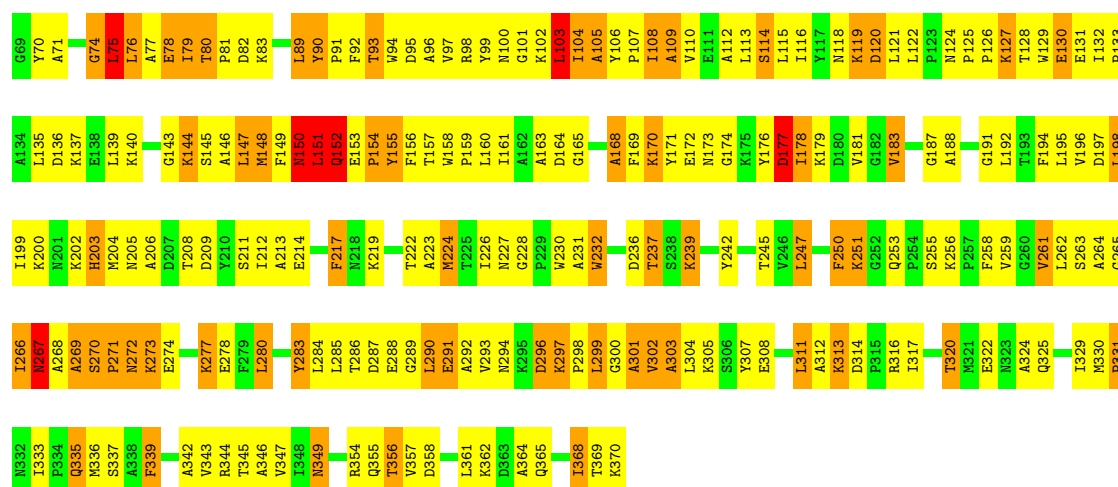
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

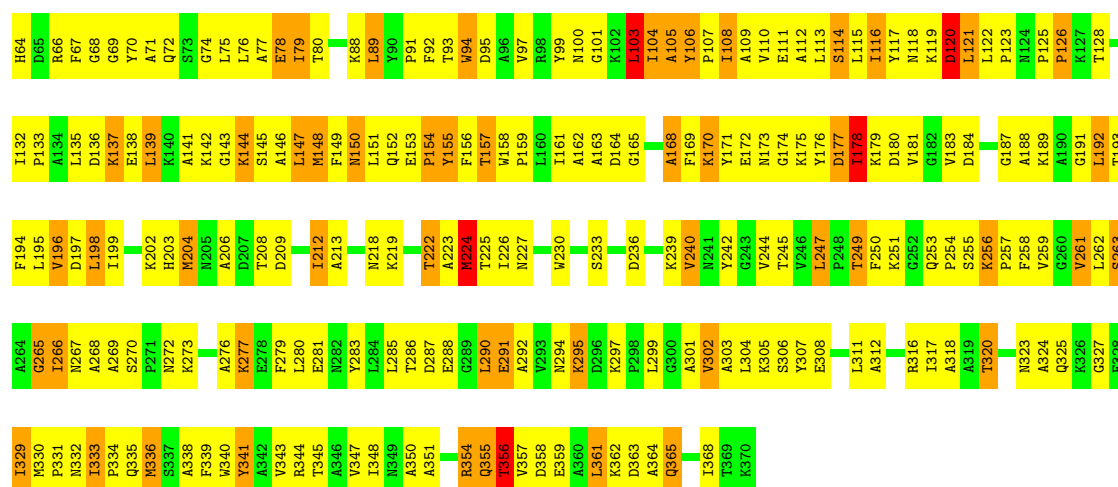
#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein



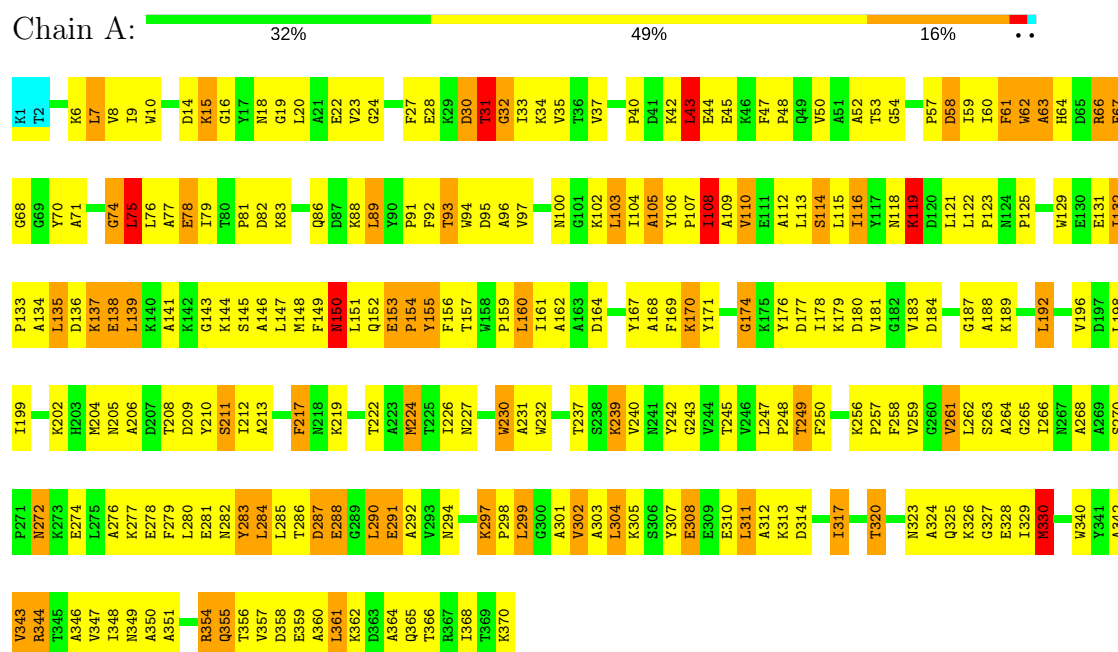






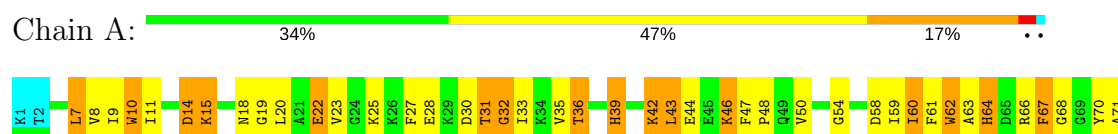
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

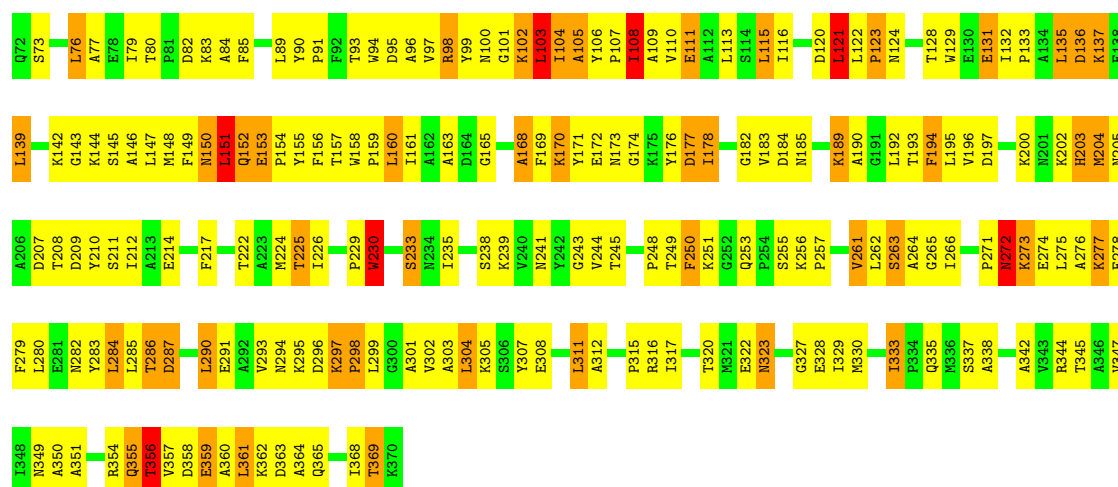


#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein



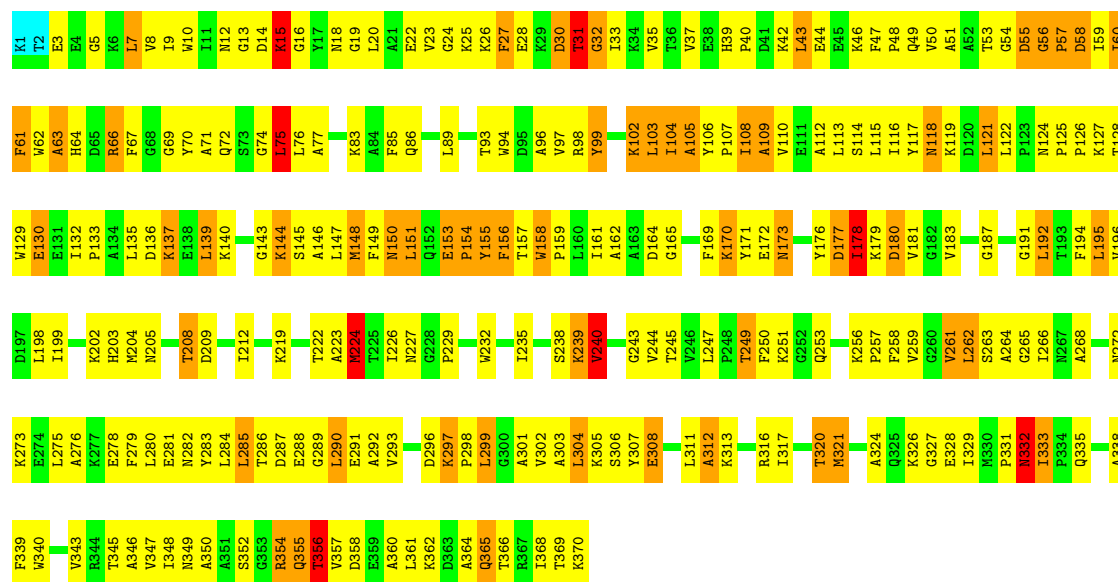




#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 31% 51% 16%

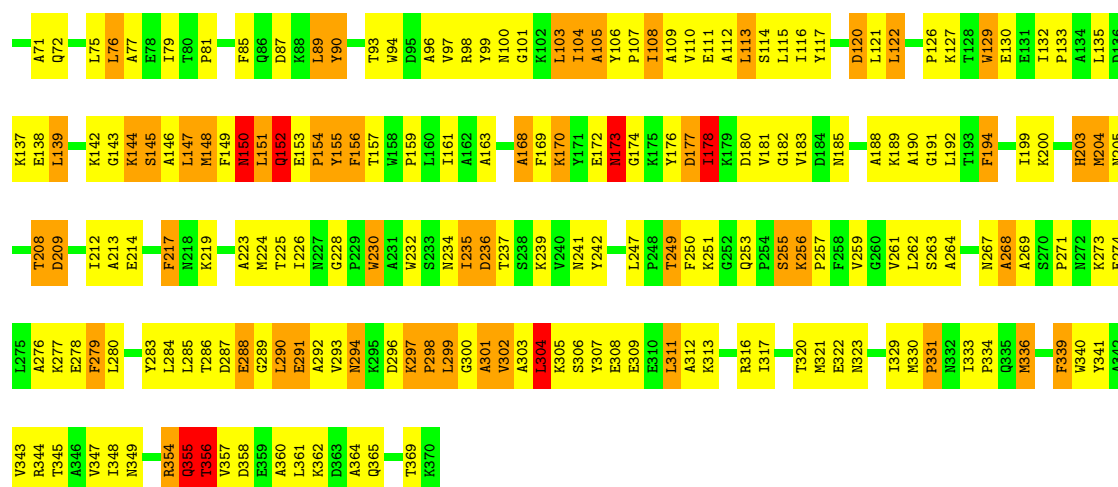


#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 34% 47% 16%

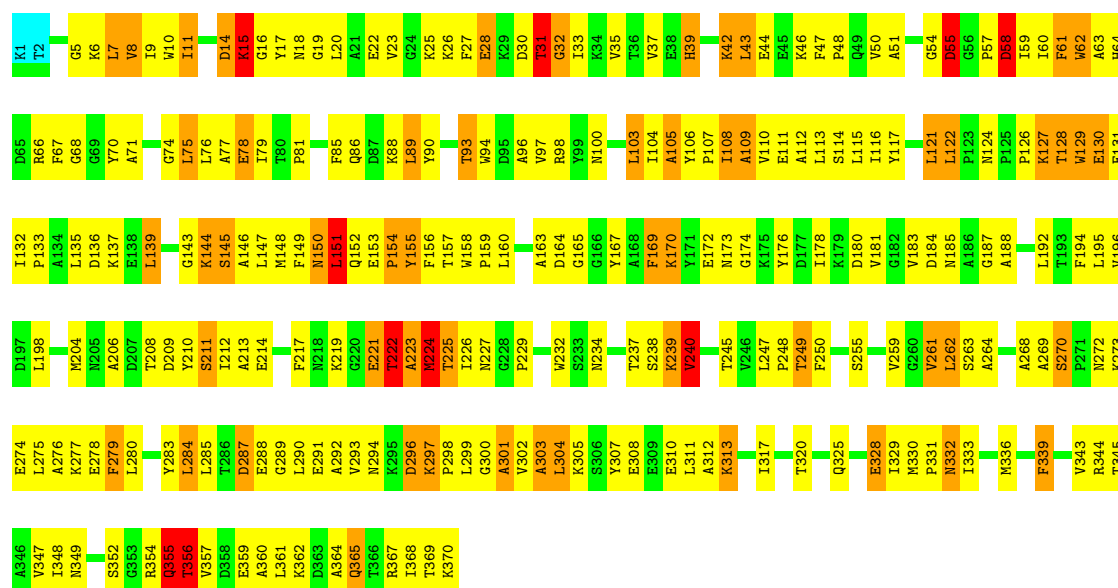




#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 33% 49% 15%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing, Paramagnetic environment relaxation enhancement refinement*.

Of the 100 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	
CNS	refinement	

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

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 5$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.33±0.01	0±0/2930 (0.0±0.0%)	0.52±0.02	1±2/3976 (0.0±0.0%)
All	All	0.33	0/29300 (0.0%)	0.52	11/39760 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.7±0.5
All	All	0	7

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	266	ILE	CA-C-N	7.46	133.60	117.20	5	1
1	A	265	GLY	C-N-CA	7.04	139.31	121.70	5	1
1	A	266	ILE	N-CA-C	-6.94	92.25	111.00	5	1
1	A	356	THR	N-CA-C	-6.10	94.54	111.00	10	1
1	A	266	ILE	O-C-N	-5.95	113.18	122.70	5	1
1	A	222	THR	CA-C-N	-5.81	104.42	117.20	10	1
1	A	355	GLN	N-CA-C	5.70	126.39	111.00	9	4
1	A	221	GLU	C-N-CA	5.54	135.56	121.70	10	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	354	ARG	Mainchain	7

