



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 08:01 pm GMT

PDB ID : 1TFB
Title : NMR STUDIES OF HUMAN GENERAL TRANSCRIPTION FACTOR
TFIIB: DYNAMICS AND INTERACTION WITH VP16 ACTIVATION DO-
MAIN, 20 STRUCTURES
Authors : Bagby, S.; Ikura, M.
Deposited on : 1996-11-14

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

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

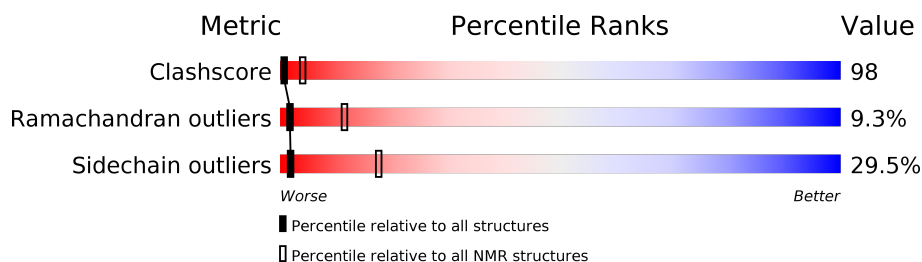
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

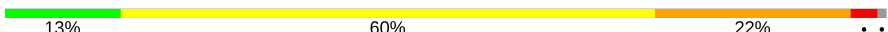
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	208	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:112-A:316 (205)	0.53	14

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3273 atoms, of which 1666 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TFIIB.

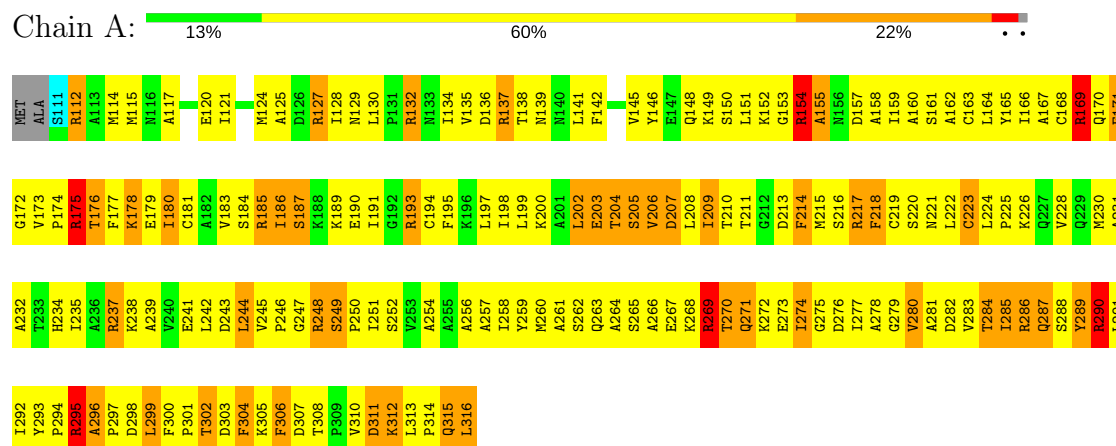
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	206	Total	C	H	N	O	S	0
			3273	1013	1666	287	295	12	

