



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 13, 2017 – 02:07 am GMT

PDB ID : 2RO1  
Title : NMR Solution Structures of Human KAP1 PHD finger-bromodomain  
Authors : Zeng, L.; Yap, K.L.; Ivanov, A.V.; Wang, X.; Mujtaba, S.; Plotnikova, O.;  
Rauscher, F.J.  
Deposited on : 2008-03-04

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

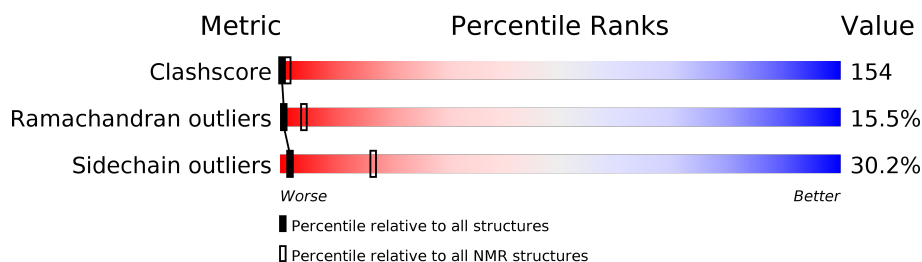
# 1 Overall quality at a glance

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<br>(#Entries) | NMR archive<br>(#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     | 189    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:625-A:670, A:694-A:725,<br>A:737-A:775, A:782-A:800<br>(136) | 0.58              | 12           |

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 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2907 atoms, of which 1436 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Transcription intermediary factor 1-beta.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |      |     |     |    | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|----|-------|
| 1   | A     | 189      | Total | C   | H    | N   | O   | S  | 0     |
|     |       |          | 2905  | 919 | 1436 | 252 | 284 | 14 |       |

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

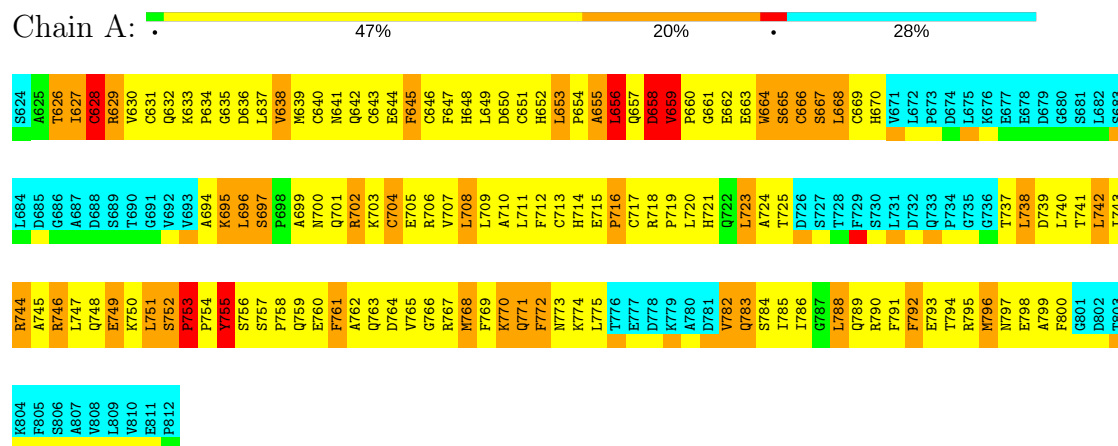
| Mol | Chain | Residues | Atoms |    |
|-----|-------|----------|-------|----|
| 2   | A     | 2        | Total | Zn |
|     |       |          | 2     | 2  |

## 4 Residue-property plots

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

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

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

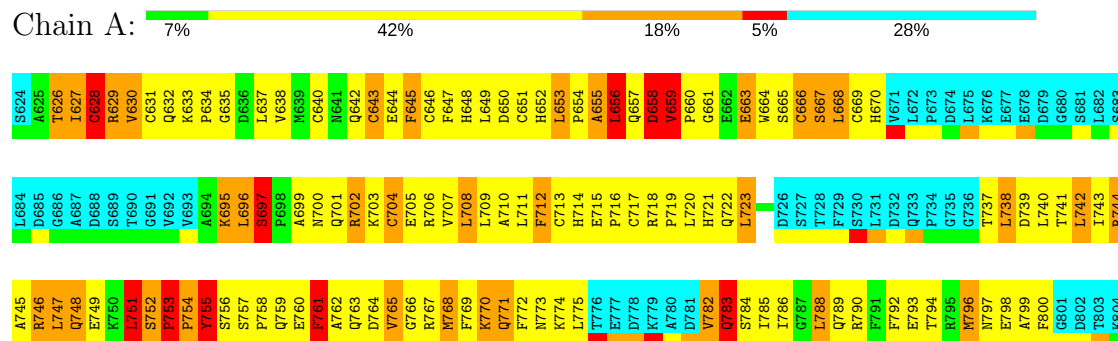


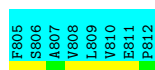
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

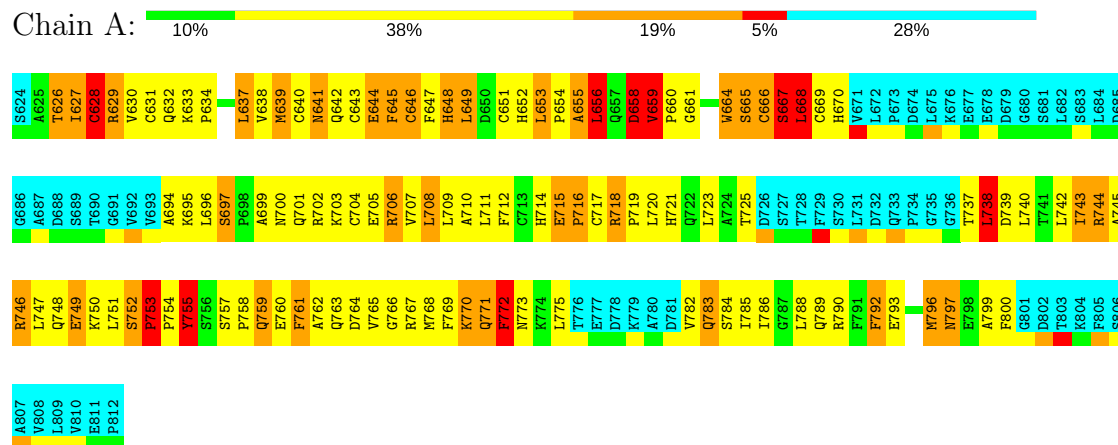
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





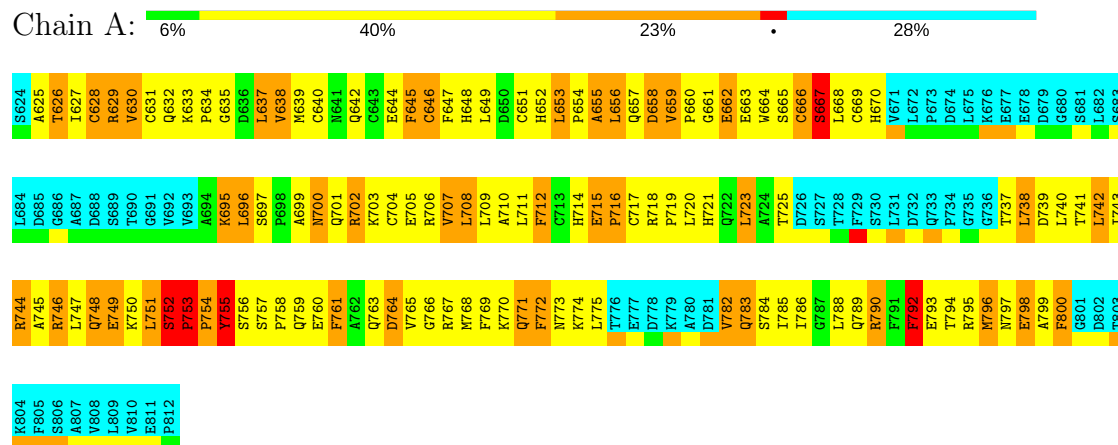
## 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



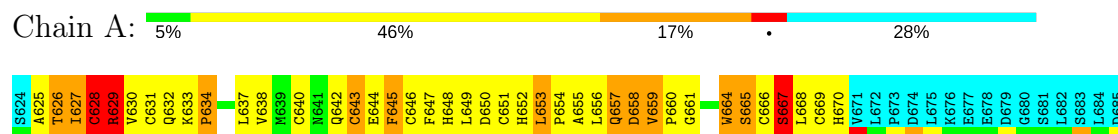
## 4.2.3 Score per residue for model 3

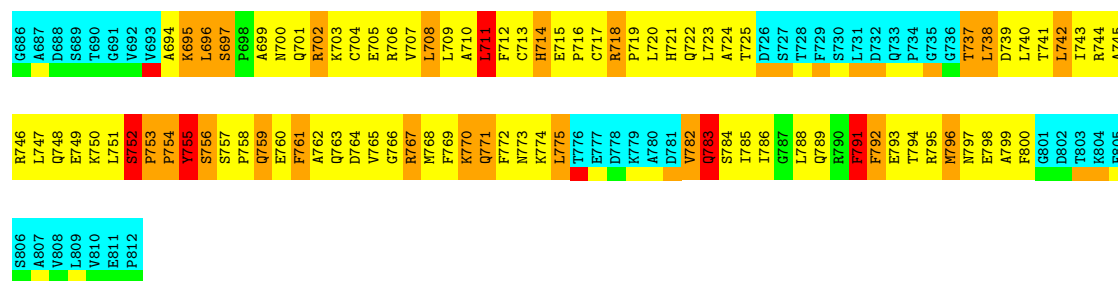
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



## 4.2.4 Score per residue for model 4

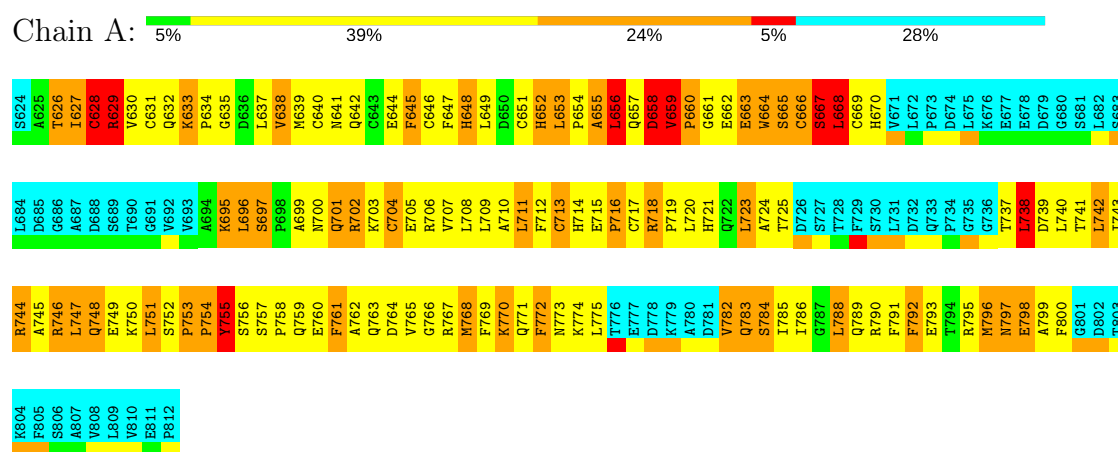
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





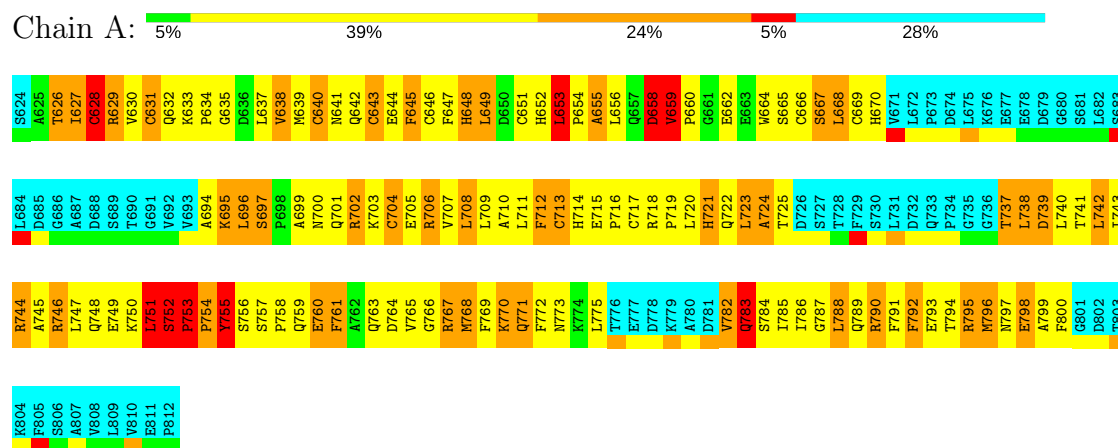
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



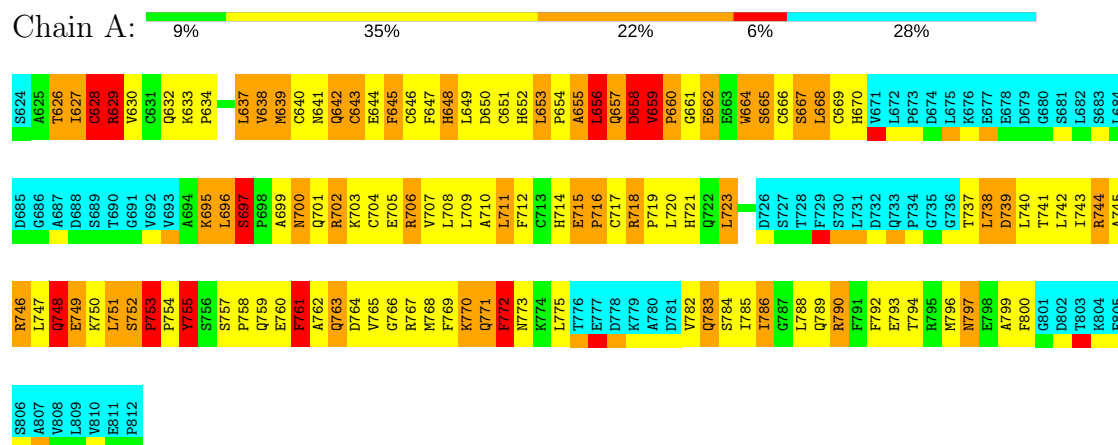
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



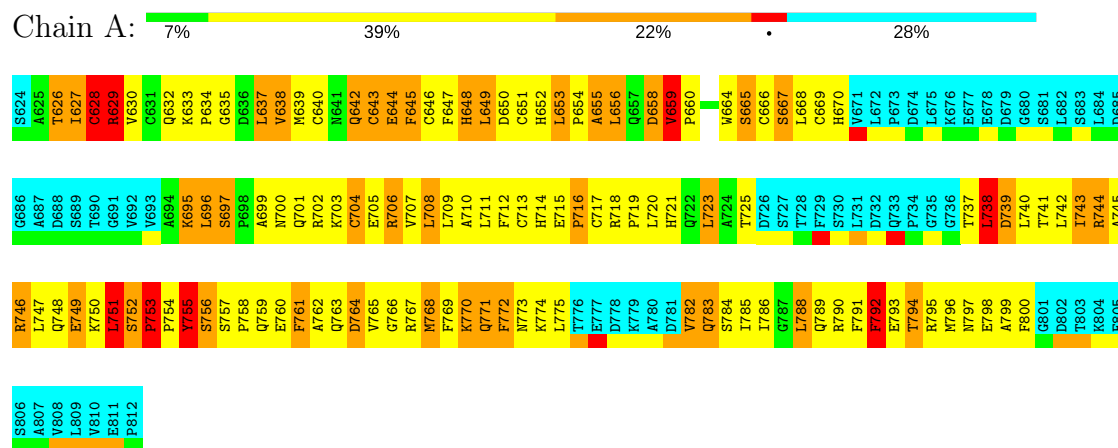
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



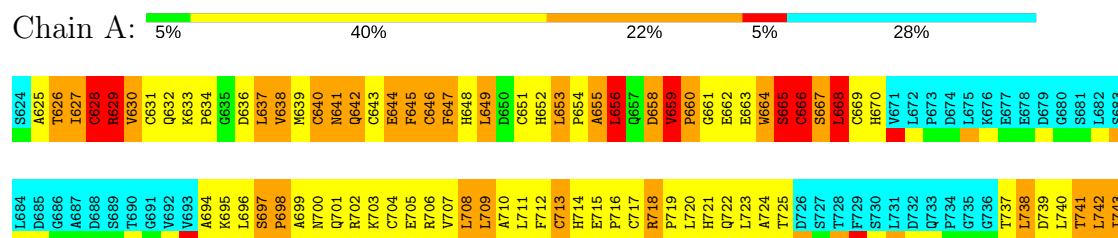
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

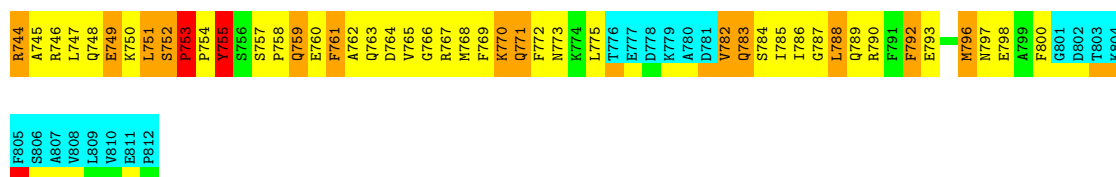


### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

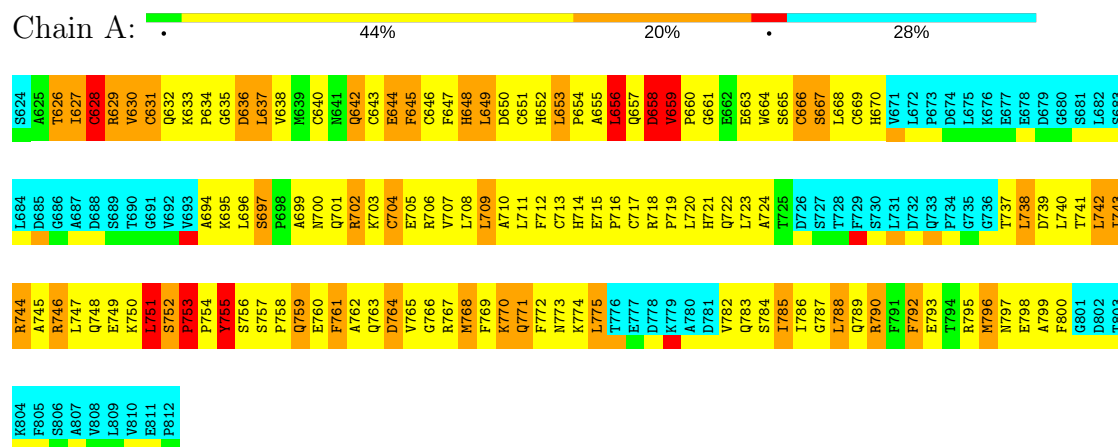






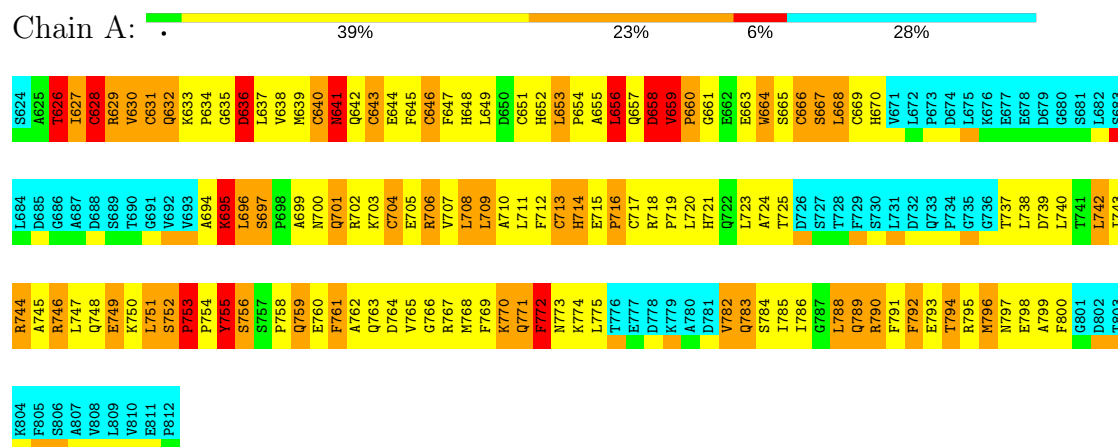
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

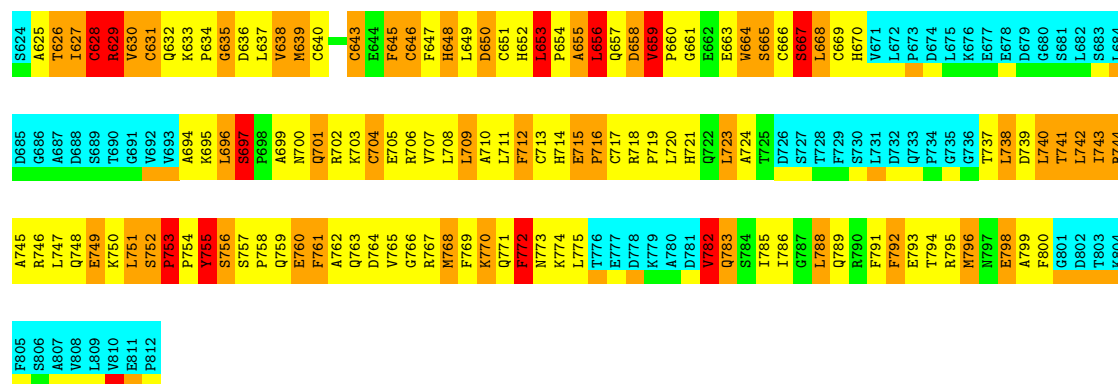
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



#### 4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

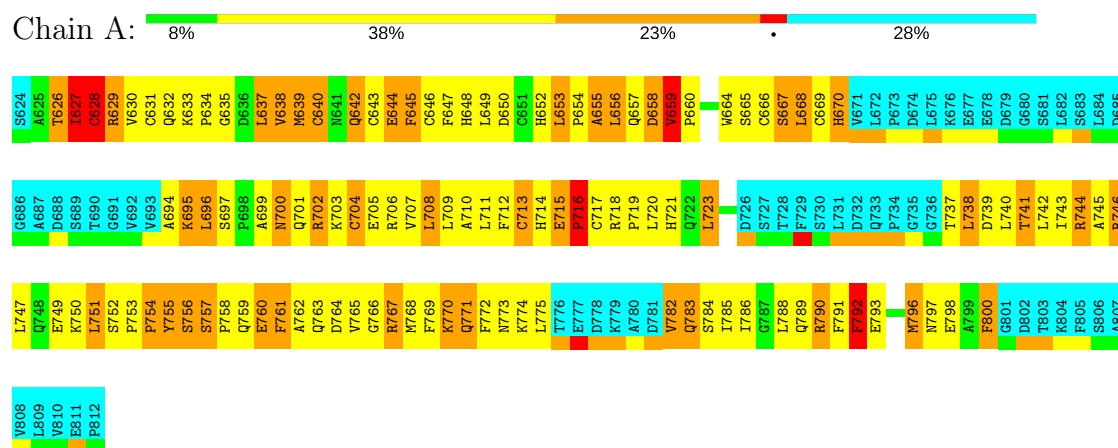
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





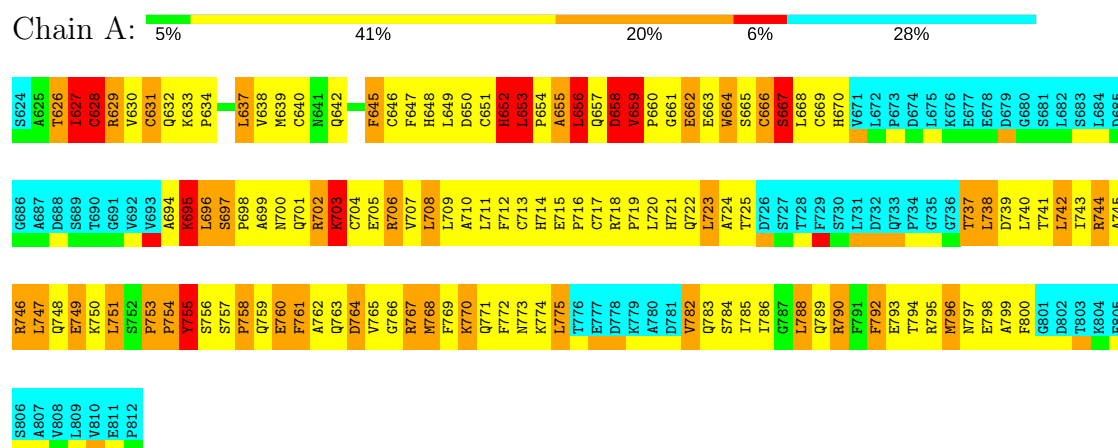
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



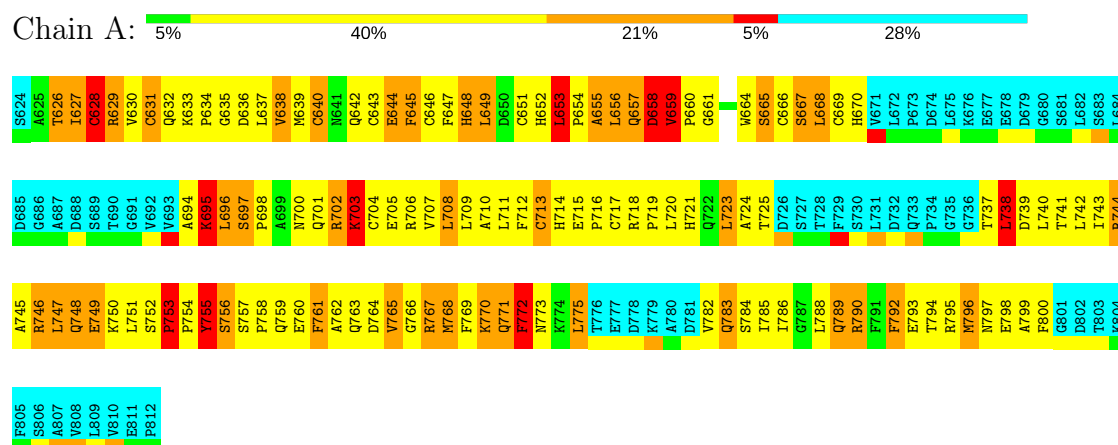
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



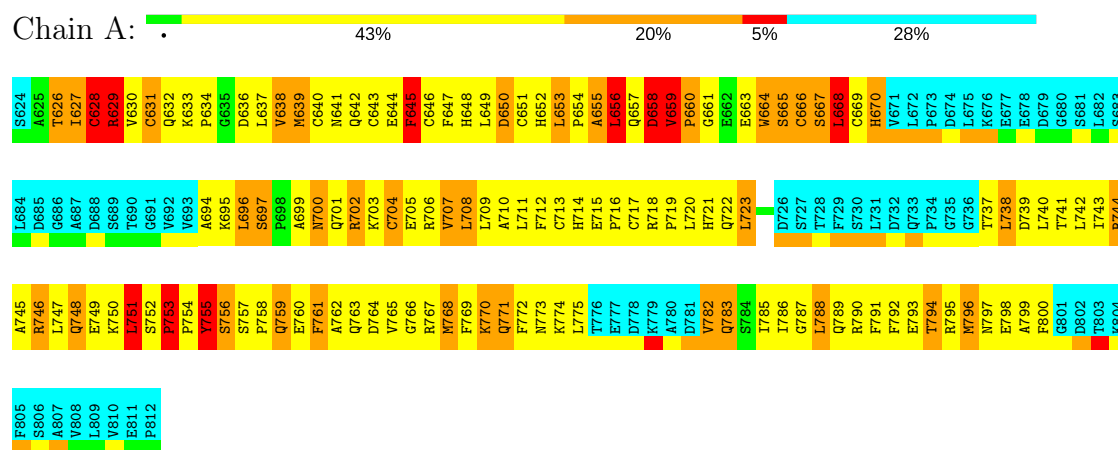
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



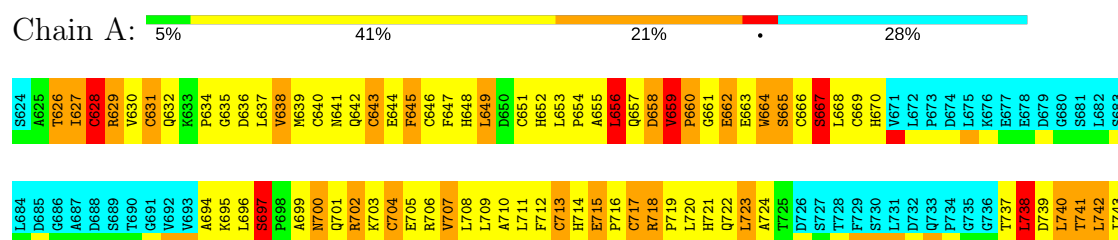
### 4.2.16 Score per residue for model 16

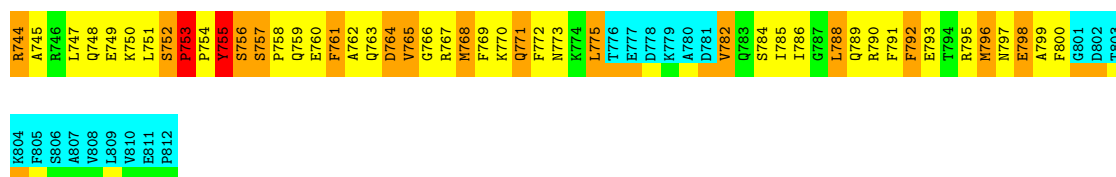
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



### 4.2.17 Score per residue for model 17

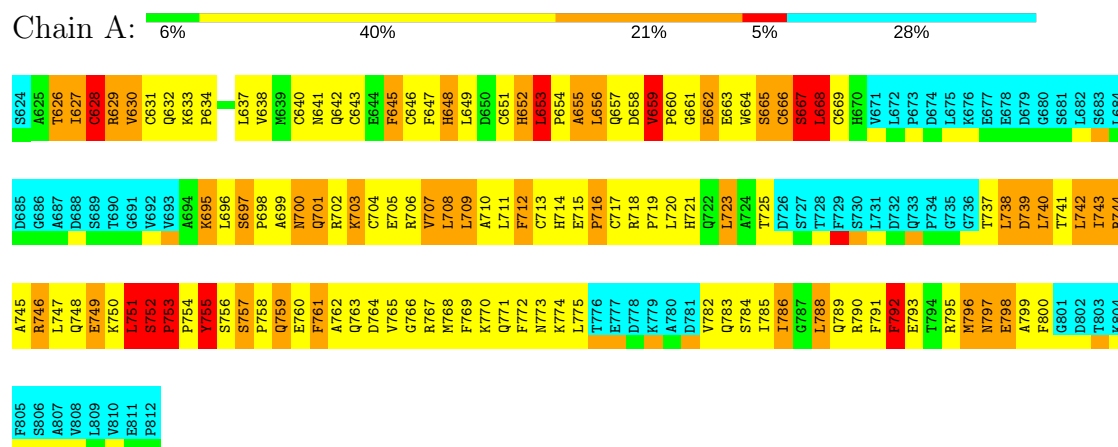
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





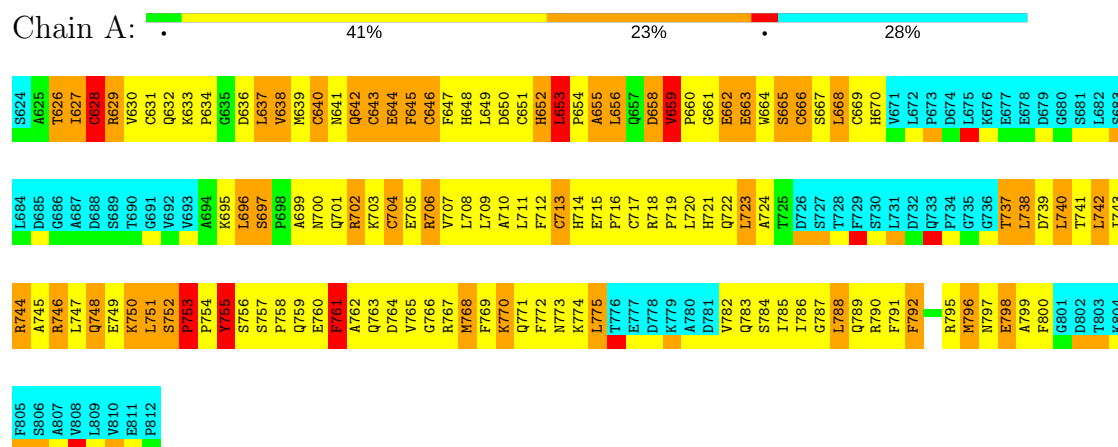
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



|      |      |      |
|------|------|------|
| K804 | R744 | S624 |
| F805 | A745 | A625 |
| S806 | R746 | T626 |
| A807 | L747 | I627 |
| V808 | Q748 | D688 |
| L809 | E749 | C628 |
| V810 | K750 | S689 |
| E811 | L751 | T630 |
| P812 | S752 | C631 |
|      | P753 | Q632 |
|      | P754 | K633 |
|      | Y755 | P634 |
|      | S756 | K635 |
|      | S757 | L636 |
|      | P758 | L637 |
|      | Q759 | V638 |
|      | E760 | M639 |
|      | F761 | N700 |
|      | A762 | C640 |
|      | Q763 | N641 |
|      | D764 | Q642 |
|      | V765 | C643 |
|      | G766 | E644 |
|      | R767 | F645 |
|      | N768 | C646 |
|      | F769 | F647 |
|      | K770 | H648 |
|      | Q771 | L649 |
|      | F772 | D650 |
|      | K773 | C651 |
|      | L774 | H652 |
|      | L775 | L653 |
|      | I776 | P654 |
|      | D777 | A655 |
|      | D778 | L656 |
|      | K779 | Q657 |
|      | A780 | D658 |
|      | D781 | P659 |
|      | V782 | P660 |
|      | Q783 | C661 |
|      | S784 | E662 |
|      | I785 | E663 |
|      | G786 | M664 |
|      | L787 | S665 |
|      | L788 | C666 |
|      | Q789 | S667 |
|      | R790 | L668 |
|      | F791 | C669 |
|      | E792 | H670 |
|      | E793 | L731 |
|      | T794 | D732 |
|      | R795 | L672 |
|      | M796 | P673 |
|      | N797 | P674 |
|      | E798 | L675 |
|      | A799 | G676 |
|      | F800 | E677 |
|      | G801 | L738 |
|      | D802 | D739 |
|      | T803 | L740 |
|      |      | T741 |
|      |      | L742 |
|      |      | I743 |
|      |      | S683 |

## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing, torsion angle dynamics*.