## 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	2861	2836	2833	319±26
All	All	28610	28360	28330	3189

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 56.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:CD	1.23	1.86	7	10
1:A:170:LYS:O	1:A:176:TYR:HA	1.20	1.36	8	10
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:CG	1.19	1.89	1	10
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:CD	1.08	2.01	7	10
1:A:301:ALA:HB2	1:A:311:LEU:HD13	1.07	1.25	2	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:37:VAL:HG11	1.06	1.27	2	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HB1	1.06	1.17	3	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:268:ALA:HB3	1.05	1.24	6	3
1:A:346:ALA:HB1	1:A:357:VAL:HG23	1.05	1.19	1	1
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:HB3	1.05	1.52	10	4
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HD23	1.05	1.15	2	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:HG11	1.04	1.28	6	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:HD12	1.04	1.14	4	2
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HD13	1.03	1.31	4	2
1:A:149:PHE:O	1:A:150:ASN:O	1.03	1.76	1	9
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	1.02	1.28	4	9
1:A:110:VAL:HG13	1:A:302:VAL:HG11	1.02	1.04	2	1
1:A:170:LYS:O	1:A:176:TYR:CA	1.02	2.07	8	5
1:A:110:VAL:HG22	1:A:302:VAL:HG21	1.02	1.31	4	1
1:A:70:TYR:O	1:A:75:LEU:N	1.00	1.94	5	1
1:A:154:PRO:O	1:A:156:PHE:N	0.99	1.96	5	9
1:A:75:LEU:C	1:A:268:ALA:HB2	0.99	1.77	1	2
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HD3	0.98	1.59	6	10
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CG	0.97	1.94	6	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:HG11	0.96	1.36	8	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:HG22	0.96	1.34	7	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:CD1	0.96	1.90	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ALA:N	1:A:267:ASN:O	0.96	1.98	1	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD11	0.95	1.37	4	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG23	0.95	1.35	4	1
1:A:48:PRO:HA	1:A:75:LEU:HD13	0.95	1.38	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:266:ILE:HD11	0.95	1.60	5	1
1:A:172:GLU:O	1:A:174:GLY:N	0.93	2.01	10	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.92	1.94	6	9
1:A:75:LEU:HD12	1:A:268:ALA:HB3	0.92	1.42	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:HG23	0.92	1.39	6	2
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:HB2	0.92	2.00	10	2
1:A:163:ALA:HB2	1:A:256:LYS:HB2	0.92	1.41	2	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:206:ALA:HB1	0.91	1.41	3	3
1:A:122:LEU:HD12	1:A:223:ALA:HB2	0.91	1.41	5	1
1:A:116:ILE:HG23	1:A:225:THR:HG23	0.89	1.44	7	1
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:HG22	0.89	1.66	5	5
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HD13	0.89	1.45	9	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HD22	0.89	2.03	5	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:N	0.88	1.83	6	7
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG21	0.88	1.68	2	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:OG1	0.88	1.90	1	6
1:A:10:TRP:CE2	1:A:43:LEU:HD13	0.88	2.04	5	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:104:ILE:HG21	0.88	1.99	5	2
1:A:110:VAL:CG1	1:A:302:VAL:HG11	0.88	1.96	2	1
1:A:343:VAL:HG13	1:A:347:VAL:HG21	0.87	1.46	3	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:O	0.87	1.93	7	1
1:A:50:VAL:O	1:A:54:GLY:N	0.87	2.07	9	4
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HD3	0.87	1.68	4	8
1:A:171:TYR:HA	1:A:175:LYS:O	0.86	1.70	2	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:62:TRP:CZ3	0.86	2.05	10	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:244:VAL:HG22	0.86	1.48	7	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:O	0.85	1.71	10	7
1:A:151:LEU:HD13	1:A:208:THR:OG1	0.85	1.70	9	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:275:LEU:HD21	0.85	1.45	10	2
1:A:181:VAL:HG21	1:A:368:ILE:CD1	0.85	2.01	10	2
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CZ	0.85	2.06	6	2
1:A:303:ALA:HB3	1:A:307:TYR:CD2	0.85	2.06	1	2
1:A:20:LEU:O	1:A:35:VAL:HG21	0.85	1.71	2	2
1:A:178:ILE:HD11	1:A:369:THR:HB	0.85	1.48	8	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:HD12	0.85	1.48	8	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:37:VAL:HG12	0.84	2.02	6	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:76:LEU:HD11	0.84	2.08	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:CG	0.84	2.03	3	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:VAL:HG13	0.84	1.46	1	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:9:ILE:HD11	0.83	1.48	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD1	0.83	2.02	4	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG11	0.83	2.03	8	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:264:ALA:O	0.83	1.73	9	2
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:CG	0.83	2.04	4	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.82	1.50	6	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:347:VAL:HG21	0.82	1.50	6	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:HA	0.82	1.49	6	3
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG3	0.82	1.70	3	10
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.82	1.74	2	4
1:A:343:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HD21	0.82	1.49	9	1
1:A:119:LYS:O	1:A:122:LEU:HD23	0.82	1.75	6	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:76:LEU:HD21	0.82	2.08	1	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:244:VAL:HG22	0.82	2.04	7	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:HB2	0.81	1.52	1	3
1:A:290:LEU:HD22	1:A:307:TYR:CD2	0.81	2.11	4	2
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.81	1.75	1	5
1:A:43:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HD11	0.81	1.52	10	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:CD1	0.81	2.02	4	3
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HD13	0.81	1.76	5	1
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:CB	0.81	1.88	7	5
1:A:290:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HD23	0.81	1.51	10	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:35:VAL:HG12	0.81	2.06	9	2
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:N	0.81	1.90	6	4
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:CD1	0.81	2.06	1	2
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HD12	0.80	2.04	4	3
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HD2	0.80	1.74	7	10
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.80	1.77	8	7
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:CG	0.80	2.29	5	10
1:A:346:ALA:HB1	1:A:357:VAL:CG2	0.80	2.05	1	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HG23	0.80	1.77	7	5
1:A:7:LEU:CB	1:A:35:VAL:HG22	0.80	2.07	6	4
1:A:307:TYR:CE1	1:A:311:LEU:HD12	0.80	2.11	2	1
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:HB2	0.79	1.77	7	10
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:HG3	0.79	1.51	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD2	0.79	2.05	2	2
1:A:115:LEU:HD23	1:A:117:TYR:OH	0.79	1.78	4	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CG1	0.79	2.08	4	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:37:VAL:HG11	0.79	2.07	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.79	1.78	8	7
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG21	0.79	1.54	3	1
1:A:290:LEU:HD22	1:A:307:TYR:CG	0.78	2.12	4	2
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HD23	0.78	1.77	5	2
1:A:148:MET:HB3	1:A:222:THR:HG21	0.78	1.54	2	2
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG21	0.78	1.53	10	1
1:A:196:VAL:HG21	1:A:355:GLN:OE1	0.78	1.77	6	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:C	0.78	1.99	1	2
1:A:64:HIS:HB2	1:A:97:VAL:HG12	0.78	1.55	7	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:75:LEU:HD12	0.78	2.14	9	1
1:A:132:ILE:CD1	1:A:198:LEU:HD22	0.78	2.08	6	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:267:ASN:O	0.78	2.32	1	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:285:LEU:HD21	0.78	2.14	9	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:HD13	0.78	2.08	2	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:303:ALA:HB1	0.78	2.09	5	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:20:LEU:HD22	0.77	1.55	8	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:O	0.77	1.79	1	3
1:A:152:GLN:NE2	1:A:348:ILE:HD11	0.77	1.94	3	2
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.77	1.79	1	1
1:A:311:LEU:CD1	1:A:317:ILE:HG21	0.77	2.09	10	1
1:A:139:LEU:CB	1:A:144:LYS:O	0.77	2.33	5	1
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:HG13	0.77	1.78	7	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:O	0.77	1.80	5	1
1:A:346:ALA:CB	1:A:357:VAL:HG23	0.77	2.07	1	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD1	0.77	2.15	7	1
1:A:114:SER:O	1:A:226:ILE:HD12	0.77	1.80	1	1
1:A:193:THR:O	1:A:196:VAL:HG12	0.77	1.80	5	2
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG21	0.77	2.08	4	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:285:LEU:HD11	0.76	2.15	8	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:226:ILE:HG22	0.76	1.56	6	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CD2	0.76	2.16	1	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:HG22	0.76	1.57	4	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:CB	0.76	2.10	5	1
1:A:343:VAL:HG12	1:A:361:LEU:CD2	0.76	2.11	9	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CE1	0.76	2.16	10	2
1:A:97:VAL:HG23	1:A:261:VAL:HG11	0.76	1.58	1	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG23	0.76	1.81	3	2
1:A:355:GLN:HG2	1:A:357:VAL:HG23	0.76	1.58	3	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HD21	0.75	2.10	2	2
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:O	0.75	1.79	5	5
1:A:93:THR:HG21	1:A:302:VAL:HG21	0.75	1.56	1	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:C	0.75	2.23	10	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HD12	0.75	1.56	10	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:HB2	0.75	1.57	1	6
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB3	0.75	1.81	2	2
1:A:312:ALA:HA	1:A:317:ILE:HD11	0.75	1.56	9	2
1:A:259:VAL:HG11	1:A:324:ALA:HA	0.75	1.59	2	2
1:A:230:TRP:CZ3	1:A:231:ALA:HB2	0.75	2.16	1	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:139:LEU:HD11	0.75	1.56	10	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:HB1	0.75	1.57	5	2
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB2	0.75	1.82	7	3
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD11	0.75	1.59	4	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:161:ILE:CD1	0.75	2.11	9	1
1:A:39:HIS:HA	1:A:43:LEU:HD12	0.75	1.59	4	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:247:LEU:HD11	0.75	1.55	10	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CZ	0.75	2.17	8	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CE3	0.75	2.16	6	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:HD12	0.75	1.58	1	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:CG1	0.75	2.10	6	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD13	0.74	2.11	9	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	0.74	1.58	2	1
1:A:148:MET:O	1:A:225:THR:HG22	0.74	1.80	9	3
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:O	0.74	2.06	1	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:HG22	0.74	1.57	3	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HD23	0.74	1.57	5	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD12	0.74	2.02	7	7
1:A:110:VAL:HG12	1:A:301:ALA:HB3	0.74	1.58	6	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:HB2	0.74	1.81	10	4
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CB	0.74	2.11	6	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HD12	0.74	1.82	1	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD12	0.74	1.83	7	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD22	0.74	1.82	5	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.74	1.82	7	2
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:HB3	0.74	1.60	3	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:117:TYR:N	0.74	1.97	4	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:270:SER:O	0.74	1.83	6	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:266:ILE:HD13	0.74	1.59	5	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:361:LEU:HD13	0.74	1.83	7	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG12	0.74	1.58	9	2
1:A:223:ALA:O	1:A:224:MET:HB2	0.74	1.83	10	4
1:A:158:TRP:CE3	1:A:161:ILE:HD11	0.74	2.18	2	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HD12	0.74	1.82	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD23	0.73	2.06	2	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG22	0.73	2.12	1	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.73	2.14	10	1
1:A:184:ASP:HB2	1:A:361:LEU:HD23	0.73	1.61	4	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:O	0.73	1.83	5	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CG	0.73	2.12	9	4
1:A:178:ILE:HD13	1:A:179:LYS:N	0.73	1.98	8	1
1:A:338:ALA:HB3	1:A:368:ILE:CD1	0.73	2.13	8	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:CG2	0.73	2.13	4	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:CA	0.73	2.14	5	3
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HB	0.73	1.84	8	5
1:A:148:MET:HB2	1:A:222:THR:HG21	0.73	1.60	8	5
1:A:307:TYR:CZ	1:A:311:LEU:HD12	0.73	2.18	8	3
1:A:301:ALA:CB	1:A:311:LEU:HD13	0.73	2.10	2	2
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.73	1.60	5	1
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HG2	0.73	1.82	5	4
1:A:262:LEU:CD1	1:A:299:LEU:HD13	0.73	2.14	4	1
1:A:343:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD22	0.73	1.57	8	1
1:A:148:MET:N	1:A:222:THR:HG21	0.73	1.98	4	2
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:CD1	0.73	2.13	2	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB2	0.73	1.84	5	9
1:A:132:ILE:HD11	1:A:198:LEU:HD22	0.72	1.59	6	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:HG13	0.72	2.18	8	1
1:A:60:ILE:O	1:A:264:ALA:HA	0.72	1.85	1	2
1:A:122:LEU:HD12	1:A:223:ALA:CB	0.72	2.13	5	1
1:A:156:PHE:C	1:A:159:PRO:HD2	0.72	2.04	8	10
1:A:170:LYS:C	1:A:176:TYR:HA	0.72	2.03	6	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:HB3	0.72	1.59	1	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG22	0.72	1.61	3	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HA	0.72	1.60	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG13	0.72	1.61	10	2
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:HG3	0.72	1.62	3	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CZ2	0.72	2.19	9	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG2	0.72	1.85	1	9
1:A:312:ALA:HA	1:A:317:ILE:HD12	0.72	1.60	6	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG11	0.72	1.61	3	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD12	0.72	1.85	10	6
1:A:110:VAL:HG22	1:A:302:VAL:CG2	0.72	2.13	4	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:280:LEU:HD11	0.71	2.20	9	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:O	0.71	1.85	8	1
1:A:368:ILE:O	1:A:368:ILE:HD13	0.71	1.84	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ILE:O	1:A:302:VAL:HG13	0.71	1.84	7	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG12	0.71	2.14	5	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:33:ILE:HD12	0.71	1.61	2	1
1:A:75:LEU:O	1:A:75:LEU:HD12	0.71	1.85	3	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:CD	0.71	2.14	1	1
1:A:88:LYS:HG3	1:A:304:LEU:HD21	0.71	1.62	3	1
1:A:124:ASN:O	1:A:135:LEU:HD11	0.71	1.85	7	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG23	0.71	1.62	7	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:HD12	0.71	1.85	7	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:C	0.71	2.06	9	7
1:A:132:ILE:HG23	1:A:133:PRO:HD3	0.71	1.63	8	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:43:LEU:HD13	0.71	2.20	5	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HD11	0.71	2.15	9	2
1:A:170:LYS:O	1:A:175:LYS:O	0.71	2.08	2	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD2	0.71	2.21	1	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:CG1	0.71	2.15	3	1
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG13	0.71	1.61	8	3
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:CB	0.71	2.39	7	9
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HD12	0.71	1.84	4	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HB1	0.71	1.63	5	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG21	0.70	1.61	5	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:CG2	0.70	2.16	4	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.70	2.17	3	3
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:CD1	0.70	2.16	9	1
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:HB3	0.70	1.86	8	7
1:A:235:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CE1	0.70	2.21	4	1
1:A:106:TYR:CD2	1:A:264:ALA:HB3	0.70	2.22	3	1
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:HB2	0.70	1.86	10	5
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HB	0.70	1.63	8	1
1:A:181:VAL:HG21	1:A:368:ILE:HD11	0.70	1.63	10	2
1:A:290:LEU:CD2	1:A:302:VAL:HG11	0.70	2.17	5	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HG23	0.70	1.85	6	3
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:CG	0.70	2.21	5	3
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CB	0.70	2.17	7	7
1:A:71:ALA:HB2	1:A:104:ILE:HG21	0.70	1.63	5	3
1:A:115:LEU:HD22	1:A:117:TYR:CE1	0.70	2.20	10	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:104:ILE:HD11	0.70	2.16	7	1
1:A:154:PRO:HA	1:A:157:THR:OG1	0.70	1.87	7	1
1:A:338:ALA:HB3	1:A:368:ILE:HD11	0.69	1.62	8	1
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:HB3	0.69	1.87	7	5
1:A:297:LYS:H	1:A:298:PRO:HD2	0.69	1.47	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ILE:HD12	1:A:81:PRO:HD3	0.69	1.63	6	1
1:A:88:LYS:HB3	1:A:304:LEU:HD11	0.69	1.64	3	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:CG2	0.69	2.17	3	1
1:A:184:ASP:CG	1:A:361:LEU:HD13	0.69	2.08	7	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.69	2.17	7	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:HA	0.69	1.63	7	3
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CZ3	0.69	2.22	5	2
1:A:61:PHE:HB2	1:A:264:ALA:HB2	0.69	1.64	1	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:285:LEU:HD21	0.69	2.22	9	2
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:HG12	0.69	2.23	6	2
1:A:11:ILE:HD12	1:A:61:PHE:CD1	0.69	2.22	9	1
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:PRO:HG2	0.69	1.64	9	10
1:A:104:ILE:HG23	1:A:104:ILE:O	0.69	1.86	8	3
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:HG23	0.69	2.16	4	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:317:ILE:HG21	0.69	1.87	4	1
1:A:226:ILE:HD11	1:A:247:LEU:HD12	0.69	1.65	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HG22	0.69	1.64	1	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HA	0.69	1.64	10	1
1:A:110:VAL:HG12	1:A:301:ALA:CB	0.69	2.17	6	1
1:A:230:TRP:CE3	1:A:231:ALA:HB2	0.68	2.22	1	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG23	0.68	1.87	9	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG23	0.68	1.64	7	2
1:A:296:ASP:O	1:A:298:PRO:HD3	0.68	1.88	7	2
1:A:356:THR:OG1	1:A:360:ALA:HB2	0.68	1.88	10	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:235:ILE:HD11	0.68	2.18	8	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:268:ALA:HB3	0.68	2.14	8	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:347:VAL:CG2	0.68	2.18	6	1
1:A:40:PRO:HG3	1:A:43:LEU:HD13	0.68	1.63	2	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:HB	0.68	1.65	7	1
1:A:361:LEU:O	1:A:364:ALA:HB3	0.68	1.88	1	2
1:A:97:VAL:CG1	1:A:105:ALA:HB3	0.68	2.18	3	2
1:A:48:PRO:O	1:A:51:ALA:HB3	0.68	1.88	10	3
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD22	0.68	2.19	4	1
1:A:159:PRO:O	1:A:163:ALA:HB3	0.68	1.89	2	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:CB	0.68	2.17	1	1
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG12	0.68	1.66	5	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:261:VAL:HG11	0.68	2.19	5	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HA	0.68	1.66	9	4
1:A:60:ILE:HG22	1:A:62:TRP:CE3	0.68	2.24	9	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:285:LEU:HD11	0.68	2.22	8	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:94:TRP:CZ2	0.68	2.23	10	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:145:SER:HA	0.68	1.63	5	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HD12	0.68	1.89	5	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:369:THR:CB	0.68	2.19	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD21	0.67	2.18	9	2
1:A:217:PHE:CB	1:A:235:ILE:HD11	0.67	2.19	7	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD21	0.67	1.65	2	3
1:A:167:TYR:O	1:A:169:PHE:N	0.67	2.27	6	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:139:LEU:CD1	0.67	2.19	10	1
1:A:126:PRO:CD	1:A:135:LEU:HD13	0.67	2.19	5	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HG23	0.67	1.89	5	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	0.67	1.66	3	4
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HD12	0.67	1.88	6	2
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:HA	0.67	1.89	3	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:CD2	0.67	2.18	10	1
1:A:12:ASN:O	1:A:14:ASP:N	0.67	2.28	8	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HG21	0.67	1.89	8	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:97:VAL:HG12	0.67	2.19	7	3
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG13	0.67	2.19	1	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:HB2	0.67	1.66	3	2
1:A:76:LEU:HD13	1:A:266:ILE:O	0.67	1.89	7	1
1:A:121:LEU:C	1:A:122:LEU:HD22	0.67	2.10	5	1
1:A:355:GLN:HB3	1:A:360:ALA:HB2	0.67	1.66	2	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HG21	0.67	1.89	6	2
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.67	1.90	1	2
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:HD21	0.67	1.67	5	2
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HD12	0.67	1.90	9	1
1:A:61:PHE:CG	1:A:264:ALA:HB2	0.67	2.24	10	2
1:A:302:VAL:HG13	1:A:317:ILE:CG2	0.67	2.19	4	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CD2	0.67	2.25	6	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:HB2	0.67	1.66	10	4
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD22	0.67	1.90	10	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:CG2	0.67	2.43	10	5
1:A:116:ILE:HG23	1:A:243:GLY:O	0.67	1.90	8	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD13	0.67	2.19	6	1
1:A:311:LEU:O	1:A:311:LEU:HD23	0.66	1.90	4	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:35:VAL:HG21	0.66	2.19	1	1
1:A:104:ILE:CG1	1:A:104:ILE:O	0.66	2.42	7	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CD1	0.66	2.25	1	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HD13	0.66	1.67	7	6
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:HG23	0.66	2.19	4	2
1:A:147:LEU:O	1:A:147:LEU:HD12	0.66	1.90	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:HB3	0.66	2.20	6	4
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG22	0.66	1.90	7	2
1:A:113:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.66	2.21	6	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HB2	0.66	2.19	1	2
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CB	0.66	2.72	5	9
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:HG3	0.66	1.68	8	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HD2	0.66	1.87	7	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:283:TYR:CE2	0.66	2.24	9	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD2	0.66	2.25	9	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:CB	0.66	2.44	8	9
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:CG2	0.66	2.21	4	2
1:A:20:LEU:HD22	1:A:37:VAL:CG1	0.66	2.21	2	1
1:A:259:VAL:CB	1:A:329:ILE:HG22	0.66	2.21	4	1
1:A:297:LYS:H	1:A:298:PRO:CD	0.66	2.03	4	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:HD12	0.66	1.91	6	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:CG	0.66	2.20	5	1
1:A:317:ILE:HD12	1:A:318:ALA:N	0.66	2.05	5	1
1:A:108:ILE:N	1:A:262:LEU:O	0.65	2.29	7	10
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.65	1.91	10	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD11	0.65	2.26	1	1
1:A:227:ASN:CB	1:A:235:ILE:HD12	0.65	2.20	8	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB3	0.65	1.68	6	4
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG23	0.65	1.67	6	2
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG22	0.65	1.67	4	2
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD23	0.65	1.92	10	2
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HD12	0.65	2.26	7	2
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:HG12	0.65	1.67	3	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:HB3	0.65	2.21	9	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:264:ALA:HB3	0.65	2.26	1	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.65	2.45	7	9
1:A:155:TYR:C	1:A:159:PRO:CD	0.65	2.65	3	9
1:A:285:LEU:HD12	1:A:304:LEU:HD13	0.65	1.67	2	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:CG2	0.65	2.21	2	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:265:GLY:O	0.65	1.92	7	2
1:A:139:LEU:HB3	1:A:145:SER:HA	0.65	1.67	5	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HD13	0.65	1.69	9	1
1:A:281:GLU:HA	1:A:285:LEU:HD23	0.65	1.67	2	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:75:LEU:HD13	0.65	1.66	3	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.65	1.92	4	10
1:A:181:VAL:HG11	1:A:368:ILE:HD12	0.65	1.68	2	1
1:A:189:LYS:HE3	1:A:361:LEU:HD21	0.65	1.69	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:CB	0.65	2.22	5	2
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:HG13	0.65	1.91	8	2