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: TFIIB

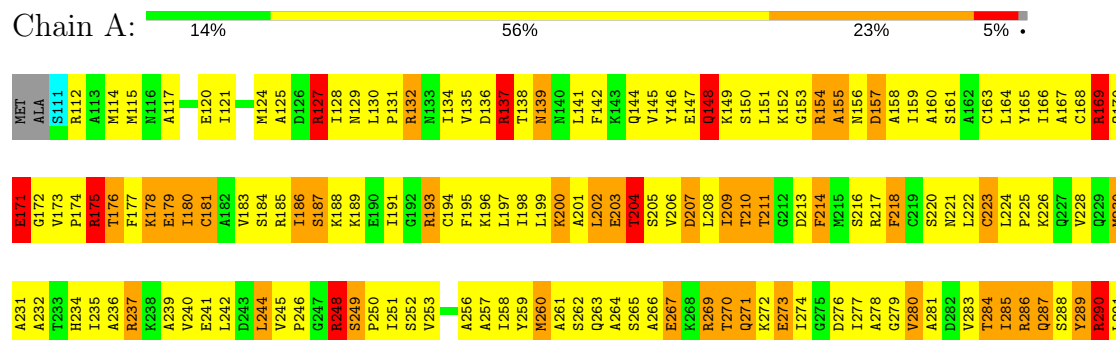


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: TFIIB

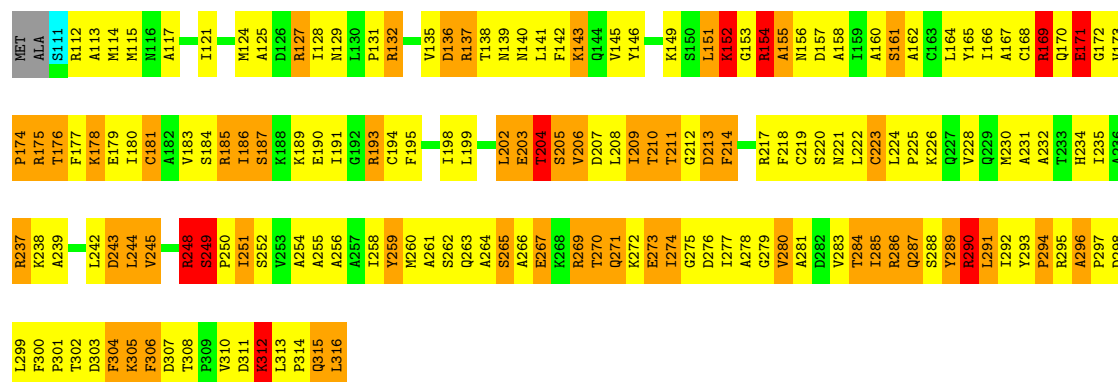




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TFIIB

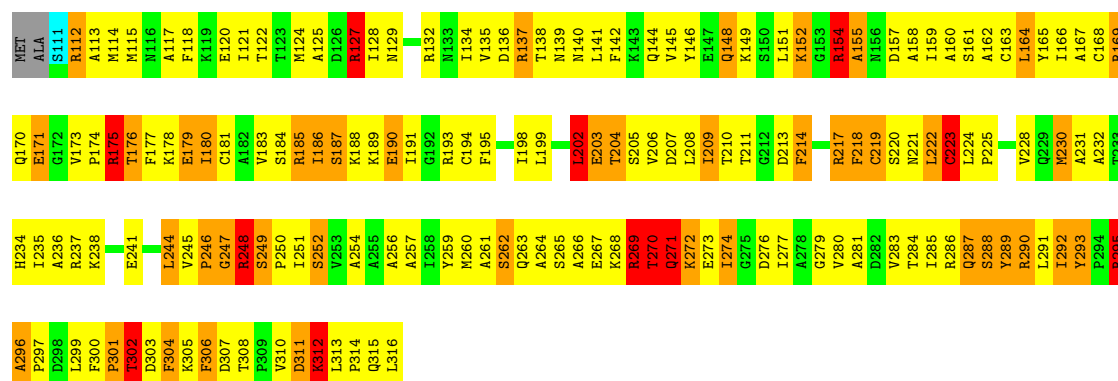
Chain A: 18% 50% 26% . .



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TFIIB

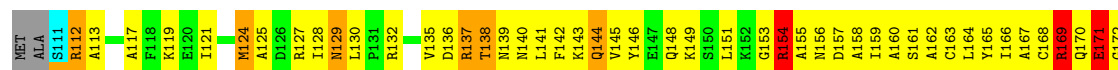
Chain A: 19% 53% 21% 6% .

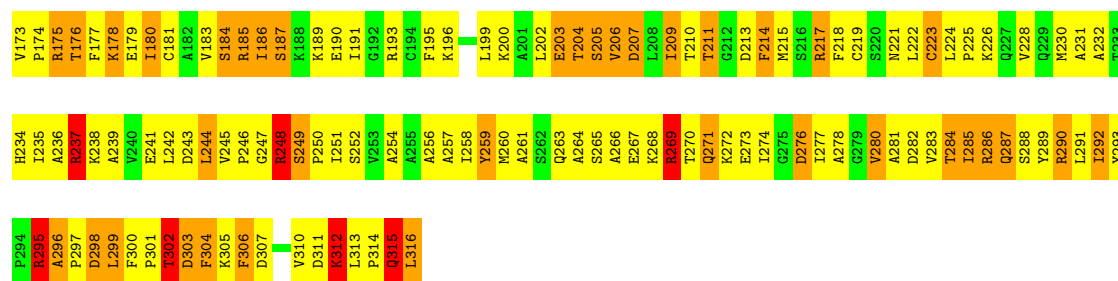


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 18% 55% 21% 5% .