Of the 200 calculated structures, 20 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 | 1.1     |
| CNS           | refinement         | 1.1     |

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

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ZN

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     | 0.96±0.02    | 1±0/1115 (0.1±0.0%) | 1.02±0.02   | 4±1/1508 (0.3±0.1%) |
| All | All   | 0.96         | 16/22300 (0.1%)     | 1.02        | 77/30160 (0.3%)     |

All unique bond 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(Å) | Ideal(Å) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|--------|-------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |        |       |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 755 | TYR  | CG-CD1 | -6.52 | 1.30        | 1.39     | 9      | 8     |
| 1   | A     | 755 | TYR  | CE2-CZ | -6.27 | 1.30        | 1.38     | 20     | 1     |
| 1   | A     | 755 | TYR  | CG-CD2 | -5.93 | 1.31        | 1.39     | 6      | 4     |
| 1   | A     | 761 | PHE  | CG-CD2 | -5.33 | 1.30        | 1.38     | 7      | 2     |
| 1   | A     | 761 | PHE  | CG-CD1 | -5.14 | 1.31        | 1.38     | 1      | 1     |

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     | 772 | PHE  | CB-CG-CD2 | -9.07 | 114.45      | 120.80   | 8      | 8     |
| 1   | A     | 755 | TYR  | CB-CG-CD2 | -8.64 | 115.82      | 121.00   | 7      | 10    |
| 1   | A     | 792 | PHE  | CB-CG-CD1 | -8.21 | 115.05      | 120.80   | 18     | 17    |
| 1   | A     | 753 | PRO  | N-CA-CB   | -7.77 | 93.97       | 103.30   | 16     | 13    |
| 1   | A     | 772 | PHE  | CB-CG-CD1 | 7.53  | 126.07      | 120.80   | 8      | 8     |
| 1   | A     | 761 | PHE  | CB-CG-CD1 | -6.78 | 116.06      | 120.80   | 1      | 2     |
| 1   | A     | 761 | PHE  | CB-CG-CD2 | -6.53 | 116.23      | 120.80   | 7      | 2     |
| 1   | A     | 755 | TYR  | CB-CG-CD1 | 6.51  | 124.91      | 121.00   | 7      | 6     |
| 1   | A     | 792 | PHE  | CB-CG-CD2 | 6.27  | 125.19      | 120.80   | 18     | 6     |
| 1   | A     | 659 | VAL  | N-CA-CB   | -6.13 | 98.02       | 111.50   | 16     | 1     |
| 1   | A     | 658 | ASP  | CA-C-N    | -5.49 | 105.12      | 117.20   | 16     | 1     |
| 1   | A     | 791 | PHE  | CB-CG-CD1 | -5.35 | 117.06      | 120.80   | 4      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms   | Z     | Observed(°) | Ideal(°) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|---------|-------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |         |       |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 703 | LYS  | N-CA-CB | -5.34 | 100.99      | 110.60   | 14     | 2     |

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

## 6.2 Too-close contacts ⓘ

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1   | A     | 1089  | 1081     | 1077     | 333±21  |
| All | All   | 21820 | 21620    | 21540    | 6658    |

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 154.