1:A:79:ILE:HD11	1:A:103:LEU:CD2	0.65	2.22	6	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:60:ILE:HD13	0.65	2.26	6	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HB2	0.65	1.67	3	1
1:A:146:ALA:C	1:A:147:LEU:HD12	0.65	2.11	7	1
1:A:122:LEU:O	1:A:223:ALA:HB1	0.65	1.91	4	1
1:A:183:VAL:HG11	1:A:368:ILE:HD11	0.65	1.69	6	1
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:HG23	0.64	1.91	6	2
1:A:163:ALA:HB2	1:A:256:LYS:CB	0.64	2.19	2	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG12	0.64	1.90	3	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:257:PRO:HA	0.64	1.69	9	1
1:A:104:ILE:O	1:A:105:ALA:HB2	0.64	1.90	10	10
1:A:183:VAL:HG12	1:A:339:PHE:CE1	0.64	2.27	8	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:361:LEU:HD22	0.64	1.68	1	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:CD1	0.64	2.23	10	1
1:A:297:LYS:HE3	1:A:299:LEU:HD12	0.64	1.67	5	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG13	0.64	1.91	5	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:C	0.64	2.33	8	3
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD22	0.64	2.13	2	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HD13	0.64	1.70	2	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:CB	0.64	2.10	3	1
1:A:95:ASP:O	1:A:329:ILE:HD11	0.64	1.91	5	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.64	2.45	5	7
1:A:343:VAL:HA	1:A:361:LEU:HD21	0.64	1.69	8	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CB	0.64	2.23	5	4
1:A:192:LEU:HD13	1:A:361:LEU:HD11	0.64	1.67	10	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:122:LEU:HD21	0.64	2.27	9	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CD2	0.64	2.27	8	2
1:A:259:VAL:CG2	1:A:329:ILE:HG22	0.64	2.23	4	1
1:A:55:ASP:C	1:A:269:ALA:HB1	0.64	2.13	4	1
1:A:311:LEU:HD12	1:A:312:ALA:N	0.64	2.07	10	1
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:CD	0.64	2.22	3	1
1:A:343:VAL:CG2	1:A:347:VAL:HG21	0.64	2.23	4	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:NE1	0.64	2.07	1	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.64	1.92	3	1
1:A:126:PRO:HD2	1:A:146:ALA:HB1	0.64	1.70	5	1
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:HD12	0.63	1.93	8	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CE2	0.63	2.28	6	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:HD13	0.63	2.28	4	2
1:A:67:PHE:CD2	1:A:76:LEU:HD11	0.63	2.27	8	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD11	0.63	1.67	7	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:62:TRP:CZ3	0.63	2.28	6	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:HB3	0.63	2.29	9	2
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HG	0.63	1.93	4	2
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CE2	0.63	2.28	6	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:227:ASN:OD1	0.63	1.94	10	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HG22	0.63	1.69	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG23	0.63	1.93	7	2
1:A:303:ALA:HB3	1:A:307:TYR:CE2	0.63	2.28	1	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:104:ILE:HG23	0.63	2.29	3	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:59:ILE:HD11	0.63	1.71	5	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HG3	0.63	1.69	9	4
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG13	0.63	1.93	8	1
1:A:335:GLN:HB3	1:A:368:ILE:HG23	0.63	1.71	8	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:311:LEU:CD1	0.63	2.15	2	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:CD	0.63	2.13	7	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:317:ILE:HG21	0.63	1.69	4	1
1:A:307:TYR:CD2	1:A:311:LEU:HD23	0.63	2.29	10	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:267:ASN:HA	0.63	1.71	5	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.63	1.94	3	4
1:A:113:LEU:HD13	1:A:156:PHE:CD1	0.63	2.29	3	2
1:A:9:ILE:CG1	1:A:59:ILE:HD12	0.63	2.24	2	1
1:A:110:VAL:O	1:A:320:THR:HG21	0.63	1.93	7	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CA	0.62	2.23	10	5
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.62	1.94	8	8
1:A:148:MET:CB	1:A:222:THR:HG21	0.62	2.23	2	5
1:A:186:ALA:O	1:A:189:LYS:HG3	0.62	1.94	2	1
1:A:70:TYR:O	1:A:75:LEU:HG	0.62	1.93	3	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:CB	0.62	2.46	3	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:247:LEU:CD1	0.62	2.24	10	1
1:A:266:ILE:O	1:A:267:ASN:O	0.62	2.17	1	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:HB2	0.62	1.94	4	7
1:A:9:ILE:HB	1:A:37:VAL:HG12	0.62	1.70	3	5
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG13	0.62	1.71	4	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:265:GLY:O	0.62	1.93	1	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HB	0.62	2.25	9	4
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG23	0.62	1.94	2	2
1:A:199:ILE:HG23	1:A:205:ASN:O	0.62	1.93	2	2
1:A:259:VAL:HG13	1:A:328:GLU:O	0.62	1.94	10	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:268:ALA:HB3	0.62	2.23	5	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:CG2	0.62	2.21	7	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ILE:HG23	1:A:133:PRO:CD	0.62	2.25	8	1
1:A:75:LEU:HD23	1:A:268:ALA:CB	0.62	2.17	8	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:37:VAL:HG12	0.62	1.72	6	1
1:A:247:LEU:HD22	1:A:255:SER:OG	0.62	1.94	3	2
1:A:297:LYS:NZ	1:A:301:ALA:HB3	0.62	2.09	10	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:HG21	0.62	1.72	7	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:43:LEU:HD12	0.62	1.54	8	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:123:PRO:HD2	0.62	1.72	4	2
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:CB	0.62	2.24	4	1
1:A:75:LEU:O	1:A:268:ALA:HB2	0.62	1.93	1	1
1:A:76:LEU:C	1:A:104:ILE:HD11	0.62	2.15	4	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:116:ILE:N	0.61	2.10	8	2
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:CD	0.61	2.24	4	1
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG22	0.61	1.71	2	2
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CB	0.61	2.24	9	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.61	1.95	3	2
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD13	0.61	1.96	10	1
1:A:93:THR:CG2	1:A:302:VAL:HG22	0.61	2.24	8	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:CB	0.61	2.49	2	2
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG23	0.61	1.73	1	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:206:ALA:HB1	0.61	2.26	10	1
1:A:190:ALA:HB1	1:A:251:LYS:HE3	0.61	1.73	9	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:CB	0.61	2.47	6	9
1:A:57:PRO:HD2	1:A:269:ALA:HB3	0.61	1.72	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:248:PRO:HD3	0.61	1.71	10	1
1:A:304:LEU:HD23	1:A:307:TYR:HB2	0.61	1.73	5	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:104:ILE:O	0.61	2.48	1	2
1:A:151:LEU:HD22	1:A:206:ALA:CB	0.61	2.22	3	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:CD1	0.61	2.49	7	2
1:A:301:ALA:HB3	1:A:311:LEU:CD1	0.61	2.26	9	1
1:A:9:ILE:O	1:A:37:VAL:HA	0.61	1.96	3	4
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:HB2	0.61	1.96	5	3
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:CB	0.61	2.25	3	1
1:A:343:VAL:HG13	1:A:347:VAL:CG2	0.61	2.24	3	1
1:A:335:GLN:OE1	1:A:368:ILE:HG23	0.61	1.95	3	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD23	0.61	2.25	10	1
1:A:121:LEU:O	1:A:223:ALA:CB	0.61	2.49	9	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:HG13	0.61	1.96	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:324:ALA:HB1	0.61	1.72	6	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:226:ILE:CD1	0.61	2.26	10	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	0.61	1.71	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:CB	0.61	2.49	1	9
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD12	0.61	2.26	1	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HD12	0.61	1.73	1	2
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD22	0.61	1.96	1	1
1:A:229:PRO:O	1:A:230:TRP:HB3	0.61	1.95	3	1
1:A:11:ILE:N	1:A:11:ILE:HD13	0.61	2.10	10	1
1:A:121:LEU:HD22	1:A:121:LEU:O	0.61	1.96	5	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:43:LEU:HD12	0.61	1.72	9	2
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:HB2	0.61	1.71	7	2
1:A:110:VAL:HG13	1:A:320:THR:HG22	0.61	1.72	6	1
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:CB	0.61	2.25	6	3
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:HD1	0.61	1.54	7	1
1:A:320:THR:O	1:A:324:ALA:HB2	0.60	1.95	3	3
1:A:108:ILE:CB	1:A:262:LEU:O	0.60	2.49	2	1
1:A:189:LYS:CE	1:A:361:LEU:HD21	0.60	2.26	6	1
1:A:144:LYS:HB2	1:A:221:GLU:O	0.60	1.95	10	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:CA	0.60	2.25	5	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.60	1.74	8	8
1:A:113:LEU:HD21	1:A:226:ILE:CG2	0.60	2.25	6	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:HD11	0.60	1.73	3	3
1:A:148:MET:SD	1:A:222:THR:HG21	0.60	2.36	5	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:224:MET:HB2	0.60	1.73	9	1
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:CB	0.60	2.49	9	8
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:HB2	0.60	1.55	4	5
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG23	0.60	1.96	2	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:324:ALA:CB	0.60	2.25	6	1
1:A:62:TRP:CH2	1:A:67:PHE:CE1	0.60	2.88	7	1
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:HD23	0.60	1.96	9	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.60	1.74	1	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:261:VAL:CG1	0.60	2.25	1	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:HG21	0.60	2.26	3	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CB	0.60	2.26	10	2
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:CB	0.60	2.27	9	3
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD12	0.60	1.96	8	2
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CD2	0.60	2.32	6	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:O	0.60	1.96	4	7
1:A:85:PHE:CE1	1:A:285:LEU:HD21	0.60	2.30	4	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:347:VAL:HG21	0.60	1.72	4	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:ASP:OD2	0.60	1.95	10	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD21	0.60	1.71	10	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CZ2	0.60	2.32	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HB	0.60	1.73	2	4
1:A:115:LEU:HD21	1:A:129:TRP:CH2	0.60	2.31	4	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:HB3	0.60	1.73	5	3
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:CB	0.60	2.50	3	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG13	0.60	1.97	8	2
1:A:79:ILE:HD12	1:A:105:ALA:HA	0.60	1.73	4	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.60	1.55	9	9
1:A:67:PHE:HZ	1:A:104:ILE:HG23	0.60	1.56	3	2
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:CB	0.59	2.50	5	7
1:A:171:TYR:CA	1:A:175:LYS:O	0.59	2.50	2	1
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CZ	0.59	2.31	6	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:CG1	0.59	2.85	5	1
1:A:50:VAL:O	1:A:54:GLY:CA	0.59	2.50	9	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:99:TYR:CE1	0.59	2.31	2	1
1:A:132:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD21	0.59	2.27	1	1
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:CG	0.59	2.00	7	1
1:A:226:ILE:HD11	1:A:247:LEU:CD1	0.59	2.27	1	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HB2	0.59	1.73	9	1
1:A:357:VAL:CG2	1:A:361:LEU:HD12	0.59	2.28	9	1
1:A:199:ILE:O	1:A:204:MET:HA	0.59	1.97	6	4
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD12	0.59	1.74	6	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:HD11	0.59	1.74	5	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:59:ILE:HD12	0.59	1.97	6	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:OE1	0.59	1.98	7	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HB3	0.59	2.27	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:HB3	0.59	1.72	9	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:149:PHE:CE2	0.59	2.33	4	1
1:A:297:LYS:HZ1	1:A:301:ALA:HB3	0.59	1.56	10	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:HA	0.59	1.72	5	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:HG22	0.59	1.97	10	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:269:ALA:HB2	0.59	2.28	5	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:235:ILE:N	0.59	2.12	2	1
1:A:93:THR:HG21	1:A:303:ALA:HA	0.59	1.73	6	1
1:A:280:LEU:HD11	1:A:284:LEU:HD22	0.59	1.74	1	1
1:A:116:ILE:HG23	1:A:225:THR:CG2	0.59	2.23	7	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:HD22	0.59	2.27	8	1
1:A:304:LEU:O	1:A:307:TYR:N	0.59	2.36	10	4
1:A:235:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.59	2.32	4	1
1:A:138:GLU:O	1:A:141:ALA:HB3	0.59	1.98	5	4
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.58	1.98	3	5
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:HD13	0.58	2.33	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:ILE:CA	1:A:191:GLY:HA3	0.58	2.28	2	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HG	0.58	1.73	5	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:C	0.58	2.76	9	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:261:VAL:HG11	0.58	1.73	8	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:HB2	0.58	1.74	2	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:HG3	0.58	1.74	6	1
1:A:132:ILE:HD13	1:A:198:LEU:HD11	0.58	1.73	1	1
1:A:361:LEU:O	1:A:361:LEU:HD13	0.58	1.98	1	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:HD11	0.58	1.74	5	1
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:CG1	0.58	2.28	9	2
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:CB	0.58	2.28	9	1
1:A:23:VAL:HG13	1:A:283:TYR:CE2	0.58	2.33	6	3
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG12	0.58	1.98	2	2
1:A:76:LEU:CB	1:A:104:ILE:HD11	0.58	2.27	7	2
1:A:7:LEU:HG	1:A:59:ILE:HD11	0.58	1.73	9	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG13	0.58	1.97	10	6
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG22	0.58	1.98	2	3
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:HD13	0.58	1.75	1	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:HZ	0.58	1.56	8	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG22	0.58	2.34	2	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:CB	0.58	2.51	1	5
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HG	0.58	1.74	1	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	0.58	1.75	7	1
1:A:298:PRO:O	1:A:299:LEU:HD23	0.58	1.99	9	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CD1	0.58	2.34	8	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CB	0.58	2.29	8	1
1:A:347:VAL:O	1:A:351:ALA:HB2	0.58	1.99	3	4
1:A:217:PHE:HB3	1:A:235:ILE:HD11	0.58	1.73	7	1
1:A:230:TRP:CZ3	1:A:262:LEU:HD11	0.58	2.33	5	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HD13	0.58	1.98	7	2
1:A:12:ASN:HA	1:A:43:LEU:HD13	0.58	1.76	4	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:HG11	0.58	2.28	8	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.58	2.13	4	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG23	0.58	2.29	7	1
1:A:159:PRO:O	1:A:163:ALA:CB	0.58	2.52	2	1
1:A:132:ILE:HG12	1:A:147:LEU:HD21	0.58	1.76	1	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HG	0.58	1.99	5	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HG3	0.58	1.76	5	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD21	0.57	1.75	9	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:CG1	0.57	2.22	8	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:HD13	0.57	2.14	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD12	0.57	2.14	10	1
1:A:267:ASN:O	1:A:269:ALA:N	0.57	2.35	9	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:CB	0.57	2.51	5	8
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:CB	0.57	2.52	5	7
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:H	0.57	1.59	2	1
1:A:61:PHE:O	1:A:62:TRP:HE3	0.57	1.82	3	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HG	0.57	1.76	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG2	0.57	2.28	7	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:212:ILE:HG22	0.57	1.75	9	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:O	0.57	1.99	7	4
1:A:115:LEU:HD11	1:A:129:TRP:CH2	0.57	2.34	4	1
1:A:231:ALA:HB3	1:A:232:TRP:CE3	0.57	2.35	6	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:N	0.57	2.15	7	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG12	0.57	1.76	5	5
1:A:94:TRP:HB3	1:A:103:LEU:HD11	0.57	1.76	10	1
1:A:271:PRO:O	1:A:276:ALA:HB3	0.57	1.98	9	2
1:A:355:GLN:O	1:A:356:THR:HG23	0.57	1.99	8	5
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HB2	0.57	1.76	5	3
1:A:122:LEU:CD1	1:A:223:ALA:HB1	0.57	2.14	2	1
1:A:88:LYS:CG	1:A:304:LEU:HD21	0.57	2.29	3	1
1:A:49:GLN:O	1:A:53:THR:HG23	0.57	1.98	5	1
1:A:129:TRP:CZ2	1:A:147:LEU:HD22	0.57	2.34	2	2
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HD12	0.57	1.76	1	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:255:SER:OG	0.57	2.00	1	1
1:A:57:PRO:O	1:A:58:ASP:HB2	0.57	1.99	3	2
1:A:184:ASP:CA	1:A:361:LEU:HD22	0.57	2.29	7	1
1:A:284:LEU:O	1:A:284:LEU:HD23	0.57	1.99	9	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:CD	0.57	2.68	4	1
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:CB	0.57	2.52	1	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.57	2.30	9	3
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB2	0.57	2.00	4	7
1:A:176:TYR:CE1	1:A:331:PRO:HG2	0.57	2.35	10	1
1:A:230:TRP:CH2	1:A:262:LEU:HD11	0.57	2.35	5	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.57	2.00	9	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:335:GLN:HB3	0.57	1.74	2	1
1:A:317:ILE:C	1:A:317:ILE:HD13	0.57	2.20	6	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:HB3	0.56	1.77	4	1
1:A:223:ALA:O	1:A:224:MET:CB	0.56	2.51	10	4
1:A:160:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HD13	0.56	1.75	10	1
1:A:356:THR:O	1:A:357:VAL:C	0.56	2.39	10	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:HB1	0.56	1.78	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:H	0.56	2.03	9	1
1:A:159:PRO:HG3	1:A:256:LYS:O	0.56	2.00	2	4
1:A:97:VAL:HG22	1:A:261:VAL:CG1	0.56	2.29	8	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:302:VAL:HG22	0.56	1.75	8	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:161:ILE:HG23	0.56	1.75	2	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:208:THR:HB	0.56	1.76	1	1
1:A:294:ASN:HB2	1:A:307:TYR:CE1	0.56	2.36	1	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.56	2.30	1	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HD11	0.56	1.73	5	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.56	1.99	2	1
1:A:222:THR:O	1:A:223:ALA:HB2	0.56	1.99	10	1
1:A:139:LEU:CB	1:A:145:SER:HA	0.56	2.30	5	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:146:ALA:HB3	0.56	2.00	4	2
1:A:161:ILE:HD12	1:A:162:ALA:N	0.56	2.15	4	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:HG23	0.56	2.35	4	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:103:LEU:HD23	0.56	1.76	6	1
1:A:199:ILE:CD1	1:A:206:ALA:HB2	0.56	2.30	1	1
1:A:189:LYS:O	1:A:193:THR:HG23	0.56	2.00	7	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:C	0.56	2.20	5	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:257:PRO:CB	0.56	2.30	4	1
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:CG2	0.56	2.53	6	2
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:N	0.56	2.16	6	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD21	0.56	2.35	1	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:264:ALA:HB3	0.56	2.35	3	1
1:A:4:GLU:CG	1:A:275:LEU:HD12	0.56	2.31	2	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:324:ALA:HA	0.56	1.77	6	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:94:TRP:CZ3	0.56	2.89	1	2
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CG	0.56	2.36	9	2
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.56	2.31	9	3
1:A:280:LEU:HD21	1:A:284:LEU:HD22	0.56	1.77	4	1
1:A:195:LEU:CD1	1:A:199:ILE:HD11	0.56	2.30	3	1
1:A:290:LEU:HD22	1:A:304:LEU:CD2	0.56	2.26	10	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:58:ASP:HB2	0.56	1.78	7	1
1:A:301:ALA:HA	1:A:311:LEU:HD13	0.56	1.78	5	1
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:CB	0.55	2.84	9	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG22	0.55	1.76	6	2
1:A:23:VAL:HG12	1:A:283:TYR:CE1	0.55	2.36	2	1
1:A:355:GLN:CB	1:A:360:ALA:HB2	0.55	2.30	2	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.55	1.76	2	1
1:A:127:LYS:HD2	1:A:128:THR:HG23	0.55	1.76	10	1
1:A:79:ILE:O	1:A:81:PRO:HD3	0.55	2.01	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:PRO:HD2	1:A:327:GLY:HA2	0.55	1.78	2	3
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:OG1	0.55	2.24	1	2
1:A:55:ASP:O	1:A:269:ALA:HB1	0.55	2.01	2	1
1:A:346:ALA:HA	1:A:349:ASN:HB2	0.55	1.78	2	2
1:A:181:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG3	0.55	1.78	2	2
1:A:70:TYR:HB3	1:A:75:LEU:HD21	0.55	1.77	3	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.55	2.69	7	2
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:HB2	0.55	2.32	8	3
1:A:343:VAL:HG22	1:A:361:LEU:CD2	0.55	2.30	8	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:262:LEU:O	0.55	2.54	2	1
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:HB	0.55	2.01	3	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:265:GLY:O	0.55	2.02	5	1
1:A:335:GLN:CB	1:A:368:ILE:HG23	0.55	2.31	8	1
1:A:77:ALA:N	1:A:268:ALA:HA	0.55	2.17	1	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.55	1.79	10	1
1:A:104:ILE:O	1:A:105:ALA:CB	0.55	2.54	10	10
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CG1	0.55	2.31	5	8
1:A:205:ASN:O	1:A:206:ALA:HB3	0.55	2.02	4	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:248:PRO:HD3	0.55	1.79	4	1
1:A:8:VAL:C	1:A:9:ILE:HD12	0.55	2.22	4	1
1:A:76:LEU:HG	1:A:104:ILE:HD11	0.55	1.77	7	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:CG	0.55	2.32	5	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:76:LEU:HD22	0.55	2.36	2	1
1:A:183:VAL:HG11	1:A:368:ILE:CD1	0.55	2.31	6	1
1:A:226:ILE:HG21	1:A:247:LEU:CD1	0.55	2.32	6	1
1:A:127:LYS:CE	1:A:128:THR:HG23	0.55	2.31	1	1
1:A:152:GLN:CD	1:A:348:ILE:HD11	0.55	2.21	3	1
1:A:209:ASP:OD1	1:A:212:ILE:HD12	0.55	2.02	10	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:223:ALA:HA	0.55	1.78	5	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:110:VAL:O	0.55	2.01	10	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:O	0.55	2.24	10	1
1:A:121:LEU:CD1	1:A:121:LEU:O	0.55	2.54	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG22	0.55	2.02	8	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HD22	0.55	1.78	4	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:CG2	0.55	2.90	3	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:244:VAL:HG22	0.55	1.78	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:CG1	0.55	2.31	4	1
1:A:114:SER:O	1:A:227:ASN:N	0.55	2.39	3	3
1:A:43:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CD1	0.55	2.32	3	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:HZ2	0.55	1.61	7	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HG12	0.55	1.77	5	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HD12	0.55	1.77	9	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG23	0.55	2.02	3	2
1:A:290:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HB3	0.55	1.79	1	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG23	0.55	2.32	3	1
1:A:78:GLU:CG	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.29	10	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG22	0.54	2.17	5	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:206:ALA:HB1	0.54	1.77	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:HD3	0.54	1.77	4	1
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:CB	0.54	2.42	10	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:CB	0.54	2.31	7	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HB	0.54	2.02	4	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HB	0.54	1.79	9	2
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ASP:CB	0.54	2.54	8	5
1:A:20:LEU:HD12	1:A:35:VAL:HG21	0.54	1.78	1	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:CB	0.54	2.55	3	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG22	0.54	2.03	9	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:N	0.54	2.17	4	1
1:A:23:VAL:HG13	1:A:283:TYR:CZ	0.54	2.38	1	2
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG13	0.54	2.01	3	2
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:CD2	0.54	2.32	10	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.54	2.17	7	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:59:ILE:HD12	0.54	1.80	9	2
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:H	0.54	1.63	8	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:CG2	0.54	2.52	2	1
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD12	0.54	2.23	10	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG22	0.54	2.21	7	1
1:A:161:ILE:HG21	1:A:192:LEU:HD12	0.54	1.80	5	1
1:A:53:THR:O	1:A:53:THR:HG23	0.54	2.02	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HA	0.54	1.79	1	1
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:CG	0.54	2.33	3	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:149:PHE:CE2	0.54	2.38	3	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:159:PRO:CG	0.54	2.33	10	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB2	0.54	2.03	1	3
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:HG21	0.54	1.80	2	2
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:HB2	0.54	1.79	6	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:HB2	0.54	2.02	5	2
1:A:77:ALA:HB3	1:A:267:ASN:O	0.54	2.03	1	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:259:VAL:O	0.54	2.02	3	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:262:LEU:O	0.54	2.02	7	2