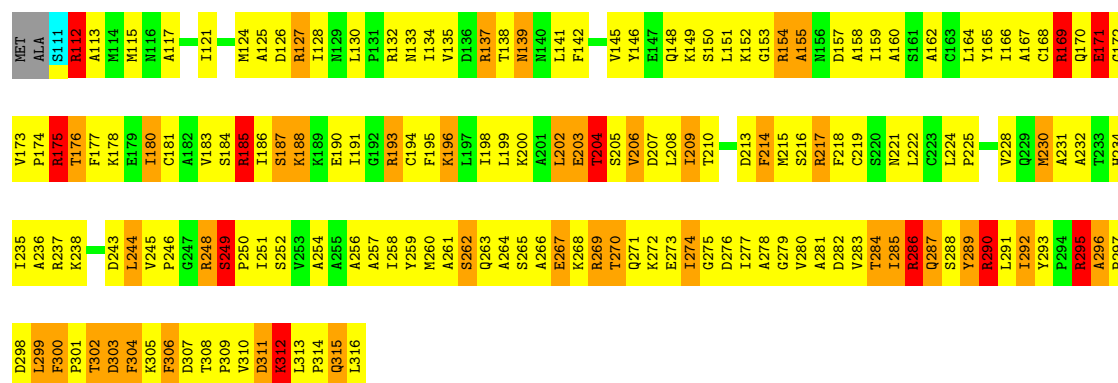




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TFIIB

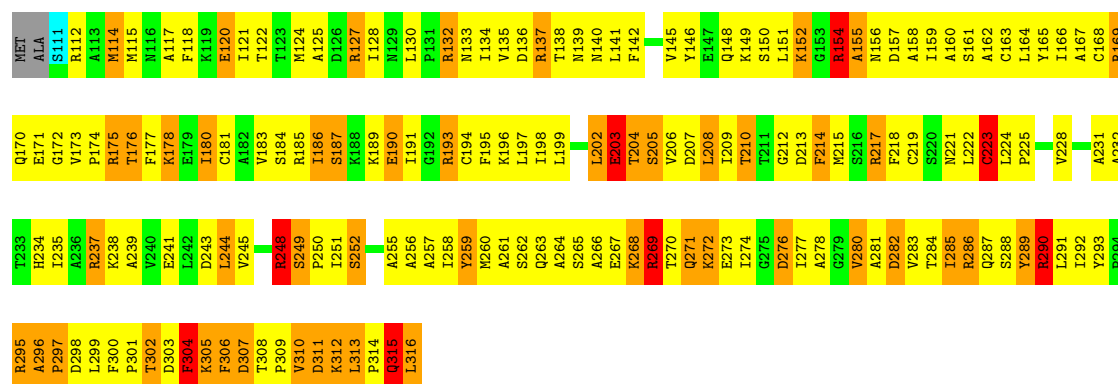
Chain A: 19% 56% 19% 5%



4.2.6 Score per residue for model 6

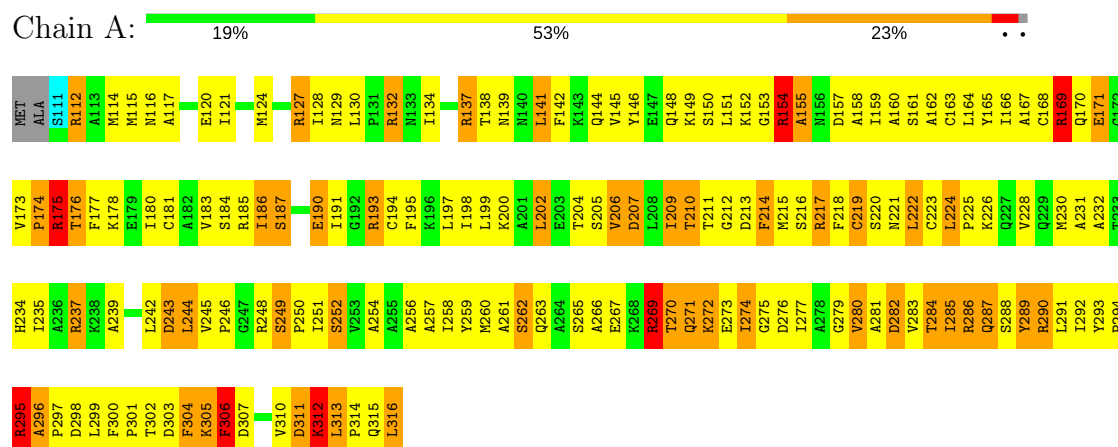
- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 17% 54% 24%