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

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:716:PRO:HB2  | 1:A:788:LEU:HD13 | 1.06     | 1.27        | 11     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HG22 | 1.05     | 1.26        | 18     | 9     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:HD11 | 1.04     | 1.28        | 13     | 4     |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:HB2  | 1.04     | 1.23        | 19     | 13    |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE3  | 1.03     | 1.27        | 19     | 5     |
| 1:A:628:CYS:SG   | 1:A:630:VAL:HG13 | 1.02     | 1.93        | 9      | 4     |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:HD11 | 1.01     | 1.25        | 18     | 8     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:HB3  | 1.01     | 1.29        | 9      | 1     |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:HD11 | 1.01     | 1.05        | 18     | 3     |
| 1:A:626:THR:HB   | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.97     | 1.34        | 6      | 11    |
| 1:A:720:LEU:HA   | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.95     | 1.38        | 12     | 14    |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:767:ARG:HD2  | 0.95     | 1.36        | 4      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.94     | 1.39        | 17     | 2     |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:CD   | 0.93     | 1.93        | 16     | 1     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.93     | 1.63        | 18     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.93     | 1.41        | 7      | 5     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.92     | 1.62        | 2      | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.92     | 2.05        | 5      | 3     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.92     | 1.37        | 12     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:HD12 | 0.92     | 1.39        | 4      | 2     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.91     | 1.81        | 1      | 11    |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.91     | 1.66        | 16     | 13    |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.91     | 1.43        | 19     | 5     |
| 1:A:765:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CE1  | 0.91     | 2.01        | 16     | 15    |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:SD   | 0.90     | 2.06        | 3      | 5     |
| 1:A:720:LEU:HA   | 1:A:723:LEU:HD13 | 0.89     | 1.45        | 11     | 5     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.89     | 1.41        | 10     | 11    |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.89     | 1.44        | 5      | 11    |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:795:ARG:NH2  | 0.89     | 1.80        | 6      | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.89     | 2.08        | 20     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.89     | 1.43        | 15     | 2     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.88     | 1.67        | 16     | 9     |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CG   | 0.88     | 2.03        | 18     | 3     |
| 1:A:703:LYS:HB3  | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.88     | 1.43        | 3      | 5     |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:H    | 0.88     | 1.26        | 18     | 3     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:660:PRO:HD3  | 0.88     | 1.45        | 10     | 14    |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.88     | 2.04        | 5      | 9     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:N    | 0.88     | 1.84        | 3      | 18    |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.88     | 2.03        | 3      | 9     |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:N    | 0.88     | 1.84        | 18     | 4     |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:CB   | 0.87     | 2.00        | 1      | 13    |
| 1:A:739:ASP:N    | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.87     | 1.84        | 18     | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.87     | 1.45        | 7      | 6     |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.87     | 2.04        | 3      | 10    |
| 1:A:626:THR:HB   | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.87     | 1.44        | 19     | 6     |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:792:PHE:CE2  | 0.87     | 2.04        | 16     | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.86     | 1.85        | 13     | 7     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:N    | 0.86     | 1.85        | 10     | 4     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:N    | 0.86     | 1.85        | 13     | 2     |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:751:LEU:N    | 0.86     | 1.85        | 8      | 10    |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.86     | 2.05        | 9      | 8     |
| 1:A:755:TYR:CE1  | 1:A:761:PHE:HB3  | 0.85     | 2.07        | 11     | 8     |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:HB2  | 0.85     | 1.48        | 20     | 5     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:HG3  | 0.85     | 1.47        | 14     | 7     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:HB3  | 0.85     | 1.48        | 12     | 12    |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.85     | 1.45        | 9      | 8     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:N    | 0.84     | 1.87        | 6      | 3     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:HG2  | 0.84     | 1.48        | 16     | 3     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.84     | 2.01        | 18     | 5     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:N    | 0.84     | 1.87        | 15     | 5     |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.84     | 1.47        | 9      | 1     |
| 1:A:711:LEU:O    | 1:A:717:CYS:SG   | 0.84     | 2.35        | 4      | 19    |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.83     | 2.08        | 12     | 4     |
| 1:A:773:ASN:HB3  | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.83     | 1.50        | 20     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.83     | 1.50        | 16     | 1     |
| 1:A:721:HIS:O    | 1:A:741:THR:HG23 | 0.83     | 1.74        | 4      | 9     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:O    | 0.83     | 1.72        | 1      | 11    |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.83     | 1.49        | 5      | 10    |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CZ   | 0.83     | 2.08        | 16     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE   | 0.83     | 2.04        | 20     | 7     |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:HB2  | 0.83     | 1.49        | 5      | 4     |
| 1:A:740:LEU:N    | 1:A:768:MET:SD   | 0.83     | 2.52        | 19     | 11    |
| 1:A:711:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.83     | 1.50        | 4      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1  | 0.83     | 1.48        | 20     | 4     |
| 1:A:720:LEU:HB3  | 1:A:768:MET:SD   | 0.83     | 2.14        | 5      | 8     |
| 1:A:667:SER:HB3  | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.82     | 1.50        | 11     | 2     |
| 1:A:656:LEU:CG   | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.82     | 2.04        | 16     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.82     | 1.51        | 14     | 9     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD13 | 0.82     | 1.51        | 10     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:SD   | 0.81     | 2.15        | 3      | 6     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.81     | 2.10        | 9      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.81     | 1.50        | 18     | 3     |
| 1:A:769:PHE:CZ   | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.81     | 2.10        | 11     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CD2  | 1:A:789:GLN:HG3  | 0.81     | 2.11        | 15     | 2     |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:HD3  | 0.81     | 1.52        | 10     | 1     |
| 1:A:740:LEU:HA   | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.81     | 1.53        | 5      | 3     |
| 1:A:649:LEU:HB3  | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.81     | 1.52        | 6      | 14    |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:764:ASP:O    | 0.80     | 1.77        | 1      | 6     |
| 1:A:755:TYR:CG   | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.80     | 2.11        | 3      | 6     |
| 1:A:755:TYR:HA   | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.80     | 1.53        | 13     | 3     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:HA   | 0.80     | 1.54        | 3      | 4     |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HE3  | 0.80     | 1.54        | 16     | 9     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:SD   | 0.80     | 2.15        | 16     | 8     |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.80     | 2.11        | 5      | 2     |
| 1:A:716:PRO:CB   | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.80     | 2.06        | 11     | 2     |
| 1:A:757:SER:HB3  | 1:A:758:PRO:HD2  | 0.80     | 1.54        | 20     | 2     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.80     | 2.12        | 4      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CD1  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.79     | 2.12        | 6      | 7     |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:HG3  | 0.79     | 1.51        | 4      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.79     | 1.54        | 8      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:659:VAL:HG22 | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.79     | 1.52        | 16     | 2     |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.79     | 2.11        | 12     | 13    |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HB3  | 0.79     | 1.52        | 11     | 3     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:C    | 0.79     | 1.97        | 20     | 6     |
| 1:A:773:ASN:HB2  | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.79     | 1.55        | 19     | 10    |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NE   | 0.79     | 1.92        | 2      | 1     |
| 1:A:659:VAL:CG2  | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.78     | 2.08        | 16     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:N    | 0.78     | 1.92        | 16     | 3     |
| 1:A:634:PRO:HA   | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.78     | 1.55        | 1      | 11    |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HG   | 0.78     | 1.55        | 3      | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HA   | 0.78     | 1.54        | 10     | 4     |
| 1:A:696:LEU:CB   | 1:A:757:SER:HB2  | 0.78     | 2.08        | 20     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HG   | 1:A:755:TYR:OH   | 0.78     | 1.78        | 20     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:647:PHE:O    | 0.78     | 1.79        | 10     | 7     |
| 1:A:703:LYS:C    | 1:A:703:LYS:HD2  | 0.78     | 2.00        | 15     | 1     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:767:ARG:HB2  | 0.78     | 1.78        | 1      | 10    |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.78     | 2.08        | 4      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HA   | 0.77     | 1.54        | 17     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.77     | 1.55        | 18     | 2     |
| 1:A:649:LEU:CB   | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.77     | 2.09        | 6      | 6     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:O    | 0.77     | 1.78        | 15     | 6     |
| 1:A:791:PHE:CD2  | 1:A:792:PHE:N    | 0.77     | 2.53        | 4      | 1     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:659:VAL:HG21 | 0.77     | 1.56        | 16     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HB2  | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.77     | 1.55        | 4      | 2     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.77     | 2.14        | 4      | 12    |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CG   | 0.77     | 2.15        | 16     | 6     |
| 1:A:737:THR:C    | 1:A:738:LEU:HD23 | 0.76     | 2.00        | 7      | 5     |
| 1:A:628:CYS:SG   | 1:A:630:VAL:HB   | 0.76     | 2.21        | 10     | 14    |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.76     | 2.10        | 20     | 11    |
| 1:A:755:TYR:CE1  | 1:A:760:GLU:HB3  | 0.76     | 2.16        | 9      | 8     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.76     | 1.55        | 6      | 5     |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.76     | 1.58        | 19     | 1     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:720:LEU:N    | 0.76     | 2.19        | 2      | 19    |
| 1:A:711:LEU:CD1  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.76     | 2.11        | 4      | 1     |
| 1:A:747:LEU:N    | 1:A:755:TYR:OH   | 0.76     | 2.19        | 20     | 2     |
| 1:A:752:SER:HB2  | 1:A:753:PRO:HD3  | 0.76     | 1.58        | 12     | 11    |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:CB   | 0.76     | 2.10        | 17     | 2     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.76     | 2.15        | 2      | 3     |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.76     | 1.57        | 10     | 7     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:744:ARG:HA   | 0.76     | 2.11        | 19     | 7     |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:CE   | 0.75     | 2.11        | 16     | 11    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:712:PHE:HA   | 1:A:721:HIS:HE2  | 0.75     | 1.40        | 19     | 7     |
| 1:A:640:CYS:HB2  | 1:A:666:CYS:HB3  | 0.75     | 1.58        | 3      | 7     |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:CE   | 0.75     | 2.10        | 7      | 9     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.75     | 2.16        | 9      | 2     |
| 1:A:765:VAL:O    | 1:A:768:MET:HB2  | 0.75     | 1.82        | 15     | 16    |
| 1:A:717:CYS:HB2  | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.75     | 1.57        | 7      | 9     |
| 1:A:638:VAL:O    | 1:A:646:CYS:HA   | 0.75     | 1.82        | 5      | 17    |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.75     | 2.17        | 11     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:HG   | 0.75     | 1.57        | 6      | 2     |
| 1:A:772:PHE:HE2  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.75     | 1.40        | 18     | 5     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:HB2  | 0.75     | 1.58        | 16     | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:HD13 | 0.74     | 1.82        | 16     | 13    |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.74     | 1.59        | 3      | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.74     | 2.17        | 16     | 2     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:739:ASP:HB2  | 0.74     | 1.82        | 8      | 18    |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:656:LEU:HD21 | 0.74     | 1.57        | 17     | 1     |
| 1:A:751:LEU:HD22 | 1:A:752:SER:N    | 0.74     | 1.97        | 11     | 2     |
| 1:A:751:LEU:HD13 | 1:A:752:SER:H    | 0.74     | 1.43        | 11     | 2     |
| 1:A:627:ILE:HB   | 1:A:632:GLN:C    | 0.74     | 2.02        | 19     | 17    |
| 1:A:628:CYS:SG   | 1:A:628:CYS:O    | 0.74     | 2.44        | 16     | 10    |
| 1:A:724:ALA:HB2  | 1:A:737:THR:HG22 | 0.74     | 1.56        | 6      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.74     | 1.58        | 6      | 4     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.74     | 1.57        | 8      | 6     |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:651:CYS:HB3  | 0.74     | 1.58        | 10     | 8     |
| 1:A:761:PHE:CD1  | 1:A:762:ALA:N    | 0.74     | 2.55        | 7      | 8     |
| 1:A:701:GLN:HA   | 1:A:704:CYS:SG   | 0.74     | 2.22        | 15     | 7     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HE1  | 0.74     | 2.13        | 20     | 2     |
| 1:A:656:LEU:CD2  | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.74     | 2.13        | 16     | 1     |
| 1:A:659:VAL:CB   | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.74     | 2.12        | 16     | 1     |
| 1:A:739:ASP:C    | 1:A:768:MET:SD   | 0.74     | 2.66        | 20     | 11    |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CB   | 0.74     | 2.11        | 10     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HG   | 1:A:659:VAL:N    | 0.74     | 1.98        | 15     | 2     |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:791:PHE:CE2  | 0.74     | 2.18        | 4      | 1     |
| 1:A:758:PRO:HB3  | 1:A:800:PHE:CZ   | 0.74     | 2.18        | 14     | 4     |
| 1:A:701:GLN:O    | 1:A:704:CYS:SG   | 0.74     | 2.45        | 20     | 3     |
| 1:A:765:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CD1  | 0.74     | 2.18        | 4      | 14    |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:HB2  | 0.74     | 1.60        | 9      | 4     |
| 1:A:711:LEU:HA   | 1:A:714:HIS:CE1  | 0.74     | 2.17        | 6      | 18    |
| 1:A:707:VAL:CG2  | 1:A:708:LEU:N    | 0.74     | 2.50        | 5      | 2     |
| 1:A:742:LEU:HD13 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.74     | 1.57        | 5      | 1     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.74     | 2.17        | 13     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:711:LEU:CB   | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.73     | 2.13        | 11     | 6     |
| 1:A:784:SER:O    | 1:A:788:LEU:HB3  | 0.73     | 1.83        | 11     | 6     |
| 1:A:628:CYS:O    | 1:A:630:VAL:N    | 0.73     | 2.21        | 2      | 20    |
| 1:A:762:ALA:HA   | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.73     | 1.59        | 5      | 2     |
| 1:A:740:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1  | 0.73     | 1.60        | 5      | 4     |
| 1:A:752:SER:C    | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.73     | 2.04        | 20     | 2     |
| 1:A:749:GLU:HA   | 1:A:754:PRO:HG3  | 0.73     | 1.60        | 1      | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:CG   | 0.73     | 2.36        | 6      | 1     |
| 1:A:658:ASP:O    | 1:A:659:VAL:HG22 | 0.73     | 1.84        | 2      | 4     |
| 1:A:716:PRO:O    | 1:A:719:PRO:HD2  | 0.73     | 1.82        | 4      | 19    |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.73     | 1.60        | 6      | 6     |
| 1:A:711:LEU:HA   | 1:A:714:HIS:NE2  | 0.73     | 1.99        | 11     | 12    |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.73     | 1.59        | 5      | 11    |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:738:LEU:O    | 0.73     | 1.82        | 3      | 8     |
| 1:A:765:VAL:HA   | 1:A:768:MET:HE2  | 0.73     | 1.59        | 7      | 5     |
| 1:A:649:LEU:O    | 1:A:652:HIS:HB3  | 0.73     | 1.82        | 3      | 18    |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:HE2  | 0.73     | 1.59        | 7      | 6     |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE   | 0.73     | 2.14        | 17     | 2     |
| 1:A:645:PHE:CE2  | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.73     | 2.19        | 7      | 4     |
| 1:A:659:VAL:CG1  | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.73     | 2.13        | 16     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:H    | 0.72     | 1.44        | 6      | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:738:LEU:O    | 0.72     | 2.07        | 17     | 5     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.72     | 2.19        | 5      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HB2  | 1:A:756:SER:O    | 0.72     | 1.84        | 20     | 2     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:768:MET:HG2  | 0.72     | 1.85        | 15     | 3     |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:HD2  | 0.72     | 1.58        | 16     | 2     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.72     | 2.15        | 19     | 4     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.72     | 2.18        | 11     | 3     |
| 1:A:769:PHE:CZ   | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.72     | 2.20        | 11     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HB2  | 0.72     | 1.61        | 12     | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HG2  | 0.72     | 1.59        | 2      | 1     |
| 1:A:628:CYS:O    | 1:A:628:CYS:SG   | 0.72     | 2.48        | 7      | 10    |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:O    | 0.72     | 1.84        | 10     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.72     | 2.20        | 19     | 2     |
| 1:A:712:PHE:HA   | 1:A:721:HIS:NE2  | 0.72     | 1.99        | 19     | 17    |
| 1:A:721:HIS:CD2  | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.72     | 2.20        | 19     | 5     |
| 1:A:652:HIS:ND1  | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.71     | 2.00        | 16     | 1     |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:738:LEU:N    | 0.71     | 1.99        | 6      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:HD2  | 0.71     | 1.43        | 16     | 1     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:711:LEU:HG   | 0.71     | 1.84        | 11     | 12    |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.71     | 2.25        | 15     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:665:SER:HA   | 0.71     | 2.24        | 4      | 17    |
| 1:A:717:CYS:HA   | 1:A:720:LEU:HD12 | 0.71     | 1.62        | 8      | 8     |
| 1:A:649:LEU:O    | 1:A:655:ALA:HA   | 0.71     | 1.85        | 5      | 16    |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:HD2  | 0.71     | 1.43        | 7      | 5     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:HB2  | 0.71     | 1.60        | 10     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.71     | 1.61        | 13     | 3     |
| 1:A:668:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.71     | 1.45        | 20     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CG   | 0.71     | 2.16        | 19     | 1     |
| 1:A:717:CYS:N    | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.71     | 2.00        | 3      | 3     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:651:CYS:N    | 0.71     | 2.23        | 9      | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.71     | 1.61        | 1      | 2     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:718:ARG:N    | 0.70     | 2.24        | 3      | 20    |
| 1:A:772:PHE:HE2  | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.70     | 1.46        | 19     | 8     |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.70     | 1.63        | 7      | 5     |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:HE3  | 0.70     | 1.63        | 9      | 5     |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.70     | 1.59        | 16     | 1     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:633:LYS:C    | 0.70     | 2.05        | 3      | 7     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.70     | 2.17        | 9      | 4     |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:HE2  | 0.70     | 1.44        | 4      | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.70     | 1.63        | 8      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:CG2  | 0.70     | 2.16        | 9      | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HA   | 0.70     | 1.62        | 15     | 8     |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:CG   | 0.70     | 2.16        | 16     | 1     |
| 1:A:653:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.70     | 1.47        | 13     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HA   | 0.70     | 1.62        | 19     | 2     |
| 1:A:792:PHE:HA   | 1:A:795:ARG:NH2  | 0.70     | 2.02        | 6      | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:HB3  | 0.70     | 1.63        | 9      | 2     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:765:VAL:N    | 0.70     | 2.02        | 12     | 3     |
| 1:A:761:PHE:CD1  | 1:A:761:PHE:C    | 0.70     | 2.65        | 5      | 7     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:HG12 | 0.70     | 1.87        | 3      | 2     |
| 1:A:761:PHE:C    | 1:A:761:PHE:HD1  | 0.70     | 1.90        | 18     | 6     |
| 1:A:765:VAL:HA   | 1:A:768:MET:HG3  | 0.70     | 1.64        | 20     | 2     |
| 1:A:792:PHE:HA   | 1:A:795:ARG:CZ   | 0.70     | 2.16        | 6      | 1     |
| 1:A:746:ARG:HG2  | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.70     | 2.22        | 13     | 6     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:745:ALA:HB3  | 0.69     | 1.87        | 11     | 9     |
| 1:A:660:PRO:HG3  | 1:A:664:TRP:CD1  | 0.69     | 2.22        | 16     | 2     |
| 1:A:737:THR:C    | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.69     | 2.08        | 15     | 2     |
| 1:A:745:ALA:C    | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.69     | 2.07        | 11     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.69     | 2.22        | 17     | 5     |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:CG   | 0.69     | 2.22        | 9      | 4     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CA   | 0.69     | 2.17        | 13     | 4     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:CB   | 0.69     | 2.17        | 13     | 2     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.69     | 2.22        | 13     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:N    | 0.69     | 2.03        | 5      | 4     |
| 1:A:740:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE   | 0.69     | 2.17        | 5      | 2     |
| 1:A:755:TYR:O    | 1:A:756:SER:HB2  | 0.69     | 1.87        | 4      | 1     |
| 1:A:769:PHE:O    | 1:A:773:ASN:HB2  | 0.69     | 1.87        | 8      | 12    |
| 1:A:703:LYS:CE   | 1:A:799:ALA:HB3  | 0.69     | 2.18        | 18     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.69     | 2.18        | 12     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HD3  | 0.69     | 1.64        | 15     | 3     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:718:ARG:HB2  | 0.69     | 1.88        | 5      | 10    |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:660:PRO:HG3  | 0.69     | 1.63        | 9      | 3     |
| 1:A:786:ILE:HD12 | 1:A:789:GLN:NE2  | 0.69     | 2.03        | 7      | 2     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:668:LEU:N    | 0.69     | 2.26        | 11     | 11    |
| 1:A:717:CYS:HB2  | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.69     | 2.17        | 19     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HG2  | 1:A:755:TYR:CG   | 0.69     | 2.23        | 3      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:CD   | 0.69     | 2.17        | 11     | 6     |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.69     | 2.22        | 17     | 3     |
| 1:A:766:GLY:HA2  | 1:A:769:PHE:CD2  | 0.69     | 2.23        | 5      | 4     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.69     | 1.88        | 5      | 6     |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.68     | 2.22        | 19     | 6     |
| 1:A:740:LEU:O    | 1:A:744:ARG:HB3  | 0.68     | 1.88        | 8      | 12    |
| 1:A:768:MET:O    | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.68     | 1.88        | 6      | 11    |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.68     | 2.23        | 20     | 7     |
| 1:A:660:PRO:HB2  | 1:A:664:TRP:HB2  | 0.68     | 1.64        | 3      | 12    |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HD2  | 0.68     | 1.66        | 6      | 2     |
| 1:A:708:LEU:HB3  | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.68     | 1.47        | 17     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.68     | 1.63        | 2      | 5     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.68     | 1.64        | 14     | 3     |
| 1:A:665:SER:HB2  | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.68     | 1.66        | 4      | 6     |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.68     | 1.64        | 16     | 1     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.68     | 1.88        | 10     | 2     |
| 1:A:755:TYR:CD2  | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.68     | 2.24        | 6      | 1     |
| 1:A:724:ALA:HB2  | 1:A:737:THR:O    | 0.68     | 1.88        | 11     | 3     |
| 1:A:742:LEU:HD22 | 1:A:746:ARG:NH2  | 0.68     | 2.04        | 11     | 1     |
| 1:A:654:PRO:HA   | 1:A:748:GLN:NE2  | 0.68     | 2.04        | 6      | 10    |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.68     | 2.23        | 8      | 6     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:HB3  | 0.68     | 1.88        | 7      | 7     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.68     | 2.19        | 13     | 1     |
| 1:A:628:CYS:SG   | 1:A:630:VAL:CG1  | 0.68     | 2.78        | 9      | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.68     | 2.17        | 9      | 6     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.68     | 1.89        | 18     | 3     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:766:GLY:O    | 1:A:770:LYS:HG2  | 0.68     | 1.89        | 18     | 3     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:768:MET:HG3  | 0.68     | 2.19        | 5      | 4     |
| 1:A:738:LEU:HB2  | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.68     | 1.66        | 7      | 3     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.68     | 1.64        | 19     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:769:PHE:CE1  | 0.68     | 2.24        | 11     | 1     |
| 1:A:703:LYS:CB   | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.68     | 2.18        | 3      | 8     |
| 1:A:637:LEU:HG   | 1:A:646:CYS:HB3  | 0.68     | 1.65        | 10     | 2     |
| 1:A:788:LEU:HD13 | 1:A:788:LEU:N    | 0.67     | 2.02        | 8      | 1     |
| 1:A:716:PRO:HG2  | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.67     | 1.66        | 9      | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:HG   | 0.67     | 1.88        | 3      | 3     |
| 1:A:755:TYR:CE2  | 1:A:760:GLU:HB3  | 0.67     | 2.24        | 13     | 3     |
| 1:A:746:ARG:HD3  | 1:A:751:LEU:HG   | 0.67     | 1.65        | 18     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.67     | 2.18        | 16     | 1     |
| 1:A:703:LYS:O    | 1:A:707:VAL:HG23 | 0.67     | 1.89        | 7      | 7     |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:CA   | 0.67     | 2.19        | 17     | 6     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.67     | 1.65        | 5      | 8     |
| 1:A:767:ARG:HA   | 1:A:770:LYS:HB2  | 0.67     | 1.67        | 11     | 7     |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:CE   | 0.67     | 2.18        | 16     | 4     |
| 1:A:740:LEU:O    | 1:A:744:ARG:CB   | 0.67     | 2.43        | 16     | 10    |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:739:ASP:CB   | 0.67     | 2.42        | 6      | 7     |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:795:ARG:HH21 | 0.67     | 1.45        | 6      | 1     |
| 1:A:628:CYS:O    | 1:A:631:CYS:N    | 0.67     | 2.27        | 9      | 10    |
| 1:A:711:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.67     | 2.20        | 4      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.67     | 2.25        | 11     | 4     |
| 1:A:761:PHE:C    | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.67     | 2.68        | 18     | 9     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.67     | 1.65        | 6      | 3     |
| 1:A:721:HIS:CD2  | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.67     | 2.24        | 4      | 8     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.67     | 1.65        | 3      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:CD1  | 0.67     | 2.15        | 18     | 6     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:761:PHE:O    | 0.67     | 1.90        | 2      | 1     |
| 1:A:721:HIS:O    | 1:A:741:THR:HG22 | 0.66     | 1.90        | 14     | 3     |
| 1:A:712:PHE:CE2  | 1:A:740:LEU:HB3  | 0.66     | 2.24        | 6      | 5     |
| 1:A:769:PHE:HE2  | 1:A:789:GLN:N    | 0.66     | 1.87        | 15     | 1     |
| 1:A:744:ARG:O    | 1:A:747:LEU:HB2  | 0.66     | 1.90        | 15     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.66     | 1.65        | 7      | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:CG1  | 0.66     | 2.20        | 19     | 1     |
| 1:A:660:PRO:HG2  | 1:A:664:TRP:CG   | 0.66     | 2.26        | 3      | 6     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.66     | 1.89        | 16     | 9     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:H    | 0.66     | 1.50        | 17     | 1     |
| 1:A:762:ALA:HA   | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.66     | 1.68        | 1      | 3     |
| 1:A:666:CYS:SG   | 1:A:668:LEU:HD13 | 0.66     | 2.31        | 20     | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:696:LEU:H    | 0.66     | 1.48        | 8      | 1     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:718:ARG:C    | 0.66     | 2.34        | 3      | 19    |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.66     | 2.21        | 18     | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG12 | 1:A:631:CYS:N    | 0.66     | 2.05        | 20     | 7     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.66     | 2.25        | 18     | 3     |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1  | 0.66     | 1.67        | 17     | 2     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:647:PHE:O    | 0.66     | 1.90        | 5      | 10    |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:708:LEU:H    | 0.66     | 1.51        | 5      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HG2  | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.66     | 1.67        | 5      | 2     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:654:PRO:HG2  | 0.66     | 2.05        | 15     | 4     |
| 1:A:756:SER:O    | 1:A:757:SER:OG   | 0.66     | 2.14        | 13     | 1     |
| 1:A:701:GLN:N    | 1:A:757:SER:HB3  | 0.66     | 2.05        | 13     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:N    | 0.66     | 2.06        | 17     | 4     |
| 1:A:769:PHE:CD2  | 1:A:789:GLN:HG2  | 0.66     | 2.25        | 17     | 13    |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.66     | 1.66        | 15     | 1     |
| 1:A:784:SER:O    | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.66     | 1.90        | 15     | 1     |
| 1:A:746:ARG:NE   | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.66     | 2.06        | 2      | 2     |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:HG2  | 0.66     | 1.67        | 13     | 2     |
| 1:A:710:ALA:HB1  | 1:A:795:ARG:HD2  | 0.66     | 1.67        | 6      | 1     |
| 1:A:755:TYR:HE1  | 1:A:761:PHE:HB3  | 0.66     | 1.51        | 18     | 6     |
| 1:A:785:ILE:HA   | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.66     | 1.67        | 7      | 4     |
| 1:A:653:LEU:N    | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.66     | 2.05        | 13     | 3     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HB3  | 0.66     | 2.25        | 13     | 2     |
| 1:A:745:ALA:O    | 1:A:748:GLN:N    | 0.66     | 2.29        | 9      | 2     |
| 1:A:772:PHE:HA   | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.66     | 1.66        | 7      | 5     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:669:CYS:N    | 0.66     | 2.29        | 16     | 11    |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:CG   | 0.66     | 2.21        | 15     | 9     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:705:GLU:HG3  | 0.66     | 2.06        | 7      | 3     |
| 1:A:647:PHE:C    | 1:A:649:LEU:H    | 0.65     | 1.94        | 2      | 17    |
| 1:A:746:ARG:HG2  | 1:A:755:TYR:CD1  | 0.65     | 2.26        | 3      | 2     |
| 1:A:706:ARG:HD3  | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.65     | 1.66        | 2      | 2     |
| 1:A:717:CYS:HB3  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.65     | 1.68        | 13     | 2     |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:708:LEU:N    | 0.65     | 2.06        | 5      | 1     |
| 1:A:648:HIS:HB2  | 1:A:651:CYS:SG   | 0.65     | 2.31        | 19     | 11    |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:HE1  | 0.65     | 1.68        | 3      | 2     |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CG   | 0.65     | 2.25        | 5      | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:705:GLU:HA   | 0.65     | 2.21        | 13     | 3     |
| 1:A:711:LEU:HB3  | 1:A:717:CYS:SG   | 0.65     | 2.31        | 20     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.65     | 2.26        | 13     | 1     |
| 1:A:753:PRO:HB2  | 1:A:754:PRO:CD   | 0.65     | 2.21        | 6      | 15    |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:767:ARG:HD2  | 0.65     | 2.22        | 3      | 4     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:746:ARG:HD3  | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.65     | 1.69        | 14     | 1     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:670:HIS:N    | 0.65     | 2.30        | 5      | 10    |
| 1:A:695:LYS:C    | 1:A:756:SER:HA   | 0.65     | 2.11        | 5      | 5     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.65     | 2.05        | 17     | 1     |
| 1:A:765:VAL:HG23 | 1:A:769:PHE:CE2  | 0.65     | 2.26        | 19     | 1     |
| 1:A:667:SER:HB3  | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.65     | 1.68        | 4      | 2     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:649:LEU:HB3  | 0.65     | 1.90        | 12     | 1     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:789:GLN:C    | 0.65     | 2.35        | 18     | 7     |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.65     | 2.26        | 18     | 7     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CB   | 0.65     | 2.21        | 18     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HG   | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.65     | 1.69        | 4      | 1     |
| 1:A:712:PHE:CE1  | 1:A:740:LEU:HB3  | 0.65     | 2.26        | 9      | 7     |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:CD2  | 0.65     | 2.26        | 18     | 6     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.65     | 2.84        | 20     | 1     |
| 1:A:645:PHE:CE1  | 1:A:666:CYS:SG   | 0.65     | 2.90        | 19     | 1     |
| 1:A:755:TYR:CE1  | 1:A:760:GLU:CB   | 0.65     | 2.80        | 12     | 2     |
| 1:A:711:LEU:HD22 | 1:A:792:PHE:CD2  | 0.65     | 2.26        | 16     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HB2  | 1:A:761:PHE:HD2  | 0.65     | 1.52        | 5      | 1     |
| 1:A:659:VAL:CG1  | 1:A:660:PRO:CD   | 0.65     | 2.73        | 16     | 1     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:767:ARG:N    | 0.65     | 2.30        | 6      | 8     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.65     | 1.69        | 17     | 1     |
| 1:A:705:GLU:N    | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.65     | 2.07        | 3      | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.65     | 1.66        | 2      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:H    | 0.64     | 1.52        | 19     | 4     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HB3  | 0.64     | 1.69        | 8      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:CG   | 0.64     | 2.21        | 17     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.64     | 1.68        | 4      | 1     |
| 1:A:740:LEU:O    | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.64     | 1.92        | 9      | 7     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.64     | 2.80        | 3      | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CA   | 0.64     | 2.22        | 19     | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:C    | 0.64     | 2.13        | 7      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.64     | 2.26        | 9      | 5     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.64     | 2.23        | 18     | 6     |
| 1:A:714:HIS:CE1  | 1:A:791:PHE:CE1  | 0.64     | 2.85        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:H    | 0.64     | 1.48        | 13     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HB3  | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.64     | 1.68        | 11     | 3     |
| 1:A:786:ILE:HA   | 1:A:789:GLN:HB2  | 0.64     | 1.68        | 7      | 20    |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:HB   | 0.64     | 1.93        | 6      | 9     |
| 1:A:739:ASP:HA   | 1:A:768:MET:SD   | 0.64     | 2.31        | 1      | 4     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:705:GLU:N    | 0.64     | 2.70        | 20     | 2     |
| 1:A:755:TYR:HB3  | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.64     | 1.69        | 20     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:758:PRO:HB3  | 0.64     | 1.68        | 2      | 2     |
| 1:A:757:SER:CB   | 1:A:758:PRO:HD2  | 0.64     | 2.23        | 13     | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.64     | 2.22        | 8      | 7     |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CE1  | 0.64     | 2.28        | 19     | 6     |
| 1:A:740:LEU:HG   | 1:A:768:MET:SD   | 0.64     | 2.33        | 10     | 5     |
| 1:A:703:LYS:HD2  | 1:A:704:CYS:N    | 0.64     | 2.07        | 15     | 1     |
| 1:A:755:TYR:CE2  | 1:A:761:PHE:HB3  | 0.64     | 2.27        | 20     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:792:PHE:CZ   | 0.64     | 2.26        | 16     | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:751:LEU:H    | 0.64     | 1.52        | 9      | 5     |
| 1:A:628:CYS:O    | 1:A:632:GLN:N    | 0.64     | 2.30        | 8      | 12    |
| 1:A:652:HIS:ND1  | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.64     | 2.07        | 12     | 2     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HG3  | 0.64     | 2.21        | 17     | 3     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.64     | 2.23        | 3      | 4     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:758:PRO:HG3  | 0.64     | 1.93        | 1      | 8     |
| 1:A:747:LEU:CG   | 1:A:755:TYR:OH   | 0.64     | 2.45        | 20     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.64     | 2.28        | 18     | 4     |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:775:LEU:HD11 | 0.64     | 1.69        | 17     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HB3  | 1:A:654:PRO:CD   | 0.63     | 2.23        | 14     | 6     |
| 1:A:714:HIS:O    | 1:A:717:CYS:SG   | 0.63     | 2.56        | 5      | 18    |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:CD   | 0.63     | 2.23        | 19     | 11    |
| 1:A:785:ILE:C    | 1:A:789:GLN:HG3  | 0.63     | 2.12        | 1      | 4     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:HG   | 0.63     | 1.70        | 18     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:O    | 0.63     | 1.92        | 15     | 2     |
| 1:A:653:LEU:O    | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.63     | 1.92        | 20     | 9     |
| 1:A:762:ALA:HA   | 1:A:765:VAL:CG1  | 0.63     | 2.23        | 5      | 5     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:HE3  | 0.63     | 1.69        | 8      | 2     |
| 1:A:649:LEU:HG   | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.63     | 1.70        | 12     | 1     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:762:ALA:N    | 0.63     | 2.32        | 20     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:658:ASP:CA   | 0.63     | 2.23        | 12     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:664:TRP:CE3  | 0.63     | 2.27        | 9      | 9     |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.63     | 2.28        | 8      | 2     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.63     | 1.71        | 9      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:CG   | 0.63     | 2.23        | 6      | 2     |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.63     | 1.54        | 15     | 1     |
| 1:A:757:SER:HB3  | 1:A:758:PRO:CD   | 0.63     | 2.23        | 20     | 1     |
| 1:A:758:PRO:HB2  | 1:A:762:ALA:HB2  | 0.63     | 1.70        | 20     | 1     |
| 1:A:652:HIS:HB2  | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.63     | 1.71        | 16     | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:H    | 0.63     | 1.54        | 1      | 2     |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:786:ILE:HD13 | 0.63     | 1.94        | 19     | 5     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.63     | 2.23        | 19     | 3     |
| 1:A:794:THR:O    | 1:A:798:GLU:HG3  | 0.63     | 1.94        | 20     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:738:LEU:C    | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.63     | 2.14        | 7      | 2     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HE3  | 0.63     | 2.17        | 19     | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.63     | 2.23        | 3      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:HB2  | 0.63     | 1.69        | 13     | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:CB   | 0.63     | 2.18        | 9      | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:CG   | 0.63     | 2.22        | 7      | 6     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.63     | 2.28        | 2      | 5     |
| 1:A:711:LEU:C    | 1:A:717:CYS:SG   | 0.62     | 2.77        | 17     | 3     |
| 1:A:746:ARG:HE   | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.62     | 1.54        | 2      | 2     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:768:MET:HG3  | 0.62     | 1.94        | 6      | 1     |
| 1:A:665:SER:HB3  | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.62     | 1.70        | 11     | 1     |
| 1:A:743:ILE:CG2  | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.62     | 2.82        | 17     | 8     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CB   | 0.62     | 2.24        | 8      | 3     |
| 1:A:718:ARG:HG3  | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.62     | 1.71        | 4      | 2     |
| 1:A:759:GLN:O    | 1:A:763:GLN:HB2  | 0.62     | 1.94        | 8      | 13    |
| 1:A:765:VAL:HA   | 1:A:768:MET:HB2  | 0.62     | 1.69        | 16     | 14    |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:CE   | 0.62     | 2.23        | 3      | 4     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.62     | 1.95        | 5      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:CA   | 0.62     | 2.24        | 16     | 2     |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:647:PHE:CE2  | 0.62     | 2.29        | 9      | 1     |
| 1:A:769:PHE:HB3  | 1:A:785:ILE:CG2  | 0.62     | 2.23        | 11     | 3     |
| 1:A:755:TYR:CE2  | 1:A:758:PRO:HA   | 0.62     | 2.30        | 16     | 7     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.62     | 1.70        | 18     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:656:LEU:CD2  | 0.62     | 2.24        | 17     | 2     |
| 1:A:628:CYS:N    | 1:A:637:LEU:HG   | 0.62     | 2.09        | 3      | 5     |
| 1:A:666:CYS:SG   | 1:A:668:LEU:CD1  | 0.62     | 2.87        | 20     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD23 | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.62     | 1.70        | 16     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.62     | 2.23        | 16     | 1     |
| 1:A:785:ILE:HA   | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.62     | 1.69        | 11     | 1     |
| 1:A:716:PRO:HB2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.62     | 2.25        | 8      | 2     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:646:CYS:SG   | 0.62     | 2.55        | 2      | 13    |
| 1:A:703:LYS:HG3  | 1:A:800:PHE:CD1  | 0.62     | 2.30        | 15     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.62     | 2.08        | 17     | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.62     | 2.10        | 5      | 1     |
| 1:A:755:TYR:HE2  | 1:A:761:PHE:HB3  | 0.62     | 1.54        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:758:PRO:N    | 0.62     | 2.09        | 7      | 1     |
| 1:A:743:ILE:CD1  | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.62     | 2.24        | 19     | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.62     | 1.95        | 14     | 4     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.62     | 1.69        | 2      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.62     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HD2  | 0.62     | 1.53        | 8      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.62     | 1.71        | 7      | 4     |
| 1:A:746:ARG:HH11 | 1:A:746:ARG:HA   | 0.62     | 1.54        | 3      | 1     |
| 1:A:656:LEU:HB3  | 1:A:659:VAL:HB   | 0.62     | 1.71        | 16     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.62     | 2.24        | 1      | 4     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:705:GLU:O    | 0.62     | 2.48        | 17     | 6     |
| 1:A:665:SER:CB   | 1:A:669:CYS:SG   | 0.62     | 2.87        | 7      | 5     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:711:LEU:N    | 0.62     | 2.33        | 18     | 1     |
| 1:A:755:TYR:H    | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.62     | 1.55        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:760:GLU:OE2  | 0.62     | 1.95        | 6      | 1     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:652:HIS:CG   | 0.62     | 2.53        | 14     | 2     |
| 1:A:740:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HE3  | 0.62     | 2.25        | 2      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.62     | 1.72        | 15     | 2     |
| 1:A:645:PHE:CD2  | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.62     | 2.29        | 16     | 2     |
| 1:A:639:MET:HA   | 1:A:645:PHE:O    | 0.62     | 1.93        | 2      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.62     | 1.70        | 7      | 2     |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:HG2  | 0.62     | 1.72        | 16     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CG   | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.62     | 2.25        | 14     | 4     |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:HB   | 0.62     | 1.55        | 18     | 3     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:CD1  | 0.62     | 2.23        | 4      | 2     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:759:GLN:C    | 0.62     | 2.36        | 20     | 2     |
| 1:A:668:LEU:CD2  | 1:A:710:ALA:HB2  | 0.61     | 2.22        | 5      | 3     |
| 1:A:696:LEU:N    | 1:A:756:SER:HA   | 0.61     | 2.10        | 3      | 3     |
| 1:A:652:HIS:HD1  | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.61     | 1.54        | 12     | 1     |
| 1:A:717:CYS:HB3  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.61     | 1.72        | 9      | 2     |
| 1:A:755:TYR:CE2  | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.61     | 2.30        | 6      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.61     | 2.29        | 11     | 5     |
| 1:A:717:CYS:HB2  | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.61     | 2.25        | 5      | 5     |
| 1:A:660:PRO:O    | 1:A:662:GLU:N    | 0.61     | 2.33        | 19     | 8     |
| 1:A:768:MET:O    | 1:A:772:PHE:CB   | 0.61     | 2.48        | 4      | 10    |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:NE2  | 0.61     | 2.10        | 1      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HA   | 1:A:796:MET:HE3  | 0.61     | 1.71        | 13     | 5     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.61     | 2.17        | 3      | 5     |
| 1:A:710:ALA:HB2  | 1:A:795:ARG:HB2  | 0.61     | 1.71        | 3      | 2     |
| 1:A:745:ALA:CB   | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.61     | 2.25        | 17     | 7     |
| 1:A:701:GLN:HE22 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.61     | 1.54        | 1      | 1     |
| 1:A:668:LEU:O    | 1:A:668:LEU:HD22 | 0.61     | 1.95        | 20     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.61     | 1.72        | 19     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:697:SER:N    | 0.61     | 2.08        | 16     | 2     |
| 1:A:629:ARG:CZ   | 1:A:647:PHE:CD1  | 0.61     | 2.83        | 9      | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:758:PRO:HA   | 0.61     | 2.34        | 3      | 7     |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:HG2  | 0.61     | 1.71        | 14     | 3     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:703:LYS:HG3  | 1:A:800:PHE:CE1  | 0.61     | 2.30        | 15     | 2     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.61     | 1.96        | 4      | 2     |
| 1:A:701:GLN:HG3  | 1:A:704:CYS:SG   | 0.61     | 2.36        | 20     | 1     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:669:CYS:HB2  | 0.61     | 1.96        | 1      | 9     |
| 1:A:630:VAL:HA   | 1:A:713:CYS:HA   | 0.61     | 1.72        | 14     | 6     |
| 1:A:720:LEU:CA   | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.61     | 2.22        | 12     | 5     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:742:LEU:N    | 0.61     | 2.33        | 10     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CZ   | 0.61     | 2.26        | 17     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:CB   | 0.61     | 2.25        | 16     | 1     |
| 1:A:755:TYR:CZ   | 1:A:761:PHE:HB3  | 0.61     | 2.31        | 11     | 4     |
| 1:A:667:SER:C    | 1:A:669:CYS:H    | 0.61     | 1.98        | 9      | 10    |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:659:VAL:H    | 0.61     | 2.08        | 1      | 5     |
| 1:A:765:VAL:CG1  | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.61     | 2.84        | 13     | 13    |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:CA   | 0.61     | 2.23        | 11     | 3     |
| 1:A:745:ALA:O    | 1:A:749:GLU:N    | 0.61     | 2.34        | 11     | 15    |
| 1:A:653:LEU:HB3  | 1:A:654:PRO:HD3  | 0.61     | 1.73        | 5      | 15    |
| 1:A:793:GLU:O    | 1:A:797:ASN:HB2  | 0.61     | 1.96        | 13     | 12    |
| 1:A:712:PHE:O    | 1:A:717:CYS:SG   | 0.61     | 2.58        | 18     | 11    |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.61     | 2.35        | 17     | 1     |
| 1:A:740:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:SD   | 0.61     | 2.35        | 6      | 3     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.61     | 1.73        | 20     | 4     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:666:CYS:C    | 0.61     | 2.38        | 9      | 8     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:HB2  | 0.61     | 1.73        | 14     | 6     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:712:PHE:HB2  | 0.61     | 1.96        | 12     | 3     |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:HA   | 0.61     | 1.72        | 7      | 1     |
| 1:A:702:ARG:HG3  | 1:A:703:LYS:HD3  | 0.61     | 1.73        | 19     | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:N    | 0.61     | 2.33        | 13     | 10    |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.61     | 2.36        | 20     | 1     |
| 1:A:788:LEU:HD23 | 1:A:789:GLN:N    | 0.61     | 2.11        | 11     | 1     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CD   | 0.61     | 2.26        | 1      | 16    |
| 1:A:712:PHE:CZ   | 1:A:744:ARG:HD3  | 0.61     | 2.30        | 13     | 7     |
| 1:A:703:LYS:HE2  | 1:A:799:ALA:HB3  | 0.61     | 1.71        | 18     | 2     |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CD2  | 0.61     | 2.31        | 16     | 4     |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:647:PHE:HB2  | 0.61     | 1.71        | 17     | 1     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:718:ARG:HB3  | 0.61     | 1.96        | 2      | 3     |
| 1:A:695:LYS:HB3  | 1:A:756:SER:HB2  | 0.61     | 1.72        | 13     | 1     |
| 1:A:667:SER:HB3  | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.61     | 2.26        | 9      | 1     |
| 1:A:753:PRO:N    | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.60     | 2.10        | 1      | 2     |
| 1:A:755:TYR:CD1  | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.60     | 2.31        | 7      | 4     |
| 1:A:746:ARG:HD2  | 1:A:751:LEU:HB3  | 0.60     | 1.72        | 3      | 1     |
| 1:A:645:PHE:CB   | 1:A:666:CYS:SG   | 0.60     | 2.90        | 1      | 3     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:627:ILE:O    | 1:A:629:ARG:N    | 0.60     | 2.34        | 5      | 13    |
| 1:A:758:PRO:HB3  | 1:A:800:PHE:HZ   | 0.60     | 1.55        | 4      | 2     |