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LEU:CD1	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.32	1	1
1:A:132:ILE:CD1	1:A:147:LEU:HD21	0.54	2.31	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.32	5	1
1:A:60:ILE:O	1:A:265:GLY:N	0.53	2.38	4	2
1:A:160:LEU:CD1	1:A:161:ILE:HG23	0.53	2.33	2	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:324:ALA:CA	0.53	2.32	2	1
1:A:104:ILE:HG12	1:A:104:ILE:O	0.53	2.01	7	2
1:A:47:PHE:CE2	1:A:75:LEU:HD12	0.53	2.37	9	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD22	0.53	2.38	9	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CZ	0.53	2.38	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:HG3	0.53	2.03	6	2
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:N	0.53	2.17	2	1
1:A:90:TYR:HB2	1:A:94:TRP:CZ3	0.53	2.38	3	2
1:A:7:LEU:HG	1:A:9:ILE:HD11	0.53	1.80	3	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:CD2	0.53	2.31	5	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:67:PHE:CD1	0.53	2.96	9	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:279:PHE:CD1	0.53	2.96	10	2
1:A:227:ASN:HB3	1:A:235:ILE:HD12	0.53	1.81	8	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:CA	0.53	2.86	10	1
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CZ	0.53	2.97	9	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:O	0.53	2.03	9	1
1:A:249:THR:O	1:A:250:PHE:CG	0.53	2.61	3	7
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:CD	0.53	2.85	8	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD2	0.53	2.19	8	4
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:CG	0.53	2.33	6	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:59:ILE:O	0.53	2.03	1	1
1:A:57:PRO:O	1:A:58:ASP:CB	0.53	2.56	3	3
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG12	0.53	2.04	3	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HB2	0.53	2.39	5	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD13	0.53	1.80	5	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:223:ALA:HB1	0.53	2.34	9	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:CA	0.53	2.33	9	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:97:VAL:O	0.53	2.04	4	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:43:LEU:HD11	0.53	2.34	2	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:259:VAL:CG1	0.53	2.33	6	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:CB	0.53	2.34	9	1
1:A:48:PRO:HA	1:A:75:LEU:HD11	0.53	1.80	9	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB3	0.53	1.78	2	1
1:A:228:GLY:O	1:A:230:TRP:N	0.53	2.41	3	2
1:A:43:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HD11	0.53	1.81	3	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:N	0.53	2.18	7	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:CD1	1:A:145:SER:HA	0.53	2.34	5	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:CG2	0.53	2.33	4	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CD1	0.53	2.56	6	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CG	0.53	2.57	6	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:HB2	0.53	1.79	1	1
1:A:312:ALA:O	1:A:318:ALA:HB2	0.53	2.03	3	1
1:A:191:GLY:O	1:A:194:PHE:CD2	0.53	2.62	9	5
1:A:311:LEU:HD23	1:A:311:LEU:O	0.53	2.03	8	2
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:CD	0.53	2.34	2	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HD12	0.53	2.03	1	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:HB2	0.53	2.04	3	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB3	0.53	2.04	5	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HD2	0.53	2.04	6	9
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.53	2.04	10	2
1:A:169:PHE:CD2	1:A:181:VAL:HG12	0.53	2.39	6	1
1:A:269:ALA:O	1:A:270:SER:CB	0.53	2.57	3	2
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:CA	0.53	2.33	5	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG13	0.53	2.04	2	2
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PRO:O	0.53	2.27	8	1
1:A:85:PHE:HE1	1:A:285:LEU:HD21	0.53	1.63	4	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CG	0.53	2.30	2	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CE1	0.53	2.38	6	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:HD3	0.53	1.78	1	1
1:A:70:TYR:HA	1:A:74:GLY:HA3	0.53	1.81	1	1
1:A:181:VAL:HG11	1:A:339:PHE:CE1	0.52	2.38	9	1
1:A:11:ILE:N	1:A:11:ILE:HD12	0.52	2.19	5	2
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD12	0.52	2.39	6	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:N	0.52	2.42	7	3
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:CG2	0.52	2.34	3	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CD2	0.52	2.39	7	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:HG13	0.52	2.39	8	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:CG	0.52	2.58	7	2
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:C	0.52	2.25	10	2
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:61:PHE:O	0.52	2.62	2	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:CZ	0.52	2.97	7	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:11:ILE:HD11	0.52	1.82	5	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:261:VAL:HG21	0.52	2.34	5	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:HB	0.52	2.33	6	4
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:HD12	0.52	2.03	8	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB2	0.52	2.04	4	3
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG13	0.52	1.82	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:HB3	0.52	2.03	1	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:261:VAL:HG11	0.52	1.81	1	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:HB3	0.52	2.04	3	1
1:A:99:TYR:O	1:A:101:GLY:N	0.52	2.43	2	6
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HG12	0.52	1.81	8	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:CB	0.52	2.57	10	5
1:A:89:LEU:HD23	1:A:303:ALA:HB1	0.52	1.80	4	1
1:A:162:ALA:O	1:A:164:ASP:N	0.52	2.42	2	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.52	2.39	5	2
1:A:317:ILE:HD13	1:A:317:ILE:N	0.52	2.18	7	2
1:A:229:PRO:O	1:A:230:TRP:CB	0.52	2.57	3	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD23	0.52	2.39	7	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:247:LEU:HD11	0.52	1.80	5	1
1:A:136:ASP:CA	1:A:139:LEU:HG	0.52	2.34	5	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:HB3	0.52	1.80	2	2
1:A:106:TYR:O	1:A:264:ALA:N	0.52	2.42	6	4
1:A:114:SER:C	1:A:226:ILE:HD12	0.52	2.24	1	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG23	0.52	1.82	10	1
1:A:97:VAL:HB	1:A:105:ALA:HB3	0.52	1.80	10	1
1:A:40:PRO:O	1:A:41:ASP:CB	0.52	2.56	5	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.52	2.38	5	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:317:ILE:HG22	0.52	1.80	6	1
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:C	0.52	2.25	1	1
1:A:39:HIS:O	1:A:39:HIS:CG	0.52	2.62	4	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:HD22	0.52	1.81	2	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.52	2.32	6	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:CB	0.52	2.34	5	2
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HA	0.52	2.04	1	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:N	0.52	2.20	5	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:247:LEU:HD11	0.52	2.35	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:H	0.52	1.65	9	1
1:A:64:HIS:O	1:A:68:GLY:N	0.52	2.43	3	7
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:CB	0.52	2.92	2	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:198:LEU:CD2	0.52	2.35	6	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CE2	0.52	2.39	3	1
1:A:348:ILE:O	1:A:352:SER:N	0.52	2.43	10	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HB	0.52	2.05	1	5
1:A:10:TRP:CH2	1:A:47:PHE:CD1	0.52	2.98	8	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:CD	0.52	2.35	4	2
1:A:57:PRO:CD	1:A:269:ALA:HB3	0.52	2.35	4	1
1:A:42:LYS:O	1:A:44:GLU:N	0.52	2.43	3	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:299:LEU:HD11	1:A:314:ASP:CG	0.52	2.25	1	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:HG23	0.52	2.35	3	1
1:A:96:ALA:HA	1:A:329:ILE:HD12	0.52	1.81	7	1
1:A:335:GLN:HG3	1:A:368:ILE:HG23	0.52	1.81	5	1
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:HD13	0.52	2.05	5	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HD21	0.52	2.05	5	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:CB	0.51	2.88	9	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD12	0.51	2.35	9	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CD1	0.51	2.35	7	6
1:A:105:ALA:CB	1:A:264:ALA:O	0.51	2.58	4	2
1:A:163:ALA:O	1:A:253:GLN:CB	0.51	2.58	7	3
1:A:259:VAL:HG23	1:A:327:GLY:HA3	0.51	1.82	6	1
1:A:302:VAL:O	1:A:303:ALA:HB2	0.51	2.05	10	2
1:A:178:ILE:O	1:A:181:VAL:HG13	0.51	2.05	3	1
1:A:359:GLU:HA	1:A:362:LYS:HG2	0.51	1.81	5	1
1:A:63:ALA:HA	1:A:261:VAL:O	0.51	2.05	4	4
1:A:10:TRP:HD1	1:A:60:ILE:HG22	0.51	1.65	2	1
1:A:155:TYR:O	1:A:258:PHE:CD1	0.51	2.63	6	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:283:TYR:CD1	0.51	2.98	6	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:188:ALA:HA	0.51	1.82	1	2
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:O	0.51	2.05	1	2
1:A:343:VAL:CG1	1:A:347:VAL:HG21	0.51	2.29	3	1
1:A:284:LEU:HD13	1:A:284:LEU:O	0.51	2.05	10	1
1:A:209:ASP:OD2	1:A:212:ILE:HD12	0.51	2.05	2	3
1:A:161:ILE:C	1:A:161:ILE:HD12	0.51	2.26	4	1
1:A:170:LYS:CB	1:A:180:ASP:O	0.51	2.58	6	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:CA	0.51	2.58	6	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HB	0.51	1.82	6	1
1:A:47:PHE:CG	1:A:60:ILE:HD12	0.51	2.41	3	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CE2	0.51	2.41	9	1
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:CB	0.51	2.58	6	3
1:A:293:VAL:HG12	1:A:294:ASN:N	0.51	2.20	4	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD3	0.51	2.20	4	1
1:A:298:PRO:O	1:A:299:LEU:CB	0.51	2.58	6	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD21	0.51	1.81	1	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.51	2.35	1	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:339:PHE:CZ	0.51	2.40	1	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:CB	0.51	2.35	7	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:146:ALA:N	0.51	2.20	5	1
1:A:85:PHE:O	1:A:89:LEU:HD12	0.51	2.05	9	2
1:A:64:HIS:N	1:A:261:VAL:O	0.51	2.43	4	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:PRO:CB	1:A:75:LEU:HD12	0.51	2.35	2	1
1:A:77:ALA:CA	1:A:267:ASN:O	0.51	2.59	1	1
1:A:330:MET:O	1:A:331:PRO:O	0.51	2.29	1	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:N	0.51	2.44	3	1
1:A:262:LEU:HD12	1:A:299:LEU:HD13	0.51	1.82	4	1
1:A:127:LYS:HE2	1:A:128:THR:HG23	0.51	1.82	1	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:206:ALA:HB1	0.51	2.34	10	2
1:A:297:LYS:HG2	1:A:299:LEU:HD21	0.51	1.83	8	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:C	0.51	2.26	6	4
1:A:132:ILE:CG1	1:A:133:PRO:HD3	0.51	2.36	6	2
1:A:70:TYR:O	1:A:74:GLY:N	0.51	2.43	6	2
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:HA2	0.51	2.36	5	3
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HD12	0.51	1.81	10	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:CB	0.51	2.58	3	4
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:HD2	0.51	2.18	4	1
1:A:158:TRP:CH2	1:A:343:VAL:HG22	0.51	2.41	2	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CE1	0.51	2.39	6	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:HG22	0.51	1.82	1	2
1:A:115:LEU:HG	1:A:226:ILE:HG22	0.51	1.83	10	1
1:A:368:ILE:HD12	1:A:369:THR:HG23	0.51	1.82	7	1
1:A:108:ILE:HA	1:A:303:ALA:HB2	0.51	1.82	10	1
1:A:5:GLY:HA2	1:A:32:GLY:O	0.51	2.06	10	2
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:CA	0.51	2.34	7	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:283:TYR:CE1	0.51	2.98	5	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:104:ILE:O	0.51	2.05	9	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:232:TRP:CZ2	0.51	2.99	8	1
1:A:339:PHE:CE1	1:A:343:VAL:CG2	0.51	2.94	8	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CD	0.51	2.36	6	2
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:CB	0.51	2.36	6	2
1:A:90:TYR:CG	1:A:91:PRO:HD3	0.51	2.40	3	1
1:A:67:PHE:HA	1:A:76:LEU:HD22	0.51	1.83	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:266:ILE:CD1	0.51	2.49	5	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:CB	0.50	2.59	9	3
1:A:297:LYS:CG	1:A:299:LEU:HD21	0.50	2.36	8	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:147:LEU:HD21	0.50	1.83	1	1
1:A:93:THR:CG2	1:A:302:VAL:HG11	0.50	2.36	1	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CE3	0.50	2.56	3	1
1:A:279:PHE:CD1	1:A:279:PHE:C	0.50	2.85	9	2
1:A:339:PHE:CD2	1:A:368:ILE:HD13	0.50	2.42	2	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:331:PRO:CG	0.50	2.94	1	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:HB3	0.50	1.82	5	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:HB3	0.50	1.82	7	3
1:A:110:VAL:HG22	1:A:259:VAL:HG13	0.50	1.81	6	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:311:LEU:HD11	0.50	1.83	9	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CZ2	0.50	2.42	6	1
1:A:47:PHE:CG	1:A:60:ILE:HG12	0.50	2.42	1	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CD1	0.50	2.41	1	1
1:A:33:ILE:HD13	1:A:34:LYS:N	0.50	2.21	3	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HB2	0.50	2.07	10	1
1:A:194:PHE:C	1:A:194:PHE:CD1	0.50	2.85	9	6
1:A:67:PHE:C	1:A:67:PHE:CD1	0.50	2.84	9	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:94:TRP:CZ2	0.50	3.00	2	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB2	0.50	2.06	6	1
1:A:75:LEU:CA	1:A:268:ALA:HB2	0.50	2.37	1	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HA	0.50	1.83	1	2
1:A:355:GLN:C	1:A:360:ALA:HB2	0.50	2.27	10	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:279:PHE:CE2	0.50	2.99	7	1
1:A:280:LEU:O	1:A:284:LEU:CB	0.50	2.59	4	3
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CE1	0.50	2.99	4	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD13	0.50	1.83	3	1
1:A:28:GLU:O	1:A:31:THR:C	0.50	2.50	3	1
1:A:262:LEU:N	1:A:262:LEU:HD22	0.50	2.22	5	1
1:A:154:PRO:O	1:A:155:TYR:C	0.50	2.50	9	6
1:A:67:PHE:CD2	1:A:76:LEU:CD1	0.50	2.94	9	2
1:A:105:ALA:HB2	1:A:265:GLY:CA	0.50	2.37	8	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:CG1	0.50	2.90	8	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:N	0.50	2.43	5	6
1:A:110:VAL:HG13	1:A:302:VAL:CG1	0.50	2.01	2	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD22	0.50	1.82	5	2
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD3	0.50	1.82	6	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CD1	0.50	2.41	1	1
1:A:195:LEU:HD12	1:A:199:ILE:HD11	0.50	1.83	3	1
1:A:261:VAL:HG22	1:A:261:VAL:O	0.50	2.06	10	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:HG12	0.50	2.37	7	2
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:CB	0.50	2.59	5	4
1:A:235:ILE:HG21	1:A:238:SER:CB	0.50	2.37	3	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CD2	0.50	2.41	10	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:207:ASP:HA	0.50	1.84	7	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:OG1	0.50	2.30	10	6
1:A:151:LEU:CB	1:A:208:THR:O	0.50	2.60	8	6
1:A:76:LEU:O	1:A:104:ILE:HD11	0.50	2.07	4	1