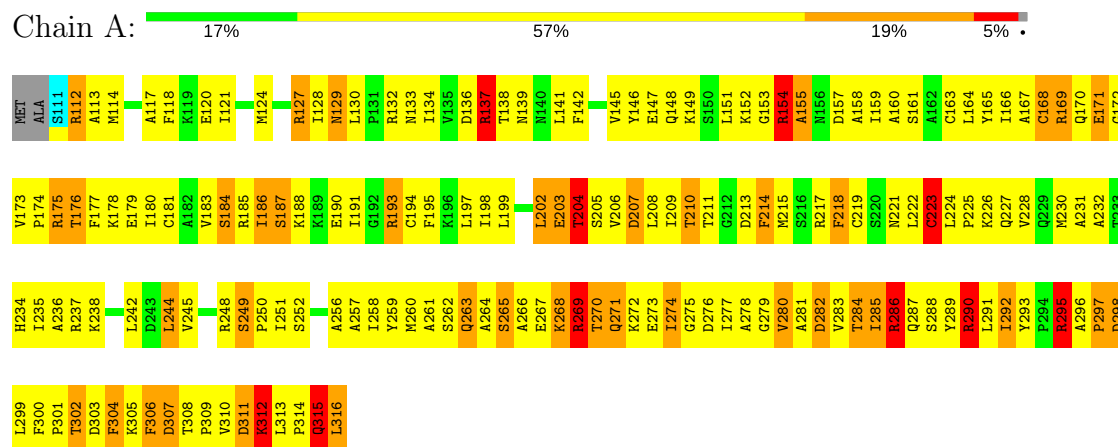
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: TFIIB