| 1:A:637:LEU:HD12 | 1:A:647:PHE:C    | 0.60     | 2.16        | 10     | 1     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:711:LEU:HB2  | 0.60     | 1.96        | 17     | 2     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:634:PRO:HA   | 0.60     | 1.96        | 3      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:757:SER:C    | 0.60     | 2.15        | 13     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HE1  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.60     | 1.53        | 9      | 1     |
| 1:A:752:SER:CB   | 1:A:753:PRO:HD3  | 0.60     | 2.25        | 12     | 5     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.60     | 1.73        | 18     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:660:PRO:C    | 0.60     | 2.17        | 16     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HB2  | 0.60     | 1.72        | 15     | 4     |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HG12 | 0.60     | 1.56        | 10     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CZ   | 0.60     | 2.27        | 17     | 1     |
| 1:A:761:PHE:CD2  | 1:A:762:ALA:N    | 0.60     | 2.70        | 1      | 1     |
| 1:A:655:ALA:HB1  | 1:A:657:GLN:HG3  | 0.60     | 1.73        | 15     | 1     |
| 1:A:647:PHE:CD2  | 1:A:664:TRP:CH2  | 0.60     | 2.89        | 2      | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:CG2  | 0.60     | 2.26        | 2      | 3     |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CB   | 0.60     | 2.26        | 13     | 2     |
| 1:A:744:ARG:C    | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.60     | 2.17        | 6      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:HD23 | 0.60     | 1.72        | 14     | 6     |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:O    | 0.60     | 1.96        | 1      | 3     |
| 1:A:720:LEU:CG   | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.60     | 2.26        | 7      | 3     |
| 1:A:710:ALA:HB2  | 1:A:795:ARG:CG   | 0.60     | 2.26        | 3      | 1     |
| 1:A:762:ALA:CA   | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.60     | 2.26        | 5      | 2     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.60     | 1.74        | 6      | 4     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:CD2  | 0.60     | 2.27        | 16     | 4     |
| 1:A:627:ILE:HA   | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.60     | 1.72        | 8      | 2     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:656:LEU:CB   | 0.60     | 2.80        | 12     | 4     |
| 1:A:762:ALA:O    | 1:A:765:VAL:HB   | 0.60     | 1.97        | 8      | 12    |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:703:LYS:HG3  | 0.60     | 1.97        | 8      | 10    |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.60     | 2.25        | 13     | 3     |
| 1:A:708:LEU:N    | 1:A:761:PHE:HZ   | 0.60     | 1.94        | 13     | 2     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:647:PHE:O    | 0.60     | 2.49        | 11     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CB   | 0.60     | 2.25        | 12     | 10    |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:HE2  | 0.60     | 1.72        | 13     | 4     |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.60     | 1.74        | 14     | 1     |
| 1:A:703:LYS:HZ3  | 1:A:799:ALA:HB3  | 0.60     | 1.57        | 18     | 2     |
| 1:A:795:ARG:HA   | 1:A:798:GLU:HB2  | 0.60     | 1.73        | 6      | 8     |
| 1:A:702:ARG:O    | 1:A:706:ARG:HG3  | 0.60     | 1.97        | 10     | 2     |
| 1:A:771:GLN:C    | 1:A:775:LEU:HD13 | 0.60     | 2.17        | 7      | 2     |
| 1:A:744:ARG:HE   | 1:A:750:LYS:HZ3  | 0.60     | 1.39        | 4      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.60     | 1.72        | 11     | 4     |
| 1:A:649:LEU:CA   | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.60     | 2.27        | 16     | 3     |
| 1:A:765:VAL:CG2  | 1:A:792:PHE:CE1  | 0.60     | 2.85        | 19     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CD2  | 0.60     | 2.26        | 8      | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:647:PHE:CD2  | 0.60     | 2.31        | 9      | 1     |
| 1:A:629:ARG:HH22 | 1:A:666:CYS:HB2  | 0.60     | 1.57        | 9      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:CG   | 0.59     | 2.27        | 14     | 5     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CA   | 0.59     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.59     | 2.12        | 9      | 1     |
| 1:A:635:GLY:C    | 1:A:637:LEU:H    | 0.59     | 2.00        | 11     | 1     |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:702:ARG:HB2  | 0.59     | 1.97        | 20     | 12    |
| 1:A:626:THR:C    | 1:A:627:ILE:HG13 | 0.59     | 2.17        | 6      | 14    |
| 1:A:709:LEU:HA   | 1:A:712:PHE:HB2  | 0.59     | 1.73        | 8      | 10    |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:649:LEU:HB2  | 0.59     | 1.97        | 20     | 12    |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:N    | 0.59     | 2.12        | 13     | 7     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:764:ASP:N    | 0.59     | 2.35        | 20     | 2     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59     | 1.72        | 5      | 1     |
| 1:A:746:ARG:N    | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.59     | 2.11        | 7      | 4     |
| 1:A:666:CYS:SG   | 1:A:666:CYS:O    | 0.59     | 2.61        | 11     | 3     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:650:ASP:N    | 0.59     | 2.35        | 19     | 3     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:742:LEU:HG   | 0.59     | 1.97        | 18     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.59     | 2.27        | 2      | 4     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:703:LYS:CE   | 0.59     | 2.51        | 15     | 1     |
| 1:A:772:PHE:HE2  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.59     | 1.54        | 4      | 1     |
| 1:A:773:ASN:ND2  | 1:A:782:VAL:HG12 | 0.59     | 2.13        | 11     | 2     |
| 1:A:656:LEU:CG   | 1:A:660:PRO:HD3  | 0.59     | 2.27        | 18     | 6     |
| 1:A:773:ASN:ND2  | 1:A:782:VAL:HA   | 0.59     | 2.13        | 1      | 12    |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:714:HIS:NE2  | 0.59     | 2.12        | 17     | 2     |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:748:GLN:HG3  | 0.59     | 2.28        | 2      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.59     | 1.72        | 5      | 1     |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:CG   | 0.59     | 2.09        | 15     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.59     | 1.73        | 4      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HD3  | 1:A:800:PHE:HA   | 0.59     | 1.73        | 13     | 4     |
| 1:A:717:CYS:CB   | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59     | 2.27        | 13     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:757:SER:HA   | 0.59     | 1.75        | 8      | 1     |
| 1:A:755:TYR:OH   | 1:A:761:PHE:CG   | 0.59     | 2.55        | 17     | 5     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:666:CYS:SG   | 0.59     | 2.60        | 9      | 3     |
| 1:A:740:LEU:HA   | 1:A:743:ILE:CD1  | 0.59     | 2.28        | 10     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:638:VAL:O    | 0.59     | 1.97        | 1      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HG3  | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.59     | 1.74        | 16     | 2     |
| 1:A:761:PHE:HA   | 1:A:764:ASP:OD1  | 0.59     | 1.96        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:789:GLN:HA   | 0.59     | 2.32        | 12     | 10    |
| 1:A:656:LEU:C    | 1:A:658:ASP:H    | 0.59     | 1.99        | 4      | 7     |
| 1:A:757:SER:HB3  | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.59     | 1.75        | 7      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.59     | 1.73        | 13     | 2     |
| 1:A:740:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:SD   | 0.59     | 2.90        | 16     | 1     |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CE2  | 0.59     | 2.32        | 4      | 10    |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:710:ALA:HB3  | 0.59     | 1.97        | 16     | 6     |
| 1:A:746:ARG:HB3  | 1:A:755:TYR:CZ   | 0.59     | 2.33        | 5      | 3     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:O    | 0.59     | 1.97        | 13     | 2     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:659:VAL:CG2  | 0.59     | 2.27        | 16     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CB   | 0.59     | 2.27        | 11     | 2     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:655:ALA:N    | 0.59     | 2.36        | 18     | 13    |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:721:HIS:CE1  | 0.59     | 2.33        | 9      | 2     |
| 1:A:737:THR:HA   | 1:A:771:GLN:HG3  | 0.59     | 1.74        | 13     | 5     |
| 1:A:703:LYS:HD3  | 1:A:796:MET:HE2  | 0.59     | 1.74        | 15     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HG3  | 1:A:755:TYR:C    | 0.59     | 2.18        | 4      | 1     |
| 1:A:751:LEU:HD21 | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.59     | 1.74        | 11     | 1     |
| 1:A:626:THR:HA   | 1:A:646:CYS:SG   | 0.59     | 2.38        | 16     | 3     |
| 1:A:710:ALA:HB2  | 1:A:795:ARG:CB   | 0.59     | 2.28        | 3      | 2     |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CE2  | 0.59     | 2.32        | 13     | 5     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:666:CYS:O    | 0.59     | 2.21        | 16     | 4     |
| 1:A:761:PHE:CG   | 1:A:762:ALA:N    | 0.59     | 2.70        | 7      | 4     |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:714:HIS:CE1  | 0.59     | 2.56        | 4      | 1     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:792:PHE:CE2  | 0.59     | 2.84        | 16     | 1     |
| 1:A:752:SER:HB2  | 1:A:753:PRO:CD   | 0.59     | 2.27        | 17     | 11    |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:792:PHE:N    | 0.59     | 2.35        | 18     | 8     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.59     | 1.98        | 14     | 1     |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:700:ASN:HB2  | 0.59     | 1.98        | 15     | 10    |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CB   | 0.59     | 2.27        | 16     | 6     |
| 1:A:723:LEU:HB2  | 1:A:737:THR:CG2  | 0.59     | 2.28        | 1      | 10    |
| 1:A:720:LEU:HA   | 1:A:723:LEU:CD2  | 0.59     | 2.23        | 12     | 10    |
| 1:A:759:GLN:O    | 1:A:763:GLN:HG3  | 0.59     | 1.98        | 1      | 7     |
| 1:A:707:VAL:HB   | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.59     | 2.32        | 6      | 5     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59     | 1.72        | 15     | 2     |
| 1:A:665:SER:HB3  | 1:A:669:CYS:SG   | 0.59     | 2.38        | 8      | 3     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:790:ARG:HD2  | 0.59     | 1.97        | 6      | 1     |
| 1:A:660:PRO:HG2  | 1:A:664:TRP:HB2  | 0.58     | 1.72        | 11     | 9     |
| 1:A:719:PRO:HB2  | 1:A:772:PHE:CZ   | 0.58     | 2.33        | 15     | 6     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.58     | 2.32        | 13     | 5     |
| 1:A:637:LEU:CB   | 1:A:646:CYS:HB3  | 0.58     | 2.28        | 13     | 4     |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:750:LYS:HB3  | 0.58     | 1.74        | 19     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:764:ASP:OD1  | 0.58     | 2.21        | 3      | 1     |
| 1:A:789:GLN:O    | 1:A:793:GLU:HB2  | 0.58     | 1.97        | 16     | 1     |
| 1:A:718:ARG:HG2  | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.58     | 1.73        | 9      | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:HG22 | 0.58     | 1.97        | 14     | 2     |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.58     | 1.74        | 14     | 2     |
| 1:A:710:ALA:HB1  | 1:A:795:ARG:HG3  | 0.58     | 1.75        | 16     | 5     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:710:ALA:N    | 0.58     | 2.36        | 1      | 5     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.58     | 1.75        | 7      | 3     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:760:GLU:N    | 0.58     | 2.36        | 20     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:660:PRO:HG3  | 0.58     | 1.74        | 3      | 1     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:627:ILE:HG13 | 0.58     | 1.98        | 19     | 6     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.58     | 2.33        | 16     | 4     |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:HB2  | 0.58     | 1.74        | 7      | 1     |
| 1:A:627:ILE:C    | 1:A:646:CYS:SG   | 0.58     | 2.81        | 19     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD2  | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.58     | 2.84        | 9      | 2     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.58     | 2.14        | 12     | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.58     | 2.66        | 15     | 2     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.58     | 2.28        | 16     | 1     |
| 1:A:717:CYS:HB2  | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.58     | 1.73        | 11     | 3     |
| 1:A:753:PRO:O    | 1:A:754:PRO:O    | 0.58     | 2.21        | 4      | 4     |
| 1:A:628:CYS:HA   | 1:A:646:CYS:O    | 0.58     | 1.99        | 15     | 14    |
| 1:A:738:LEU:N    | 1:A:738:LEU:CD1  | 0.58     | 2.61        | 6      | 3     |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:712:PHE:CD1  | 0.58     | 2.34        | 3      | 2     |
| 1:A:749:GLU:HG3  | 1:A:753:PRO:HA   | 0.58     | 1.75        | 19     | 2     |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HB2  | 0.58     | 1.76        | 15     | 4     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CG   | 0.58     | 2.33        | 5      | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.58     | 1.98        | 19     | 3     |
| 1:A:721:HIS:HA   | 1:A:740:LEU:HB2  | 0.58     | 1.75        | 18     | 11    |
| 1:A:747:LEU:CD1  | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.58     | 2.86        | 12     | 3     |
| 1:A:720:LEU:HG   | 1:A:768:MET:SD   | 0.58     | 2.38        | 15     | 3     |
| 1:A:628:CYS:CA   | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.58     | 2.28        | 10     | 1     |
| 1:A:644:GLU:O    | 1:A:645:PHE:C    | 0.58     | 2.42        | 17     | 8     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:738:LEU:HD22 | 0.58     | 1.98        | 15     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.58     | 2.29        | 9      | 3     |
| 1:A:701:GLN:HA   | 1:A:757:SER:HA   | 0.58     | 1.73        | 20     | 2     |
| 1:A:712:PHE:HA   | 1:A:721:HIS:CE1  | 0.58     | 2.34        | 11     | 2     |
| 1:A:769:PHE:CD1  | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.58     | 2.33        | 11     | 1     |
| 1:A:664:TRP:CG   | 1:A:665:SER:N    | 0.58     | 2.71        | 4      | 17    |
| 1:A:653:LEU:O    | 1:A:744:ARG:NE   | 0.58     | 2.37        | 12     | 2     |
| 1:A:792:PHE:O    | 1:A:796:MET:HB3  | 0.58     | 1.98        | 8      | 6     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:762:ALA:HB2  | 0.58     | 2.39        | 13     | 3     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:HA   | 0.58     | 1.76        | 12     | 5     |
| 1:A:707:VAL:CG2  | 1:A:796:MET:HB2  | 0.58     | 2.28        | 9      | 5     |
| 1:A:666:CYS:HB3  | 1:A:668:LEU:HD12 | 0.58     | 1.74        | 1      | 2     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:761:PHE:HE2  | 0.58     | 2.21        | 20     | 1     |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.58     | 2.28        | 7      | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:795:ARG:HH12 | 0.58     | 1.59        | 6      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.58     | 2.34        | 13     | 4     |
| 1:A:765:VAL:CG1  | 1:A:792:PHE:CE1  | 0.58     | 2.85        | 16     | 3     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:H    | 0.58     | 1.59        | 17     | 5     |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.58     | 2.29        | 10     | 1     |
| 1:A:748:GLN:O    | 1:A:749:GLU:HB2  | 0.58     | 1.99        | 14     | 8     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HD23 | 0.58     | 1.76        | 5      | 3     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:C    | 0.58     | 2.19        | 17     | 3     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:660:PRO:HG2  | 0.58     | 2.26        | 16     | 2     |
| 1:A:751:LEU:HG   | 1:A:752:SER:H    | 0.58     | 1.58        | 4      | 1     |
| 1:A:743:ILE:CG2  | 1:A:761:PHE:HB2  | 0.57     | 2.29        | 11     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.57     | 1.76        | 16     | 4     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:HA   | 0.57     | 2.28        | 15     | 7     |
| 1:A:717:CYS:HA   | 1:A:720:LEU:HB2  | 0.57     | 1.76        | 5      | 6     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:789:GLN:HG3  | 0.57     | 1.98        | 16     | 5     |
| 1:A:761:PHE:HD1  | 1:A:761:PHE:C    | 0.57     | 2.00        | 5      | 3     |
| 1:A:772:PHE:CG   | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.57     | 2.34        | 13     | 6     |
| 1:A:645:PHE:HB3  | 1:A:666:CYS:HB3  | 0.57     | 1.73        | 3      | 5     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:HD13 | 0.57     | 1.73        | 15     | 2     |
| 1:A:638:VAL:CG2  | 1:A:647:PHE:HB2  | 0.57     | 2.25        | 20     | 3     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:757:SER:HB2  | 0.57     | 1.76        | 13     | 2     |
| 1:A:712:PHE:CD1  | 1:A:740:LEU:HG   | 0.57     | 2.34        | 19     | 1     |
| 1:A:760:GLU:HG3  | 1:A:761:PHE:H    | 0.57     | 1.58        | 6      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.57     | 1.73        | 11     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HG   | 1:A:709:LEU:N    | 0.57     | 2.14        | 14     | 3     |
| 1:A:712:PHE:CE1  | 1:A:744:ARG:HG3  | 0.57     | 2.34        | 15     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CD2  | 0.57     | 2.33        | 8      | 1     |
| 1:A:652:HIS:ND1  | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.57     | 2.15        | 16     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.57     | 1.74        | 16     | 1     |
| 1:A:743:ILE:CD1  | 1:A:768:MET:HG3  | 0.57     | 2.28        | 16     | 7     |
| 1:A:716:PRO:HB2  | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.57     | 1.75        | 17     | 5     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:CD2  | 0.57     | 2.29        | 4      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.57     | 1.76        | 4      | 1     |
| 1:A:746:ARG:HB2  | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.57     | 1.75        | 3      | 1     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.57     | 2.49        | 16     | 1     |
| 1:A:643:CYS:O    | 1:A:645:PHE:N    | 0.57     | 2.37        | 8      | 8     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:751:LEU:HG   | 1:A:752:SER:N    | 0.57     | 2.14        | 12     | 1     |
| 1:A:639:MET:O    | 1:A:640:CYS:C    | 0.57     | 2.43        | 6      | 10    |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:712:PHE:N    | 0.57     | 2.37        | 18     | 1     |
| 1:A:627:ILE:CA   | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.57     | 2.30        | 8      | 3     |
| 1:A:647:PHE:CD2  | 1:A:652:HIS:HA   | 0.57     | 2.34        | 19     | 6     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:SD   | 0.57     | 2.40        | 19     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.57     | 2.35        | 3      | 1     |
| 1:A:752:SER:CB   | 1:A:753:PRO:CD   | 0.57     | 2.82        | 7      | 8     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HG2  | 0.57     | 1.77        | 14     | 1     |
| 1:A:626:THR:CB   | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.57     | 2.28        | 18     | 11    |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:646:CYS:SG   | 0.57     | 2.40        | 17     | 8     |
| 1:A:704:CYS:CB   | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.57     | 2.87        | 19     | 2     |
| 1:A:707:VAL:HG12 | 1:A:708:LEU:N    | 0.57     | 2.13        | 16     | 1     |
| 1:A:652:HIS:CE1  | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.57     | 2.35        | 6      | 5     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:737:THR:HG22 | 0.57     | 2.00        | 10     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:761:PHE:HZ   | 0.57     | 1.59        | 20     | 2     |
| 1:A:655:ALA:O    | 1:A:656:LEU:C    | 0.57     | 2.42        | 7      | 2     |
| 1:A:738:LEU:C    | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.57     | 2.18        | 2      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:CD1  | 0.57     | 2.28        | 15     | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:696:LEU:O    | 0.57     | 1.98        | 7      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.57     | 2.35        | 4      | 4     |
| 1:A:697:SER:HB3  | 1:A:700:ASN:HB2  | 0.57     | 1.77        | 4      | 10    |
| 1:A:754:PRO:O    | 1:A:755:TYR:O    | 0.57     | 2.23        | 4      | 2     |
| 1:A:639:MET:O    | 1:A:639:MET:HG3  | 0.57     | 1.99        | 6      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HA   | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.57     | 1.77        | 4      | 5     |
| 1:A:649:LEU:HB3  | 1:A:656:LEU:CB   | 0.57     | 2.30        | 14     | 7     |
| 1:A:773:ASN:CB   | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.57     | 2.30        | 3      | 8     |
| 1:A:773:ASN:CG   | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.57     | 2.20        | 13     | 9     |
| 1:A:634:PRO:CA   | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.57     | 2.27        | 1      | 5     |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:CD2  | 0.57     | 2.11        | 15     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:HG2  | 0.57     | 2.30        | 15     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HB2  | 1:A:772:PHE:CE2  | 0.57     | 2.34        | 19     | 2     |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:645:PHE:HB2  | 0.57     | 2.40        | 7      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:761:PHE:HE2  | 0.57     | 1.58        | 7      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.57     | 1.59        | 18     | 1     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:670:HIS:HB3  | 0.57     | 1.99        | 15     | 2     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.57     | 2.34        | 3      | 2     |
| 1:A:788:LEU:H    | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.57     | 1.58        | 8      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:HG   | 0.57     | 1.75        | 8      | 4     |
| 1:A:753:PRO:CD   | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.57     | 2.28        | 5      | 3     |
| 1:A:772:PHE:CZ   | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.57     | 2.35        | 4      | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:723:LEU:HD23 | 1:A:737:THR:CG2  | 0.56     | 2.29        | 10     | 2     |
| 1:A:630:VAL:CG2  | 1:A:631:CYS:N    | 0.56     | 2.68        | 14     | 5     |
| 1:A:767:ARG:O    | 1:A:770:LYS:N    | 0.56     | 2.37        | 15     | 13    |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.56     | 2.68        | 17     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:NE1  | 0.56     | 2.15        | 15     | 1     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:768:MET:SD   | 0.56     | 2.63        | 9      | 2     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:758:PRO:CG   | 0.56     | 2.29        | 13     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:HA   | 0.56     | 1.77        | 11     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CG   | 1:A:755:TYR:HD2  | 0.56     | 2.13        | 11     | 4     |
| 1:A:645:PHE:HB3  | 1:A:666:CYS:CB   | 0.56     | 2.30        | 3      | 3     |
| 1:A:792:PHE:HD2  | 1:A:793:GLU:HG2  | 0.56     | 1.61        | 20     | 5     |
| 1:A:639:MET:HA   | 1:A:644:GLU:O    | 0.56     | 1.99        | 5      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.56     | 2.30        | 20     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:CD2  | 0.56     | 2.29        | 13     | 2     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:658:ASP:C    | 0.56     | 2.74        | 11     | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:HD2  | 0.56     | 1.60        | 10     | 4     |
| 1:A:627:ILE:HD13 | 1:A:632:GLN:HB3  | 0.56     | 1.75        | 6      | 5     |
| 1:A:627:ILE:O    | 1:A:627:ILE:HD12 | 0.56     | 2.00        | 19     | 5     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.56     | 2.30        | 14     | 6     |
| 1:A:665:SER:OG   | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.56     | 2.01        | 14     | 6     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.56     | 1.77        | 18     | 1     |
| 1:A:744:ARG:HA   | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.56     | 2.15        | 17     | 1     |
| 1:A:775:LEU:C    | 1:A:775:LEU:HD23 | 0.56     | 2.19        | 17     | 3     |
| 1:A:759:GLN:HG2  | 1:A:763:GLN:HG3  | 0.56     | 1.76        | 5      | 2     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:747:LEU:HB3  | 0.56     | 2.15        | 15     | 3     |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:791:PHE:HE2  | 0.56     | 1.59        | 4      | 1     |
| 1:A:747:LEU:CA   | 1:A:755:TYR:OH   | 0.56     | 2.52        | 20     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:CD2  | 0.56     | 2.30        | 16     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:661:GLY:N    | 0.56     | 2.15        | 16     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:HE3  | 0.56     | 1.76        | 10     | 4     |
| 1:A:660:PRO:HG3  | 1:A:664:TRP:CG   | 0.56     | 2.35        | 16     | 5     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:758:PRO:HG3  | 0.56     | 1.77        | 13     | 1     |
| 1:A:788:LEU:HA   | 1:A:791:PHE:HB2  | 0.56     | 1.76        | 11     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:649:LEU:HD21 | 0.56     | 1.77        | 14     | 2     |
| 1:A:703:LYS:NZ   | 1:A:799:ALA:HB3  | 0.56     | 2.16        | 18     | 2     |
| 1:A:703:LYS:O    | 1:A:706:ARG:HB2  | 0.56     | 2.00        | 20     | 11    |
| 1:A:705:GLU:HG2  | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.56     | 2.14        | 2      | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:721:HIS:HE1  | 0.56     | 1.61        | 6      | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HA   | 0.56     | 1.78        | 6      | 1     |
| 1:A:649:LEU:CG   | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.56     | 2.31        | 12     | 1     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:790:ARG:HG2  | 0.56     | 2.00        | 1      | 6     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:755:TYR:N    | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.56     | 2.15        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.56     | 1.77        | 20     | 1     |
| 1:A:705:GLU:O    | 1:A:709:LEU:HB2  | 0.56     | 2.00        | 9      | 1     |
| 1:A:746:ARG:CA   | 1:A:751:LEU:HG   | 0.56     | 2.30        | 11     | 1     |
| 1:A:703:LYS:NZ   | 1:A:795:ARG:O    | 0.56     | 2.34        | 14     | 2     |
| 1:A:709:LEU:O    | 1:A:710:ALA:C    | 0.56     | 2.44        | 7      | 13    |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:HA   | 0.56     | 1.78        | 12     | 1     |
| 1:A:740:LEU:H    | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.56     | 1.61        | 18     | 2     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.56     | 2.01        | 17     | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:660:PRO:CD   | 0.56     | 2.84        | 8      | 5     |
| 1:A:765:VAL:HB   | 1:A:768:MET:HE2  | 0.56     | 1.77        | 15     | 1     |
| 1:A:659:VAL:O    | 1:A:660:PRO:O    | 0.56     | 2.23        | 16     | 1     |
| 1:A:652:HIS:CB   | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.56     | 2.31        | 2      | 2     |
| 1:A:718:ARG:HB2  | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.56     | 1.78        | 13     | 12    |
| 1:A:716:PRO:HB3  | 1:A:784:SER:O    | 0.56     | 2.00        | 2      | 8     |
| 1:A:627:ILE:HB   | 1:A:632:GLN:O    | 0.56     | 2.00        | 8      | 8     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.56     | 1.78        | 2      | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:HG2  | 0.56     | 1.77        | 7      | 1     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.56     | 2.35        | 7      | 2     |
| 1:A:711:LEU:O    | 1:A:717:CYS:CB   | 0.56     | 2.54        | 11     | 1     |
| 1:A:766:GLY:O    | 1:A:770:LYS:HD3  | 0.56     | 2.00        | 11     | 16    |
| 1:A:667:SER:C    | 1:A:669:CYS:N    | 0.56     | 2.58        | 5      | 10    |
| 1:A:783:GLN:HA   | 1:A:786:ILE:HB   | 0.56     | 1.76        | 13     | 11    |
| 1:A:627:ILE:HA   | 1:A:633:LYS:O    | 0.56     | 2.01        | 20     | 13    |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:767:ARG:HD3  | 0.56     | 2.30        | 9      | 4     |
| 1:A:762:ALA:O    | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.56     | 2.01        | 20     | 2     |
| 1:A:638:VAL:CG2  | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.56     | 2.30        | 2      | 5     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:742:LEU:HB3  | 0.56     | 1.78        | 14     | 1     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:669:CYS:SG   | 0.56     | 2.64        | 4      | 3     |
| 1:A:744:ARG:NE   | 1:A:750:LYS:HE2  | 0.56     | 2.15        | 18     | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:721:HIS:CE1  | 0.56     | 2.36        | 20     | 3     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:767:ARG:CB   | 0.56     | 2.54        | 19     | 6     |
| 1:A:769:PHE:HB3  | 1:A:789:GLN:OE1  | 0.56     | 2.01        | 1      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CG   | 0.56     | 2.35        | 5      | 1     |
| 1:A:752:SER:HB3  | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.56     | 1.78        | 15     | 1     |
| 1:A:700:ASN:HB2  | 1:A:757:SER:OG   | 0.56     | 2.01        | 20     | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.56     | 2.36        | 19     | 2     |
| 1:A:695:LYS:HB3  | 1:A:696:LEU:HD23 | 0.56     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:758:PRO:O    | 0.55     | 2.63        | 10     | 3     |
| 1:A:695:LYS:HB3  | 1:A:755:TYR:O    | 0.55     | 2.01        | 14     | 3     |
| 1:A:651:CYS:O    | 1:A:653:LEU:N    | 0.55     | 2.39        | 18     | 3     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:660:PRO:CD   | 0.55     | 2.31        | 5      | 7     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HD3  | 0.55     | 1.79        | 1      | 6     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.55     | 2.16        | 17     | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:712:PHE:HB3  | 0.55     | 1.77        | 17     | 3     |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HB3  | 0.55     | 1.61        | 15     | 3     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:761:PHE:N    | 0.55     | 2.40        | 20     | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.55     | 1.78        | 3      | 1     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:768:MET:HG3  | 0.55     | 2.02        | 4      | 3     |
| 1:A:755:TYR:CD2  | 1:A:760:GLU:HB3  | 0.55     | 2.36        | 13     | 2     |
| 1:A:769:PHE:CZ   | 1:A:792:PHE:HB2  | 0.55     | 2.36        | 10     | 7     |
| 1:A:647:PHE:O    | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.55     | 2.01        | 16     | 4     |
| 1:A:721:HIS:HA   | 1:A:740:LEU:CB   | 0.55     | 2.31        | 19     | 1     |
| 1:A:744:ARG:O    | 1:A:748:GLN:N    | 0.55     | 2.39        | 4      | 3     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:768:MET:CG   | 0.55     | 2.54        | 6      | 3     |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:750:LYS:HB2  | 0.55     | 1.79        | 13     | 6     |
| 1:A:631:CYS:HB3  | 1:A:633:LYS:HE3  | 0.55     | 1.78        | 5      | 1     |
| 1:A:743:ILE:CG2  | 1:A:761:PHE:CG   | 0.55     | 2.89        | 5      | 1     |
| 1:A:738:LEU:CB   | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.55     | 2.31        | 15     | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HG   | 0.55     | 1.78        | 20     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:658:ASP:HA   | 0.55     | 1.77        | 12     | 1     |
| 1:A:783:GLN:C    | 1:A:783:GLN:HE21 | 0.55     | 2.04        | 12     | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:709:LEU:HG   | 0.55     | 1.78        | 6      | 2     |
| 1:A:704:CYS:HA   | 1:A:796:MET:HE1  | 0.55     | 1.78        | 1      | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.55     | 1.79        | 5      | 1     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.55     | 2.88        | 4      | 1     |
| 1:A:765:VAL:CG2  | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.55     | 2.89        | 20     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HA   | 1:A:772:PHE:HD2  | 0.55     | 1.62        | 9      | 1     |
| 1:A:633:LYS:HB2  | 1:A:648:HIS:CE1  | 0.55     | 2.37        | 11     | 1     |
| 1:A:717:CYS:CA   | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.55     | 2.30        | 13     | 5     |
| 1:A:699:ALA:HB1  | 1:A:703:LYS:NZ   | 0.55     | 2.16        | 17     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:764:ASP:O    | 0.55     | 2.54        | 19     | 5     |
| 1:A:664:TRP:CH2  | 1:A:666:CYS:HA   | 0.55     | 2.37        | 15     | 4     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.55     | 1.76        | 5      | 1     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.55     | 2.01        | 15     | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:758:PRO:HD3  | 0.55     | 1.79        | 20     | 1     |
| 1:A:653:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.55     | 1.61        | 3      | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.55     | 2.31        | 16     | 1     |
| 1:A:640:CYS:C    | 1:A:642:GLN:H    | 0.55     | 2.05        | 3      | 17    |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:697:SER:HB3  | 0.55     | 2.02        | 12     | 2     |
| 1:A:755:TYR:CE1  | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.55     | 2.36        | 12     | 1     |
| 1:A:718:ARG:O    | 1:A:721:HIS:HB2  | 0.55     | 2.01        | 17     | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:711:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HE1  | 0.55     | 2.31        | 17     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD23 | 1:A:649:LEU:N    | 0.55     | 2.15        | 9      | 5     |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.55     | 1.61        | 3      | 2     |
| 1:A:711:LEU:HB2  | 1:A:792:PHE:CD2  | 0.55     | 2.36        | 16     | 1     |
| 1:A:783:GLN:HA   | 1:A:783:GLN:HE21 | 0.55     | 1.61        | 11     | 2     |
| 1:A:751:LEU:H    | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.55     | 2.15        | 9      | 2     |
| 1:A:742:LEU:HA   | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.55     | 1.76        | 17     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:700:ASN:CB   | 0.55     | 2.32        | 8      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HG2  | 0.55     | 1.78        | 6      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HB   | 0.55     | 1.79        | 6      | 1     |
| 1:A:711:LEU:O    | 1:A:717:CYS:HB2  | 0.55     | 2.02        | 11     | 1     |
| 1:A:710:ALA:HB2  | 1:A:795:ARG:HG3  | 0.55     | 1.79        | 3      | 4     |
| 1:A:755:TYR:OH   | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.55     | 2.60        | 17     | 5     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:649:LEU:C    | 0.55     | 2.45        | 9      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:767:ARG:HD3  | 0.55     | 1.79        | 14     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:O    | 0.55     | 2.01        | 16     | 3     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:CD1  | 0.55     | 2.31        | 2      | 1     |
| 1:A:697:SER:HB3  | 1:A:700:ASN:H    | 0.55     | 1.62        | 4      | 4     |
| 1:A:769:PHE:HZ   | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.55     | 1.60        | 11     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:CD2  | 0.55     | 2.37        | 16     | 5     |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:NH2  | 0.55     | 2.17        | 20     | 1     |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:632:GLN:HG2  | 0.55     | 1.79        | 3      | 1     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:708:LEU:C    | 0.54     | 2.45        | 1      | 5     |
| 1:A:752:SER:N    | 1:A:753:PRO:CD   | 0.54     | 2.70        | 1      | 2     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:721:HIS:NE2  | 0.54     | 2.81        | 3      | 10    |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.54     | 2.32        | 20     | 1     |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:N    | 0.54     | 2.17        | 16     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.54     | 1.80        | 11     | 2     |
| 1:A:746:ARG:HA   | 1:A:751:LEU:HG   | 0.54     | 1.78        | 11     | 1     |
| 1:A:770:LYS:O    | 1:A:774:LYS:HG2  | 0.54     | 2.01        | 19     | 9     |
| 1:A:708:LEU:HA   | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.54     | 1.78        | 19     | 6     |
| 1:A:705:GLU:CG   | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.54     | 2.32        | 16     | 3     |
| 1:A:701:GLN:O    | 1:A:705:GLU:HG3  | 0.54     | 2.03        | 6      | 5     |
| 1:A:721:HIS:N    | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.54     | 2.17        | 12     | 7     |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.54     | 1.79        | 8      | 5     |
| 1:A:652:HIS:CG   | 1:A:652:HIS:O    | 0.54     | 2.61        | 5      | 2     |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:712:PHE:HD1  | 0.54     | 1.62        | 3      | 3     |
| 1:A:753:PRO:HD2  | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.54     | 1.79        | 5      | 2     |
| 1:A:762:ALA:HB1  | 1:A:792:PHE:HZ   | 0.54     | 1.61        | 5      | 2     |
| 1:A:765:VAL:HG23 | 1:A:768:MET:HE3  | 0.54     | 1.79        | 20     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HG2  | 1:A:756:SER:HB3  | 0.54     | 1.78        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:750:LYS:CB   | 0.54     | 2.31        | 13     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:HD22 | 0.54     | 1.79        | 11     | 3     |
| 1:A:751:LEU:CD1  | 1:A:752:SER:H    | 0.54     | 2.14        | 11     | 2     |
| 1:A:717:CYS:HG   | 1:A:721:HIS:CD2  | 0.54     | 2.19        | 12     | 2     |
| 1:A:645:PHE:HB2  | 1:A:666:CYS:HB3  | 0.54     | 1.79        | 2      | 2     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.54     | 2.69        | 17     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:C    | 0.54     | 2.23        | 7      | 2     |
| 1:A:645:PHE:CD2  | 1:A:666:CYS:SG   | 0.54     | 3.00        | 20     | 5     |
| 1:A:753:PRO:CG   | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.54     | 2.33        | 4      | 2     |
| 1:A:653:LEU:HG   | 1:A:705:GLU:O    | 0.54     | 2.03        | 12     | 2     |
| 1:A:665:SER:HB2  | 1:A:670:HIS:CB   | 0.54     | 2.33        | 12     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.54     | 2.37        | 16     | 3     |
| 1:A:738:LEU:CA   | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.54     | 2.32        | 15     | 1     |
| 1:A:749:GLU:HA   | 1:A:752:SER:O    | 0.54     | 2.02        | 15     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.54     | 1.78        | 15     | 2     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:669:CYS:HB2  | 0.54     | 2.02        | 20     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.54     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.54     | 1.80        | 11     | 1     |
| 1:A:651:CYS:HA   | 1:A:744:ARG:HH12 | 0.54     | 1.63        | 5      | 1     |
| 1:A:755:TYR:CD1  | 1:A:756:SER:N    | 0.54     | 2.75        | 20     | 1     |
| 1:A:631:CYS:SG   | 1:A:633:LYS:HB2  | 0.54     | 2.43        | 13     | 1     |
| 1:A:706:ARG:HE   | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.54     | 1.62        | 6      | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:631:CYS:N    | 0.54     | 2.17        | 9      | 5     |
| 1:A:753:PRO:HB2  | 1:A:754:PRO:HD3  | 0.54     | 1.80        | 6      | 7     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:639:MET:H    | 0.54     | 1.62        | 14     | 1     |
| 1:A:716:PRO:C    | 1:A:719:PRO:HD2  | 0.54     | 2.23        | 9      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HG   | 1:A:768:MET:HG3  | 0.54     | 1.77        | 19     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.54     | 1.78        | 8      | 3     |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:CE   | 0.54     | 2.32        | 8      | 2     |
| 1:A:773:ASN:ND2  | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.54     | 2.18        | 10     | 5     |
| 1:A:789:GLN:O    | 1:A:792:PHE:HB3  | 0.54     | 2.03        | 19     | 6     |
| 1:A:768:MET:O    | 1:A:772:PHE:N    | 0.54     | 2.40        | 1      | 9     |
| 1:A:655:ALA:O    | 1:A:656:LEU:O    | 0.54     | 2.26        | 17     | 6     |
| 1:A:643:CYS:O    | 1:A:644:GLU:HB3  | 0.54     | 2.03        | 10     | 2     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:719:PRO:CD   | 0.54     | 2.56        | 17     | 3     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HG22 | 0.54     | 1.79        | 16     | 2     |
| 1:A:746:ARG:HG3  | 1:A:754:PRO:HA   | 0.54     | 1.79        | 1      | 1     |
| 1:A:740:LEU:CD2  | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.54     | 2.33        | 5      | 1     |
| 1:A:695:LYS:HB2  | 1:A:756:SER:HB3  | 0.54     | 1.79        | 20     | 1     |
| 1:A:765:VAL:HA   | 1:A:768:MET:CG   | 0.54     | 2.33        | 20     | 1     |
| 1:A:765:VAL:C    | 1:A:768:MET:HB2  | 0.54     | 2.23        | 14     | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:703:LYS:HZ3  | 1:A:799:ALA:CB   | 0.54     | 2.16        | 18     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HB3  | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.54     | 2.18        | 17     | 1     |
| 1:A:712:PHE:CZ   | 1:A:740:LEU:HB3  | 0.54     | 2.37        | 17     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:696:LEU:C    | 0.54     | 2.22        | 7      | 1     |
| 1:A:741:THR:CA   | 1:A:744:ARG:HB3  | 0.54     | 2.33        | 7      | 1     |
| 1:A:738:LEU:CG   | 1:A:768:MET:HG3  | 0.54     | 2.33        | 19     | 1     |
| 1:A:659:VAL:C    | 1:A:661:GLY:H    | 0.54     | 2.06        | 9      | 8     |
| 1:A:703:LYS:CA   | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.54     | 2.33        | 4      | 3     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.54     | 2.22        | 12     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:CB   | 0.54     | 2.33        | 5      | 1     |
| 1:A:745:ALA:HA   | 1:A:750:LYS:HE2  | 0.54     | 1.79        | 5      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HB2  | 1:A:755:TYR:OH   | 0.54     | 2.02        | 4      | 1     |
| 1:A:653:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.54     | 1.63        | 8      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.54     | 1.80        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HD3  | 1:A:630:VAL:N    | 0.54     | 2.19        | 9      | 1     |
| 1:A:716:PRO:HG3  | 1:A:784:SER:HB2  | 0.53     | 1.78        | 11     | 2     |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:HE2  | 0.53     | 1.78        | 11     | 1     |
| 1:A:796:MET:O    | 1:A:800:PHE:HB2  | 0.53     | 2.03        | 9      | 12    |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.53     | 2.34        | 12     | 3     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:762:ALA:CB   | 0.53     | 2.56        | 16     | 4     |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.53     | 2.38        | 16     | 2     |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HB   | 0.53     | 1.63        | 15     | 2     |
| 1:A:714:HIS:CE1  | 1:A:791:PHE:HB3  | 0.53     | 2.38        | 13     | 3     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.53     | 1.79        | 5      | 1     |
| 1:A:627:ILE:HA   | 1:A:634:PRO:HA   | 0.53     | 1.80        | 8      | 2     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.53     | 2.33        | 17     | 1     |
| 1:A:630:VAL:O    | 1:A:718:ARG:HD3  | 0.53     | 2.03        | 1      | 2     |
| 1:A:637:LEU:HG   | 1:A:646:CYS:HB2  | 0.53     | 1.79        | 19     | 1     |
| 1:A:743:ILE:O    | 1:A:747:LEU:HG   | 0.53     | 2.03        | 13     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:659:VAL:HA   | 0.53     | 2.33        | 12     | 4     |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:796:MET:HB2  | 0.53     | 1.79        | 14     | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:709:LEU:HB3  | 0.53     | 1.80        | 10     | 2     |
| 1:A:626:THR:CG2  | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.53     | 2.34        | 16     | 4     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.53     | 1.81        | 12     | 1     |
| 1:A:652:HIS:HD1  | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.53     | 1.60        | 16     | 2     |
| 1:A:652:HIS:HB3  | 1:A:656:LEU:H    | 0.53     | 1.62        | 17     | 1     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:796:MET:HB2  | 0.53     | 2.34        | 17     | 1     |
| 1:A:715:GLU:HA   | 1:A:718:ARG:HB3  | 0.53     | 1.80        | 4      | 2     |
| 1:A:745:ALA:O    | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.53     | 2.04        | 11     | 2     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.53     | 2.33        | 14     | 3     |
| 1:A:647:PHE:C    | 1:A:649:LEU:N    | 0.53     | 2.60        | 5      | 15    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:629:ARG:HD2  | 1:A:713:CYS:SG   | 0.53     | 2.44        | 4      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.53     | 2.33        | 20     | 1     |
| 1:A:635:GLY:C    | 1:A:637:LEU:N    | 0.53     | 2.60        | 10     | 2     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:718:ARG:N    | 0.53     | 2.81        | 5      | 10    |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CE1  | 0.53     | 2.39        | 4      | 5     |
| 1:A:656:LEU:C    | 1:A:658:ASP:N    | 0.53     | 2.61        | 15     | 6     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.53     | 2.37        | 15     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HE   | 1:A:713:CYS:HB2  | 0.53     | 1.64        | 9      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.53     | 2.39        | 11     | 1     |
| 1:A:640:CYS:C    | 1:A:642:GLN:N    | 0.53     | 2.62        | 6      | 17    |
| 1:A:649:LEU:N    | 1:A:649:LEU:CD2  | 0.53     | 2.71        | 2      | 2     |
| 1:A:660:PRO:CG   | 1:A:664:TRP:HB2  | 0.53     | 2.33        | 19     | 8     |
| 1:A:721:HIS:CA   | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.53     | 2.33        | 12     | 1     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:708:LEU:N    | 0.53     | 2.72        | 18     | 3     |
| 1:A:715:GLU:N    | 1:A:716:PRO:HD2  | 0.53     | 2.18        | 1      | 4     |
| 1:A:721:HIS:CD2  | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.53     | 2.92        | 2      | 6     |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:HA   | 0.53     | 1.80        | 13     | 2     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:740:LEU:N    | 0.53     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:652:HIS:ND1  | 1:A:656:LEU:CD1  | 0.53     | 2.71        | 16     | 1     |
| 1:A:745:ALA:CB   | 1:A:751:LEU:HB3  | 0.53     | 2.31        | 9      | 2     |
| 1:A:705:GLU:HG2  | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.53     | 1.81        | 5      | 1     |
| 1:A:641:ASN:ND2  | 1:A:663:GLU:HA   | 0.53     | 2.19        | 16     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.53     | 2.39        | 10     | 2     |
| 1:A:701:GLN:CA   | 1:A:757:SER:HA   | 0.53     | 2.34        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:757:SER:N    | 0.53     | 2.19        | 3      | 2     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:758:PRO:CD   | 0.53     | 2.34        | 13     | 1     |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.53     | 2.38        | 3      | 7     |
| 1:A:745:ALA:CB   | 1:A:750:LYS:HB2  | 0.53     | 2.33        | 7      | 8     |
| 1:A:747:LEU:HB2  | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.53     | 2.38        | 16     | 3     |
| 1:A:668:LEU:HG   | 1:A:710:ALA:HA   | 0.53     | 1.81        | 20     | 1     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:758:PRO:HD3  | 0.53     | 2.04        | 20     | 1     |
| 1:A:710:ALA:HB1  | 1:A:795:ARG:CD   | 0.53     | 2.33        | 6      | 1     |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CB   | 0.53     | 2.32        | 9      | 3     |
| 1:A:721:HIS:HA   | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.53     | 1.78        | 12     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HG   | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.53     | 2.19        | 17     | 1     |
| 1:A:742:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:N    | 0.53     | 2.19        | 2      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CE2  | 0.53     | 2.39        | 16     | 1     |
| 1:A:756:SER:N    | 1:A:760:GLU:OE1  | 0.52     | 2.42        | 6      | 2     |
| 1:A:793:GLU:O    | 1:A:797:ASN:CB   | 0.52     | 2.57        | 18     | 5     |
| 1:A:741:THR:HA   | 1:A:744:ARG:HB3  | 0.52     | 1.78        | 17     | 5     |
| 1:A:645:PHE:HB2  | 1:A:666:CYS:SG   | 0.52     | 2.44        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:HB2  | 0.52     | 1.79        | 2      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:705:GLU:HA   | 0.52     | 1.80        | 4      | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:758:PRO:HA   | 0.52     | 1.80        | 4      | 1     |
| 1:A:765:VAL:CG1  | 1:A:768:MET:HE2  | 0.52     | 2.34        | 7      | 2     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:762:ALA:HB2  | 0.52     | 2.04        | 19     | 1     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:711:LEU:HB2  | 0.52     | 2.04        | 20     | 3     |
| 1:A:761:PHE:HD1  | 1:A:762:ALA:N    | 0.52     | 2.02        | 18     | 4     |
| 1:A:716:PRO:O    | 1:A:772:PHE:CZ   | 0.52     | 2.62        | 6      | 8     |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:HG   | 0.52     | 2.34        | 5      | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.52     | 1.79        | 10     | 1     |
| 1:A:703:LYS:CD   | 1:A:703:LYS:C    | 0.52     | 2.71        | 15     | 1     |
| 1:A:768:MET:O    | 1:A:772:PHE:HB3  | 0.52     | 2.05        | 3      | 2     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.52     | 2.05        | 6      | 1     |
| 1:A:709:LEU:O    | 1:A:712:PHE:HB2  | 0.52     | 2.04        | 6      | 4     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HG   | 0.52     | 1.80        | 14     | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:755:TYR:CE2  | 0.52     | 3.02        | 18     | 1     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:712:PHE:HD1  | 0.52     | 1.88        | 1      | 4     |
| 1:A:792:PHE:CD2  | 1:A:793:GLU:HG3  | 0.52     | 2.39        | 3      | 6     |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HE2  | 0.52     | 1.81        | 4      | 3     |
| 1:A:702:ARG:NH1  | 1:A:706:ARG:HE   | 0.52     | 2.03        | 19     | 1     |
| 1:A:721:HIS:NE2  | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.52     | 2.18        | 19     | 1     |
| 1:A:660:PRO:HG2  | 1:A:664:TRP:CB   | 0.52     | 2.34        | 8      | 8     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.52     | 2.39        | 8      | 3     |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:649:LEU:HD21 | 0.52     | 1.81        | 5      | 2     |
| 1:A:746:ARG:HG2  | 1:A:755:TYR:CZ   | 0.52     | 2.38        | 13     | 3     |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:NH1  | 0.52     | 2.19        | 15     | 1     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.52     | 2.04        | 19     | 1     |
| 1:A:639:MET:HA   | 1:A:646:CYS:HA   | 0.52     | 1.80        | 11     | 1     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:719:PRO:HD2  | 0.52     | 2.04        | 11     | 10    |
| 1:A:628:CYS:HB2  | 1:A:648:HIS:H    | 0.52     | 1.65        | 16     | 3     |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:721:HIS:HE1  | 0.52     | 1.63        | 4      | 3     |
| 1:A:703:LYS:C    | 1:A:703:LYS:HD3  | 0.52     | 2.25        | 18     | 2     |
| 1:A:631:CYS:HA   | 1:A:718:ARG:HD3  | 0.52     | 1.81        | 12     | 1     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:789:GLN:N    | 0.52     | 2.43        | 1      | 6     |
| 1:A:718:ARG:HG3  | 1:A:719:PRO:CD   | 0.52     | 2.33        | 4      | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:HH21 | 0.52     | 1.64        | 20     | 1     |
| 1:A:755:TYR:N    | 1:A:755:TYR:CD1  | 0.52     | 2.71        | 20     | 1     |
| 1:A:724:ALA:HB2  | 1:A:738:LEU:N    | 0.52     | 2.18        | 19     | 1     |
| 1:A:741:THR:O    | 1:A:744:ARG:HG3  | 0.52     | 2.05        | 19     | 1     |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:701:GLN:N    | 0.52     | 2.42        | 3      | 1     |
| 1:A:772:PHE:HA   | 1:A:775:LEU:HB2  | 0.52     | 1.82        | 7      | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:697:SER:HB2  | 1:A:700:ASN:HB2  | 0.52     | 1.82        | 20     | 2     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:761:PHE:CG   | 0.52     | 2.39        | 14     | 1     |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:714:HIS:ND1  | 0.52     | 2.43        | 12     | 2     |
| 1:A:761:PHE:HA   | 1:A:764:ASP:HB2  | 0.52     | 1.81        | 20     | 3     |
| 1:A:703:LYS:HD2  | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.52     | 1.82        | 1      | 3     |
| 1:A:752:SER:H    | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.52     | 1.64        | 1      | 3     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HB2  | 0.52     | 1.81        | 5      | 1     |
| 1:A:743:ILE:HA   | 1:A:746:ARG:HD3  | 0.52     | 1.82        | 5      | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:700:ASN:C    | 0.52     | 2.25        | 16     | 1     |
| 1:A:653:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.52     | 1.65        | 16     | 1     |
| 1:A:642:GLN:HE21 | 1:A:642:GLN:HA   | 0.52     | 1.64        | 9      | 1     |
| 1:A:642:GLN:HG3  | 1:A:665:SER:HB3  | 0.52     | 1.82        | 9      | 1     |
| 1:A:767:ARG:CA   | 1:A:770:LYS:HB2  | 0.52     | 2.35        | 11     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:CB   | 0.52     | 2.34        | 12     | 2     |
| 1:A:756:SER:O    | 1:A:757:SER:HB3  | 0.52     | 2.05        | 18     | 2     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:744:ARG:CA   | 0.52     | 2.87        | 7      | 5     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:HB3  | 0.52     | 2.04        | 15     | 2     |
| 1:A:790:ARG:N    | 1:A:790:ARG:HD3  | 0.52     | 2.19        | 5      | 1     |
| 1:A:654:PRO:HA   | 1:A:748:GLN:CD   | 0.52     | 2.25        | 15     | 1     |
| 1:A:639:MET:HG2  | 1:A:644:GLU:HA   | 0.52     | 1.82        | 3      | 3     |
| 1:A:711:LEU:HD22 | 1:A:792:PHE:CE2  | 0.52     | 2.40        | 16     | 1     |
| 1:A:631:CYS:HB3  | 1:A:633:LYS:HD3  | 0.52     | 1.82        | 9      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:700:ASN:C    | 0.52     | 2.25        | 11     | 2     |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:697:SER:CB   | 0.52     | 2.58        | 18     | 15    |
| 1:A:694:ALA:HA   | 1:A:697:SER:HA   | 0.52     | 1.81        | 14     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:709:LEU:H    | 0.52     | 2.17        | 18     | 2     |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HA   | 0.52     | 1.64        | 16     | 9     |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:HB3  | 0.52     | 1.82        | 1      | 5     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:722:GLN:N    | 0.52     | 2.43        | 6      | 2     |
| 1:A:653:LEU:C    | 1:A:653:LEU:HD12 | 0.52     | 2.25        | 4      | 2     |
| 1:A:769:PHE:CD1  | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.52     | 2.39        | 20     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.52     | 2.30        | 8      | 1     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.52     | 2.04        | 8      | 1     |
| 1:A:744:ARG:HE   | 1:A:750:LYS:HE3  | 0.52     | 1.65        | 11     | 2     |
| 1:A:762:ALA:HA   | 1:A:765:VAL:CG2  | 0.52     | 2.35        | 18     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:701:GLN:HA   | 0.52     | 1.81        | 1      | 2     |