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HB	0.50	1.83	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CZ	0.50	2.42	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:226:ILE:HG13	0.50	1.84	6	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CE2	0.50	2.42	6	1
1:A:48:PRO:CG	1:A:75:LEU:HD22	0.50	2.36	3	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:HD2	0.49	2.06	9	5
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB2	0.49	1.83	9	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:67:PHE:HB3	0.49	1.83	9	2
1:A:235:ILE:O	1:A:237:THR:N	0.49	2.44	2	2
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.49	2.36	8	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:33:ILE:CG2	0.49	2.37	8	1
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:CB	0.49	2.60	5	6
1:A:131:GLU:HB3	1:A:135:LEU:HD12	0.49	1.83	1	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:CD1	0.49	2.95	4	2
1:A:117:TYR:CZ	1:A:243:GLY:HA3	0.49	2.42	8	1
1:A:61:PHE:N	1:A:61:PHE:CD1	0.49	2.80	8	2
1:A:24:GLY:CA	1:A:33:ILE:HG21	0.49	2.37	4	1
1:A:181:VAL:HG23	1:A:181:VAL:O	0.49	2.07	2	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:HB3	0.49	1.85	5	4
1:A:280:LEU:HD13	1:A:280:LEU:O	0.49	2.07	1	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:329:ILE:HA	0.49	2.38	10	1
1:A:111:GLU:O	1:A:324:ALA:HB2	0.49	2.08	5	1
1:A:312:ALA:O	1:A:313:LYS:C	0.49	2.50	4	6
1:A:170:LYS:CE	1:A:172:GLU:CG	0.49	2.90	8	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:235:ILE:HD11	0.49	1.82	8	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE1	0.49	3.00	8	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:O	0.49	2.06	6	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:O	0.49	2.08	1	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HB	0.49	2.43	3	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.49	2.41	5	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:60:ILE:CG2	0.49	2.95	5	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:105:ALA:O	0.49	2.07	9	1
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CG	0.49	2.95	9	5
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CD2	0.49	2.43	2	1
1:A:329:ILE:O	1:A:330:MET:C	0.49	2.51	2	2
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:CG	0.49	2.96	6	1
1:A:280:LEU:CD1	1:A:284:LEU:HD22	0.49	2.37	1	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:106:TYR:CZ	0.49	2.42	4	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:35:VAL:HG22	0.49	2.38	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:266:ILE:HD12	0.49	1.84	4	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:CG2	0.49	2.96	2	1
1:A:170:LYS:N	1:A:180:ASP:O	0.49	2.45	6	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LEU:N	1:A:33:ILE:HD11	0.49	2.23	3	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:63:ALA:O	0.49	2.65	6	2
1:A:163:ALA:HA	1:A:254:PRO:O	0.49	2.07	5	2
1:A:106:TYR:OH	1:A:280:LEU:HD13	0.49	2.07	5	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:CD	0.49	2.75	9	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HB3	0.49	2.38	9	2
1:A:79:ILE:HD12	1:A:104:ILE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:279:PHE:CE2	0.49	3.00	7	1
1:A:279:PHE:CD1	1:A:280:LEU:N	0.49	2.81	10	2
1:A:307:TYR:OH	1:A:311:LEU:HD12	0.49	2.06	2	2
1:A:163:ALA:CB	1:A:256:LYS:N	0.49	2.76	2	1
1:A:123:PRO:O	1:A:125:PRO:HD3	0.49	2.08	3	3
1:A:76:LEU:C	1:A:268:ALA:HA	0.49	2.28	1	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:60:ILE:HG12	0.49	2.42	1	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:CG	0.49	2.38	3	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CG	0.49	2.91	5	1
1:A:23:VAL:CG2	1:A:283:TYR:CD2	0.49	2.95	5	1
1:A:39:HIS:CB	1:A:40:PRO:CD	0.49	2.91	5	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:104:ILE:O	0.49	2.58	8	1
1:A:307:TYR:CE2	1:A:311:LEU:HD12	0.49	2.43	8	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:CD1	0.49	2.96	6	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.49	1.83	3	1
1:A:181:VAL:O	1:A:181:VAL:HG23	0.49	2.08	10	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CE2	0.49	2.43	8	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HG13	0.49	1.85	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:11:ILE:HG13	0.49	1.85	3	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD23	0.49	2.08	10	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:CB	0.48	2.60	5	4
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CG2	0.48	2.95	4	1
1:A:171:TYR:CD2	1:A:176:TYR:CE1	0.48	3.01	4	1
1:A:169:PHE:HA	1:A:181:VAL:HA	0.48	1.84	6	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:HD2	0.48	1.83	1	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:340:TRP:CD1	1:A:341:TYR:N	0.48	2.81	5	1
1:A:77:ALA:C	1:A:104:ILE:HD11	0.48	2.29	8	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:279:PHE:CD2	0.48	3.00	8	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:CB	0.48	2.61	5	3
1:A:199:ILE:HD12	1:A:206:ALA:HB2	0.48	1.84	1	1
1:A:333:ILE:HD13	1:A:335:GLN:HB2	0.48	1.83	1	1
1:A:48:PRO:CA	1:A:75:LEU:HD13	0.48	2.26	5	1
1:A:177:ASP:C	1:A:178:ILE:HG22	0.48	2.28	8	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:TRP:HB2	1:A:43:LEU:HD11	0.48	1.85	2	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB3	0.48	2.07	3	1
1:A:217:PHE:CD2	1:A:222:THR:HG21	0.48	2.43	10	1
1:A:57:PRO:CD	1:A:269:ALA:CB	0.48	2.91	4	1
1:A:184:ASP:CB	1:A:361:LEU:HB2	0.48	2.38	4	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD13	0.48	1.84	6	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:CA	0.48	2.38	1	2
1:A:113:LEU:HD21	1:A:156:PHE:CE1	0.48	2.43	5	1
1:A:347:VAL:CG2	1:A:361:LEU:HD11	0.48	2.38	9	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:CB	0.48	2.91	8	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:O	0.48	2.08	7	2
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.48	2.08	1	2
1:A:10:TRP:CD1	1:A:60:ILE:HA	0.48	2.44	2	1
1:A:7:LEU:O	1:A:35:VAL:HA	0.48	2.09	1	3
1:A:147:LEU:HD12	1:A:149:PHE:HE2	0.48	1.69	3	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:N	0.48	2.22	7	1
1:A:330:MET:N	1:A:331:PRO:HD2	0.48	2.24	5	1
1:A:279:PHE:CG	1:A:280:LEU:N	0.48	2.82	4	3
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:47:PHE:CG	0.48	3.01	8	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD23	0.48	2.08	8	1
1:A:48:PRO:HB3	1:A:75:LEU:HD23	0.48	1.86	4	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:HB3	0.48	2.38	2	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD13	0.48	2.44	2	1
1:A:237:THR:O	1:A:237:THR:HG23	0.48	2.08	6	1
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:67:PHE:CD1	0.48	3.01	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:CD2	0.48	2.62	5	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:267:ASN:ND2	0.48	2.81	5	1
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:HB2	0.48	2.09	4	2
1:A:231:ALA:CB	1:A:232:TRP:CE3	0.48	2.97	6	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HB2	0.48	2.36	1	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:94:TRP:N	0.48	2.82	1	2
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:CG2	0.48	2.61	7	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.48	2.09	9	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:CD1	0.48	2.39	8	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:279:PHE:CE1	0.48	2.97	2	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:35:VAL:CG2	0.48	2.39	1	1
1:A:93:THR:HG22	1:A:107:PRO:CG	0.48	2.39	10	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:139:LEU:HG	0.48	1.85	10	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:O	0.48	2.08	10	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HD12	0.48	2.44	9	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD2	0.48	2.09	6	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:C	1:A:122:LEU:HD12	0.48	2.29	2	2
1:A:85:PHE:CE2	1:A:94:TRP:CH2	0.48	3.02	10	2
1:A:43:LEU:HD21	1:A:60:ILE:CD1	0.48	2.35	10	1
1:A:178:ILE:HG22	1:A:335:GLN:HG2	0.48	1.85	5	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:C	0.48	2.52	9	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.48	2.28	4	2
1:A:194:PHE:CD1	1:A:195:LEU:N	0.48	2.82	5	3
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:O	0.48	2.62	4	1
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.48	2.77	4	1
1:A:168:ALA:CA	1:A:183:VAL:HG22	0.48	2.39	2	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:311:LEU:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB3	0.48	2.08	6	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:H	0.48	1.69	10	2
1:A:271:PRO:O	1:A:272:ASN:C	0.48	2.52	1	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:307:TYR:HB2	0.48	1.85	1	1
1:A:69:GLY:O	1:A:73:SER:CB	0.48	2.61	3	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:HD11	0.48	1.85	5	2
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:HB3	0.48	2.09	10	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:10:TRP:N	0.47	2.82	8	2
1:A:108:ILE:HG13	1:A:262:LEU:O	0.47	2.09	2	1
1:A:259:VAL:HG13	1:A:327:GLY:HA3	0.47	1.85	3	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:OG	0.47	2.09	9	2
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:CA	0.47	2.39	8	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:248:PRO:HD3	0.47	1.85	4	1
1:A:156:PHE:CA	1:A:159:PRO:HG2	0.47	2.39	4	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:67:PHE:CE1	0.47	2.43	4	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:159:PRO:HG2	0.47	1.85	10	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.39	7	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:CD1	0.47	2.38	5	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HB3	0.47	1.87	9	2
1:A:132:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD21	0.47	1.85	9	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CG	0.47	2.44	6	2
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD2	0.47	1.85	4	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:47:PHE:C	0.47	2.87	4	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:99:TYR:CD1	0.47	2.97	2	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:50:VAL:HG11	0.47	2.44	3	1
1:A:65:ASP:HB3	1:A:330:MET:CG	0.47	2.38	3	1
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:HB2	0.47	2.09	7	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:O	0.47	2.31	9	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:PRO:O	1:A:162:ALA:HB3	0.47	2.08	8	5
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:HB3	0.47	1.86	4	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:9:ILE:CD1	0.47	2.32	4	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:CG1	0.47	2.62	6	2
1:A:176:TYR:O	1:A:178:ILE:N	0.47	2.48	2	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:67:PHE:HB2	0.47	2.45	2	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:N	0.47	2.72	1	2
1:A:43:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG22	0.47	2.40	1	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.47	1.85	1	1
1:A:97:VAL:CB	1:A:105:ALA:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:67:PHE:CE1	0.47	3.03	7	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:283:TYR:CD2	0.47	2.44	5	1
1:A:149:PHE:C	1:A:150:ASN:O	0.47	2.51	9	1
1:A:357:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD12	0.47	1.86	8	2
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.47	2.09	3	3
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HB	0.47	1.85	4	4
1:A:149:PHE:O	1:A:150:ASN:C	0.47	2.53	10	5
1:A:249:THR:O	1:A:250:PHE:CD2	0.47	2.67	10	3
1:A:10:TRP:CD1	1:A:60:ILE:HG22	0.47	2.43	2	1
1:A:304:LEU:O	1:A:305:LYS:C	0.47	2.53	10	2
1:A:109:ALA:HA	1:A:301:ALA:HA	0.47	1.85	10	2
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:HD12	0.47	2.30	2	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:106:TYR:OH	0.47	2.08	6	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:361:LEU:CD2	0.47	2.39	1	1
1:A:107:PRO:HB2	1:A:261:VAL:HG12	0.47	1.86	7	1
1:A:199:ILE:O	1:A:204:MET:N	0.47	2.47	5	1
1:A:176:TYR:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.47	2.44	9	1
1:A:99:TYR:N	1:A:102:LYS:O	0.47	2.38	8	1
1:A:247:LEU:HD23	1:A:255:SER:OG	0.47	2.10	4	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:329:ILE:HG22	0.47	1.84	4	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:O	0.47	2.09	2	1
1:A:158:TRP:CZ3	1:A:161:ILE:HD11	0.47	2.45	2	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:250:PHE:CE2	0.47	2.45	2	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:302:VAL:O	0.47	2.09	2	1
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:HD12	0.47	2.24	1	1
1:A:169:PHE:N	1:A:169:PHE:CD1	0.47	2.83	1	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:91:PRO:CD	0.47	2.97	3	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:105:ALA:HB3	0.47	1.85	3	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:ALA:N	0.47	2.25	3	1
1:A:164:ASP:HB2	1:A:187:GLY:CA	0.47	2.40	10	1
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:HB	0.47	2.10	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:OG1	0.47	2.10	9	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:265:GLY:O	0.47	2.63	8	2
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ASP:HB2	0.47	2.10	5	2
1:A:295:LYS:O	1:A:296:ASP:CB	0.47	2.62	4	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:263:SER:O	0.47	2.68	2	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:222:THR:O	1:A:223:ALA:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CE2	0.47	2.83	7	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:CB	0.47	2.63	9	5
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:HB2	0.47	1.85	4	1
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:HG3	0.47	1.85	3	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:HD12	0.47	1.87	5	1
1:A:148:MET:HG3	1:A:222:THR:HG21	0.47	1.85	8	1
1:A:176:TYR:CE1	1:A:177:ASP:O	0.47	2.68	7	2
1:A:147:LEU:C	1:A:222:THR:HG21	0.47	2.31	4	2
1:A:111:GLU:HB2	1:A:260:GLY:HA3	0.47	1.87	4	1
1:A:356:THR:O	1:A:359:GLU:N	0.47	2.48	4	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:CB	0.47	2.63	4	3
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:HG22	0.47	2.10	1	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:37:VAL:HG11	0.47	1.87	3	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.93	3	2
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:HG23	0.47	2.44	7	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:266:ILE:HA	0.47	1.87	7	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:N	0.46	2.25	9	1
1:A:27:PHE:HB2	1:A:33:ILE:CB	0.46	2.40	10	2
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG12	0.46	2.10	5	2
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:C	0.46	2.29	8	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HB3	0.46	1.86	8	1
1:A:66:ARG:HB3	1:A:70:TYR:CZ	0.46	2.44	8	1
1:A:86:GLN:O	1:A:94:TRP:CD1	0.46	2.68	10	2
1:A:343:VAL:HG23	1:A:347:VAL:CG2	0.46	2.40	4	1
1:A:356:THR:O	1:A:360:ALA:N	0.46	2.48	4	2
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:HB3	0.46	2.09	4	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB2	0.46	1.86	2	1
1:A:37:VAL:HG23	1:A:37:VAL:O	0.46	2.10	6	1
1:A:47:PHE:O	1:A:50:VAL:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:35:VAL:HG22	0.46	1.86	10	1
1:A:190:ALA:O	1:A:193:THR:OG1	0.46	2.33	7	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:HA	0.46	1.86	9	1
1:A:262:LEU:HG	1:A:299:LEU:HD22	0.46	1.87	4	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:233:SER:CB	0.46	2.98	2	1