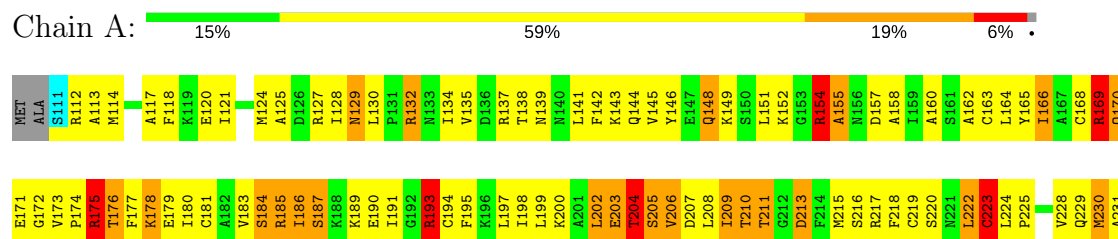
4.2.8 Score per residue for model 8

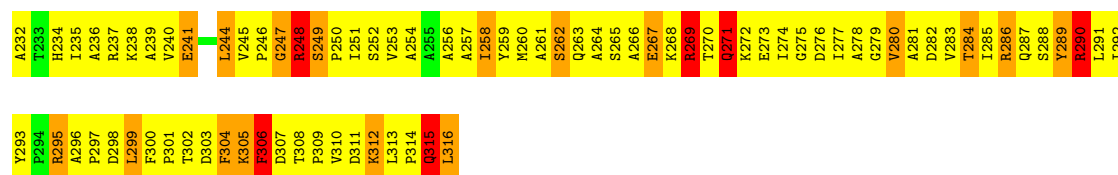
• Molecule 1: TFIIB



4.2.9 Score per residue for model 9

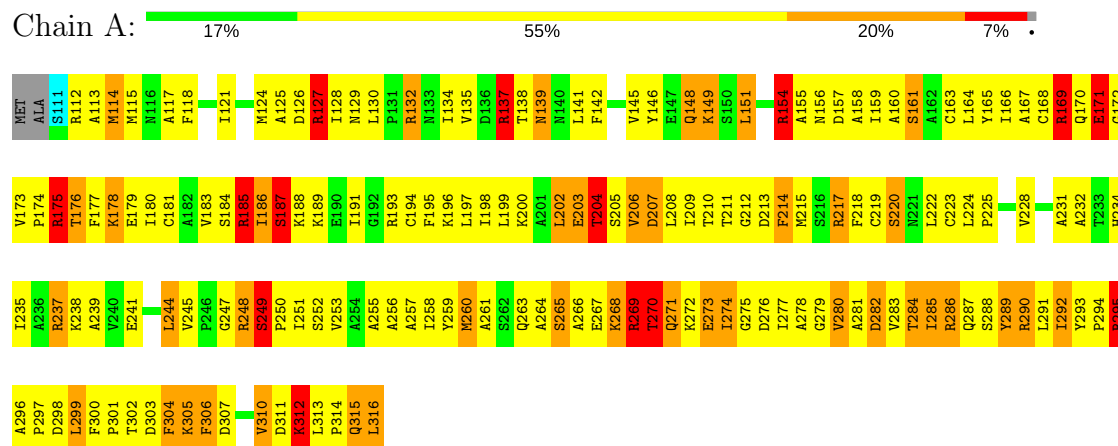
• Molecule 1: TFIIB





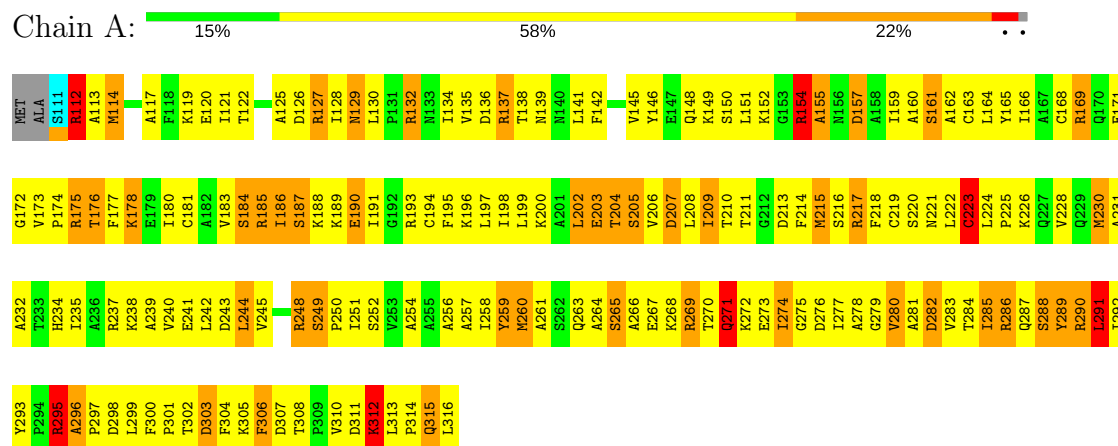
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TFIIB