| 1:A:647:PHE:CD2  | 1:A:664:TRP:HH2  | 0.52     | 2.23        | 2      | 2     |
| 1:A:700:ASN:HA   | 1:A:703:LYS:HB3  | 0.52     | 1.81        | 15     | 1     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.52     | 2.05        | 20     | 2     |
| 1:A:696:LEU:H    | 1:A:756:SER:HB3  | 0.52     | 1.64        | 20     | 1     |
| 1:A:721:HIS:HA   | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.52     | 1.82        | 20     | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:774:LYS:HB2  | 0.52     | 2.05        | 3      | 2     |
| 1:A:628:CYS:O    | 1:A:629:ARG:C    | 0.52     | 2.47        | 3      | 20    |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:CA   | 0.52     | 2.34        | 12     | 2     |
| 1:A:660:PRO:CG   | 1:A:664:TRP:CB   | 0.52     | 2.87        | 15     | 3     |
| 1:A:760:GLU:O    | 1:A:764:ASP:OD2  | 0.52     | 2.28        | 3      | 1     |
| 1:A:755:TYR:CD2  | 1:A:760:GLU:CD   | 0.52     | 2.83        | 6      | 1     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:764:ASP:HB2  | 0.51     | 2.05        | 4      | 5     |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:627:ILE:O    | 0.51     | 2.04        | 2      | 4     |
| 1:A:772:PHE:CG   | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.51     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.51     | 2.35        | 17     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:649:LEU:CD2  | 0.51     | 2.34        | 4      | 1     |
| 1:A:667:SER:H    | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.51     | 2.17        | 7      | 1     |
| 1:A:773:ASN:HA   | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.51     | 1.82        | 11     | 1     |
| 1:A:759:GLN:O    | 1:A:760:GLU:C    | 0.51     | 2.49        | 6      | 3     |
| 1:A:742:LEU:CD1  | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.51     | 2.32        | 5      | 2     |
| 1:A:773:ASN:ND2  | 1:A:782:VAL:HB   | 0.51     | 2.20        | 15     | 2     |
| 1:A:643:CYS:SG   | 1:A:645:PHE:CD1  | 0.51     | 3.03        | 10     | 6     |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CD1  | 0.51     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:740:LEU:N    | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.51     | 2.21        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:CZ   | 1:A:647:PHE:HD1  | 0.51     | 2.19        | 9      | 1     |
| 1:A:721:HIS:CD2  | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.51     | 2.93        | 11     | 1     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:721:HIS:CD2  | 0.51     | 3.03        | 12     | 4     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:790:ARG:N    | 0.51     | 2.43        | 18     | 5     |
| 1:A:643:CYS:O    | 1:A:644:GLU:CB   | 0.51     | 2.58        | 10     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HB   | 0.51     | 1.82        | 5      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:CA   | 0.51     | 2.34        | 15     | 2     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:709:LEU:HG   | 0.51     | 2.34        | 19     | 1     |
| 1:A:697:SER:O    | 1:A:701:GLN:HB3  | 0.51     | 2.04        | 3      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:CB   | 0.51     | 2.31        | 5      | 4     |
| 1:A:720:LEU:C    | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.51     | 2.26        | 17     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HB   | 0.51     | 1.81        | 5      | 2     |
| 1:A:759:GLN:HA   | 1:A:762:ALA:HB3  | 0.51     | 1.81        | 2      | 1     |
| 1:A:783:GLN:HE21 | 1:A:783:GLN:HA   | 0.51     | 1.66        | 5      | 2     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:HA   | 0.51     | 2.19        | 13     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:659:VAL:N    | 0.51     | 2.73        | 11     | 5     |
| 1:A:640:CYS:O    | 1:A:642:GLN:N    | 0.51     | 2.43        | 6      | 8     |
| 1:A:628:CYS:HB2  | 1:A:648:HIS:N    | 0.51     | 2.20        | 16     | 3     |
| 1:A:716:PRO:CB   | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.51     | 2.36        | 16     | 3     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.51     | 2.35        | 15     | 3     |
| 1:A:747:LEU:HA   | 1:A:755:TYR:HE2  | 0.51     | 1.64        | 4      | 1     |
| 1:A:706:ARG:HG2  | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.51     | 1.83        | 19     | 1     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:696:LEU:N    | 0.51     | 2.20        | 8      | 1     |
| 1:A:649:LEU:H    | 1:A:649:LEU:CD2  | 0.51     | 2.19        | 11     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:C    | 0.51     | 2.26        | 11     | 1     |
| 1:A:751:LEU:HD13 | 1:A:752:SER:N    | 0.51     | 2.18        | 11     | 2     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.51     | 3.03        | 11     | 4     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.51     | 2.35        | 2      | 1     |
| 1:A:721:HIS:HD2  | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.51     | 1.66        | 5      | 3     |
| 1:A:701:GLN:CA   | 1:A:704:CYS:SG   | 0.51     | 2.97        | 15     | 1     |
| 1:A:630:VAL:CG1  | 1:A:631:CYS:N    | 0.51     | 2.72        | 20     | 2     |
| 1:A:720:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:HG   | 0.51     | 1.83        | 20     | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD13 | 1:A:668:LEU:N    | 0.51     | 2.21        | 13     | 3     |
| 1:A:704:CYS:HA   | 1:A:707:VAL:HB   | 0.51     | 1.83        | 16     | 1     |
| 1:A:705:GLU:HG2  | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.51     | 1.83        | 9      | 1     |
| 1:A:783:GLN:C    | 1:A:783:GLN:NE2  | 0.51     | 2.64        | 12     | 2     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:741:THR:N    | 0.51     | 2.44        | 18     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:771:GLN:HE22 | 0.51     | 1.66        | 5      | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:656:LEU:CD2  | 0.51     | 2.27        | 5      | 2     |
| 1:A:772:PHE:O    | 1:A:775:LEU:CD2  | 0.51     | 2.58        | 19     | 3     |
| 1:A:790:ARG:N    | 1:A:790:ARG:HD2  | 0.51     | 2.20        | 3      | 2     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:649:LEU:CB   | 0.51     | 2.59        | 5      | 11    |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:653:LEU:N    | 0.51     | 2.78        | 12     | 2     |
| 1:A:769:PHE:HA   | 1:A:772:PHE:HB3  | 0.51     | 1.81        | 18     | 10    |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:CB   | 0.51     | 2.19        | 10     | 1     |
| 1:A:639:MET:HG2  | 1:A:644:GLU:O    | 0.51     | 2.04        | 17     | 2     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.51     | 2.93        | 2      | 1     |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:711:LEU:C    | 0.51     | 2.48        | 4      | 1     |
| 1:A:714:HIS:CE1  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.51     | 2.41        | 13     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HB2  | 1:A:737:THR:HG21 | 0.51     | 1.81        | 6      | 1     |
| 1:A:715:GLU:HB2  | 1:A:716:PRO:HD3  | 0.51     | 1.83        | 11     | 2     |
| 1:A:790:ARG:O    | 1:A:794:THR:HB   | 0.51     | 2.05        | 16     | 2     |
| 1:A:627:ILE:HA   | 1:A:633:LYS:C    | 0.51     | 2.27        | 19     | 6     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:627:ILE:O    | 0.51     | 2.28        | 14     | 16    |
| 1:A:745:ALA:O    | 1:A:746:ARG:C    | 0.51     | 2.49        | 9      | 2     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:796:MET:HE1  | 0.51     | 2.45        | 14     | 1     |
| 1:A:766:GLY:O    | 1:A:769:PHE:HB2  | 0.51     | 2.05        | 12     | 5     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:CZ2  | 0.51     | 2.41        | 6      | 3     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.51     | 2.41        | 4      | 5     |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:785:ILE:N    | 0.51     | 2.44        | 4      | 7     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.51     | 1.81        | 18     | 3     |
| 1:A:646:CYS:C    | 1:A:647:PHE:CD1  | 0.51     | 2.84        | 17     | 2     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.51     | 2.35        | 1      | 2     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:769:PHE:CD2  | 1:A:789:GLN:CG   | 0.51     | 2.94        | 2      | 5     |
| 1:A:739:ASP:N    | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.51     | 2.21        | 15     | 3     |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CG   | 0.51     | 2.36        | 20     | 1     |
| 1:A:746:ARG:C    | 1:A:748:GLN:N    | 0.51     | 2.62        | 3      | 1     |
| 1:A:746:ARG:NH2  | 1:A:753:PRO:O    | 0.51     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HG3  | 1:A:756:SER:O    | 0.51     | 2.06        | 13     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:HE1  | 0.51     | 1.83        | 14     | 3     |
| 1:A:703:LYS:HE3  | 1:A:796:MET:O    | 0.51     | 2.05        | 18     | 2     |
| 1:A:737:THR:HA   | 1:A:771:GLN:CD   | 0.51     | 2.27        | 1      | 2     |
| 1:A:773:ASN:HA   | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.51     | 1.82        | 3      | 5     |
| 1:A:740:LEU:O    | 1:A:744:ARG:N    | 0.51     | 2.44        | 3      | 3     |
| 1:A:758:PRO:HG2  | 1:A:800:PHE:CZ   | 0.51     | 2.41        | 7      | 2     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.51     | 2.21        | 13     | 5     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HD13 | 0.51     | 1.82        | 16     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HB3  | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.50     | 2.41        | 14     | 3     |
| 1:A:717:CYS:HA   | 1:A:720:LEU:HB3  | 0.50     | 1.82        | 18     | 3     |
| 1:A:700:ASN:HB3  | 1:A:758:PRO:HD3  | 0.50     | 1.83        | 5      | 4     |
| 1:A:626:THR:HB   | 1:A:637:LEU:CD2  | 0.50     | 2.36        | 2      | 6     |
| 1:A:752:SER:HB3  | 1:A:753:PRO:CD   | 0.50     | 2.36        | 7      | 3     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:768:MET:HA   | 0.50     | 2.06        | 15     | 1     |
| 1:A:765:VAL:CA   | 1:A:768:MET:HE2  | 0.50     | 2.35        | 7      | 1     |
| 1:A:706:ARG:HD2  | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.50     | 1.83        | 7      | 1     |
| 1:A:708:LEU:N    | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.50     | 2.78        | 13     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.50     | 2.36        | 11     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HA   | 0.50     | 1.81        | 11     | 1     |
| 1:A:657:GLN:O    | 1:A:658:ASP:HB2  | 0.50     | 2.06        | 10     | 4     |
| 1:A:711:LEU:O    | 1:A:714:HIS:CD2  | 0.50     | 2.64        | 9      | 8     |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:703:LYS:HG2  | 0.50     | 2.06        | 10     | 3     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:764:ASP:C    | 0.50     | 2.79        | 17     | 1     |
| 1:A:741:THR:HG23 | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.50     | 2.22        | 15     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:740:LEU:HA   | 0.50     | 1.81        | 4      | 2     |
| 1:A:716:PRO:HB2  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.50     | 1.83        | 8      | 1     |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:666:CYS:N    | 0.50     | 2.84        | 3      | 10    |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.50     | 2.36        | 14     | 2     |
| 1:A:755:TYR:CE2  | 1:A:761:PHE:HA   | 0.50     | 2.42        | 1      | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CD1  | 0.50     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:700:ASN:HB3  | 1:A:758:PRO:HG3  | 0.50     | 1.82        | 8      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HG21 | 0.50     | 1.82        | 19     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.50     | 2.91        | 11     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.50     | 2.41        | 12     | 4     |
| 1:A:769:PHE:O    | 1:A:772:PHE:HB3  | 0.50     | 2.06        | 14     | 6     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:742:LEU:CB   | 0.50     | 2.59        | 10     | 5     |
| 1:A:630:VAL:HA   | 1:A:712:PHE:O    | 0.50     | 2.06        | 18     | 1     |
| 1:A:773:ASN:ND2  | 1:A:785:ILE:HB   | 0.50     | 2.22        | 5      | 6     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:744:ARG:N    | 0.50     | 2.21        | 4      | 4     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.50     | 2.06        | 10     | 3     |
| 1:A:765:VAL:O    | 1:A:768:MET:CB   | 0.50     | 2.58        | 15     | 3     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:743:ILE:HB   | 0.50     | 2.07        | 8      | 2     |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:656:LEU:HG   | 0.50     | 2.41        | 15     | 1     |
| 1:A:628:CYS:SG   | 1:A:630:VAL:HG22 | 0.50     | 2.47        | 4      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.50     | 1.83        | 7      | 1     |
| 1:A:656:LEU:CG   | 1:A:660:PRO:HG3  | 0.50     | 2.36        | 3      | 1     |
| 1:A:769:PHE:O    | 1:A:773:ASN:CB   | 0.50     | 2.60        | 11     | 5     |
| 1:A:703:LYS:O    | 1:A:706:ARG:N    | 0.50     | 2.44        | 4      | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.50     | 1.83        | 12     | 1     |
| 1:A:704:CYS:CB   | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.50     | 2.94        | 13     | 5     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:771:GLN:HG3  | 0.50     | 2.07        | 2      | 6     |
| 1:A:701:GLN:N    | 1:A:757:SER:OG   | 0.50     | 2.45        | 20     | 1     |
| 1:A:702:ARG:HH12 | 1:A:706:ARG:HE   | 0.50     | 1.50        | 19     | 1     |
| 1:A:700:ASN:HB3  | 1:A:758:PRO:HG2  | 0.50     | 1.83        | 13     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:757:SER:CA   | 0.50     | 2.36        | 8      | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:CB   | 0.50     | 2.35        | 2      | 2     |
| 1:A:771:GLN:HA   | 1:A:774:LYS:HB2  | 0.50     | 1.83        | 19     | 2     |
| 1:A:700:ASN:C    | 1:A:758:PRO:CD   | 0.50     | 2.80        | 13     | 1     |
| 1:A:790:ARG:CD   | 1:A:790:ARG:N    | 0.50     | 2.75        | 13     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:N    | 0.50     | 2.21        | 16     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HA   | 1:A:772:PHE:CD2  | 0.50     | 2.41        | 9      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.50     | 2.94        | 4      | 2     |
| 1:A:795:ARG:HA   | 1:A:798:GLU:CB   | 0.50     | 2.36        | 12     | 2     |
| 1:A:749:GLU:HA   | 1:A:753:PRO:O    | 0.50     | 2.06        | 10     | 2     |
| 1:A:792:PHE:CD2  | 1:A:793:GLU:HG2  | 0.50     | 2.41        | 1      | 6     |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:CB   | 0.50     | 2.20        | 18     | 3     |
| 1:A:746:ARG:HH21 | 1:A:760:GLU:HG3  | 0.50     | 1.67        | 10     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD1  | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.50     | 2.41        | 10     | 1     |
| 1:A:657:GLN:O    | 1:A:658:ASP:CB   | 0.50     | 2.59        | 16     | 5     |
| 1:A:635:GLY:O    | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.50     | 2.06        | 8      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CD1  | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.50     | 2.42        | 8      | 1     |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:697:SER:HB2  | 0.50     | 2.07        | 5      | 4     |
| 1:A:705:GLU:HA   | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.50     | 1.83        | 4      | 2     |
| 1:A:699:ALA:HA   | 1:A:702:ARG:HB2  | 0.50     | 1.84        | 8      | 10    |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.50     | 1.84        | 12     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HG3  | 1:A:755:TYR:O    | 0.50     | 2.07        | 18     | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:748:GLN:NE2  | 1:A:750:LYS:NZ   | 0.50     | 2.60        | 3      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:HD2  | 0.50     | 1.66        | 14     | 2     |
| 1:A:748:GLN:O    | 1:A:749:GLU:CB   | 0.50     | 2.60        | 12     | 2     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:791:PHE:N    | 0.50     | 2.45        | 13     | 4     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:772:PHE:CD2  | 0.50     | 2.95        | 5      | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CD1  | 0.50     | 2.36        | 15     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HA   | 1:A:746:ARG:CG   | 0.50     | 2.37        | 19     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:653:LEU:C    | 0.50     | 2.27        | 8      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.50     | 1.67        | 9      | 1     |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:665:SER:CA   | 0.49     | 3.00        | 11     | 3     |
| 1:A:667:SER:O    | 1:A:669:CYS:N    | 0.49     | 2.45        | 18     | 7     |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CB   | 0.49     | 2.36        | 12     | 2     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:CA   | 0.49     | 2.89        | 18     | 2     |
| 1:A:762:ALA:CA   | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.49     | 2.37        | 20     | 3     |
| 1:A:746:ARG:NH2  | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.49     | 2.22        | 2      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.49     | 2.37        | 5      | 1     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:747:LEU:O    | 0.49     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:755:TYR:O    | 1:A:756:SER:HB3  | 0.49     | 2.07        | 8      | 2     |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:HE   | 0.49     | 1.65        | 9      | 1     |
| 1:A:662:GLU:C    | 1:A:663:GLU:HG3  | 0.49     | 2.26        | 20     | 5     |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:738:LEU:N    | 0.49     | 2.22        | 18     | 1     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:646:CYS:HB2  | 0.49     | 2.07        | 4      | 5     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HG3  | 0.49     | 1.84        | 2      | 1     |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:784:SER:N    | 0.49     | 2.45        | 9      | 4     |
| 1:A:746:ARG:HB2  | 1:A:755:TYR:CZ   | 0.49     | 2.42        | 19     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HB3  | 1:A:756:SER:CB   | 0.49     | 2.36        | 13     | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:707:VAL:CB   | 0.49     | 2.59        | 6      | 1     |
| 1:A:647:PHE:HE2  | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.49     | 1.65        | 11     | 1     |
| 1:A:744:ARG:HE   | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.49     | 1.51        | 12     | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.49     | 3.00        | 18     | 4     |
| 1:A:769:PHE:CA   | 1:A:772:PHE:HB3  | 0.49     | 2.37        | 9      | 8     |
| 1:A:751:LEU:HB3  | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.49     | 1.84        | 1      | 1     |
| 1:A:740:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:CE   | 0.49     | 2.90        | 5      | 5     |
| 1:A:649:LEU:CA   | 1:A:656:LEU:HD12 | 0.49     | 2.27        | 4      | 1     |
| 1:A:667:SER:OG   | 1:A:706:ARG:HA   | 0.49     | 2.06        | 7      | 1     |
| 1:A:667:SER:OG   | 1:A:709:LEU:HB3  | 0.49     | 2.07        | 7      | 1     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:654:PRO:CD   | 0.49     | 2.60        | 19     | 1     |
| 1:A:742:LEU:HD23 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.49     | 1.83        | 3      | 1     |
| 1:A:790:ARG:HD2  | 1:A:790:ARG:N    | 0.49     | 2.21        | 6      | 3     |
| 1:A:723:LEU:H    | 1:A:739:ASP:HB3  | 0.49     | 1.67        | 8      | 2     |
| 1:A:752:SER:HB2  | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.49     | 1.84        | 13     | 2     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:709:LEU:N    | 0.49     | 2.70        | 15     | 2     |
| 1:A:721:HIS:N    | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.49     | 2.22        | 15     | 2     |
| 1:A:744:ARG:HE   | 1:A:750:LYS:NZ   | 0.49     | 2.06        | 8      | 2     |
| 1:A:635:GLY:O    | 1:A:637:LEU:HD22 | 0.49     | 2.07        | 3      | 2     |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:H    | 0.49     | 1.68        | 8      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:CA   | 0.49     | 2.38        | 11     | 1     |
| 1:A:658:ASP:O    | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.49     | 2.07        | 11     | 2     |
| 1:A:755:TYR:CE1  | 1:A:761:PHE:N    | 0.49     | 2.80        | 10     | 7     |
| 1:A:627:ILE:N    | 1:A:637:LEU:CD1  | 0.49     | 2.76        | 14     | 6     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:721:HIS:N    | 0.49     | 2.46        | 17     | 4     |
| 1:A:649:LEU:HG   | 1:A:656:LEU:CB   | 0.49     | 2.38        | 20     | 2     |
| 1:A:764:ASP:HA   | 1:A:767:ARG:HD3  | 0.49     | 1.82        | 20     | 2     |
| 1:A:712:PHE:HA   | 1:A:717:CYS:SG   | 0.49     | 2.48        | 17     | 1     |
| 1:A:704:CYS:HA   | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.49     | 1.84        | 5      | 3     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CG   | 0.49     | 2.38        | 5      | 1     |
| 1:A:717:CYS:HG   | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.49     | 1.67        | 20     | 1     |
| 1:A:723:LEU:CD1  | 1:A:739:ASP:HA   | 0.49     | 2.36        | 7      | 1     |
| 1:A:766:GLY:HA2  | 1:A:769:PHE:HD2  | 0.49     | 1.64        | 19     | 1     |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:627:ILE:C    | 0.49     | 2.49        | 11     | 4     |
| 1:A:633:LYS:HB2  | 1:A:648:HIS:HE1  | 0.49     | 1.65        | 11     | 5     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:656:LEU:HB3  | 0.49     | 2.38        | 17     | 3     |
| 1:A:701:GLN:HG2  | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.49     | 1.85        | 6      | 3     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:717:CYS:SG   | 0.49     | 2.71        | 17     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.49     | 2.37        | 5      | 1     |
| 1:A:703:LYS:CG   | 1:A:799:ALA:HB1  | 0.49     | 2.36        | 6      | 2     |
| 1:A:757:SER:CB   | 1:A:758:PRO:CD   | 0.49     | 2.90        | 20     | 2     |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:713:CYS:N    | 0.49     | 2.23        | 19     | 2     |
| 1:A:640:CYS:HB3  | 1:A:644:GLU:N    | 0.49     | 2.23        | 19     | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:HG3  | 0.49     | 2.08        | 6      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE1  | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.49     | 2.96        | 9      | 1     |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.49     | 2.43        | 9      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:664:TRP:CE3  | 0.49     | 2.41        | 2      | 3     |
| 1:A:707:VAL:CG2  | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.49     | 2.95        | 14     | 3     |
| 1:A:747:LEU:HA   | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.49     | 1.85        | 9      | 2     |
| 1:A:643:CYS:C    | 1:A:645:PHE:H    | 0.49     | 2.10        | 18     | 6     |
| 1:A:756:SER:O    | 1:A:757:SER:CB   | 0.49     | 2.60        | 18     | 2     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:755:TYR:OH   | 0.49     | 2.66        | 16     | 3     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HB3  | 0.49     | 1.84        | 17     | 1     |
| 1:A:647:PHE:CD2  | 1:A:664:TRP:CZ2  | 0.49     | 3.01        | 8      | 2     |
| 1:A:743:ILE:HA   | 1:A:746:ARG:HG3  | 0.49     | 1.85        | 19     | 2     |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:CG   | 0.49     | 2.38        | 13     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.49     | 2.65        | 19     | 1     |
| 1:A:791:PHE:O    | 1:A:795:ARG:HD3  | 0.49     | 2.08        | 6      | 1     |
| 1:A:629:ARG:CZ   | 1:A:645:PHE:CD2  | 0.49     | 2.95        | 9      | 1     |
| 1:A:656:LEU:CD2  | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.49     | 2.38        | 9      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.49     | 2.37        | 9      | 1     |
| 1:A:753:PRO:CB   | 1:A:754:PRO:CD   | 0.49     | 2.90        | 6      | 16    |
| 1:A:668:LEU:N    | 1:A:668:LEU:HD12 | 0.49     | 2.22        | 14     | 1     |
| 1:A:647:PHE:HE2  | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.49     | 1.66        | 16     | 3     |
| 1:A:629:ARG:HA   | 1:A:629:ARG:HE   | 0.49     | 1.67        | 12     | 2     |
| 1:A:697:SER:O    | 1:A:701:GLN:CB   | 0.49     | 2.60        | 3      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:CD1  | 0.49     | 2.28        | 15     | 1     |
| 1:A:656:LEU:CG   | 1:A:659:VAL:HG21 | 0.49     | 2.33        | 16     | 1     |
| 1:A:763:GLN:O    | 1:A:767:ARG:HG3  | 0.49     | 2.08        | 14     | 2     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:N    | 0.49     | 2.46        | 7      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.49     | 1.84        | 10     | 1     |
| 1:A:769:PHE:O    | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.49     | 2.08        | 4      | 3     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:767:ARG:CB   | 0.49     | 2.37        | 1      | 2     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:703:LYS:HE3  | 0.49     | 2.07        | 15     | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CE1  | 0.49     | 2.43        | 19     | 1     |
| 1:A:706:ARG:NE   | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.49     | 2.23        | 11     | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:CB   | 0.49     | 2.61        | 2      | 4     |
| 1:A:641:ASN:HB3  | 1:A:664:TRP:O    | 0.49     | 2.07        | 16     | 5     |
| 1:A:747:LEU:HA   | 1:A:755:TYR:CE2  | 0.49     | 2.43        | 4      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HA   | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.49     | 1.84        | 9      | 2     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:795:ARG:NH2  | 0.49     | 2.67        | 6      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.48     | 1.84        | 14     | 1     |
| 1:A:794:THR:O    | 1:A:798:GLU:N    | 0.48     | 2.45        | 6      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:767:ARG:HB3  | 0.48     | 1.84        | 18     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:N    | 0.48     | 2.23        | 10     | 3     |
| 1:A:649:LEU:O    | 1:A:652:HIS:CB   | 0.48     | 2.61        | 1      | 5     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.48     | 2.35        | 2      | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:CG   | 0.48     | 2.37        | 9      | 2     |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:642:GLN:HB2  | 0.48     | 2.48        | 16     | 2     |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.48     | 1.84        | 5      | 1     |
| 1:A:706:ARG:HG3  | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.48     | 1.84        | 5      | 1     |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:713:CYS:HB3  | 0.48     | 2.08        | 4      | 1     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.48     | 2.08        | 19     | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.48     | 2.70        | 13     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HE   | 1:A:751:LEU:HG   | 0.48     | 1.67        | 8      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:N    | 0.48     | 2.23        | 14     | 3     |
| 1:A:746:ARG:CB   | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.48     | 2.96        | 14     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:705:GLU:HG3  | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.48     | 1.84        | 18     | 2     |
| 1:A:718:ARG:HB3  | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.48     | 1.83        | 2      | 1     |
| 1:A:700:ASN:HB3  | 1:A:758:PRO:HD2  | 0.48     | 1.84        | 20     | 1     |
| 1:A:627:ILE:N    | 1:A:637:LEU:CD2  | 0.48     | 2.76        | 19     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:664:TRP:NE1  | 0.48     | 2.22        | 19     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.48     | 1.83        | 3      | 1     |
| 1:A:659:VAL:CB   | 1:A:660:PRO:CD   | 0.48     | 2.89        | 16     | 1     |
| 1:A:771:GLN:C    | 1:A:775:LEU:HG   | 0.48     | 2.29        | 12     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:792:PHE:CD1  | 0.48     | 2.43        | 18     | 1     |
| 1:A:747:LEU:CD2  | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.48     | 2.97        | 18     | 2     |
| 1:A:652:HIS:CG   | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.48     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:711:LEU:CD1  | 1:A:765:VAL:HG21 | 0.48     | 2.38        | 5      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HB3  | 1:A:709:LEU:HB3  | 0.48     | 1.85        | 20     | 1     |
| 1:A:755:TYR:HD2  | 1:A:760:GLU:CG   | 0.48     | 2.22        | 20     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:714:HIS:CE1  | 0.48     | 2.43        | 7      | 1     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.48     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:757:SER:CB   | 0.48     | 2.38        | 13     | 1     |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:CD   | 0.48     | 2.37        | 16     | 1     |
| 1:A:636:ASP:O    | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.48     | 2.09        | 11     | 1     |
| 1:A:626:THR:C    | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.48     | 2.28        | 11     | 1     |
| 1:A:638:VAL:O    | 1:A:638:VAL:HG13 | 0.48     | 2.09        | 18     | 2     |
| 1:A:746:ARG:CD   | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.48     | 2.38        | 14     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.48     | 1.83        | 17     | 3     |
| 1:A:745:ALA:C    | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.48     | 2.28        | 10     | 6     |
| 1:A:755:TYR:CD1  | 1:A:760:GLU:HB3  | 0.48     | 2.44        | 18     | 5     |
| 1:A:743:ILE:HG12 | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.48     | 1.85        | 17     | 1     |
| 1:A:705:GLU:HG2  | 1:A:747:LEU:CD2  | 0.48     | 2.38        | 3      | 2     |
| 1:A:786:ILE:HG13 | 1:A:790:ARG:NE   | 0.48     | 2.23        | 13     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:711:LEU:HD23 | 0.48     | 1.84        | 16     | 1     |
| 1:A:786:ILE:HA   | 1:A:789:GLN:CB   | 0.48     | 2.38        | 16     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD23 | 1:A:649:LEU:H    | 0.48     | 1.67        | 9      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HG3  | 1:A:800:PHE:HD1  | 0.48     | 1.69        | 14     | 1     |
| 1:A:660:PRO:C    | 1:A:662:GLU:N    | 0.48     | 2.66        | 5      | 7     |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:CG   | 0.48     | 2.39        | 12     | 1     |
| 1:A:762:ALA:HA   | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.48     | 1.84        | 18     | 1     |
| 1:A:669:CYS:SG   | 1:A:670:HIS:N    | 0.48     | 2.86        | 17     | 2     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:717:CYS:HB3  | 0.48     | 2.42        | 8      | 4     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:740:LEU:CA   | 0.48     | 2.38        | 4      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.48     | 2.38        | 16     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:HA   | 0.48     | 1.86        | 13     | 1     |
| 1:A:647:PHE:CD2  | 1:A:652:HIS:N    | 0.48     | 2.82        | 9      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:626:THR:CB   | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.48     | 2.39        | 10     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HG   | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.48     | 1.85        | 14     | 3     |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:744:ARG:N    | 0.48     | 2.23        | 12     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.48     | 1.84        | 18     | 1     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:790:ARG:HG3  | 0.48     | 2.08        | 2      | 4     |
| 1:A:628:CYS:HA   | 1:A:646:CYS:C    | 0.48     | 2.28        | 17     | 1     |
| 1:A:759:GLN:O    | 1:A:763:GLN:CB   | 0.48     | 2.61        | 4      | 3     |
| 1:A:753:PRO:N    | 1:A:754:PRO:CD   | 0.48     | 2.77        | 1      | 2     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:CG   | 0.48     | 2.39        | 5      | 1     |
| 1:A:794:THR:O    | 1:A:798:GLU:HB2  | 0.48     | 2.09        | 15     | 1     |
| 1:A:747:LEU:CB   | 1:A:755:TYR:OH   | 0.48     | 2.62        | 4      | 2     |
| 1:A:747:LEU:HA   | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.48     | 2.44        | 20     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD23 | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.48     | 2.43        | 20     | 1     |
| 1:A:765:VAL:C    | 1:A:767:ARG:N    | 0.48     | 2.66        | 20     | 1     |
| 1:A:629:ARG:NH1  | 1:A:645:PHE:HB3  | 0.48     | 2.24        | 9      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.48     | 1.69        | 14     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:CD1  | 0.48     | 2.97        | 5      | 3     |
| 1:A:659:VAL:HG12 | 1:A:660:PRO:HD2  | 0.48     | 1.85        | 15     | 2     |
| 1:A:645:PHE:HB3  | 1:A:647:PHE:HE1  | 0.48     | 1.69        | 7      | 6     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:CG   | 0.48     | 2.38        | 2      | 1     |
| 1:A:711:LEU:CB   | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.48     | 2.38        | 19     | 1     |
| 1:A:753:PRO:CG   | 1:A:754:PRO:HD3  | 0.48     | 2.38        | 13     | 1     |
| 1:A:659:VAL:HG22 | 1:A:660:PRO:CD   | 0.48     | 2.34        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:NH2  | 1:A:645:PHE:HD2  | 0.48     | 2.07        | 9      | 1     |
| 1:A:647:PHE:HB2  | 1:A:664:TRP:CH2  | 0.48     | 2.44        | 11     | 2     |
| 1:A:796:MET:SD   | 1:A:800:PHE:CZ   | 0.48     | 3.07        | 14     | 1     |
| 1:A:654:PRO:HA   | 1:A:744:ARG:HH21 | 0.48     | 1.68        | 12     | 1     |
| 1:A:702:ARG:O    | 1:A:706:ARG:HG2  | 0.48     | 2.09        | 17     | 3     |
| 1:A:637:LEU:N    | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.48     | 2.23        | 2      | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:HA   | 0.48     | 1.86        | 4      | 2     |
| 1:A:633:LYS:O    | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.48     | 2.08        | 8      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CG   | 1:A:789:GLN:HG2  | 0.48     | 2.44        | 18     | 2     |
| 1:A:648:HIS:HB2  | 1:A:651:CYS:HB2  | 0.48     | 1.84        | 7      | 3     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:792:PHE:HB2  | 0.48     | 2.08        | 2      | 2     |
| 1:A:653:LEU:C    | 1:A:655:ALA:H    | 0.48     | 2.12        | 15     | 2     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:789:GLN:N    | 0.48     | 2.77        | 15     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:CA   | 0.48     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.48     | 2.94        | 13     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:755:TYR:HD2  | 0.48     | 2.21        | 11     | 4     |
| 1:A:714:HIS:HD2  | 1:A:717:CYS:SG   | 0.48     | 2.30        | 11     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HB3  | 0.48     | 1.86        | 11     | 1     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:751:LEU:N    | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.48     | 2.77        | 11     | 2     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.48     | 2.44        | 18     | 3     |
| 1:A:745:ALA:HA   | 1:A:750:LYS:HE3  | 0.48     | 1.85        | 7      | 4     |
| 1:A:661:GLY:C    | 1:A:663:GLU:H    | 0.48     | 2.12        | 10     | 3     |
| 1:A:738:LEU:HG   | 1:A:764:ASP:O    | 0.48     | 2.09        | 18     | 1     |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:NE2  | 0.48     | 2.24        | 10     | 2     |
| 1:A:721:HIS:O    | 1:A:722:GLN:HG2  | 0.48     | 2.09        | 17     | 2     |
| 1:A:715:GLU:HB3  | 1:A:716:PRO:CD   | 0.48     | 2.39        | 15     | 3     |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:750:LYS:HZ2  | 0.48     | 2.21        | 15     | 1     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.48     | 2.48        | 20     | 1     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:653:LEU:C    | 0.47     | 2.53        | 2      | 11    |
| 1:A:668:LEU:CD1  | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47     | 2.39        | 14     | 1     |
| 1:A:765:VAL:CA   | 1:A:768:MET:HB2  | 0.47     | 2.38        | 16     | 7     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CA   | 0.47     | 2.38        | 18     | 2     |
| 1:A:647:PHE:CD1  | 1:A:664:TRP:CH2  | 0.47     | 3.02        | 17     | 1     |
| 1:A:717:CYS:SG   | 1:A:720:LEU:HD23 | 0.47     | 2.49        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.47     | 2.39        | 19     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:HA   | 0.47     | 1.84        | 19     | 1     |
| 1:A:703:LYS:O    | 1:A:706:ARG:HB3  | 0.47     | 2.08        | 6      | 2     |
| 1:A:711:LEU:CD2  | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.47     | 2.29        | 9      | 1     |
| 1:A:656:LEU:O    | 1:A:657:GLN:HB2  | 0.47     | 2.09        | 18     | 2     |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.47     | 2.39        | 17     | 1     |
| 1:A:743:ILE:CD1  | 1:A:761:PHE:O    | 0.47     | 2.60        | 2      | 1     |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:NE   | 0.47     | 2.24        | 19     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.47     | 2.38        | 3      | 1     |
| 1:A:700:ASN:HD22 | 1:A:703:LYS:HD2  | 0.47     | 1.69        | 3      | 1     |
| 1:A:629:ARG:CZ   | 1:A:647:PHE:CE1  | 0.47     | 2.98        | 9      | 1     |
| 1:A:723:LEU:CD2  | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.47     | 2.38        | 12     | 1     |
| 1:A:785:ILE:C    | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.47     | 2.12        | 17     | 5     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.47     | 2.44        | 2      | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:768:MET:N    | 0.47     | 2.75        | 2      | 1     |
| 1:A:656:LEU:O    | 1:A:658:ASP:N    | 0.47     | 2.47        | 15     | 2     |
| 1:A:770:LYS:O    | 1:A:773:ASN:ND2  | 0.47     | 2.47        | 20     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:708:LEU:HB2  | 0.47     | 2.39        | 13     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:788:LEU:HG   | 0.47     | 2.39        | 8      | 1     |
| 1:A:794:THR:HG22 | 1:A:795:ARG:N    | 0.47     | 2.24        | 8      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HE2  | 1:A:799:ALA:CB   | 0.47     | 2.39        | 14     | 2     |
| 1:A:707:VAL:CG2  | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.47     | 2.97        | 20     | 2     |
| 1:A:658:ASP:O    | 1:A:659:VAL:O    | 0.47     | 2.32        | 1      | 2     |
| 1:A:785:ILE:HA   | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.47     | 2.40        | 5      | 2     |
| 1:A:701:GLN:HG3  | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.47     | 2.40        | 4      | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:772:PHE:CE2  | 1:A:785:ILE:HA   | 0.47     | 2.43        | 4      | 2     |
| 1:A:737:THR:CG2  | 1:A:738:LEU:N    | 0.47     | 2.67        | 6      | 2     |
| 1:A:752:SER:CB   | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.47     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.47     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:656:LEU:CD2  | 1:A:660:PRO:HD3  | 0.47     | 2.39        | 8      | 3     |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:792:PHE:HB2  | 0.47     | 1.86        | 16     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:792:PHE:CB   | 0.47     | 2.39        | 16     | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:755:TYR:HE2  | 0.47     | 2.33        | 18     | 2     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:709:LEU:C    | 0.47     | 2.49        | 18     | 2     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:O    | 0.47     | 2.10        | 9      | 2     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.47     | 2.40        | 17     | 3     |
| 1:A:723:LEU:CB   | 1:A:739:ASP:HB3  | 0.47     | 2.39        | 2      | 2     |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:748:GLN:CG   | 0.47     | 2.92        | 2      | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG2  | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.47     | 2.98        | 5      | 3     |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.47     | 2.44        | 5      | 2     |
| 1:A:707:VAL:HG23 | 1:A:711:LEU:CD1  | 0.47     | 2.40        | 5      | 1     |
| 1:A:696:LEU:O    | 1:A:700:ASN:CB   | 0.47     | 2.62        | 3      | 3     |
| 1:A:637:LEU:HA   | 1:A:647:PHE:O    | 0.47     | 2.10        | 20     | 2     |
| 1:A:630:VAL:CG2  | 1:A:647:PHE:CE2  | 0.47     | 2.98        | 20     | 2     |
| 1:A:712:PHE:CE2  | 1:A:744:ARG:HD3  | 0.47     | 2.45        | 3      | 2     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:670:HIS:N    | 0.47     | 2.42        | 7      | 1     |
| 1:A:757:SER:OG   | 1:A:760:GLU:HB2  | 0.47     | 2.10        | 3      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:668:LEU:H    | 0.47     | 1.69        | 16     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:H    | 0.47     | 2.21        | 6      | 1     |
| 1:A:695:LYS:O    | 1:A:756:SER:O    | 0.47     | 2.32        | 17     | 7     |
| 1:A:796:MET:HE2  | 1:A:800:PHE:CE1  | 0.47     | 2.44        | 19     | 2     |
| 1:A:639:MET:HG3  | 1:A:639:MET:O    | 0.47     | 2.10        | 5      | 1     |
| 1:A:653:LEU:C    | 1:A:655:ALA:N    | 0.47     | 2.68        | 19     | 3     |
| 1:A:668:LEU:N    | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47     | 2.22        | 20     | 1     |
| 1:A:700:ASN:ND2  | 1:A:703:LYS:NZ   | 0.47     | 2.63        | 7      | 1     |
| 1:A:648:HIS:O    | 1:A:651:CYS:HB2  | 0.47     | 2.10        | 9      | 1     |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.47     | 2.93        | 9      | 1     |
| 1:A:713:CYS:SG   | 1:A:714:HIS:N    | 0.47     | 2.88        | 11     | 2     |
| 1:A:664:TRP:CZ2  | 1:A:666:CYS:HA   | 0.47     | 2.45        | 19     | 3     |
| 1:A:703:LYS:HG2  | 1:A:799:ALA:HB3  | 0.47     | 1.87        | 15     | 3     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:746:ARG:NH2  | 0.47     | 2.25        | 18     | 1     |
| 1:A:652:HIS:ND1  | 1:A:664:TRP:HZ2  | 0.47     | 2.08        | 6      | 4     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:742:LEU:HB3  | 0.47     | 2.10        | 20     | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:HA   | 0.47     | 1.85        | 17     | 1     |
| 1:A:706:ARG:O    | 1:A:710:ALA:HB2  | 0.47     | 2.10        | 13     | 4     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.47     | 2.93        | 19     | 2     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:789:GLN:N    | 0.47     | 2.43        | 16     | 4     |
| 1:A:794:THR:O    | 1:A:797:ASN:HB3  | 0.47     | 2.09        | 1      | 3     |
| 1:A:653:LEU:C    | 1:A:744:ARG:HE   | 0.47     | 2.12        | 2      | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.47     | 2.37        | 4      | 1     |
| 1:A:796:MET:O    | 1:A:800:PHE:CD1  | 0.47     | 2.68        | 4      | 1     |
| 1:A:667:SER:H    | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47     | 1.70        | 7      | 1     |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:746:ARG:HE   | 0.47     | 1.70        | 19     | 1     |
| 1:A:640:CYS:HA   | 1:A:664:TRP:O    | 0.47     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:CE   | 0.47     | 2.39        | 3      | 1     |
| 1:A:628:CYS:HB2  | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.47     | 1.87        | 3      | 2     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.47     | 2.25        | 8      | 1     |
| 1:A:705:GLU:O    | 1:A:706:ARG:C    | 0.47     | 2.52        | 6      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:662:GLU:HA   | 0.47     | 1.86        | 6      | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:CD   | 0.47     | 2.53        | 6      | 1     |
| 1:A:629:ARG:NE   | 1:A:647:PHE:CE1  | 0.47     | 2.83        | 9      | 1     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.47     | 2.25        | 14     | 1     |
| 1:A:660:PRO:CG   | 1:A:664:TRP:CG   | 0.47     | 2.98        | 7      | 5     |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:765:VAL:C    | 0.47     | 2.51        | 6      | 2     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:716:PRO:C    | 0.47     | 2.52        | 5      | 3     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:772:PHE:HD2  | 0.47     | 2.22        | 5      | 1     |
| 1:A:716:PRO:HA   | 1:A:784:SER:HB3  | 0.47     | 1.87        | 5      | 1     |
| 1:A:786:ILE:HA   | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.47     | 1.69        | 19     | 3     |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:OH   | 0.47     | 2.10        | 4      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HB2  | 1:A:742:LEU:CD1  | 0.47     | 2.38        | 8      | 1     |
| 1:A:786:ILE:CG2  | 1:A:790:ARG:HD3  | 0.47     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:767:ARG:HG2  | 1:A:771:GLN:NE2  | 0.47     | 2.24        | 15     | 2     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:792:PHE:CB   | 0.47     | 2.63        | 2      | 1     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.47     | 2.98        | 15     | 2     |
| 1:A:719:PRO:HB2  | 1:A:772:PHE:CE1  | 0.47     | 2.45        | 13     | 2     |
| 1:A:720:LEU:C    | 1:A:740:LEU:HG   | 0.47     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:761:PHE:HD1  | 0.47     | 1.93        | 7      | 2     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:787:GLY:C    | 0.47     | 2.53        | 16     | 1     |
| 1:A:665:SER:OG   | 1:A:669:CYS:HB3  | 0.47     | 2.10        | 11     | 1     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:667:SER:C    | 0.47     | 2.53        | 18     | 9     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:768:MET:HB3  | 0.47     | 2.34        | 3      | 2     |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:CG   | 0.47     | 2.40        | 9      | 2     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.47     | 2.45        | 16     | 1     |
| 1:A:752:SER:N    | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.46     | 2.25        | 1      | 1     |
| 1:A:758:PRO:HB2  | 1:A:800:PHE:CZ   | 0.46     | 2.45        | 9      | 3     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:CD2  | 0.46     | 2.40        | 2      | 1     |
| 1:A:697:SER:HB3  | 1:A:700:ASN:CB   | 0.46     | 2.39        | 4      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:HB2  | 0.46     | 1.86        | 20     | 1     |
| 1:A:626:THR:C    | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.46     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:HZ   | 0.46     | 1.65        | 16     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.46     | 1.87        | 16     | 1     |
| 1:A:633:LYS:HD2  | 1:A:633:LYS:N    | 0.46     | 2.23        | 9      | 1     |
| 1:A:744:ARG:HH12 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.46     | 1.67        | 12     | 1     |
| 1:A:637:LEU:HG   | 1:A:646:CYS:CB   | 0.46     | 2.38        | 10     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:796:MET:HE3  | 0.46     | 1.87        | 17     | 1     |
| 1:A:706:ARG:CD   | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.46     | 2.41        | 7      | 2     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.46     | 2.98        | 13     | 1     |
| 1:A:668:LEU:CD1  | 1:A:709:LEU:HB3  | 0.46     | 2.39        | 14     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HB3  | 1:A:768:MET:CG   | 0.46     | 2.40        | 18     | 1     |
| 1:A:627:ILE:CG2  | 1:A:634:PRO:HD3  | 0.46     | 2.39        | 1      | 2     |
| 1:A:745:ALA:CB   | 1:A:750:LYS:HB3  | 0.46     | 2.40        | 16     | 2     |
| 1:A:712:PHE:CE2  | 1:A:744:ARG:NE   | 0.46     | 2.83        | 17     | 1     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:761:PHE:HD2  | 0.46     | 1.93        | 1      | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:CG   | 0.46     | 2.34        | 4      | 2     |
| 1:A:761:PHE:CZ   | 1:A:765:VAL:HG21 | 0.46     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB2  | 1:A:757:SER:OG   | 0.46     | 2.09        | 13     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HG   | 1:A:795:ARG:HH22 | 0.46     | 1.70        | 6      | 1     |
| 1:A:746:ARG:N    | 1:A:751:LEU:HG   | 0.46     | 2.24        | 9      | 2     |
| 1:A:640:CYS:HB2  | 1:A:645:PHE:HB2  | 0.46     | 1.88        | 18     | 3     |
| 1:A:645:PHE:HB3  | 1:A:647:PHE:CE1  | 0.46     | 2.45        | 10     | 2     |
| 1:A:712:PHE:CE2  | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.46     | 2.81        | 17     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HA   | 1:A:706:ARG:HD3  | 0.46     | 1.86        | 1      | 1     |
| 1:A:707:VAL:C    | 1:A:709:LEU:N    | 0.46     | 2.64        | 1      | 1     |
| 1:A:760:GLU:O    | 1:A:763:GLN:HB2  | 0.46     | 2.11        | 1      | 2     |
| 1:A:704:CYS:CB   | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.46     | 2.99        | 1      | 1     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:711:LEU:N    | 0.46     | 2.48        | 5      | 2     |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:769:PHE:CZ   | 0.46     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CD1  | 0.46     | 2.46        | 15     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:708:LEU:CB   | 0.46     | 2.92        | 7      | 3     |
| 1:A:758:PRO:CB   | 1:A:800:PHE:HZ   | 0.46     | 2.24        | 4      | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.46     | 2.68        | 6      | 2     |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:CA   | 0.46     | 2.41        | 16     | 2     |
| 1:A:715:GLU:HB2  | 1:A:716:PRO:CD   | 0.46     | 2.41        | 11     | 2     |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:786:ILE:HB   | 0.46     | 2.11        | 14     | 1     |
| 1:A:645:PHE:CB   | 1:A:666:CYS:HB3  | 0.46     | 2.40        | 18     | 2     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:LEU:CD1  | 0.46     | 2.34        | 18     | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:768:MET:HA   | 0.46     | 2.11        | 18     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.46     | 2.46        | 8      | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:786:ILE:CD1  | 0.46     | 2.63        | 2      | 4     |
| 1:A:753:PRO:CB   | 1:A:754:PRO:HD2  | 0.46     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:CE2  | 0.46     | 2.45        | 4      | 1     |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:702:ARG:CB   | 0.46     | 2.63        | 7      | 2     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:CG   | 0.46     | 2.41        | 3      | 2     |
| 1:A:696:LEU:CB   | 1:A:757:SER:OG   | 0.46     | 2.64        | 13     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HE   | 1:A:629:ARG:HA   | 0.46     | 1.70        | 16     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:639:MET:N    | 0.46     | 2.25        | 14     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HB3  | 1:A:789:GLN:CG   | 0.46     | 2.41        | 20     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HE   | 0.46     | 1.68        | 2      | 1     |
| 1:A:663:GLU:O    | 1:A:664:TRP:O    | 0.46     | 2.33        | 5      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HA   | 1:A:707:VAL:CG2  | 0.46     | 2.40        | 13     | 2     |
| 1:A:765:VAL:HA   | 1:A:768:MET:CB   | 0.46     | 2.41        | 20     | 1     |
| 1:A:745:ALA:O    | 1:A:750:LYS:N    | 0.46     | 2.49        | 19     | 3     |
| 1:A:746:ARG:HG2  | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.46     | 2.45        | 3      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:701:GLN:N    | 0.46     | 2.24        | 11     | 4     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.46     | 2.98        | 11     | 1     |
| 1:A:765:VAL:O    | 1:A:769:PHE:CG   | 0.46     | 2.69        | 14     | 6     |
| 1:A:786:ILE:HG13 | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.46     | 1.69        | 12     | 1     |
| 1:A:767:ARG:O    | 1:A:768:MET:C    | 0.46     | 2.53        | 17     | 8     |
| 1:A:793:GLU:O    | 1:A:797:ASN:HB3  | 0.46     | 2.11        | 18     | 2     |
| 1:A:714:HIS:ND1  | 1:A:791:PHE:CD1  | 0.46     | 2.83        | 6      | 2     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.46     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:784:SER:O    | 1:A:788:LEU:CB   | 0.46     | 2.63        | 15     | 1     |
| 1:A:627:ILE:O    | 1:A:646:CYS:SG   | 0.46     | 2.73        | 3      | 2     |
| 1:A:753:PRO:CB   | 1:A:754:PRO:HD3  | 0.46     | 2.41        | 13     | 1     |
| 1:A:652:HIS:CD2  | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.46     | 2.46        | 6      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.46     | 2.44        | 9      | 1     |
| 1:A:642:GLN:CG   | 1:A:665:SER:HB3  | 0.46     | 2.40        | 9      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD13 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.46     | 1.88        | 14     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:HD2  | 0.46     | 1.70        | 14     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:CE2  | 0.46     | 2.46        | 6      | 2     |
| 1:A:773:ASN:CA   | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.46     | 2.41        | 3      | 3     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.46     | 2.64        | 19     | 3     |
| 1:A:634:PRO:HA   | 1:A:637:LEU:CD1  | 0.46     | 2.36        | 1      | 1     |
| 1:A:641:ASN:OD1  | 1:A:642:GLN:HG2  | 0.46     | 2.10        | 2      | 1     |
| 1:A:710:ALA:CB   | 1:A:795:ARG:HG3  | 0.46     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:768:MET:CG   | 0.46     | 2.94        | 7      | 3     |
| 1:A:790:ARG:N    | 1:A:790:ARG:CD   | 0.46     | 2.78        | 7      | 4     |
| 1:A:703:LYS:NZ   | 1:A:758:PRO:HA   | 0.46     | 2.26        | 15     | 1     |
| 1:A:716:PRO:C    | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.46     | 2.31        | 3      | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:743:ILE:CG1  | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.46     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:667:SER:HB2  | 0.46     | 2.26        | 16     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HG12 | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.46     | 2.45        | 16     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:723:LEU:HD22 | 0.46     | 2.41        | 11     | 2     |
| 1:A:788:LEU:C    | 1:A:790:ARG:N    | 0.46     | 2.68        | 11     | 3     |
| 1:A:665:SER:O    | 1:A:670:HIS:CB   | 0.46     | 2.64        | 5      | 4     |
| 1:A:652:HIS:CG   | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.46     | 2.45        | 10     | 4     |
| 1:A:638:VAL:O    | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.46     | 2.69        | 2      | 2     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:747:LEU:HB3  | 0.46     | 2.26        | 2      | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:747:LEU:CD1  | 0.46     | 2.94        | 2      | 1     |
| 1:A:746:ARG:CB   | 1:A:755:TYR:CZ   | 0.46     | 2.99        | 19     | 2     |
| 1:A:665:SER:CB   | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.46     | 2.41        | 9      | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:709:LEU:H    | 0.46     | 1.69        | 4      | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:CD2  | 0.46     | 2.34        | 6      | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.46     | 2.36        | 6      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CB   | 0.46     | 2.41        | 20     | 2     |
| 1:A:737:THR:HG22 | 1:A:738:LEU:O    | 0.46     | 2.11        | 16     | 7     |
| 1:A:742:LEU:CD1  | 1:A:743:ILE:N    | 0.46     | 2.72        | 18     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:CZ   | 0.46     | 2.94        | 17     | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:758:PRO:CD   | 0.46     | 2.40        | 20     | 1     |
| 1:A:785:ILE:HA   | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.46     | 1.87        | 20     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD1  | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.46     | 2.41        | 13     | 2     |
| 1:A:649:LEU:N    | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.46     | 2.26        | 3      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:758:PRO:HD3  | 0.46     | 1.87        | 13     | 1     |