*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:217:PHE:C	0.46	2.88	6	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HB2	0.46	2.10	1	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:63:ALA:N	0.46	2.83	1	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:HB	0.46	2.40	1	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG13	0.46	1.87	3	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:94:TRP:CD1	0.46	2.45	3	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CD1	0.46	2.98	9	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:N	0.46	2.68	9	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HG22	0.46	2.44	4	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB2	0.46	2.43	10	3
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CE1	0.46	2.98	2	2
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:VAL:HG12	0.46	2.39	6	1
1:A:294:ASN:HA	1:A:297:LYS:HB2	0.46	1.87	3	3
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:CE2	0.46	2.98	1	1
1:A:69:GLY:O	1:A:70:TYR:C	0.46	2.53	5	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD11	0.46	2.46	9	1
1:A:161:ILE:O	1:A:188:ALA:HA	0.46	2.11	9	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.46	1.83	9	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:61:PHE:CD1	0.46	2.99	3	2
1:A:110:VAL:HG13	1:A:324:ALA:CB	0.46	2.40	8	1
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:HD22	0.46	2.24	2	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:CG2	0.46	2.98	1	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:75:LEU:O	0.46	2.61	3	1
1:A:55:ASP:O	1:A:269:ALA:HB2	0.46	2.10	10	1
1:A:126:PRO:HD2	1:A:146:ALA:CB	0.46	2.37	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CB	0.46	2.38	5	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG12	0.46	2.10	10	2
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG13	0.46	1.87	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:CB	0.46	2.64	6	2
1:A:232:TRP:N	1:A:232:TRP:CD1	0.46	2.84	1	1
1:A:249:THR:C	1:A:250:PHE:CD1	0.46	2.88	7	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:263:SER:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:280:LEU:HD21	0.46	2.45	8	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:35:VAL:HG11	0.46	1.88	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG12	0.46	2.11	4	1
1:A:307:TYR:O	1:A:307:TYR:CD1	0.46	2.69	2	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:147:LEU:HD22	0.46	2.46	10	2
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:CB	0.46	2.98	6	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:336:MET:N	0.46	2.25	10	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:CD1	0.46	2.99	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:GLN:OE1	1:A:348:ILE:HD11	0.46	2.11	9	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CZ	0.46	2.45	10	2
1:A:280:LEU:HD22	1:A:284:LEU:HD13	0.46	1.87	1	1
1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CD1	0.46	2.84	5	2
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.46	2.83	10	1
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:70:TYR:CD2	0.46	3.03	7	2
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG1	0.46	2.41	7	1
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:CG1	0.46	2.63	5	1
1:A:194:PHE:CE2	1:A:250:PHE:CD1	0.46	3.04	5	1
1:A:209:ASP:O	1:A:213:ALA:CB	0.46	2.64	2	4
1:A:129:TRP:CZ2	1:A:147:LEU:CD2	0.46	2.99	8	2
1:A:156:PHE:CE2	1:A:226:ILE:O	0.46	2.69	8	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:75:LEU:HD22	0.46	1.86	8	1
1:A:77:ALA:O	1:A:79:ILE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:94:TRP:CE3	0.46	2.95	6	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:CG2	0.46	2.64	10	1
1:A:333:ILE:HG22	1:A:334:PRO:HD2	0.46	1.88	5	1
1:A:155:TYR:CZ	1:A:340:TRP:CH2	0.46	3.04	8	1
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:CB	0.46	2.40	8	1
1:A:62:TRP:CG	1:A:63:ALA:N	0.46	2.84	8	1
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:OG1	0.46	2.32	4	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:262:LEU:C	0.46	2.31	2	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:232:TRP:CZ2	0.46	2.99	6	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CB	0.46	2.41	6	1
1:A:108:ILE:HG23	1:A:303:ALA:HB2	0.46	1.87	1	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:232:TRP:CD1	0.46	2.46	1	1
1:A:342:ALA:C	1:A:361:LEU:HD23	0.46	2.31	1	1
1:A:339:PHE:CE2	1:A:368:ILE:CD1	0.46	2.99	10	1
1:A:335:GLN:CG	1:A:368:ILE:CG2	0.46	2.94	5	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:CG1	0.46	2.91	5	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:CD	0.46	2.64	4	6
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:CD2	0.46	2.94	4	1
1:A:301:ALA:O	1:A:317:ILE:HG13	0.46	2.10	4	1
1:A:155:TYR:CD1	1:A:155:TYR:N	0.46	2.84	2	1
1:A:361:LEU:N	1:A:361:LEU:CD1	0.46	2.79	6	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CG1	0.46	2.41	6	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:CB	0.46	2.63	1	3
1:A:113:LEU:CD1	1:A:156:PHE:CD1	0.46	2.99	5	1
1:A:76:LEU:N	1:A:268:ALA:HB2	0.46	2.25	5	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.46	2.10	5	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.46	2.39	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:PHE:CE1	1:A:250:PHE:CZ	0.45	3.04	9	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:CG	0.45	2.64	4	4
1:A:293:VAL:O	1:A:298:PRO:CD	0.45	2.64	4	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:66:ARG:CB	0.45	2.98	4	1
1:A:161:ILE:CB	1:A:191:GLY:HA3	0.45	2.40	2	1
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:CB	0.45	2.64	5	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HB3	0.45	2.11	1	5
1:A:339:PHE:CD1	1:A:343:VAL:CG2	0.45	3.00	8	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:CB	0.45	2.64	8	1
1:A:331:PRO:O	1:A:332:ASN:CB	0.45	2.65	10	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:106:TYR:CZ	0.45	3.00	4	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:155:TYR:CB	1:A:230:TRP:CZ2	0.45	3.00	1	1
1:A:357:VAL:HG13	1:A:361:LEU:HD12	0.45	1.87	3	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:71:ALA:HB3	0.45	2.46	3	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HD12	0.45	1.87	10	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD13	0.45	2.11	5	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:75:LEU:CD2	0.45	2.41	5	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:230:TRP:CH2	0.45	3.00	9	1
1:A:23:VAL:CG2	1:A:283:TYR:CE2	0.45	2.98	9	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:192:LEU:N	0.45	2.25	8	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:156:PHE:CE1	0.45	2.46	4	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:92:PHE:CE2	0.45	3.05	2	1
1:A:259:VAL:HG22	1:A:324:ALA:O	0.45	2.12	1	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:96:ALA:O	0.45	2.69	7	2
1:A:61:PHE:CZ	1:A:264:ALA:CB	0.45	2.99	7	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.45	2.11	5	2
1:A:183:VAL:CG2	1:A:184:ASP:N	0.45	2.78	5	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:223:ALA:O	0.45	2.65	9	1
1:A:90:TYR:O	1:A:94:TRP:CD1	0.45	2.70	10	2
1:A:178:ILE:HG12	1:A:369:THR:HG22	0.45	1.88	8	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:232:TRP:CZ2	0.45	3.05	8	1
1:A:159:PRO:CB	1:A:256:LYS:O	0.45	2.64	5	4
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:HB3	0.45	2.11	4	1
1:A:28:GLU:CG	1:A:33:ILE:O	0.45	2.65	3	3
1:A:231:ALA:HB3	1:A:232:TRP:CZ3	0.45	2.46	6	1
1:A:230:TRP:CE3	1:A:231:ALA:CB	0.45	2.98	1	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:PRO:HG3	0.45	1.88	3	1
1:A:148:MET:N	1:A:224:MET:O	0.45	2.48	3	1
1:A:230:TRP:N	1:A:230:TRP:CD1	0.45	2.85	7	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:364:ALA:CB	0.45	2.42	7	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:HD11	1:A:156:PHE:CD1	0.45	2.46	5	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:CD2	0.45	2.99	9	1
1:A:170:LYS:CB	1:A:180:ASP:CB	0.45	2.94	5	3
1:A:170:LYS:N	1:A:176:TYR:HB2	0.45	2.27	8	1
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:CD1	0.45	2.69	8	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG12	0.45	2.46	8	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.45	2.26	7	3
1:A:55:ASP:HA	1:A:269:ALA:HB1	0.45	1.88	2	1
1:A:160:LEU:CD2	1:A:250:PHE:CE2	0.45	2.98	6	1
1:A:189:LYS:HG2	1:A:357:VAL:HG23	0.45	1.88	6	1
1:A:226:ILE:HG21	1:A:247:LEU:HD11	0.45	1.88	6	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:CA	0.45	2.65	3	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HA	0.45	1.86	10	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:108:ILE:HG22	0.45	2.46	9	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:O	0.45	2.11	9	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:CD1	0.45	2.99	9	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:N	0.45	2.50	8	1
1:A:346:ALA:O	1:A:349:ASN:HB2	0.45	2.12	8	1
1:A:148:MET:CG	1:A:222:THR:HG21	0.45	2.41	5	2
1:A:343:VAL:CG2	1:A:347:VAL:CG2	0.45	2.94	4	1
1:A:10:TRP:O	1:A:10:TRP:CG	0.45	2.66	2	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:302:VAL:HB	0.45	1.88	2	1
1:A:169:PHE:CD2	1:A:181:VAL:CG1	0.45	2.99	6	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:325:GLN:CG	0.45	2.99	6	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:360:ALA:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:94:TRP:CD1	0.45	2.47	10	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:261:VAL:HG21	0.45	1.89	5	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:CG1	0.45	2.94	9	3
1:A:348:ILE:CG2	1:A:349:ASN:N	0.45	2.80	6	3
1:A:170:LYS:HD3	1:A:180:ASP:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:CD1	0.45	2.35	4	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:67:PHE:HZ	0.45	1.71	1	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:71:ALA:CB	0.45	3.00	3	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:CG1	0.45	2.65	5	3
1:A:192:LEU:HD11	1:A:347:VAL:HG11	0.45	1.87	5	1
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:CD1	0.45	2.65	5	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:244:VAL:HG12	0.45	1.89	8	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:O	0.45	2.65	8	1
1:A:275:LEU:O	1:A:279:PHE:HB2	0.45	2.12	8	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:224:MET:CE	0.45	3.00	4	1
1:A:28:GLU:CB	1:A:33:ILE:O	0.45	2.65	3	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB3	0.45	2.11	5	2
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:OG1	0.45	2.35	3	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:104:ILE:O	0.45	2.70	3	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:250:PHE:CE2	0.45	3.04	7	1
1:A:169:PHE:CE2	1:A:336:MET:HE1	0.45	2.46	9	1
1:A:17:TYR:CD1	1:A:18:ASN:N	0.45	2.85	9	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HA	0.45	1.89	9	1
1:A:184:ASP:HB3	1:A:361:LEU:HG	0.45	1.89	4	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:CG2	0.45	2.99	4	1
1:A:293:VAL:O	1:A:296:ASP:N	0.45	2.50	10	3
1:A:114:SER:O	1:A:227:ASN:O	0.45	2.35	2	2
1:A:9:ILE:HG21	1:A:61:PHE:CE1	0.45	2.46	2	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:232:TRP:CZ3	0.45	2.99	6	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.45	2.47	1	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:CG2	0.45	2.65	5	1
1:A:333:ILE:HB	1:A:334:PRO:HD2	0.45	1.88	9	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:CG1	0.45	2.99	8	1
1:A:362:LYS:O	1:A:365:GLN:CG	0.45	2.65	8	2
1:A:17:TYR:CZ	1:A:37:VAL:CG2	0.45	3.00	4	1
1:A:355:GLN:OE1	1:A:357:VAL:HG23	0.45	2.12	4	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.45	2.95	7	3
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:CG1	0.45	2.65	2	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:208:THR:N	0.45	2.27	7	1
1:A:121:LEU:HD22	1:A:121:LEU:C	0.45	2.32	5	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:324:ALA:CB	0.45	2.95	5	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:HB2	0.44	2.12	9	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:228:GLY:HA2	0.44	1.89	9	1
1:A:357:VAL:HG13	1:A:358:ASP:N	0.44	2.27	9	3
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:N	0.44	2.26	9	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:280:LEU:O	0.44	2.12	4	1
1:A:235:ILE:CD1	1:A:235:ILE:N	0.44	2.80	2	1
1:A:76:LEU:HD21	1:A:265:GLY:HA3	0.44	1.89	2	1
1:A:73:SER:HB3	1:A:75:LEU:HD23	0.44	1.89	2	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HG	0.44	2.12	1	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:TRP:CD1	0.44	3.00	1	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:230:TRP:CZ2	0.44	3.00	9	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:CB	0.44	2.95	9	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD23	0.44	2.33	8	1
1:A:117:TYR:CE2	1:A:243:GLY:HA3	0.44	2.48	8	1
1:A:155:TYR:C	1:A:258:PHE:CE1	0.44	2.90	6	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG22	0.44	1.88	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:67:PHE:HA	0.44	2.48	10	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HG	0.44	2.43	5	1
1:A:61:PHE:CG	1:A:263:SER:O	0.44	2.70	5	1
1:A:203:HIS:O	1:A:205:ASN:N	0.44	2.50	9	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:C	0.44	2.33	8	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:275:LEU:HD21	0.44	2.42	4	2
1:A:158:TRP:CH2	1:A:343:VAL:CG2	0.44	3.01	2	1
1:A:176:TYR:CD1	1:A:177:ASP:N	0.44	2.85	1	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:CB	0.44	2.92	3	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:156:PHE:CG	0.44	2.47	5	1
1:A:168:ALA:CA	1:A:183:VAL:HG12	0.44	2.39	5	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:75:LEU:HD11	0.44	2.42	5	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CE1	0.44	2.47	9	2
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:CB	0.44	2.66	9	1
1:A:154:PRO:CB	1:A:340:TRP:CZ2	0.44	3.00	8	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:HG13	0.44	2.42	4	1
1:A:323:ASN:O	1:A:327:GLY:N	0.44	2.51	6	2
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.44	2.12	6	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:HG2	0.44	2.48	6	1
1:A:250:PHE:O	1:A:253:GLN:N	0.44	2.50	1	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:108:ILE:HB	0.44	2.48	1	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:HG23	0.44	1.88	3	1
1:A:94:TRP:O	1:A:98:ARG:HB2	0.44	2.12	7	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:224:MET:HE1	0.44	1.89	5	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	0.44	1.90	9	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:48:PRO:HD3	0.44	2.42	1	3
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HB	0.44	2.13	5	3
1:A:115:LEU:HD12	1:A:226:ILE:CG2	0.44	2.43	2	1
1:A:131:GLU:O	1:A:134:ALA:N	0.44	2.51	2	3
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CE2	0.44	2.48	6	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:HA2	0.44	2.12	3	1
1:A:111:GLU:HA	1:A:320:THR:CG2	0.44	2.43	10	1
1:A:120:ASP:OD2	1:A:240:VAL:HG13	0.44	2.13	5	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CG	0.44	2.65	5	1
1:A:293:VAL:CA	1:A:298:PRO:HD3	0.44	2.43	4	1
1:A:53:THR:O	1:A:55:ASP:N	0.44	2.51	4	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CG	0.44	2.43	1	1
1:A:342:ALA:CB	1:A:361:LEU:HD22	0.44	2.42	1	1
1:A:88:LYS:CB	1:A:304:LEU:HD11	0.44	2.39	3	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HD23	0.44	1.87	7	1
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:HB2	0.44	2.12	9	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:227:ASN:HB2	1:A:235:ILE:HD12	0.44	1.88	8	1
1:A:112:ALA:N	1:A:320:THR:HG22	0.44	2.27	8	1
1:A:205:ASN:O	1:A:206:ALA:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:N	0.44	2.27	4	1
1:A:10:TRP:O	1:A:11:ILE:HG13	0.44	2.13	2	1
1:A:117:TYR:CE2	1:A:245:THR:HG23	0.44	2.47	2	1
1:A:355:GLN:HB3	1:A:360:ALA:CB	0.44	2.40	2	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:HB2	0.44	2.47	2	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:339:PHE:CZ	0.44	3.01	1	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HB3	0.44	1.88	3	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:94:TRP:HZ2	0.44	1.67	10	1
1:A:121:LEU:CD2	1:A:121:LEU:O	0.44	2.65	5	1
1:A:225:THR:HG21	1:A:236:ASP:OD1	0.44	2.12	9	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CB	0.44	2.41	9	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:116:ILE:C	0.44	2.32	4	1
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.44	2.86	4	5
1:A:79:ILE:CG2	1:A:106:TYR:CE1	0.44	3.01	4	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:335:GLN:CB	0.44	2.43	2	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:HB2	0.44	2.47	2	1
1:A:93:THR:CB	1:A:94:TRP:CZ3	0.44	3.01	1	1
1:A:117:TYR:CG	1:A:124:ASN:OD1	0.44	2.71	10	1
1:A:194:PHE:CD1	1:A:194:PHE:C	0.44	2.90	7	1
1:A:257:PRO:O	1:A:327:GLY:HA2	0.44	2.13	7	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:N	0.44	2.51	7	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:76:LEU:CD2	0.44	3.01	7	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:CD1	0.44	2.43	7	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:105:ALA:HB3	0.44	1.88	9	1
1:A:70:TYR:HB2	1:A:76:LEU:HD12	0.44	1.90	8	1
1:A:86:GLN:HG2	1:A:94:TRP:CD1	0.44	2.48	8	1
1:A:159:PRO:HB3	1:A:256:LYS:O	0.44	2.13	2	3
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:N	0.44	2.48	2	2
1:A:89:LEU:HA	1:A:304:LEU:HA	0.44	1.89	4	1
1:A:4:GLU:HG3	1:A:275:LEU:HD12	0.44	1.89	2	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HA	0.44	2.13	6	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HG22	0.44	1.90	1	1
1:A:294:ASN:CB	1:A:307:TYR:CE2	0.44	3.01	3	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:104:ILE:O	0.44	2.71	3	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:91:PRO:CD	0.44	2.95	3	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:CG	0.44	2.66	10	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:CD1	0.44	2.99	7	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA3	0.44	2.48	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:HIS:HA	1:A:67:PHE:HB2	0.44	1.90	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:GLU:CG	0.43	2.66	9	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:304:LEU:HD13	0.43	1.89	9	1
1:A:178:ILE:O	1:A:369:THR:HG22	0.43	2.12	9	1
1:A:42:LYS:O	1:A:43:LEU:C	0.43	2.56	9	3
1:A:129:TRP:CH2	1:A:224:MET:HE1	0.43	2.47	4	1
1:A:290:LEU:HB3	1:A:307:TYR:CD1	0.43	2.48	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:58:ASP:HB2	0.43	1.88	4	1
1:A:8:VAL:N	1:A:58:ASP:HB2	0.43	2.28	10	2
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB3	0.43	2.12	2	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:59:ILE:HD12	0.43	1.90	2	1
1:A:92:PHE:CD1	1:A:93:THR:N	0.43	2.85	2	1
1:A:178:ILE:CG1	1:A:369:THR:HA	0.43	2.43	1	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:123:PRO:O	0.43	2.13	3	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:CG	0.43	2.48	3	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HB	0.43	1.89	10	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:153:GLU:OE1	0.43	2.12	7	1
1:A:257:PRO:O	1:A:327:GLY:CA	0.43	2.66	5	2
1:A:170:LYS:N	1:A:176:TYR:HB3	0.43	2.28	5	1
1:A:33:ILE:HG22	1:A:33:ILE:O	0.43	2.13	9	1
1:A:182:GLY:O	1:A:185:ASN:ND2	0.43	2.50	7	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:324:ALA:HB2	0.43	1.89	4	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:280:LEU:C	0.43	2.33	4	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:N	0.43	2.52	5	3
1:A:230:TRP:CD1	1:A:230:TRP:C	0.43	2.92	6	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HB	0.43	2.13	6	2
1:A:170:LYS:O	1:A:176:TYR:CB	0.43	2.65	3	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:176:TYR:CD2	0.43	3.06	3	1
1:A:112:ALA:O	1:A:229:PRO:CD	0.43	2.66	10	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:CG1	0.43	2.66	10	1
1:A:274:GLU:O	1:A:278:GLU:CB	0.43	2.66	9	3
1:A:293:VAL:C	1:A:298:PRO:HD3	0.43	2.34	4	1
1:A:17:TYR:CZ	1:A:37:VAL:HG21	0.43	2.48	4	1
1:A:356:THR:HB	1:A:359:GLU:CB	0.43	2.43	7	2
1:A:116:ILE:HD12	1:A:243:GLY:O	0.43	2.14	6	2
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HB	0.43	1.91	5	3
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:CG2	0.43	2.81	5	1
1:A:283:TYR:O	1:A:284:LEU:C	0.43	2.56	3	5
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:CD2	0.43	2.43	8	1
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CD1	0.43	3.01	8	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:CB	0.43	2.97	8	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:CG	0.43	2.67	2	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:O	0.43	2.71	1	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD12	0.43	1.90	3	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:CA	0.43	2.44	9	1
1:A:176:TYR:CD1	1:A:176:TYR:C	0.43	2.90	8	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:321:MET:HA	0.43	1.88	8	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CD1	0.43	2.49	8	1
1:A:276:ALA:HB1	1:A:280:LEU:HD13	0.43	1.90	2	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:CG1	0.43	3.01	2	1
1:A:176:TYR:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.43	2.48	1	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:CG2	0.43	2.66	3	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:317:ILE:HD11	0.43	2.44	3	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:61:PHE:CZ	1:A:108:ILE:HD11	0.43	2.48	5	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CG	0.43	2.48	9	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:N	0.43	2.52	9	4
1:A:347:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD11	0.43	1.90	9	1
1:A:357:VAL:HG23	1:A:361:LEU:HD12	0.43	1.91	9	1
1:A:178:ILE:O	1:A:181:VAL:CG2	0.43	2.67	8	1
1:A:62:TRP:O	1:A:63:ALA:C	0.43	2.57	8	1
1:A:240:VAL:O	1:A:242:TYR:CD2	0.43	2.72	4	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CD1	0.43	2.97	1	1
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HB2	0.43	1.88	1	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.43	2.48	1	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:CG1	0.43	2.44	1	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HD23	0.43	2.14	3	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CZ3	0.43	2.60	3	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:96:ALA:O	0.43	2.71	10	1
1:A:239:LYS:O	1:A:242:TYR:CZ	0.43	2.71	4	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:311:LEU:HD22	0.43	2.43	4	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:104:ILE:HD13	0.43	2.42	2	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:HA3	0.43	1.90	2	1
1:A:161:ILE:HB	1:A:191:GLY:HA3	0.43	1.91	2	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CB	0.43	2.43	2	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:62:TRP:CZ2	0.43	3.02	2	1
1:A:11:ILE:N	1:A:11:ILE:CD1	0.43	2.80	10	1
1:A:249:THR:C	1:A:250:PHE:CG	0.43	2.92	7	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:CD1	0.43	2.82	7	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:CB	0.43	2.43	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:PHE:HB2	1:A:33:ILE:HB	0.43	1.89	10	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:CA	0.43	2.44	8	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD21	0.43	2.48	8	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG13	0.43	1.91	4	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:188:ALA:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:304:LEU:HD22	0.43	1.88	2	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:HA2	0.43	2.48	6	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:208:THR:HB	0.43	1.90	1	1
1:A:181:VAL:HG11	1:A:339:PHE:CZ	0.43	2.48	1	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD23	0.43	2.28	3	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:HA3	0.43	2.49	7	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:60:ILE:HG21	0.43	2.48	9	1
1:A:105:ALA:CB	1:A:265:GLY:CA	0.43	2.96	8	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:HB2	0.43	2.14	4	1
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:CB	0.43	2.66	2	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG21	0.43	1.91	2	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CB	0.43	2.95	1	2
1:A:114:SER:C	1:A:226:ILE:CD1	0.43	2.88	1	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HD12	0.43	1.91	7	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG12	0.43	2.13	5	1
1:A:226:ILE:HD12	1:A:226:ILE:N	0.43	2.28	5	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:HG2	0.43	2.14	9	1
1:A:61:PHE:HA	1:A:264:ALA:HA	0.43	1.91	6	2
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HG	0.43	2.14	4	1
1:A:184:ASP:HB2	1:A:361:LEU:CD2	0.43	2.39	4	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:HG13	0.43	1.89	4	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:365:GLN:CG	0.43	2.97	5	2
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CE2	0.43	2.49	7	1
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:ALA:HB3	0.43	2.14	7	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CB	0.42	2.44	9	1
1:A:366:THR:O	1:A:370:LYS:N	0.42	2.50	8	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:N	0.42	2.50	2	3
1:A:293:VAL:CG1	1:A:294:ASN:N	0.42	2.82	4	1
1:A:156:PHE:HB3	1:A:226:ILE:HD12	0.42	1.91	2	1
1:A:181:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HB2	0.42	1.90	3	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:238:SER:HB3	0.42	1.90	3	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:124:ASN:CG	0.42	2.93	10	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:302:VAL:HG11	0.42	1.87	5	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:188:ALA:HA	0.42	2.44	9	1
1:A:112:ALA:O	1:A:228:GLY:HA3	0.42	2.14	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:HD21	0.42	1.91	4	1
1:A:160:LEU:CB	1:A:250:PHE:CE2	0.42	3.02	2	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:150:ASN:O	0.42	2.73	6	1
1:A:110:VAL:O	1:A:320:THR:CG2	0.42	2.67	1	2
1:A:93:THR:HB	1:A:94:TRP:CE3	0.42	2.49	1	1
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:CB	0.42	2.64	7	2
1:A:317:ILE:CD1	1:A:318:ALA:N	0.42	2.81	5	1
1:A:146:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.91	9	1
1:A:232:TRP:O	1:A:234:ASN:N	0.42	2.52	9	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:285:LEU:CD2	0.42	2.99	9	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:94:TRP:CZ2	0.42	2.99	9	1
1:A:94:TRP:CZ3	1:A:107:PRO:HD3	0.42	2.49	4	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:CD1	0.42	2.63	4	1
1:A:38:GLU:C	1:A:40:PRO:HD3	0.42	2.35	2	1
1:A:283:TYR:O	1:A:285:LEU:N	0.42	2.52	3	2
1:A:162:ALA:CB	1:A:256:LYS:HB2	0.42	2.44	6	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:CB	0.42	2.97	6	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:336:MET:H	0.42	1.73	10	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:207:ASP:HA	0.42	2.43	7	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:250:PHE:CD1	0.42	2.50	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:191:GLY:HA2	1:A:194:PHE:CE2	0.42	2.49	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:CG1	0.42	2.97	8	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:64:HIS:O	0.42	2.72	6	2
1:A:155:TYR:HA	1:A:258:PHE:CD1	0.42	2.49	1	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:NE2	0.42	2.87	1	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CG1	0.42	3.02	3	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:CG2	0.42	2.97	3	1
1:A:329:ILE:O	1:A:331:PRO:CD	0.42	2.68	10	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.42	1.91	7	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:265:GLY:O	0.42	2.15	7	1
1:A:126:PRO:CG	1:A:135:LEU:HD13	0.42	2.44	5	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:198:LEU:HD21	0.42	2.41	5	1
1:A:262:LEU:N	1:A:262:LEU:CD2	0.42	2.82	5	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HB	0.42	2.14	9	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG13	0.42	2.42	4	1
1:A:369:THR:OG1	1:A:369:THR:O	0.42	2.38	4	1
1:A:257:PRO:O	1:A:328:GLU:N	0.42	2.50	6	1
1:A:349:ASN:OD1	1:A:356:THR:N	0.42	2.53	1	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.42	2.30	1	1