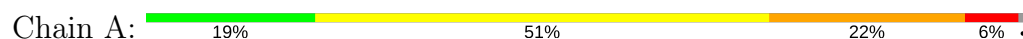
4.2.11 Score per residue for model 11

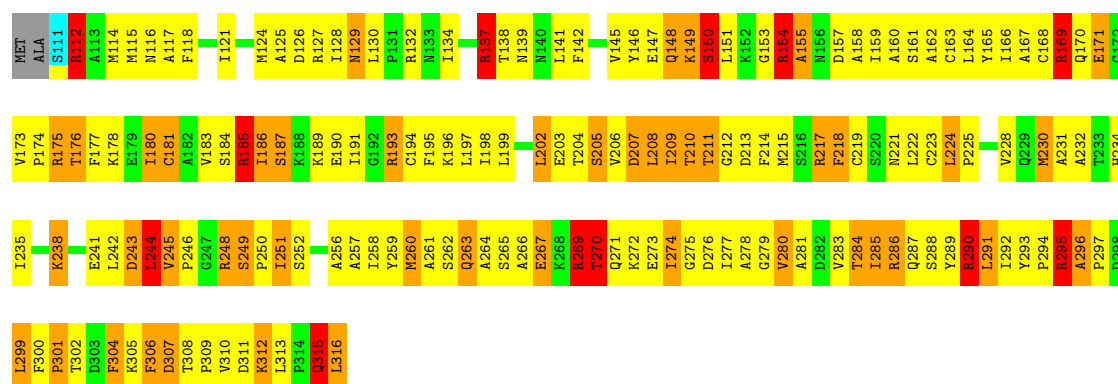
- Molecule 1: TFIIB



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TFIIB

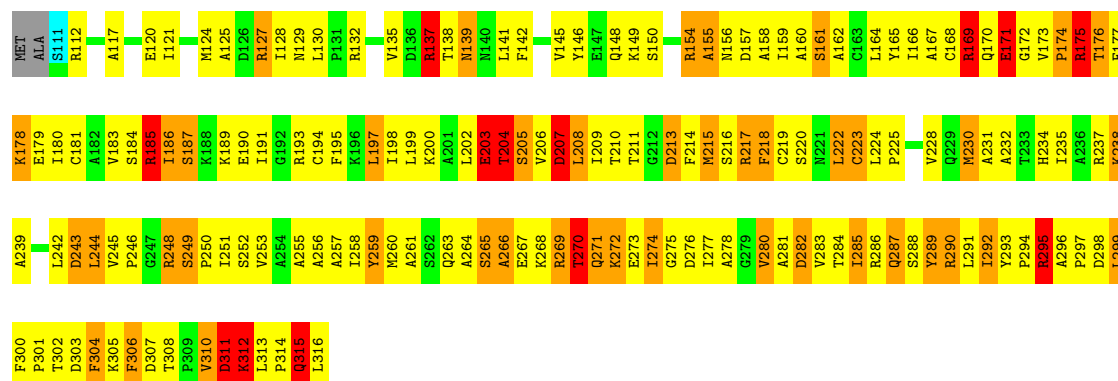




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TFIIB

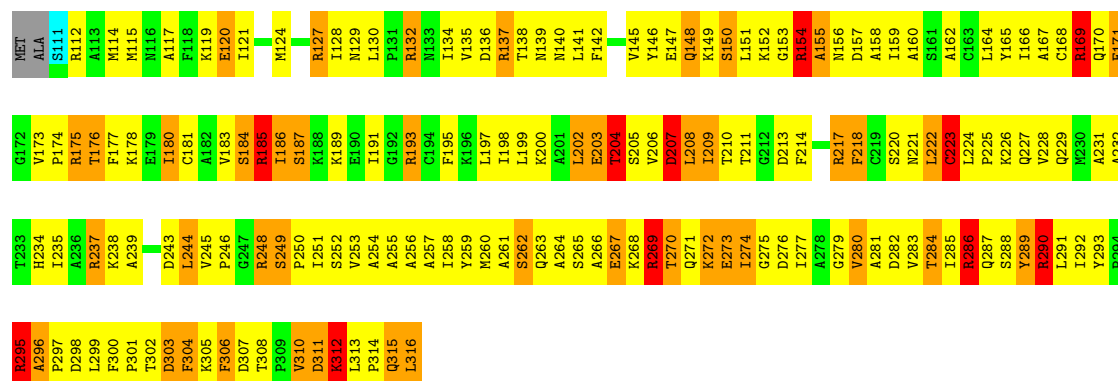
Chain A: 19% 52% 21% 6%



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

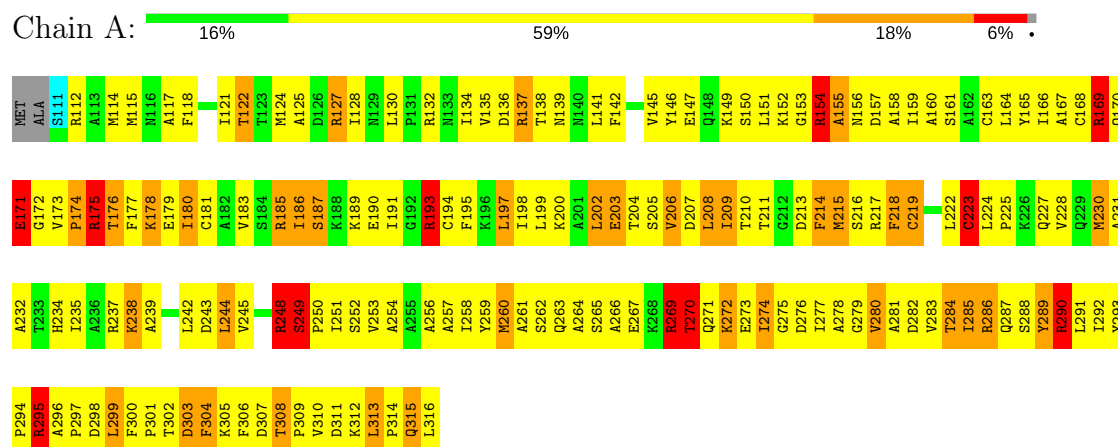
- Molecule 1: TFIIB

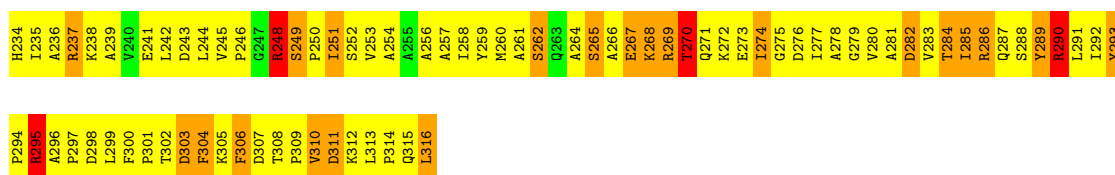
Chain A: 17% 55% 21% 5%



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: TFIIB

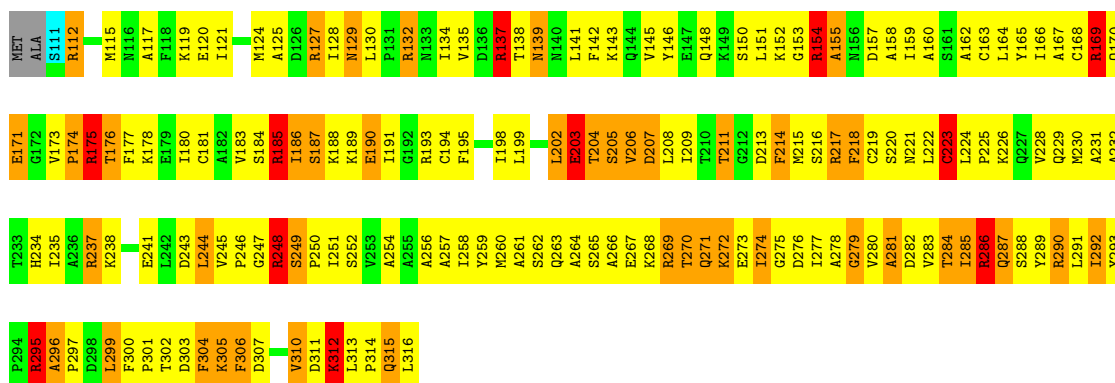




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TFIIB

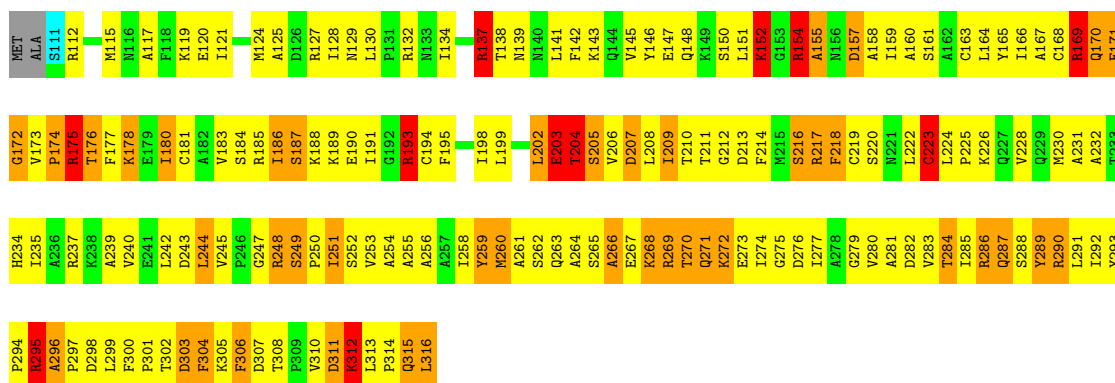
Chain A: 18% 54% 21% 5%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 17% 56% 20% 5%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 18% 51% 22% 7%