| 1:A:626:THR:CG2  | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.45     | 2.41        | 10     | 2     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:CD1  | 0.45     | 2.39        | 14     | 3     |
| 1:A:720:LEU:HA   | 1:A:723:LEU:CG   | 0.45     | 2.41        | 14     | 3     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:HB2  | 0.45     | 2.11        | 1      | 2     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:667:SER:CB   | 0.45     | 2.79        | 10     | 1     |
| 1:A:633:LYS:O    | 1:A:648:HIS:CE1  | 0.45     | 2.69        | 20     | 3     |
| 1:A:721:HIS:HB3  | 1:A:722:GLN:NE2  | 0.45     | 2.26        | 4      | 2     |
| 1:A:758:PRO:HB3  | 1:A:800:PHE:CE1  | 0.45     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:CA   | 0.45     | 2.41        | 13     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CB   | 1:A:709:LEU:HG   | 0.45     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:HA   | 0.45     | 1.88        | 16     | 2     |
| 1:A:716:PRO:CG   | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.45     | 2.41        | 6      | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:795:ARG:NH1  | 0.45     | 2.24        | 6      | 1     |
| 1:A:755:TYR:HE1  | 1:A:761:PHE:N    | 0.45     | 2.10        | 9      | 1     |
| 1:A:628:CYS:N    | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.45     | 2.25        | 12     | 1     |
| 1:A:757:SER:O    | 1:A:760:GLU:N    | 0.45     | 2.49        | 5      | 3     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:654:PRO:HD2  | 0.45     | 2.10        | 5      | 2     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:744:ARG:CB   | 0.45     | 2.92        | 17     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HG12 | 1:A:761:PHE:HB2  | 0.45     | 1.88        | 2      | 1     |
| 1:A:704:CYS:C    | 1:A:706:ARG:N    | 0.45     | 2.67        | 15     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CB   | 1:A:654:PRO:CD   | 0.45     | 2.95        | 13     | 3     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:705:GLU:CG   | 0.45     | 2.79        | 7      | 2     |
| 1:A:708:LEU:HB2  | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.45     | 2.46        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HE   | 1:A:713:CYS:CB   | 0.45     | 2.24        | 9      | 1     |
| 1:A:696:LEU:CG   | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.45     | 2.98        | 11     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HA   | 1:A:751:LEU:CG   | 0.45     | 2.40        | 11     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HB2  | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.45     | 1.87        | 12     | 2     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.45     | 2.24        | 17     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.45     | 1.70        | 17     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CA   | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.45     | 2.41        | 4      | 2     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:720:LEU:HB2  | 0.45     | 2.10        | 1      | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:CD1  | 0.45     | 2.38        | 1      | 2     |
| 1:A:723:LEU:CD1  | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.45     | 2.41        | 2      | 1     |
| 1:A:746:ARG:HG3  | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.45     | 1.87        | 5      | 1     |
| 1:A:714:HIS:CE1  | 1:A:791:PHE:CD1  | 0.45     | 3.04        | 16     | 2     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:701:GLN:HA   | 0.45     | 1.88        | 15     | 1     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:750:LYS:HE3  | 0.45     | 2.26        | 15     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HD3  | 1:A:754:PRO:HG2  | 0.45     | 1.89        | 4      | 1     |
| 1:A:721:HIS:CA   | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.45     | 2.40        | 20     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:768:MET:CG   | 0.45     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.45     | 2.46        | 8      | 1     |
| 1:A:783:GLN:HE22 | 1:A:786:ILE:HG21 | 0.45     | 1.72        | 18     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CG   | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.45     | 2.42        | 17     | 2     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:CA   | 0.45     | 2.42        | 17     | 1     |
| 1:A:665:SER:C    | 1:A:669:CYS:HB2  | 0.45     | 2.32        | 5      | 2     |
| 1:A:757:SER:N    | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.45     | 2.27        | 15     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HG   | 0.45     | 2.46        | 4      | 1     |
| 1:A:628:CYS:HB2  | 1:A:647:PHE:HA   | 0.45     | 1.89        | 20     | 1     |
| 1:A:755:TYR:O    | 1:A:756:SER:CB   | 0.45     | 2.64        | 13     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:CE   | 0.45     | 2.93        | 11     | 2     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:721:HIS:C    | 0.45     | 2.55        | 14     | 4     |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:CG1  | 0.45     | 2.41        | 12     | 1     |
| 1:A:628:CYS:C    | 1:A:630:VAL:N    | 0.45     | 2.70        | 3      | 7     |
| 1:A:666:CYS:C    | 1:A:668:LEU:H    | 0.45     | 2.14        | 17     | 1     |
| 1:A:744:ARG:CA   | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.45     | 2.80        | 17     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CG   | 0.45     | 2.39        | 2      | 1     |
| 1:A:763:GLN:O    | 1:A:767:ARG:HB2  | 0.45     | 2.12        | 5      | 1     |
| 1:A:655:ALA:CB   | 1:A:657:GLN:HG3  | 0.45     | 2.41        | 15     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:656:LEU:O    | 1:A:657:GLN:CB   | 0.45     | 2.65        | 7      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:CG2  | 0.45     | 2.93        | 8      | 1     |
| 1:A:709:LEU:CD1  | 1:A:713:CYS:SG   | 0.45     | 3.05        | 1      | 1     |
| 1:A:704:CYS:CA   | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.45     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:701:GLN:CB   | 1:A:756:SER:O    | 0.45     | 2.63        | 13     | 1     |
| 1:A:783:GLN:NE2  | 1:A:783:GLN:O    | 0.45     | 2.50        | 13     | 1     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:789:GLN:CG   | 0.45     | 2.65        | 16     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:N    | 0.45     | 2.80        | 6      | 1     |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.45     | 1.89        | 11     | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB2  | 1:A:750:LYS:NZ   | 0.45     | 2.27        | 14     | 1     |
| 1:A:772:PHE:HA   | 1:A:775:LEU:HD12 | 0.45     | 1.89        | 12     | 1     |
| 1:A:738:LEU:O    | 1:A:739:ASP:HB3  | 0.45     | 2.12        | 18     | 1     |
| 1:A:653:LEU:C    | 1:A:653:LEU:HD23 | 0.45     | 2.32        | 17     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HG3  | 1:A:645:PHE:HA   | 0.45     | 1.87        | 15     | 2     |
| 1:A:655:ALA:HB3  | 1:A:657:GLN:HE21 | 0.45     | 1.71        | 13     | 1     |
| 1:A:700:ASN:C    | 1:A:758:PRO:HD2  | 0.45     | 2.32        | 13     | 1     |
| 1:A:665:SER:C    | 1:A:670:HIS:HB2  | 0.45     | 2.31        | 8      | 1     |
| 1:A:626:THR:HB   | 1:A:637:LEU:CD1  | 0.45     | 2.40        | 14     | 2     |
| 1:A:703:LYS:HE2  | 1:A:799:ALA:CA   | 0.45     | 2.41        | 14     | 1     |
| 1:A:711:LEU:O    | 1:A:712:PHE:C    | 0.45     | 2.54        | 9      | 3     |
| 1:A:744:ARG:NE   | 1:A:750:LYS:CE   | 0.45     | 2.79        | 18     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HZ   | 1:A:792:PHE:HB2  | 0.45     | 1.71        | 18     | 4     |
| 1:A:708:LEU:CG   | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.45     | 2.99        | 16     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.45     | 1.88        | 2      | 1     |
| 1:A:700:ASN:C    | 1:A:758:PRO:HD3  | 0.45     | 2.32        | 20     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:CB   | 0.45     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:668:LEU:HA   | 1:A:706:ARG:HB2  | 0.45     | 1.88        | 8      | 1     |
| 1:A:720:LEU:C    | 1:A:722:GLN:N    | 0.45     | 2.66        | 14     | 4     |
| 1:A:648:HIS:C    | 1:A:649:LEU:HG   | 0.45     | 2.32        | 7      | 2     |
| 1:A:657:GLN:O    | 1:A:658:ASP:HB3  | 0.45     | 2.12        | 12     | 1     |
| 1:A:744:ARG:O    | 1:A:748:GLN:HB2  | 0.45     | 2.10        | 7      | 3     |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:HB3  | 0.45     | 1.87        | 15     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:785:ILE:O    | 0.45     | 2.70        | 15     | 1     |
| 1:A:791:PHE:O    | 1:A:794:THR:HB   | 0.45     | 2.12        | 4      | 1     |
| 1:A:706:ARG:HB2  | 1:A:799:ALA:HB2  | 0.45     | 1.89        | 4      | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:788:LEU:HB3  | 0.45     | 2.26        | 8      | 2     |
| 1:A:699:ALA:C    | 1:A:703:LYS:HE2  | 0.45     | 2.32        | 13     | 4     |
| 1:A:656:LEU:O    | 1:A:657:GLN:CG   | 0.45     | 2.65        | 7      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE1  | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.45     | 2.47        | 13     | 1     |
| 1:A:739:ASP:H    | 1:A:742:LEU:CD1  | 0.45     | 2.19        | 8      | 1     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:792:PHE:CZ   | 0.45     | 2.99        | 16     | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:743:ILE:HG12 | 0.45     | 1.89        | 11     | 1     |
| 1:A:790:ARG:HA   | 1:A:790:ARG:NE   | 0.45     | 2.27        | 11     | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:SD   | 0.45     | 2.51        | 13     | 2     |
| 1:A:716:PRO:HB2  | 1:A:788:LEU:HG   | 0.45     | 1.89        | 18     | 3     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:658:ASP:HA   | 0.45     | 2.42        | 17     | 1     |
| 1:A:755:TYR:CZ   | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.45     | 3.05        | 9      | 2     |
| 1:A:755:TYR:HB3  | 1:A:760:GLU:CB   | 0.45     | 2.42        | 15     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HA   | 1:A:746:ARG:NH1  | 0.45     | 2.25        | 3      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.45     | 2.42        | 13     | 1     |
| 1:A:711:LEU:CD2  | 1:A:795:ARG:HH12 | 0.45     | 2.24        | 6      | 1     |
| 1:A:759:GLN:HB3  | 1:A:763:GLN:HE21 | 0.44     | 1.72        | 11     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD1  | 1:A:705:GLU:HA   | 0.44     | 2.40        | 15     | 6     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:HG3  | 0.44     | 1.87        | 12     | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.44     | 2.36        | 18     | 1     |
| 1:A:718:ARG:CG   | 1:A:719:PRO:HD3  | 0.44     | 2.40        | 9      | 2     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:761:PHE:CG   | 0.44     | 2.47        | 1      | 2     |
| 1:A:739:ASP:HA   | 1:A:768:MET:HG2  | 0.44     | 1.88        | 15     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:H    | 0.44     | 1.71        | 20     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HB2  | 1:A:756:SER:CB   | 0.44     | 2.42        | 20     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CG   | 0.44     | 2.39        | 19     | 1     |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:787:GLY:N    | 0.44     | 2.27        | 6      | 2     |
| 1:A:647:PHE:CZ   | 1:A:713:CYS:HB2  | 0.44     | 2.47        | 11     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CE1  | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.44     | 2.48        | 11     | 1     |
| 1:A:698:PRO:O    | 1:A:702:ARG:CG   | 0.44     | 2.65        | 14     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:701:GLN:NE2  | 0.44     | 2.80        | 12     | 1     |
| 1:A:756:SER:H    | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.44     | 1.73        | 12     | 1     |
| 1:A:792:PHE:HD2  | 1:A:793:GLU:HG3  | 0.44     | 1.72        | 18     | 3     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:790:ARG:N    | 0.44     | 2.50        | 6      | 2     |
| 1:A:716:PRO:HB3  | 1:A:784:SER:HB2  | 0.44     | 1.90        | 15     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.44     | 1.89        | 4      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HD13 | 1:A:637:LEU:N    | 0.44     | 2.28        | 13     | 3     |
| 1:A:745:ALA:HA   | 1:A:748:GLN:HB2  | 0.44     | 1.89        | 19     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HA   | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.44     | 1.87        | 3      | 1     |
| 1:A:649:LEU:N    | 1:A:649:LEU:CD1  | 0.44     | 2.80        | 8      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CZ   | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.44     | 2.46        | 8      | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:CE   | 0.44     | 2.42        | 11     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.44     | 2.47        | 11     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CG   | 0.44     | 2.42        | 14     | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB2  | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.44     | 1.88        | 18     | 1     |
| 1:A:709:LEU:O    | 1:A:713:CYS:HB3  | 0.44     | 2.13        | 18     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:649:LEU:N    | 0.44     | 2.80        | 10     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.44     | 1.88        | 17     | 1     |
| 1:A:721:HIS:O    | 1:A:741:THR:CG2  | 0.44     | 2.66        | 17     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HD2  | 1:A:785:ILE:HG22 | 0.44     | 1.71        | 15     | 1     |
| 1:A:639:MET:CG   | 1:A:644:GLU:HA   | 0.44     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:764:ASP:HB2  | 0.44     | 1.88        | 3      | 1     |
| 1:A:668:LEU:N    | 1:A:668:LEU:HD13 | 0.44     | 2.28        | 18     | 1     |
| 1:A:699:ALA:HA   | 1:A:702:ARG:HB3  | 0.44     | 1.89        | 19     | 2     |
| 1:A:788:LEU:HD12 | 1:A:791:PHE:CD2  | 0.44     | 2.48        | 4      | 1     |
| 1:A:642:GLN:HG2  | 1:A:665:SER:OG   | 0.44     | 2.13        | 16     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CD1  | 0.44     | 2.42        | 16     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HA   | 1:A:792:PHE:HE2  | 0.44     | 1.72        | 16     | 1     |
| 1:A:703:LYS:HE2  | 1:A:800:PHE:N    | 0.44     | 2.27        | 14     | 1     |
| 1:A:643:CYS:HB2  | 1:A:645:PHE:CD1  | 0.44     | 2.47        | 12     | 1     |
| 1:A:744:ARG:NE   | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.44     | 2.10        | 12     | 1     |
| 1:A:641:ASN:CB   | 1:A:664:TRP:O    | 0.44     | 2.66        | 18     | 3     |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.44     | 1.72        | 10     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.44     | 2.42        | 17     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HG   | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.44     | 2.47        | 19     | 1     |
| 1:A:737:THR:CG2  | 1:A:737:THR:O    | 0.44     | 2.64        | 3      | 1     |
| 1:A:660:PRO:HB2  | 1:A:664:TRP:CB   | 0.44     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:639:MET:HG3  | 1:A:646:CYS:SG   | 0.44     | 2.53        | 11     | 1     |
| 1:A:742:LEU:HG   | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.44     | 1.72        | 14     | 1     |
| 1:A:758:PRO:HG2  | 1:A:800:PHE:HZ   | 0.44     | 1.73        | 12     | 1     |
| 1:A:782:VAL:HA   | 1:A:785:ILE:CG1  | 0.44     | 2.42        | 18     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:795:ARG:HD2  | 0.44     | 1.90        | 17     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.44     | 1.89        | 5      | 2     |
| 1:A:740:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:HE1  | 0.44     | 2.43        | 15     | 1     |
| 1:A:655:ALA:O    | 1:A:657:GLN:HG3  | 0.44     | 2.12        | 4      | 1     |
| 1:A:700:ASN:N    | 1:A:700:ASN:HD22 | 0.44     | 2.10        | 7      | 1     |
| 1:A:783:GLN:NE2  | 1:A:786:ILE:HG21 | 0.44     | 2.27        | 8      | 1     |
| 1:A:718:ARG:N    | 1:A:719:PRO:CD   | 0.44     | 2.81        | 9      | 1     |
| 1:A:790:ARG:HE   | 1:A:790:ARG:HA   | 0.44     | 1.72        | 11     | 2     |
| 1:A:700:ASN:HA   | 1:A:703:LYS:HB2  | 0.44     | 1.90        | 14     | 1     |
| 1:A:703:LYS:HE3  | 1:A:796:MET:HA   | 0.44     | 1.90        | 14     | 1     |
| 1:A:745:ALA:CB   | 1:A:751:LEU:CB   | 0.44     | 2.95        | 12     | 1     |
| 1:A:628:CYS:HA   | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.44     | 1.89        | 10     | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:738:LEU:C    | 0.44     | 2.53        | 10     | 1     |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.44     | 1.73        | 10     | 2     |
| 1:A:742:LEU:HA   | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.44     | 2.42        | 17     | 1     |
| 1:A:660:PRO:CB   | 1:A:664:TRP:HB2  | 0.44     | 2.42        | 16     | 3     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.44     | 2.43        | 1      | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:773:ASN:CB   | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.44     | 2.34        | 20     | 1     |
| 1:A:791:PHE:O    | 1:A:795:ARG:HG2  | 0.44     | 2.12        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:700:ASN:HB3  | 0.44     | 1.88        | 19     | 1     |
| 1:A:762:ALA:O    | 1:A:765:VAL:N    | 0.44     | 2.51        | 19     | 2     |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CD   | 0.44     | 2.42        | 3      | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD1  | 1:A:772:PHE:O    | 0.44     | 2.71        | 3      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:CD2  | 0.44     | 2.26        | 9      | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD1  | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.44     | 2.47        | 11     | 2     |
| 1:A:788:LEU:HA   | 1:A:791:PHE:HB3  | 0.44     | 1.88        | 20     | 2     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.44     | 2.71        | 5      | 6     |
| 1:A:702:ARG:O    | 1:A:705:GLU:HB2  | 0.44     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:664:TRP:CE2  | 1:A:665:SER:O    | 0.44     | 2.71        | 8      | 1     |
| 1:A:667:SER:CA   | 1:A:670:HIS:HB3  | 0.44     | 2.43        | 8      | 1     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:723:LEU:HB2  | 0.44     | 2.13        | 11     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:HG12 | 0.44     | 2.43        | 11     | 1     |
| 1:A:769:PHE:HB3  | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.44     | 1.89        | 11     | 1     |
| 1:A:739:ASP:OD1  | 1:A:742:LEU:N    | 0.44     | 2.51        | 14     | 1     |
| 1:A:660:PRO:C    | 1:A:662:GLU:H    | 0.44     | 2.16        | 7      | 2     |
| 1:A:635:GLY:O    | 1:A:636:ASP:C    | 0.44     | 2.55        | 12     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD1  | 1:A:772:PHE:C    | 0.44     | 2.91        | 12     | 3     |
| 1:A:647:PHE:HZ   | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.44     | 1.73        | 2      | 1     |
| 1:A:762:ALA:C    | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.44     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:757:SER:OG   | 1:A:758:PRO:HD2  | 0.44     | 2.13        | 4      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HB2  | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.44     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:738:LEU:HB2  | 0.44     | 2.12        | 3      | 1     |
| 1:A:746:ARG:CA   | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.44     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:701:GLN:HG3  | 1:A:756:SER:C    | 0.44     | 2.33        | 13     | 1     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.44     | 2.47        | 9      | 1     |
| 1:A:652:HIS:HE2  | 1:A:667:SER:CB   | 0.43     | 2.26        | 17     | 1     |
| 1:A:640:CYS:SG   | 1:A:643:CYS:N    | 0.43     | 2.86        | 4      | 3     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.43     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:717:CYS:C    | 1:A:721:HIS:CD2  | 0.43     | 2.91        | 20     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HA   | 1:A:755:TYR:HE1  | 0.43     | 1.71        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CG   | 1:A:757:SER:HB2  | 0.43     | 2.42        | 20     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:664:TRP:CD1  | 0.43     | 2.48        | 19     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB3  | 1:A:701:GLN:HB2  | 0.43     | 1.90        | 3      | 1     |
| 1:A:643:CYS:SG   | 1:A:643:CYS:O    | 0.43     | 2.76        | 11     | 1     |
| 1:A:668:LEU:H    | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.43     | 1.72        | 12     | 1     |
| 1:A:667:SER:HA   | 1:A:670:HIS:C    | 0.43     | 2.33        | 4      | 3     |
| 1:A:786:ILE:O    | 1:A:789:GLN:HB2  | 0.43     | 2.12        | 10     | 1     |
| 1:A:652:HIS:HB3  | 1:A:655:ALA:HA   | 0.43     | 1.89        | 17     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.43     | 1.89        | 4      | 2     |
| 1:A:628:CYS:CA   | 1:A:637:LEU:HG   | 0.43     | 2.42        | 2      | 3     |
| 1:A:627:ILE:N    | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.43     | 2.28        | 2      | 2     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.43     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:703:LYS:C    | 1:A:706:ARG:HB2  | 0.43     | 2.34        | 15     | 1     |
| 1:A:755:TYR:CG   | 1:A:756:SER:N    | 0.43     | 2.82        | 20     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HH11 | 1:A:751:LEU:HB3  | 0.43     | 1.73        | 3      | 1     |
| 1:A:748:GLN:NE2  | 1:A:750:LYS:HZ1  | 0.43     | 2.11        | 3      | 1     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:746:ARG:HB2  | 0.43     | 2.13        | 13     | 1     |
| 1:A:766:GLY:O    | 1:A:770:LYS:HB2  | 0.43     | 2.12        | 8      | 1     |
| 1:A:629:ARG:CZ   | 1:A:645:PHE:HD2  | 0.43     | 2.25        | 9      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.43     | 3.01        | 11     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HB   | 1:A:659:VAL:CG2  | 0.43     | 2.43        | 14     | 1     |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:703:LYS:HB2  | 0.43     | 2.13        | 14     | 1     |
| 1:A:716:PRO:CB   | 1:A:788:LEU:HG   | 0.43     | 2.43        | 12     | 3     |
| 1:A:738:LEU:HG   | 1:A:764:ASP:HB3  | 0.43     | 1.90        | 2      | 2     |
| 1:A:659:VAL:HA   | 1:A:660:PRO:HD3  | 0.43     | 1.65        | 8      | 3     |
| 1:A:743:ILE:HG21 | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.43     | 2.48        | 11     | 2     |
| 1:A:790:ARG:O    | 1:A:794:THR:OG1  | 0.43     | 2.35        | 14     | 1     |
| 1:A:668:LEU:CD2  | 1:A:706:ARG:O    | 0.43     | 2.66        | 2      | 1     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:788:LEU:HG   | 0.43     | 2.11        | 5      | 1     |
| 1:A:695:LYS:HD3  | 1:A:754:PRO:HB2  | 0.43     | 1.89        | 15     | 1     |
| 1:A:717:CYS:O    | 1:A:721:HIS:CD2  | 0.43     | 2.72        | 4      | 1     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:670:HIS:CB   | 0.43     | 2.66        | 7      | 1     |
| 1:A:738:LEU:N    | 1:A:738:LEU:HD23 | 0.43     | 2.27        | 7      | 1     |
| 1:A:796:MET:CE   | 1:A:800:PHE:CE1  | 0.43     | 3.01        | 7      | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD2  | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.43     | 2.43        | 8      | 1     |
| 1:A:745:ALA:C    | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.43     | 2.85        | 9      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:646:CYS:HB2  | 0.43     | 1.90        | 11     | 1     |
| 1:A:668:LEU:N    | 1:A:668:LEU:CD1  | 0.43     | 2.81        | 14     | 1     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:765:VAL:N    | 0.43     | 2.51        | 18     | 2     |
| 1:A:701:GLN:NE2  | 1:A:705:GLU:CD   | 0.43     | 2.71        | 10     | 1     |
| 1:A:744:ARG:CG   | 1:A:744:ARG:HH11 | 0.43     | 2.27        | 17     | 1     |
| 1:A:637:LEU:CD2  | 1:A:648:HIS:CD2  | 0.43     | 3.02        | 15     | 3     |
| 1:A:660:PRO:CG   | 1:A:664:TRP:CD1  | 0.43     | 3.01        | 2      | 1     |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:HE3  | 0.43     | 1.88        | 2      | 1     |
| 1:A:720:LEU:HG   | 1:A:740:LEU:CD2  | 0.43     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:627:ILE:HB   | 1:A:632:GLN:CA   | 0.43     | 2.43        | 15     | 2     |
| 1:A:759:GLN:O    | 1:A:763:GLN:CG   | 0.43     | 2.67        | 20     | 2     |
| 1:A:665:SER:HB2  | 1:A:669:CYS:SG   | 0.43     | 2.54        | 7      | 1     |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:632:GLN:HA   | 0.43     | 1.90        | 8      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:788:LEU:H    | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.43     | 1.73        | 8      | 1     |
| 1:A:697:SER:O    | 1:A:701:GLN:N    | 0.43     | 2.44        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:CD   | 1:A:630:VAL:N    | 0.43     | 2.82        | 9      | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE1  | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.43     | 2.48        | 9      | 1     |
| 1:A:795:ARG:HD3  | 1:A:798:GLU:OE1  | 0.43     | 2.13        | 11     | 1     |
| 1:A:795:ARG:O    | 1:A:798:GLU:HB3  | 0.43     | 2.13        | 12     | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:649:LEU:CD2  | 0.43     | 2.96        | 18     | 1     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:739:ASP:HA   | 0.43     | 2.14        | 18     | 1     |
| 1:A:767:ARG:HA   | 1:A:770:LYS:CG   | 0.43     | 2.44        | 17     | 2     |
| 1:A:707:VAL:O    | 1:A:709:LEU:N    | 0.43     | 2.51        | 1      | 1     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:744:ARG:O    | 0.43     | 2.50        | 2      | 1     |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:713:CYS:SG   | 0.43     | 2.77        | 5      | 1     |
| 1:A:744:ARG:CZ   | 1:A:750:LYS:NZ   | 0.43     | 2.81        | 15     | 1     |
| 1:A:755:TYR:C    | 1:A:755:TYR:CD1  | 0.43     | 2.92        | 20     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HG21 | 0.43     | 1.89        | 9      | 2     |
| 1:A:650:ASP:HA   | 1:A:655:ALA:HB1  | 0.43     | 1.89        | 16     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CB   | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.43     | 2.43        | 16     | 1     |
| 1:A:625:ALA:O    | 1:A:627:ILE:N    | 0.43     | 2.52        | 9      | 1     |
| 1:A:629:ARG:HG2  | 1:A:713:CYS:SG   | 0.43     | 2.54        | 11     | 1     |
| 1:A:755:TYR:OH   | 1:A:761:PHE:CB   | 0.43     | 2.67        | 11     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CZ   | 0.43     | 2.43        | 12     | 1     |
| 1:A:652:HIS:O    | 1:A:654:PRO:N    | 0.43     | 2.51        | 18     | 1     |
| 1:A:715:GLU:HB3  | 1:A:716:PRO:HD3  | 0.43     | 1.90        | 8      | 2     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:HH12 | 0.43     | 2.26        | 17     | 1     |
| 1:A:741:THR:O    | 1:A:742:LEU:C    | 0.43     | 2.57        | 17     | 1     |
| 1:A:755:TYR:HB3  | 1:A:760:GLU:CG   | 0.43     | 2.43        | 1      | 1     |
| 1:A:714:HIS:NE2  | 1:A:791:PHE:CE1  | 0.43     | 2.86        | 4      | 1     |
| 1:A:647:PHE:HE2  | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.43     | 1.70        | 13     | 1     |
| 1:A:741:THR:HA   | 1:A:744:ARG:HH11 | 0.43     | 1.74        | 13     | 1     |
| 1:A:710:ALA:HB3  | 1:A:795:ARG:CZ   | 0.43     | 2.44        | 6      | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:775:LEU:N    | 0.43     | 2.51        | 7      | 2     |
| 1:A:744:ARG:HE   | 1:A:750:LYS:HE2  | 0.43     | 1.73        | 14     | 1     |
| 1:A:701:GLN:OE1  | 1:A:747:LEU:O    | 0.43     | 2.37        | 1      | 1     |
| 1:A:755:TYR:HB3  | 1:A:760:GLU:CD   | 0.43     | 2.34        | 1      | 1     |
| 1:A:715:GLU:O    | 1:A:718:ARG:CB   | 0.43     | 2.66        | 2      | 3     |
| 1:A:773:ASN:OD1  | 1:A:782:VAL:HG13 | 0.43     | 2.14        | 2      | 1     |
| 1:A:754:PRO:O    | 1:A:755:TYR:HB2  | 0.43     | 2.11        | 13     | 3     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:716:PRO:HB2  | 0.43     | 2.49        | 13     | 1     |
| 1:A:796:MET:O    | 1:A:796:MET:HG3  | 0.43     | 2.13        | 13     | 1     |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.43     | 1.90        | 16     | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:774:LYS:N    | 0.43     | 2.48        | 12     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:707:VAL:CG2  | 1:A:796:MET:HE3  | 0.43     | 2.38        | 12     | 2     |
| 1:A:645:PHE:N    | 1:A:645:PHE:CD1  | 0.43     | 2.87        | 10     | 1     |
| 1:A:651:CYS:O    | 1:A:652:HIS:C    | 0.43     | 2.56        | 1      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:758:PRO:N    | 0.43     | 2.29        | 2      | 2     |
| 1:A:700:ASN:HB3  | 1:A:758:PRO:CG   | 0.43     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:668:LEU:N    | 1:A:709:LEU:CD2  | 0.43     | 2.82        | 4      | 1     |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:712:PHE:C    | 0.43     | 2.35        | 19     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.43     | 2.44        | 19     | 1     |
| 1:A:653:LEU:O    | 1:A:748:GLN:NE2  | 0.43     | 2.51        | 19     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HD1  | 0.43     | 1.73        | 13     | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE2  | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.43     | 3.01        | 8      | 1     |
| 1:A:721:HIS:HA   | 1:A:740:LEU:HG   | 0.43     | 1.90        | 16     | 1     |
| 1:A:751:LEU:CD2  | 1:A:753:PRO:HD2  | 0.43     | 2.43        | 11     | 1     |
| 1:A:647:PHE:CE1  | 1:A:666:CYS:HB2  | 0.43     | 2.49        | 14     | 2     |
| 1:A:746:ARG:HD2  | 1:A:755:TYR:CE1  | 0.43     | 2.48        | 14     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.43     | 1.89        | 17     | 1     |
| 1:A:714:HIS:HD2  | 1:A:717:CYS:H    | 0.43     | 1.57        | 17     | 1     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:748:GLN:HG3  | 0.43     | 2.28        | 2      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.43     | 1.90        | 15     | 1     |
| 1:A:698:PRO:O    | 1:A:702:ARG:HG3  | 0.43     | 2.14        | 15     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:789:GLN:HG3  | 0.43     | 2.48        | 15     | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG2  | 1:A:649:LEU:CD1  | 0.43     | 2.96        | 6      | 2     |
| 1:A:714:HIS:N    | 1:A:714:HIS:ND1  | 0.43     | 2.65        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.43     | 2.49        | 4      | 1     |
| 1:A:764:ASP:C    | 1:A:767:ARG:HB2  | 0.43     | 2.34        | 20     | 1     |
| 1:A:660:PRO:HG2  | 1:A:664:TRP:CD1  | 0.43     | 2.49        | 3      | 2     |
| 1:A:739:ASP:OD1  | 1:A:742:LEU:HG   | 0.43     | 2.14        | 7      | 1     |
| 1:A:711:LEU:N    | 1:A:795:ARG:NH1  | 0.43     | 2.67        | 6      | 1     |
| 1:A:639:MET:O    | 1:A:641:ASN:N    | 0.42     | 2.52        | 11     | 2     |
| 1:A:647:PHE:HB2  | 1:A:664:TRP:CZ3  | 0.42     | 2.49        | 11     | 1     |
| 1:A:630:VAL:HB   | 1:A:712:PHE:C    | 0.42     | 2.34        | 11     | 2     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:667:SER:HB3  | 0.42     | 2.28        | 10     | 1     |
| 1:A:705:GLU:HG2  | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.42     | 1.91        | 17     | 1     |
| 1:A:740:LEU:HD22 | 1:A:740:LEU:H    | 0.42     | 1.74        | 1      | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:743:ILE:CD1  | 0.42     | 2.96        | 2      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HA   | 1:A:742:LEU:HD22 | 0.42     | 1.90        | 2      | 1     |
| 1:A:716:PRO:CB   | 1:A:788:LEU:HB3  | 0.42     | 2.44        | 5      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD2  | 1:A:747:LEU:HG   | 0.42     | 2.44        | 15     | 1     |
| 1:A:746:ARG:O    | 1:A:753:PRO:O    | 0.42     | 2.36        | 15     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CZ   | 1:A:788:LEU:HG   | 0.42     | 2.49        | 15     | 1     |
| 1:A:704:CYS:CA   | 1:A:707:VAL:HB   | 0.42     | 2.43        | 16     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:744:ARG:CD   | 0.42     | 2.44        | 9      | 1     |
| 1:A:629:ARG:HG2  | 1:A:646:CYS:H    | 0.42     | 1.73        | 14     | 1     |
| 1:A:744:ARG:HH12 | 1:A:747:LEU:HB3  | 0.42     | 1.74        | 12     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:761:PHE:CD2  | 0.42     | 2.49        | 10     | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:761:PHE:HZ   | 0.42     | 1.97        | 17     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CG   | 1:A:744:ARG:NH2  | 0.42     | 2.81        | 17     | 1     |
| 1:A:635:GLY:C    | 1:A:637:LEU:HG   | 0.42     | 2.35        | 5      | 4     |
| 1:A:746:ARG:HD2  | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.42     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:705:GLU:HG2  | 0.42     | 1.91        | 15     | 1     |
| 1:A:782:VAL:C    | 1:A:784:SER:H    | 0.42     | 2.17        | 15     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HB3  | 1:A:660:PRO:HD3  | 0.42     | 1.91        | 4      | 1     |
| 1:A:746:ARG:CB   | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.42     | 2.38        | 4      | 1     |
| 1:A:703:LYS:HD2  | 1:A:799:ALA:O    | 0.42     | 2.14        | 16     | 1     |
| 1:A:772:PHE:O    | 1:A:775:LEU:HB2  | 0.42     | 2.12        | 11     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD1  | 1:A:701:GLN:HG3  | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:C    | 0.42     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CD1  | 0.42     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:744:ARG:O    | 1:A:747:LEU:HB3  | 0.42     | 2.15        | 2      | 1     |
| 1:A:704:CYS:C    | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.42     | 2.34        | 5      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:708:LEU:HB3  | 0.42     | 1.90        | 4      | 1     |
| 1:A:740:LEU:C    | 1:A:742:LEU:N    | 0.42     | 2.71        | 20     | 1     |
| 1:A:759:GLN:HG2  | 1:A:763:GLN:NE2  | 0.42     | 2.29        | 13     | 1     |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:739:ASP:N    | 0.42     | 2.29        | 6      | 1     |
| 1:A:656:LEU:CD2  | 1:A:660:PRO:CD   | 0.42     | 2.97        | 9      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.42     | 2.45        | 17     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:712:PHE:CD2  | 0.42     | 3.02        | 2      | 1     |
| 1:A:630:VAL:HB   | 1:A:712:PHE:O    | 0.42     | 2.14        | 5      | 1     |
| 1:A:631:CYS:O    | 1:A:632:GLN:HB2  | 0.42     | 2.15        | 9      | 2     |
| 1:A:701:GLN:C    | 1:A:704:CYS:HG   | 0.42     | 2.17        | 15     | 1     |
| 1:A:629:ARG:NE   | 1:A:629:ARG:HA   | 0.42     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:643:CYS:O    | 1:A:643:CYS:SG   | 0.42     | 2.77        | 7      | 1     |
| 1:A:747:LEU:HD23 | 1:A:755:TYR:CD2  | 0.42     | 2.49        | 7      | 2     |
| 1:A:630:VAL:HB   | 1:A:712:PHE:HB3  | 0.42     | 1.92        | 14     | 1     |
| 1:A:768:MET:HB3  | 1:A:768:MET:HE3  | 0.42     | 1.72        | 14     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HB2  | 1:A:737:THR:HG22 | 0.42     | 1.90        | 5      | 1     |
| 1:A:711:LEU:HG   | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.42     | 1.92        | 7      | 1     |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:761:PHE:HZ   | 0.42     | 2.27        | 19     | 1     |
| 1:A:658:ASP:O    | 1:A:659:VAL:C    | 0.42     | 2.57        | 14     | 5     |
| 1:A:638:VAL:O    | 1:A:638:VAL:CG1  | 0.42     | 2.67        | 1      | 1     |
| 1:A:744:ARG:HH11 | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.42     | 1.56        | 1      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.42     | 1.90        | 2      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HE21 | 0.42     | 1.74        | 5      | 1     |
| 1:A:704:CYS:SG   | 1:A:758:PRO:HB3  | 0.42     | 2.54        | 16     | 2     |
| 1:A:700:ASN:CA   | 1:A:703:LYS:HE2  | 0.42     | 2.44        | 15     | 1     |
| 1:A:701:GLN:O    | 1:A:702:ARG:C    | 0.42     | 2.56        | 20     | 1     |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:CD   | 0.42     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:636:ASP:O    | 1:A:649:LEU:HG   | 0.42     | 2.15        | 19     | 1     |
| 1:A:767:ARG:O    | 1:A:770:LYS:HB2  | 0.42     | 2.15        | 19     | 1     |
| 1:A:785:ILE:O    | 1:A:788:LEU:HB2  | 0.42     | 2.14        | 3      | 1     |
| 1:A:701:GLN:O    | 1:A:705:GLU:HB2  | 0.42     | 2.15        | 13     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HG3  | 1:A:751:LEU:HB3  | 0.42     | 1.90        | 13     | 1     |
| 1:A:718:ARG:HB2  | 1:A:719:PRO:CD   | 0.42     | 2.44        | 16     | 2     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:767:ARG:HB2  | 0.42     | 1.92        | 16     | 1     |
| 1:A:656:LEU:CG   | 1:A:660:PRO:CD   | 0.42     | 2.98        | 9      | 1     |
| 1:A:742:LEU:HD22 | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.42     | 1.74        | 11     | 1     |
| 1:A:742:LEU:CD1  | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.42     | 2.45        | 12     | 1     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:704:CYS:SG   | 0.42     | 2.75        | 5      | 2     |
| 1:A:769:PHE:CE2  | 1:A:789:GLN:CA   | 0.42     | 3.03        | 15     | 1     |
| 1:A:717:CYS:HG   | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.42     | 2.26        | 20     | 1     |
| 1:A:761:PHE:CE1  | 1:A:796:MET:HE3  | 0.42     | 2.50        | 7      | 1     |
| 1:A:626:THR:C    | 1:A:646:CYS:SG   | 0.42     | 2.98        | 19     | 1     |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HA   | 0.42     | 1.89        | 13     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CB   | 1:A:757:SER:CB   | 0.42     | 2.98        | 13     | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD2  | 1:A:755:TYR:HD2  | 0.42     | 2.22        | 16     | 1     |
| 1:A:653:LEU:O    | 1:A:744:ARG:HD3  | 0.42     | 2.14        | 6      | 1     |
| 1:A:704:CYS:O    | 1:A:705:GLU:C    | 0.42     | 2.58        | 6      | 1     |
| 1:A:705:GLU:HG3  | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.42     | 1.90        | 9      | 1     |
| 1:A:783:GLN:HE21 | 1:A:786:ILE:HB   | 0.42     | 1.75        | 11     | 1     |
| 1:A:742:LEU:HG   | 1:A:746:ARG:NH2  | 0.42     | 2.30        | 14     | 1     |
| 1:A:739:ASP:O    | 1:A:740:LEU:C    | 0.42     | 2.58        | 10     | 2     |
| 1:A:711:LEU:CG   | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.42     | 2.45        | 17     | 1     |
| 1:A:772:PHE:C    | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.42     | 2.34        | 19     | 2     |
| 1:A:635:GLY:O    | 1:A:637:LEU:HG   | 0.42     | 2.14        | 20     | 2     |
| 1:A:667:SER:HG   | 1:A:706:ARG:HA   | 0.42     | 1.73        | 7      | 1     |
| 1:A:628:CYS:H    | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.42     | 1.75        | 19     | 1     |
| 1:A:722:GLN:C    | 1:A:723:LEU:HG   | 0.42     | 2.34        | 19     | 1     |
| 1:A:625:ALA:O    | 1:A:627:ILE:HG12 | 0.42     | 2.14        | 3      | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:SD   | 0.42     | 3.08        | 13     | 1     |
| 1:A:751:LEU:CD2  | 1:A:752:SER:N    | 0.42     | 2.77        | 11     | 2     |
| 1:A:755:TYR:HA   | 1:A:760:GLU:OE1  | 0.42     | 2.15        | 11     | 1     |
| 1:A:703:LYS:HE3  | 1:A:796:MET:C    | 0.42     | 2.34        | 14     | 1     |
| 1:A:645:PHE:CD1  | 1:A:645:PHE:N    | 0.42     | 2.88        | 12     | 1     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:707:VAL:CG1  | 1:A:796:MET:HE3  | 0.42     | 2.45        | 17     | 1     |
| 1:A:708:LEU:O    | 1:A:712:PHE:CD1  | 0.42     | 2.73        | 1      | 1     |
| 1:A:629:ARG:N    | 1:A:646:CYS:O    | 0.42     | 2.53        | 5      | 1     |
| 1:A:708:LEU:HA   | 1:A:711:LEU:HB2  | 0.42     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:717:CYS:N    | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.42     | 2.82        | 15     | 1     |
| 1:A:746:ARG:HB3  | 1:A:755:TYR:CE2  | 0.42     | 2.50        | 20     | 1     |
| 1:A:705:GLU:CG   | 1:A:747:LEU:CD2  | 0.42     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HG   | 1:A:654:PRO:HD3  | 0.42     | 1.92        | 13     | 1     |
| 1:A:714:HIS:CD2  | 1:A:717:CYS:SG   | 0.42     | 3.13        | 11     | 3     |
| 1:A:647:PHE:O    | 1:A:649:LEU:N    | 0.42     | 2.53        | 5      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:C    | 0.42     | 2.34        | 15     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HA   | 1:A:757:SER:N    | 0.42     | 2.30        | 4      | 2     |
| 1:A:720:LEU:O    | 1:A:740:LEU:HG   | 0.42     | 2.15        | 7      | 1     |
| 1:A:762:ALA:O    | 1:A:763:GLN:C    | 0.42     | 2.58        | 19     | 1     |
| 1:A:756:SER:C    | 1:A:757:SER:OG   | 0.42     | 2.57        | 13     | 1     |
| 1:A:649:LEU:HA   | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.42     | 1.91        | 16     | 1     |
| 1:A:665:SER:HB2  | 1:A:670:HIS:CG   | 0.42     | 2.48        | 16     | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:769:PHE:HE1  | 0.42     | 1.75        | 16     | 1     |
| 1:A:667:SER:HB3  | 1:A:709:LEU:CG   | 0.42     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:767:ARG:CB   | 0.42     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB1  | 1:A:751:LEU:CB   | 0.41     | 2.44        | 12     | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:740:LEU:CD1  | 0.41     | 2.98        | 18     | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.41     | 1.92        | 10     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.41     | 1.91        | 10     | 2     |
| 1:A:772:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.41     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:744:ARG:CG   | 1:A:744:ARG:NH1  | 0.41     | 2.82        | 17     | 1     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:703:LYS:HE2  | 0.41     | 2.14        | 15     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.41     | 1.90        | 20     | 1     |
| 1:A:741:THR:C    | 1:A:744:ARG:HB3  | 0.41     | 2.35        | 7      | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:768:MET:CG   | 0.41     | 2.96        | 19     | 1     |
| 1:A:710:ALA:HB1  | 1:A:791:PHE:CE1  | 0.41     | 2.50        | 19     | 1     |
| 1:A:715:GLU:HA   | 1:A:718:ARG:HG2  | 0.41     | 1.92        | 13     | 2     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:788:LEU:CD2  | 0.41     | 2.99        | 5      | 1     |
| 1:A:743:ILE:O    | 1:A:746:ARG:HB2  | 0.41     | 2.14        | 5      | 1     |
| 1:A:695:LYS:O    | 1:A:756:SER:HA   | 0.41     | 2.15        | 5      | 1     |
| 1:A:769:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:HG22 | 0.41     | 2.50        | 15     | 1     |
| 1:A:771:GLN:O    | 1:A:772:PHE:C    | 0.41     | 2.58        | 20     | 1     |
| 1:A:746:ARG:O    | 1:A:748:GLN:N    | 0.41     | 2.52        | 3      | 1     |
| 1:A:630:VAL:CG1  | 1:A:651:CYS:HB3  | 0.41     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:715:GLU:H    | 1:A:716:PRO:HD2  | 0.41     | 1.75        | 6      | 1     |
| 1:A:629:ARG:NH1  | 1:A:645:PHE:C    | 0.41     | 2.74        | 9      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:710:ALA:HB1  | 1:A:791:PHE:CD1  | 0.41     | 2.50        | 11     | 2     |
| 1:A:746:ARG:HA   | 1:A:751:LEU:CD1  | 0.41     | 2.45        | 11     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD1  | 1:A:656:LEU:HB2  | 0.41     | 2.45        | 12     | 1     |
| 1:A:697:SER:OG   | 1:A:698:PRO:HD2  | 0.41     | 2.15        | 18     | 1     |
| 1:A:743:ILE:CG2  | 1:A:761:PHE:O    | 0.41     | 2.69        | 10     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:HE1  | 0.41     | 1.75        | 1      | 1     |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.41     | 1.92        | 5      | 1     |
| 1:A:757:SER:C    | 1:A:759:GLN:N    | 0.41     | 2.73        | 5      | 1     |
| 1:A:652:HIS:CE1  | 1:A:664:TRP:HZ2  | 0.41     | 2.34        | 15     | 1     |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:771:GLN:HG3  | 0.41     | 1.91        | 15     | 2     |
| 1:A:700:ASN:ND2  | 1:A:703:LYS:HZ1  | 0.41     | 2.13        | 7      | 1     |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HB3  | 0.41     | 1.93        | 7      | 1     |
| 1:A:704:CYS:C    | 1:A:761:PHE:CE2  | 0.41     | 2.94        | 13     | 1     |
| 1:A:664:TRP:O    | 1:A:665:SER:OG   | 0.41     | 2.31        | 16     | 1     |
| 1:A:794:THR:HG23 | 1:A:798:GLU:OE1  | 0.41     | 2.15        | 11     | 1     |
| 1:A:703:LYS:HE3  | 1:A:796:MET:CA   | 0.41     | 2.45        | 14     | 1     |
| 1:A:710:ALA:CB   | 1:A:795:ARG:HB2  | 0.41     | 2.45        | 12     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:742:LEU:CD1  | 0.41     | 2.45        | 18     | 1     |
| 1:A:697:SER:O    | 1:A:700:ASN:N    | 0.41     | 2.53        | 10     | 1     |
| 1:A:666:CYS:O    | 1:A:670:HIS:HB3  | 0.41     | 2.16        | 1      | 1     |
| 1:A:744:ARG:NH1  | 1:A:748:GLN:NE2  | 0.41     | 2.67        | 1      | 1     |
| 1:A:705:GLU:CG   | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.41     | 2.45        | 5      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HB3  | 1:A:646:CYS:HB3  | 0.41     | 1.93        | 13     | 2     |
| 1:A:667:SER:CB   | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.41     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:712:PHE:CD2  | 1:A:721:HIS:CE1  | 0.41     | 3.08        | 13     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:C    | 0.41     | 2.35        | 13     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:CB   | 0.41     | 2.41        | 6      | 1     |
| 1:A:645:PHE:CE2  | 1:A:713:CYS:SG   | 0.41     | 3.12        | 12     | 1     |
| 1:A:667:SER:O    | 1:A:706:ARG:HG2  | 0.41     | 2.16        | 10     | 1     |
| 1:A:641:ASN:HD22 | 1:A:642:GLN:NE2  | 0.41     | 2.13        | 17     | 1     |
| 1:A:645:PHE:HB3  | 1:A:666:CYS:SG   | 0.41     | 2.55        | 1      | 1     |
| 1:A:795:ARG:C    | 1:A:797:ASN:N    | 0.41     | 2.72        | 5      | 1     |
| 1:A:643:CYS:SG   | 1:A:645:PHE:CG   | 0.41     | 3.14        | 7      | 2     |
| 1:A:665:SER:OG   | 1:A:670:HIS:CB   | 0.41     | 2.69        | 19     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD1  | 1:A:772:PHE:HB2  | 0.41     | 2.46        | 13     | 1     |
| 1:A:667:SER:O    | 1:A:670:HIS:N    | 0.41     | 2.53        | 11     | 2     |
| 1:A:630:VAL:HA   | 1:A:713:CYS:CA   | 0.41     | 2.44        | 14     | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:738:LEU:HG   | 0.41     | 2.15        | 5      | 2     |
| 1:A:656:LEU:HG   | 1:A:656:LEU:H    | 0.41     | 1.47        | 4      | 1     |
| 1:A:668:LEU:C    | 1:A:668:LEU:HD22 | 0.41     | 2.36        | 20     | 1     |
| 1:A:642:GLN:NE2  | 1:A:665:SER:HB2  | 0.41     | 2.30        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.41     | 1.93        | 3      | 1     |
| 1:A:772:PHE:C    | 1:A:775:LEU:H    | 0.41     | 2.18        | 3      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CB   | 1:A:761:PHE:CZ   | 0.41     | 3.04        | 16     | 1     |
| 1:A:742:LEU:HD13 | 1:A:751:LEU:HD21 | 0.41     | 1.91        | 6      | 1     |
| 1:A:716:PRO:HG2  | 1:A:788:LEU:CD1  | 0.41     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:709:LEU:HD23 | 1:A:709:LEU:HA   | 0.41     | 1.80        | 11     | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.41     | 2.42        | 14     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:744:ARG:HB2  | 0.41     | 2.45        | 18     | 1     |
| 1:A:709:LEU:O    | 1:A:712:PHE:N    | 0.41     | 2.54        | 17     | 1     |
| 1:A:737:THR:O    | 1:A:737:THR:CG2  | 0.41     | 2.67        | 17     | 1     |
| 1:A:761:PHE:O    | 1:A:764:ASP:CB   | 0.41     | 2.69        | 17     | 1     |
| 1:A:700:ASN:O    | 1:A:703:LYS:N    | 0.41     | 2.54        | 15     | 1     |
| 1:A:769:PHE:CD2  | 1:A:785:ILE:O    | 0.41     | 2.74        | 15     | 1     |
| 1:A:652:HIS:HD2  | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.41     | 1.75        | 13     | 1     |
| 1:A:653:LEU:CD2  | 1:A:705:GLU:CA   | 0.41     | 2.98        | 8      | 1     |
| 1:A:772:PHE:C    | 1:A:774:LYS:N    | 0.41     | 2.74        | 8      | 1     |
| 1:A:746:ARG:O    | 1:A:755:TYR:N    | 0.41     | 2.53        | 11     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CA   | 0.41     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:648:HIS:NE2  | 0.41     | 2.31        | 15     | 1     |
| 1:A:747:LEU:N    | 1:A:755:TYR:CZ   | 0.41     | 2.89        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HB2  | 1:A:755:TYR:HB3  | 0.41     | 1.92        | 7      | 1     |
| 1:A:716:PRO:O    | 1:A:772:PHE:HZ   | 0.41     | 1.98        | 19     | 1     |
| 1:A:738:LEU:CD2  | 1:A:764:ASP:HB2  | 0.41     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:768:MET:HE3  | 1:A:768:MET:HB3  | 0.41     | 1.77        | 8      | 1     |
| 1:A:695:LYS:CG   | 1:A:696:LEU:H    | 0.41     | 2.29        | 11     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:746:ARG:NH2  | 0.41     | 2.30        | 11     | 1     |
| 1:A:629:ARG:O    | 1:A:713:CYS:O    | 0.41     | 2.38        | 14     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:C    | 0.41     | 2.36        | 12     | 1     |
| 1:A:782:VAL:O    | 1:A:785:ILE:HB   | 0.41     | 2.16        | 12     | 1     |
| 1:A:658:ASP:C    | 1:A:659:VAL:HG22 | 0.41     | 2.35        | 10     | 2     |
| 1:A:787:GLY:HA2  | 1:A:790:ARG:HE   | 0.41     | 1.76        | 10     | 1     |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.41     | 1.92        | 2      | 1     |
| 1:A:755:TYR:CD2  | 1:A:760:GLU:HG2  | 0.41     | 2.51        | 2      | 3     |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:O    | 0.41     | 2.16        | 15     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:CD   | 0.41     | 2.42        | 15     | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:744:ARG:HD2  | 0.41     | 1.93        | 4      | 1     |
| 1:A:772:PHE:C    | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.41     | 2.37        | 20     | 2     |
| 1:A:770:LYS:HA   | 1:A:773:ASN:ND2  | 0.41     | 2.30        | 20     | 1     |
| 1:A:745:ALA:HB3  | 1:A:751:LEU:HB2  | 0.41     | 1.91        | 7      | 1     |
| 1:A:641:ASN:HD22 | 1:A:642:GLN:HE22 | 0.41     | 1.58        | 7      | 1     |
| 1:A:643:CYS:SG   | 1:A:645:PHE:CD2  | 0.41     | 3.14        | 19     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:703:LYS:HE2  | 0.41     | 2.16        | 13     | 1     |
| 1:A:791:PHE:O    | 1:A:792:PHE:C    | 0.41     | 2.59        | 13     | 1     |
| 1:A:786:ILE:HA   | 1:A:789:GLN:HG3  | 0.41     | 1.92        | 16     | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG2  | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.41     | 2.45        | 10     | 1     |
| 1:A:720:LEU:CD2  | 1:A:772:PHE:CG   | 0.41     | 3.00        | 1      | 1     |
| 1:A:746:ARG:NH1  | 1:A:752:SER:OG   | 0.41     | 2.54        | 2      | 1     |
| 1:A:652:HIS:HA   | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.41     | 1.92        | 5      | 1     |
| 1:A:625:ALA:O    | 1:A:626:THR:CB   | 0.41     | 2.68        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:758:PRO:N    | 0.41     | 2.31        | 4      | 1     |
| 1:A:743:ILE:CD1  | 1:A:768:MET:SD   | 0.41     | 3.09        | 4      | 1     |
| 1:A:712:PHE:CE2  | 1:A:740:LEU:CB   | 0.41     | 3.04        | 3      | 1     |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.41     | 1.93        | 13     | 1     |
| 1:A:631:CYS:SG   | 1:A:633:LYS:HG3  | 0.41     | 2.56        | 16     | 1     |
| 1:A:796:MET:HE2  | 1:A:800:PHE:CD1  | 0.41     | 2.51        | 6      | 1     |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:659:VAL:HA   | 0.41     | 1.92        | 9      | 1     |
| 1:A:708:LEU:CD1  | 1:A:743:ILE:CG2  | 0.41     | 2.99        | 9      | 1     |
| 1:A:759:GLN:HB3  | 1:A:763:GLN:NE2  | 0.40     | 2.31        | 8      | 2     |
| 1:A:795:ARG:O    | 1:A:798:GLU:HB2  | 0.40     | 2.16        | 14     | 1     |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:761:PHE:O    | 0.40     | 2.16        | 4      | 1     |
| 1:A:748:GLN:HB3  | 1:A:750:LYS:HB2  | 0.40     | 1.93        | 20     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:HA   | 0.40     | 1.92        | 20     | 1     |
| 1:A:723:LEU:H    | 1:A:739:ASP:CB   | 0.40     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:741:THR:OG1  | 1:A:750:LYS:NZ   | 0.40     | 2.53        | 8      | 1     |
| 1:A:755:TYR:HD2  | 1:A:760:GLU:CD   | 0.40     | 2.19        | 6      | 1     |
| 1:A:649:LEU:CD2  | 1:A:649:LEU:H    | 0.40     | 2.23        | 9      | 1     |
| 1:A:742:LEU:O    | 1:A:746:ARG:HG2  | 0.40     | 2.15        | 14     | 1     |
| 1:A:721:HIS:C    | 1:A:739:ASP:HB2  | 0.40     | 2.35        | 18     | 1     |
| 1:A:739:ASP:CA   | 1:A:768:MET:SD   | 0.40     | 3.09        | 18     | 1     |
| 1:A:646:CYS:O    | 1:A:647:PHE:CD1  | 0.40     | 2.74        | 17     | 1     |
| 1:A:629:ARG:O    | 1:A:632:GLN:HG3  | 0.40     | 2.17        | 1      | 1     |
| 1:A:753:PRO:O    | 1:A:754:PRO:C    | 0.40     | 2.59        | 1      | 1     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:CD1  | 0.40     | 2.45        | 5      | 1     |
| 1:A:788:LEU:O    | 1:A:791:PHE:HD2  | 0.40     | 1.99        | 4      | 1     |
| 1:A:696:LEU:CD2  | 1:A:701:GLN:HG2  | 0.40     | 2.44        | 7      | 1     |
| 1:A:704:CYS:HB3  | 1:A:761:PHE:CE1  | 0.40     | 2.52        | 19     | 1     |
| 1:A:787:GLY:O    | 1:A:791:PHE:HB2  | 0.40     | 2.16        | 19     | 1     |
| 1:A:709:LEU:C    | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.40     | 2.36        | 6      | 1     |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CG   | 0.40     | 2.46        | 12     | 1     |
| 1:A:695:LYS:HG2  | 1:A:755:TYR:O    | 0.40     | 2.17        | 12     | 1     |
| 1:A:715:GLU:C    | 1:A:717:CYS:N    | 0.40     | 2.75        | 12     | 1     |
| 1:A:751:LEU:CG   | 1:A:752:SER:N    | 0.40     | 2.77        | 12     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CE1  | 0.40     | 2.51        | 12     | 1     |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:795:ARG:HH11 | 0.40     | 1.76        | 17     | 1     |
| 1:A:738:LEU:HB2  | 1:A:742:LEU:HD22 | 0.40     | 1.93        | 2      | 1     |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:HA   | 0.40     | 1.92        | 4      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HB3  | 1:A:647:PHE:N    | 0.40     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:645:PHE:HE2  | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.40     | 1.68        | 7      | 1     |
| 1:A:765:VAL:HB   | 1:A:768:MET:CE   | 0.40     | 2.46        | 19     | 1     |
| 1:A:794:THR:HA   | 1:A:797:ASN:HB3  | 0.40     | 1.94        | 16     | 1     |
| 1:A:629:ARG:HG3  | 1:A:646:CYS:O    | 0.40     | 2.16        | 9      | 1     |
| 1:A:661:GLY:C    | 1:A:663:GLU:N    | 0.40     | 2.74        | 11     | 1     |
| 1:A:758:PRO:O    | 1:A:762:ALA:HB3  | 0.40     | 2.15        | 18     | 1     |
| 1:A:638:VAL:CG1  | 1:A:647:PHE:HB2  | 0.40     | 2.46        | 17     | 1     |
| 1:A:652:HIS:NE2  | 1:A:654:PRO:CG   | 0.40     | 2.80        | 15     | 1     |
| 1:A:707:VAL:HB   | 1:A:761:PHE:HZ   | 0.40     | 1.77        | 15     | 1     |
| 1:A:721:HIS:O    | 1:A:722:GLN:HG3  | 0.40     | 2.17        | 20     | 1     |
| 1:A:696:LEU:HG   | 1:A:701:GLN:HB2  | 0.40     | 1.92        | 19     | 1     |
| 1:A:667:SER:HB2  | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.40     | 1.93        | 13     | 1     |
| 1:A:634:PRO:HA   | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.40     | 1.93        | 8      | 1     |
| 1:A:772:PHE:HA   | 1:A:775:LEU:CG   | 0.40     | 2.46        | 8      | 1     |
| 1:A:654:PRO:HB3  | 1:A:705:GLU:OE2  | 0.40     | 2.16        | 9      | 1     |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:646:CYS:CB   | 0.40     | 2.45        | 11     | 1     |
| 1:A:723:LEU:CD2  | 1:A:768:MET:O    | 0.40     | 2.69        | 11     | 1     |
| 1:A:723:LEU:HB3  | 1:A:775:LEU:CD1  | 0.40     | 2.46        | 12     | 1     |
| 1:A:695:LYS:O    | 1:A:756:SER:C    | 0.40     | 2.60        | 18     | 1     |
| 1:A:751:LEU:CG   | 1:A:752:SER:H    | 0.40     | 2.25        | 4      | 1     |
| 1:A:755:TYR:O    | 1:A:756:SER:OG   | 0.40     | 2.35        | 3      | 1     |
| 1:A:761:PHE:HA   | 1:A:764:ASP:CG   | 0.40     | 2.36        | 3      | 1     |
| 1:A:629:ARG:HG2  | 1:A:645:PHE:CE2  | 0.40     | 2.52        | 6      | 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     | 136/189 (72%) | 82±4 (60±3%) | 33±3 (24±3%) | 21±3 (16±2%) | 0 4         |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Analysed        | Favoured   | Allowed   | Outliers  | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|------------|-----------|-----------|-------------|
| All | All   | 2720/3780 (72%) | 1632 (60%) | 666 (24%) | 422 (16%) | 0 4         |