*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:CG	0.42	2.42	3	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HG12	0.42	2.14	10	1
1:A:10:TRP:C	1:A:10:TRP:CE3	0.42	2.93	5	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:CB	0.42	2.97	5	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:339:PHE:CE2	0.42	2.49	9	1
1:A:42:LYS:O	1:A:45:GLU:N	0.42	2.53	4	3
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:HA	0.42	1.91	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD23	0.42	2.45	4	1
1:A:62:TRP:CE3	1:A:263:SER:O	0.42	2.72	2	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:320:THR:O	0.42	2.13	10	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:229:PRO:HG3	0.42	1.90	7	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:CD	0.42	2.83	7	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:303:ALA:CB	0.42	2.98	7	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:58:ASP:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD23	0.42	2.35	9	2
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG13	0.42	1.92	4	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD1	0.42	2.15	6	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:361:LEU:HG	0.42	1.91	6	1
1:A:302:VAL:HA	1:A:311:LEU:HD21	0.42	1.92	10	1
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.49	7	1
1:A:330:MET:N	1:A:331:PRO:CD	0.42	2.83	5	1
1:A:176:TYR:O	1:A:177:ASP:HB2	0.42	2.15	9	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:CA	0.42	2.45	9	1
1:A:352:SER:C	1:A:354:ARG:N	0.42	2.73	8	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:279:PHE:CB	0.42	3.02	4	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:256:LYS:CB	0.42	2.95	2	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:265:GLY:O	0.42	2.14	6	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:320:THR:CG2	0.42	2.44	1	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.42	2.45	1	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB3	0.42	2.15	1	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.50	3	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:147:LEU:N	0.42	2.83	7	1
1:A:154:PRO:O	1:A:158:TRP:CG	0.42	2.73	7	1
1:A:99:TYR:O	1:A:102:LYS:N	0.42	2.53	7	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:76:LEU:HD11	0.42	2.42	5	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.42	2.13	9	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:HB3	0.42	2.44	9	2
1:A:44:GLU:HG2	1:A:70:TYR:CE1	0.42	2.50	8	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:CG	0.42	2.72	8	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:149:PHE:HE2	0.42	1.72	4	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TRP:CZ2	0.42	2.50	2	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:CG	0.42	3.03	6	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:CD	0.42	2.45	1	1
1:A:226:ILE:CD1	1:A:247:LEU:CD1	0.42	2.98	1	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:250:PHE:CD2	0.42	3.03	10	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:CB	0.42	2.45	10	2
1:A:149:PHE:CD1	1:A:226:ILE:HG12	0.42	2.49	7	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.50	7	1
1:A:192:LEU:HD11	1:A:347:VAL:CG1	0.42	2.45	5	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:CG	0.42	2.68	8	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.45	4	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:HG21	0.42	2.50	4	1
1:A:330:MET:HE3	1:A:336:MET:HE1	0.42	1.92	2	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:58:ASP:OD2	0.42	2.73	1	1
1:A:108:ILE:HA	1:A:302:VAL:O	0.42	2.15	1	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CB	0.42	2.41	3	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HB2	0.42	1.91	3	1
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:CD1	0.42	2.83	10	1
1:A:167:TYR:O	1:A:183:VAL:CA	0.42	2.68	10	1
1:A:339:PHE:CE2	1:A:368:ILE:HD12	0.42	2.50	10	1
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:N	0.41	2.53	9	2
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:HA2	0.41	1.92	8	1
1:A:39:HIS:CD2	1:A:39:HIS:O	0.41	2.73	8	2
1:A:44:GLU:CG	1:A:70:TYR:OH	0.41	2.67	8	1
1:A:124:ASN:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.41	1.92	1	2
1:A:184:ASP:OD2	1:A:357:VAL:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:307:TYR:OH	0.41	2.14	4	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG23	0.41	2.45	4	1
1:A:183:VAL:O	1:A:185:ASN:N	0.41	2.48	2	1
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:N	0.41	2.53	2	2
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:355:GLN:O	1:A:355:GLN:OE1	0.41	2.38	6	1
1:A:342:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG22	0.41	2.45	6	1
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:CB	0.41	2.45	1	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:62:TRP:HZ3	0.41	1.75	3	1
1:A:158:TRP:HB2	1:A:159:PRO:HD3	0.41	1.90	10	1
1:A:131:GLU:C	1:A:133:PRO:HD2	0.41	2.35	7	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:148:MET:HB2	1:A:222:THR:CG2	0.41	2.41	5	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HA	0.41	1.91	5	1
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:CG	0.41	2.68	8	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:C	0.41	2.35	4	1
1:A:155:TYR:HB3	1:A:258:PHE:CD1	0.41	2.50	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:ND2	0.41	2.30	6	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:89:LEU:HD21	0.41	1.92	6	1
1:A:361:LEU:C	1:A:361:LEU:HD13	0.41	2.35	1	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:122:LEU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:HG22	0.41	2.14	3	1
1:A:59:ILE:HD12	1:A:264:ALA:HB1	0.41	1.89	10	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:282:ASN:O	1:A:286:THR:CG2	0.41	2.68	7	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:199:ILE:HG22	1:A:204:MET:HA	0.41	1.91	9	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HB2	0.41	2.14	4	1
1:A:350:ALA:CB	1:A:355:GLN:HA	0.41	2.45	4	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:106:TYR:CE1	0.41	2.51	4	1
1:A:117:TYR:CD2	1:A:243:GLY:O	0.41	2.73	2	1
1:A:4:GLU:HG2	1:A:275:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:62:TRP:C	1:A:62:TRP:CD1	0.41	2.93	1	2
1:A:192:LEU:HD13	1:A:347:VAL:HG13	0.41	1.90	3	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:111:GLU:CB	1:A:229:PRO:CG	0.41	2.98	7	1
1:A:126:PRO:CA	1:A:135:LEU:HD13	0.41	2.45	5	1
1:A:169:PHE:CE2	1:A:336:MET:HE3	0.41	2.50	5	1
1:A:311:LEU:CD2	1:A:317:ILE:HG21	0.41	2.38	5	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:147:LEU:CD2	0.41	2.46	9	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:324:ALA:CB	0.41	2.98	8	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:223:ALA:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:60:ILE:HG12	0.41	2.50	1	1
1:A:156:PHE:HE2	1:A:227:ASN:HA	0.41	1.74	3	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:CG2	0.41	2.68	3	1
1:A:77:ALA:O	1:A:79:ILE:HD13	0.41	2.16	7	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HD12	0.41	1.90	5	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:117:TYR:CE2	0.41	3.03	5	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HB3	0.41	1.92	5	1
1:A:293:VAL:HG22	1:A:297:LYS:HB3	0.41	1.92	4	1
1:A:340:TRP:O	1:A:344:ARG:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:331:PRO:HG2	0.41	2.49	1	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CG2	0.41	2.69	6	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:CD2	0.41	3.04	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:342:ALA:CB	1:A:361:LEU:CD2	0.41	2.98	1	1
1:A:155:TYR:C	1:A:159:PRO:HD3	0.41	2.33	3	1
1:A:266:ILE:CG2	1:A:271:PRO:CD	0.41	2.97	3	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:CA	0.41	2.45	10	1
1:A:356:THR:N	1:A:360:ALA:HB2	0.41	2.30	10	1
1:A:149:PHE:CG	1:A:226:ILE:CG1	0.41	3.04	7	1
1:A:154:PRO:CB	1:A:158:TRP:CD1	0.41	3.03	7	1
1:A:271:PRO:O	1:A:272:ASN:CB	0.41	2.69	7	1
1:A:96:ALA:CA	1:A:329:ILE:HD12	0.41	2.45	7	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:CD1	0.41	2.82	7	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:CG	0.41	2.68	8	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:299:LEU:HD12	0.41	2.45	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:67:PHE:CE1	0.41	3.03	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:192:LEU:CA	0.41	2.45	4	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:275:LEU:CD2	0.41	2.45	4	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:67:PHE:CZ	0.41	2.50	4	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:158:TRP:CE3	0.41	2.51	2	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:HA	0.41	2.50	2	1
1:A:129:TRP:HB2	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.51	6	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HG23	0.41	2.50	1	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:331:PRO:HG2	0.41	2.50	1	1
1:A:183:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HB3	0.41	1.91	3	1
1:A:242:TYR:CD1	1:A:242:TYR:O	0.41	2.74	3	1
1:A:183:VAL:HG13	1:A:184:ASP:N	0.41	2.31	10	1
1:A:144:LYS:CB	1:A:221:GLU:O	0.41	2.66	10	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:CD1	0.41	2.69	7	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HG22	0.41	2.14	5	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:O	0.41	2.74	5	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:230:TRP:CH2	0.41	2.51	9	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:103:LEU:CD1	0.41	2.45	9	1
1:A:170:LYS:CD	1:A:180:ASP:CB	0.41	2.98	8	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:279:PHE:CZ	0.41	3.02	8	1
1:A:176:TYR:CD2	1:A:331:PRO:HG3	0.41	2.51	8	1
1:A:154:PRO:HB2	1:A:340:TRP:CZ2	0.41	2.51	8	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:132:ILE:HD12	1:A:133:PRO:HD3	0.41	1.93	4	1
1:A:160:LEU:HB2	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.51	2	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HD11	0.41	1.93	2	1
1:A:48:PRO:CB	1:A:75:LEU:CD1	0.41	2.98	2	1
1:A:155:TYR:HB3	1:A:258:PHE:CG	0.41	2.51	6	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:91:PRO:HD2	0.41	2.51	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:CG1	1:A:324:ALA:HA	0.41	2.45	3	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG23	0.41	2.16	3	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG13	0.41	1.88	10	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:HB3	0.41	2.46	5	1
1:A:281:GLU:HA	1:A:285:LEU:HB2	0.41	1.93	8	1
1:A:5:GLY:CA	1:A:32:GLY:O	0.41	2.69	8	1
1:A:114:SER:N	1:A:227:ASN:O	0.41	2.53	4	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB3	0.41	2.15	4	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:259:VAL:CG1	0.41	2.99	6	1
1:A:45:GLU:C	1:A:48:PRO:HD2	0.41	2.35	6	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:C	0.41	2.36	6	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CE2	0.41	2.51	1	1
1:A:94:TRP:CD2	1:A:94:TRP:N	0.41	2.89	1	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:ALA:H	0.41	1.75	3	1
1:A:293:VAL:O	1:A:297:LYS:N	0.41	2.41	10	1
1:A:283:TYR:OH	1:A:293:VAL:CG2	0.41	2.69	7	1
1:A:286:THR:N	1:A:307:TYR:OH	0.41	2.54	7	1
1:A:113:LEU:O	1:A:323:ASN:ND2	0.41	2.54	7	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:247:LEU:HD21	0.41	2.46	5	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:156:PHE:HB2	0.41	2.45	5	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:325:GLN:OE1	0.41	2.74	5	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:CD1	0.41	2.98	5	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:75:LEU:CD1	0.41	2.98	5	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:CB	0.41	2.99	5	1
1:A:153:GLU:OE1	1:A:232:TRP:CZ2	0.41	2.73	9	1
1:A:291:GLU:OE2	1:A:307:TYR:CZ	0.41	2.74	9	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:304:LEU:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:222:THR:O	0.41	2.16	8	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:CG2	0.41	2.46	8	1
1:A:229:PRO:HG3	1:A:320:THR:HG21	0.41	1.92	8	1
1:A:69:GLY:N	1:A:332:ASN:OD1	0.41	2.54	8	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:303:ALA:O	0.41	2.69	4	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:307:TYR:CD2	0.41	2.95	4	1
1:A:62:TRP:HE3	1:A:62:TRP:O	0.41	1.99	2	1
1:A:67:PHE:HE1	1:A:76:LEU:HD22	0.41	1.72	2	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:11:ILE:HD11	0.41	1.92	2	1
1:A:247:LEU:CB	1:A:255:SER:OG	0.41	2.69	3	1
1:A:297:LYS:HD2	1:A:301:ALA:HB2	0.41	1.93	3	1
1:A:72:GLN:OE1	1:A:99:TYR:CZ	0.41	2.74	3	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CD2	0.41	2.74	3	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:61:PHE:HB2	0.41	1.92	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:PHE:HE2	1:A:76:LEU:HD23	0.41	1.72	7	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:229:PRO:CG	0.41	2.99	7	1
1:A:362:LYS:CG	1:A:363:ASP:N	0.41	2.84	5	1
1:A:312:ALA:CA	1:A:317:ILE:HD11	0.41	2.40	9	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:307:TYR:OH	1:A:311:LEU:CD1	0.41	2.69	8	1
1:A:112:ALA:O	1:A:228:GLY:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:238:SER:O	1:A:242:TYR:CE1	0.41	2.74	4	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:66:ARG:HB2	0.41	2.51	4	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:CA	0.41	2.46	2	1
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:CG1	0.41	2.68	6	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CH2	0.41	2.51	6	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:HG3	0.41	1.91	6	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:38:GLU:HB3	0.41	2.51	1	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG13	0.41	1.91	1	1
1:A:48:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE1	0.41	2.50	1	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:159:PRO:CG	0.41	2.99	10	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:250:PHE:HB2	0.41	2.46	10	1
1:A:348:ILE:O	1:A:352:SER:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:O	0.41	2.16	7	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CE1	0.40	2.51	8	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HG22	0.40	2.51	4	1
1:A:30:ASP:C	1:A:31:THR:OG1	0.40	2.59	4	2
1:A:181:VAL:HG23	1:A:365:GLN:CG	0.40	2.45	2	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HB2	0.40	2.16	2	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:226:ILE:HG13	0.40	1.92	1	1
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:ND1	0.40	2.54	1	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HB2	0.40	2.47	3	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:267:ASN:CG	0.40	2.95	3	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:HG12	0.40	1.92	7	1
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:HA	0.40	2.16	7	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:CB	0.40	2.46	5	1
1:A:204:MET:O	1:A:204:MET:CG	0.40	2.69	5	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:N	0.40	2.54	5	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:HB2	0.40	1.93	5	1
1:A:71:ALA:CA	1:A:76:LEU:HB2	0.40	2.46	5	1
1:A:237:THR:O	1:A:237:THR:HG22	0.40	2.15	9	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD11	0.40	1.87	9	1
1:A:53:THR:O	1:A:53:THR:CG2	0.40	2.69	8	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:248:PRO:CD	0.40	2.46	4	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:266:ILE:HA	0.40	1.92	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ILE:C	1:A:33:ILE:HD13	0.40	2.36	3	1
1:A:44:GLU:HB3	1:A:62:TRP:CZ2	0.40	2.51	3	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:HG23	0.40	1.91	10	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:HB2	0.40	2.16	7	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:CG1	0.40	2.45	7	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:O	0.40	2.69	5	1
1:A:112:ALA:N	1:A:320:THR:CG2	0.40	2.84	5	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:CD	0.40	2.47	5	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:CB	0.40	2.70	5	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:280:LEU:CD1	0.40	2.99	9	1
1:A:153:GLU:OE1	1:A:232:TRP:CH2	0.40	2.75	9	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:279:PHE:CD1	0.40	3.09	9	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:62:TRP:CZ3	0.40	2.74	8	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:CG	0.40	2.43	8	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CD1	0.40	3.05	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:192:LEU:N	0.40	2.31	4	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:HB2	0.40	2.51	4	1
1:A:163:ALA:O	1:A:253:GLN:OE1	0.40	2.39	2	1
1:A:70:TYR:HB3	1:A:76:LEU:HD12	0.40	1.92	2	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:354:ARG:HG2	0.40	1.93	6	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:C	0.40	2.60	1	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:226:ILE:HD12	0.40	2.51	3	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:N	0.40	2.53	5	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:CD2	0.40	3.00	8	1
1:A:255:SER:O	1:A:257:PRO:HD3	0.40	2.16	2	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.40	2.45	6	1
1:A:257:PRO:HB2	1:A:327:GLY:CA	0.40	2.47	6	1
1:A:7:LEU:HD11	1:A:279:PHE:CE1	0.40	2.52	6	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:320:THR:HG22	0.40	1.94	1	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:60:ILE:CG2	0.40	3.00	1	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG13	0.40	2.16	3	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.40	2.46	3	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:HA3	0.40	2.47	10	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:C	0.40	2.60	7	1
1:A:155:TYR:CD1	1:A:258:PHE:CB	0.40	3.04	5	1
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:C	0.40	2.59	5	1
1:A:291:GLU:CG	1:A:307:TYR:OH	0.40	2.69	5	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:230:TRP:CZ2	0.40	2.51	9	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:94:TRP:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:59:ILE:CD1	0.40	2.46	2	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:HG2	0.40	2.51	6	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:TYR:CE2	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	1	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:284:LEU:HD13	0.40	2.46	1	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:243:GLY:O	0.40	2.17	3	1
1:A:303:ALA:O	1:A:308:GLU:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:104:ILE:CG2	0.40	2.47	7	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:CG	0.40	2.69	5	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:302:VAL:CG1	0.40	2.45	5	1
1:A:12:ASN:HA	1:A:40:PRO:CG	0.40	2.46	5	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	367/370 (99%)	281±4 (76±1%)	53±6 (15±2%)	33±5 (9±1%)	2	12
All	All	3670/3700 (99%)	2805 (76%)	534 (15%)	331 (9%)	2	12