D298	A236	V173	ME1
L289	R237	P174	ALA
F300	K238	R175	S111
P301	A239	T176	R112
T302		F177	A113
D303	L242	K178	H114
F304	D243	E179	
K305	L244	E179	A117
F306	V245	C181	F118
D307	P246	A182	K119
	G247	V183	E120
V310	R248	S184	I121
D311	S249	R185	
K312	L250	S187	M124
L313	L251		A125
F314	S252		I126
Q315		E190	R127
L316	A255	I191	I128
	A256	G192	N129
	A257	R193	L130
	L258	C194	P131
	Y259	F195	R132
	M260		N133
	A261	I188	I134
	S262	L199	I135
	Q263	K200	D136
	A264	A201	R137
	S265	L202	T138
	A266	E203	N139
	E267	T204	H140
	K268	S205	L141
	R269	V206	F142
	T270	D207	
	Q271	L208	V145
	K272	L209	Y146
	E273	T210	
	L274	T211	K149
	D275	G212	S150
	D276	D213	L151
	L277	F214	K152
	L278	M215	G153
	G279	S216	R154
	V280	R217	A155
	A281	C219	L156
	D282		A157
	V283		I159
	T284		A160
	L285		S161
	R286		C162
	Q287		A163
	S288		L164
	Y289		V165
	R290		I166
	L291		A167
	L292		C168
	Y293		R169
	P294		Q170
	R295		T171
	P296		S172
	A297		G173