All 58 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     | 628 | CYS  | 20             |
| 1   | A     | 658 | ASP  | 20             |
| 1   | A     | 629 | ARG  | 20             |
| 1   | A     | 627 | ILE  | 19             |
| 1   | A     | 659 | VAL  | 18             |
| 1   | A     | 753 | PRO  | 17             |
| 1   | A     | 655 | ALA  | 17             |
| 1   | A     | 697 | SER  | 17             |
| 1   | A     | 645 | PHE  | 16             |
| 1   | A     | 752 | SER  | 15             |
| 1   | A     | 738 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 656 | LEU  | 12             |
| 1   | A     | 667 | SER  | 11             |
| 1   | A     | 666 | CYS  | 11             |
| 1   | A     | 755 | TYR  | 11             |
| 1   | A     | 644 | GLU  | 11             |
| 1   | A     | 749 | GLU  | 11             |
| 1   | A     | 664 | TRP  | 10             |
| 1   | A     | 653 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 751 | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 648 | HIS  | 9              |
| 1   | A     | 754 | PRO  | 8              |
| 1   | A     | 724 | ALA  | 8              |
| 1   | A     | 668 | LEU  | 7              |
| 1   | A     | 661 | GLY  | 7              |
| 1   | A     | 640 | CYS  | 7              |
| 1   | A     | 695 | LYS  | 7              |
| 1   | A     | 662 | GLU  | 7              |
| 1   | A     | 660 | PRO  | 6              |
| 1   | A     | 783 | GLN  | 6              |
| 1   | A     | 630 | VAL  | 6              |
| 1   | A     | 756 | SER  | 6              |
| 1   | A     | 792 | PHE  | 5              |
| 1   | A     | 665 | SER  | 4              |
| 1   | A     | 657 | GLN  | 3              |
| 1   | A     | 739 | ASP  | 3              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 652 | HIS  | 3              |
| 1   | A     | 740 | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 757 | SER  | 2              |
| 1   | A     | 636 | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 748 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 625 | ALA  | 2              |
| 1   | A     | 711 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 663 | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 737 | THR  | 2              |
| 1   | A     | 641 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 800 | PHE  | 1              |
| 1   | A     | 626 | THR  | 1              |
| 1   | A     | 698 | PRO  | 1              |
| 1   | A     | 721 | HIS  | 1              |
| 1   | A     | 782 | VAL  | 1              |
| 1   | A     | 765 | VAL  | 1              |
| 1   | A     | 775 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 649 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 716 | PRO  | 1              |
| 1   | A     | 703 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 758 | PRO  | 1              |
| 1   | A     | 635 | GLY  | 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     | 123/167 (74%)   | 86±4 (70±3%) | 37±4 (30±3%) | <b>2</b> <b>16</b> |
| All | All   | 2460/3340 (74%) | 1717 (70%)   | 743 (30%)    | <b>2</b> <b>16</b> |