All 89 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	105	ALA	10
1	A	178	ILE	10
1	A	108	ILE	10
1	A	15	LYS	10
1	A	150	ASN	10
1	A	143	GLY	10
1	A	154	PRO	9
1	A	31	THR	9
1	A	32	GLY	9
1	A	155	TYR	9
1	A	43	LEU	8
1	A	177	ASP	8
1	A	356	THR	8
1	A	126	PRO	7

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	168	ALA	7
1	A	298	PRO	7
1	A	224	MET	7
1	A	100	ASN	7
1	A	173	ASN	6
1	A	58	ASP	6
1	A	55	ASP	6
1	A	304	LEU	6
1	A	165	GLY	5
1	A	272	ASN	5
1	A	152	GLN	5
1	A	202	LYS	4
1	A	174	GLY	4
1	A	109	ALA	4
1	A	63	ALA	4
1	A	151	LEU	4
1	A	240	VAL	4
1	A	230	TRP	4
1	A	54	GLY	4
1	A	301	ALA	4
1	A	57	PRO	4
1	A	74	GLY	4
1	A	331	PRO	4
1	A	103	LEU	4
1	A	302	VAL	3
1	A	121	LEU	3
1	A	299	LEU	3
1	A	120	ASP	3
1	A	75	LEU	3
1	A	303	ALA	3
1	A	284	LEU	3
1	A	236	ASP	3
1	A	239	LYS	3
1	A	332	ASN	3
1	A	270	SER	3
1	A	78	GLU	3
1	A	235	ILE	2
1	A	123	PRO	2
1	A	233	SER	2
1	A	313	LYS	2
1	A	204	MET	2
1	A	248	PRO	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	271	PRO	2
1	A	315	PRO	2
1	A	56	GLY	2
1	A	251	LYS	2
1	A	267	ASN	1
1	A	184	ASP	1
1	A	238	SER	1
1	A	296	ASP	1
1	A	81	PRO	1
1	A	355	GLN	1
1	A	335	GLN	1
1	A	312	ALA	1
1	A	79	ILE	1
1	A	229	PRO	1
1	A	53	THR	1
1	A	234	ASN	1
1	A	13	GLY	1
1	A	40	PRO	1
1	A	329	ILE	1
1	A	255	SER	1
1	A	269	ALA	1
1	A	330	MET	1
1	A	294	ASN	1
1	A	41	ASP	1
1	A	297	LYS	1
1	A	206	ALA	1
1	A	305	LYS	1
1	A	119	LYS	1
1	A	268	ALA	1
1	A	237	THR	1
1	A	163	ALA	1
1	A	104	ILE	1
1	A	223	ALA	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	295/297 (99%)	212±6 (72±2%)	83±6 (28±2%)	2	20
All	All	2950/2970 (99%)	2122 (72%)	828 (28%)	2	20

All 241 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	103	LEU	10
1	A	245	THR	9
1	A	7	LEU	9
1	A	139	LEU	9
1	A	170	LYS	8
1	A	219	LYS	8
1	A	42	LYS	8
1	A	261	VAL	8
1	A	114	SER	8
1	A	356	THR	8
1	A	305	LYS	8
1	A	239	LYS	8
1	A	98	ARG	7
1	A	121	LEU	7
1	A	83	LYS	7
1	A	137	LYS	7
1	A	25	LYS	7
1	A	89	LEU	7
1	A	31	THR	7
1	A	203	HIS	7
1	A	144	LYS	7
1	A	330	MET	7
1	A	297	LYS	7
1	A	365	GLN	7
1	A	290	LEU	6
1	A	26	LYS	6
1	A	6	LYS	6
1	A	355	GLN	6
1	A	299	LEU	6
1	A	344	ARG	6
1	A	76	LEU	6
1	A	249	THR	6
1	A	171	TYR	6
1	A	119	LYS	6
1	A	90	TYR	6
1	A	209	ASP	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	224	MET	6
1	A	202	LYS	5
1	A	195	LEU	5
1	A	102	LYS	5
1	A	88	LYS	5
1	A	194	PHE	5
1	A	179	LYS	5
1	A	62	TRP	5
1	A	311	LEU	5
1	A	15	LYS	5
1	A	354	ARG	5
1	A	189	LYS	5
1	A	320	THR	5
1	A	130	GLU	5
1	A	192	LEU	5
1	A	66	ARG	5
1	A	148	MET	5
1	A	151	LEU	5
1	A	308	GLU	5
1	A	284	LEU	5
1	A	80	THR	5
1	A	211	SER	5
1	A	152	GLN	5
1	A	104	ILE	5
1	A	277	LYS	5
1	A	251	LYS	5
1	A	44	GLU	4
1	A	273	LYS	4
1	A	78	GLU	4
1	A	238	SER	4
1	A	361	LEU	4
1	A	200	LYS	4
1	A	339	PHE	4
1	A	208	THR	4
1	A	217	PHE	4
1	A	147	LEU	4
1	A	140	LYS	4
1	A	214	GLU	4
1	A	82	ASP	4
1	A	135	LEU	4
1	A	156	PHE	4
1	A	60	ILE	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	283	TYR	4
1	A	236	ASP	4
1	A	313	LYS	4
1	A	116	ILE	4
1	A	197	ASP	4
1	A	93	THR	4
1	A	359	GLU	4
1	A	120	ASP	4
1	A	279	PHE	4
1	A	153	GLU	4
1	A	43	LEU	4
1	A	67	PHE	4
1	A	75	LEU	4
1	A	232	TRP	4
1	A	142	LYS	4
1	A	291	GLU	4
1	A	255	SER	4
1	A	328	GLU	4
1	A	30	ASP	4
1	A	340	TRP	4
1	A	27	PHE	4
1	A	150	ASN	4
1	A	127	LYS	4
1	A	39	HIS	4
1	A	280	LEU	4
1	A	128	THR	4
1	A	270	SER	4
1	A	322	GLU	3
1	A	302	VAL	3
1	A	247	LEU	3
1	A	295	LYS	3
1	A	287	ASP	3
1	A	367	ARG	3
1	A	108	ILE	3
1	A	129	TRP	3
1	A	118	ASN	3
1	A	337	SER	3
1	A	349	ASN	3
1	A	306	SER	3
1	A	253	GLN	3
1	A	263	SER	3
1	A	20	LEU	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	TRP	3
1	A	198	LEU	3
1	A	28	GLU	3
1	A	233	SER	3
1	A	205	ASN	3
1	A	131	GLU	3
1	A	158	TRP	3
1	A	61	PHE	3
1	A	316	ARG	3
1	A	336	MET	3
1	A	204	MET	3
1	A	256	LYS	3
1	A	212	ILE	3
1	A	72	GLN	3
1	A	262	LEU	3
1	A	274	GLU	3
1	A	3	GLU	3
1	A	294	ASN	3
1	A	185	ASN	3
1	A	230	TRP	3
1	A	370	LYS	3
1	A	106	TYR	3
1	A	304	LEU	3
1	A	178	ILE	3
1	A	237	THR	3
1	A	222	THR	3
1	A	341	TYR	3
1	A	333	ILE	3
1	A	177	ASP	3
1	A	17	TYR	3
1	A	288	GLU	2
1	A	326	LYS	2
1	A	250	PHE	2
1	A	122	LEU	2
1	A	225	THR	2
1	A	267	ASN	2
1	A	55	ASP	2
1	A	58	ASP	2
1	A	296	ASP	2
1	A	34	LYS	2
1	A	53	THR	2
1	A	132	ILE	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	175	LYS	2
1	A	115	LEU	2
1	A	22	GLU	2
1	A	278	GLU	2
1	A	46	LYS	2
1	A	14	ASP	2
1	A	145	SER	2
1	A	258	PHE	2
1	A	310	GLU	2
1	A	160	LEU	2
1	A	36	THR	2
1	A	240	VAL	2
1	A	11	ILE	2
1	A	323	ASN	2
1	A	47	PHE	2
1	A	332	ASN	2
1	A	241	ASN	2
1	A	45	GLU	2
1	A	363	ASP	2
1	A	325	GLN	2
1	A	285	LEU	2
1	A	65	ASP	2
1	A	100	ASN	2
1	A	111	GLU	2
1	A	94	TRP	2
1	A	218	ASN	2
1	A	138	GLU	2
1	A	321	MET	2
1	A	113	LEU	2
1	A	176	TYR	2
1	A	368	ILE	1
1	A	49	GLN	1
1	A	9	ILE	1
1	A	286	THR	1
1	A	173	ASN	1
1	A	235	ILE	1
1	A	59	ILE	1
1	A	99	TYR	1
1	A	366	THR	1
1	A	180	ASP	1
1	A	64	HIS	1
1	A	348	ILE	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	335	GLN	1
1	A	37	VAL	1
1	A	298	PRO	1
1	A	345	THR	1
1	A	33	ILE	1
1	A	136	ASP	1
1	A	79	ILE	1
1	A	272	ASN	1
1	A	183	VAL	1
1	A	87	ASP	1
1	A	226	ILE	1
1	A	95	ASP	1
1	A	229	PRO	1
1	A	169	PHE	1
1	A	234	ASN	1
1	A	184	ASP	1
1	A	266	ILE	1
1	A	157	THR	1
1	A	343	VAL	1
1	A	281	GLU	1
1	A	362	LYS	1
1	A	358	ASP	1
1	A	86	GLN	1
1	A	369	THR	1
1	A	73	SER	1
1	A	317	ILE	1
1	A	29	LYS	1
1	A	4	GLU	1
1	A	275	LEU	1
1	A	41	ASP	1
1	A	85	PHE	1
1	A	309	GLU	1
1	A	110	VAL	1
1	A	8	VAL	1
1	A	38	GLU	1
1	A	196	VAL	1
1	A	227	ASN	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

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