All 101 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     | 659 | VAL  | 20             |
| 1   | A     | 761 | PHE  | 19             |
| 1   | A     | 626 | THR  | 19             |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 744 | ARG  | 19             |
| 1   | A     | 628 | CYS  | 19             |
| 1   | A     | 656 | LEU  | 18             |
| 1   | A     | 796 | MET  | 18             |
| 1   | A     | 667 | SER  | 17             |
| 1   | A     | 770 | LYS  | 17             |
| 1   | A     | 746 | ARG  | 16             |
| 1   | A     | 753 | PRO  | 16             |
| 1   | A     | 653 | LEU  | 15             |
| 1   | A     | 771 | GLN  | 15             |
| 1   | A     | 696 | LEU  | 15             |
| 1   | A     | 708 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 751 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 782 | VAL  | 14             |
| 1   | A     | 788 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 742 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 783 | GLN  | 14             |
| 1   | A     | 723 | LEU  | 14             |
| 1   | A     | 702 | ARG  | 13             |
| 1   | A     | 638 | VAL  | 13             |
| 1   | A     | 713 | CYS  | 12             |
| 1   | A     | 755 | TYR  | 12             |
| 1   | A     | 668 | LEU  | 12             |
| 1   | A     | 704 | CYS  | 11             |
| 1   | A     | 768 | MET  | 11             |
| 1   | A     | 658 | ASP  | 11             |
| 1   | A     | 738 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 643 | CYS  | 9              |
| 1   | A     | 665 | SER  | 9              |
| 1   | A     | 716 | PRO  | 9              |
| 1   | A     | 650 | ASP  | 9              |
| 1   | A     | 637 | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 631 | CYS  | 9              |
| 1   | A     | 695 | LYS  | 8              |
| 1   | A     | 706 | ARG  | 8              |
| 1   | A     | 790 | ARG  | 8              |
| 1   | A     | 748 | GLN  | 7              |
| 1   | A     | 798 | GLU  | 7              |
| 1   | A     | 649 | LEU  | 7              |
| 1   | A     | 629 | ARG  | 7              |
| 1   | A     | 759 | GLN  | 7              |
| 1   | A     | 743 | ILE  | 7              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 764 | ASP  | 6              |
| 1   | A     | 718 | ARG  | 6              |
| 1   | A     | 700 | ASN  | 6              |
| 1   | A     | 636 | ASP  | 6              |
| 1   | A     | 646 | CYS  | 6              |
| 1   | A     | 715 | GLU  | 6              |
| 1   | A     | 775 | LEU  | 6              |
| 1   | A     | 642 | GLN  | 6              |
| 1   | A     | 767 | ARG  | 6              |
| 1   | A     | 639 | MET  | 6              |
| 1   | A     | 794 | THR  | 5              |
| 1   | A     | 797 | ASN  | 5              |
| 1   | A     | 772 | PHE  | 5              |
| 1   | A     | 712 | PHE  | 5              |
| 1   | A     | 741 | THR  | 5              |
| 1   | A     | 707 | VAL  | 5              |
| 1   | A     | 709 | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 697 | SER  | 4              |
| 1   | A     | 752 | SER  | 4              |
| 1   | A     | 701 | GLN  | 4              |
| 1   | A     | 641 | ASN  | 4              |
| 1   | A     | 760 | GLU  | 4              |
| 1   | A     | 747 | LEU  | 4              |
| 1   | A     | 645 | PHE  | 4              |
| 1   | A     | 765 | VAL  | 3              |
| 1   | A     | 670 | HIS  | 3              |
| 1   | A     | 786 | ILE  | 3              |
| 1   | A     | 756 | SER  | 3              |
| 1   | A     | 703 | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 663 | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 714 | HIS  | 2              |
| 1   | A     | 711 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 634 | PRO  | 2              |
| 1   | A     | 737 | THR  | 2              |
| 1   | A     | 722 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 652 | HIS  | 2              |
| 1   | A     | 789 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 784 | SER  | 2              |
| 1   | A     | 627 | ILE  | 2              |
| 1   | A     | 630 | VAL  | 2              |
| 1   | A     | 632 | GLN  | 1              |
| 1   | A     | 800 | PHE  | 1              |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 763 | GLN  | 1              |
| 1   | A     | 785 | ILE  | 1              |
| 1   | A     | 750 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 739 | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 758 | PRO  | 1              |
| 1   | A     | 795 | ARG  | 1              |
| 1   | A     | 633 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 647 | PHE  | 1              |
| 1   | A     | 740 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 791 | PHE  | 1              |
| 1   | A     | 773 | ASN  | 1              |
| 1   | A     | 666 | CYS  | 1              |
| 1   | A     | 757 | SER  | 1              |
| 1   | A     | 717 | CYS  | 1              |

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

## 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