5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

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 [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	15.6±0.6
All	All	0	312

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	169	ARG	Sidechain	20
1	A	290	ARG	Sidechain	20
1	A	193	ARG	Sidechain	20
1	A	132	ARG	Sidechain	20
1	A	217	ARG	Sidechain	20
1	A	248	ARG	Sidechain	20
1	A	185	ARG	Sidechain	20
1	A	112	ARG	Sidechain	20
1	A	127	ARG	Sidechain	20
1	A	175	ARG	Sidechain	20
1	A	237	ARG	Sidechain	19
1	A	269	ARG	Sidechain	19
1	A	154	ARG	Sidechain	19
1	A	137	ARG	Sidechain	19
1	A	286	ARG	Sidechain	18
1	A	295	ARG	Sidechain	18

6.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen

atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1601	1662	1662	321±14
All	All	32020	33240	33240	6424

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 98.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:VAL:HG21	1:A:180:ILE:HG22	1.08	1.19	3	4
1:A:173:VAL:HG11	1:A:180:ILE:HG22	1.07	1.25	15	3
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD12	1.06	1.16	9	2
1:A:245:VAL:HG12	1:A:292:ILE:HD13	1.06	1.28	14	1
1:A:125:ALA:HB1	1:A:130:LEU:HD11	1.05	1.07	5	1
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HD11	1.03	1.11	9	9
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD22	1.02	1.84	15	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD23	1.02	1.26	5	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CD1	1.01	1.86	11	4
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:HD21	1.00	1.87	16	4
1:A:177:PHE:CE1	1:A:180:ILE:HD11	0.99	1.93	5	6
1:A:173:VAL:HG11	1:A:180:ILE:CG2	0.99	1.86	19	3
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:HG21	0.99	1.34	9	4
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:HD11	0.99	1.34	12	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:HD11	0.99	1.28	14	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD12	0.98	1.92	2	2
1:A:245:VAL:HG11	1:A:288:SER:O	0.98	1.59	1	11
1:A:244:LEU:HD11	1:A:293:TYR:N	0.98	1.72	20	5
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CG2	0.98	1.87	12	1
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD11	0.98	1.87	14	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HG21	0.97	1.36	12	7
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CE2	0.97	1.94	8	19
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:OG	0.97	1.60	4	11
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CD2	0.97	1.90	5	5
1:A:310:VAL:HG13	1:A:313:LEU:CD2	0.96	1.90	15	1
1:A:177:PHE:CE2	1:A:180:ILE:HD11	0.96	1.95	13	14
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:CD1	0.96	1.90	9	5
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD22	0.96	1.91	4	1
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:CB	0.95	1.90	12	8
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HB3	0.95	1.39	7	14
1:A:245:VAL:HG23	1:A:287:GLN:OE1	0.95	1.61	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:O	1:A:145:VAL:HG22	0.94	1.62	2	17
1:A:194:CYS:O	1:A:198:ILE:HD12	0.94	1.62	16	11
1:A:260:MET:SD	1:A:313:LEU:HD23	0.94	2.01	7	2
1:A:292:ILE:O	1:A:299:LEU:HD21	0.94	1.62	7	6
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HD13	0.94	1.93	14	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:197:LEU:O	0.94	1.62	16	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG23	0.93	1.99	6	8
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:SG	0.93	2.04	18	4
1:A:296:ALA:HB1	1:A:297:PRO:HD2	0.93	1.41	20	16
1:A:197:LEU:O	1:A:197:LEU:HD22	0.93	1.63	13	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HD13	0.93	1.39	20	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:313:LEU:HD22	0.92	0.95	15	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:C	0.92	1.84	8	5
1:A:141:LEU:O	1:A:145:VAL:HG12	0.92	1.64	3	3
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD21	0.91	1.40	19	7
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:CB	0.91	1.96	9	20
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:CG2	0.91	1.96	1	20
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:HG22	0.90	1.66	3	20
1:A:176:THR:HG21	1:A:315:GLN:O	0.90	1.65	19	13
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:C	0.90	1.85	9	4
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HD21	0.90	2.02	8	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:CB	0.90	1.97	9	3
1:A:299:LEU:HD13	1:A:299:LEU:N	0.89	1.83	5	2
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:HG12	0.88	1.43	10	6
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HD22	0.88	1.67	11	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD21	0.88	1.43	8	3
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HD21	0.88	2.05	19	6
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG12	0.87	1.46	19	8
1:A:124:MET:O	1:A:183:VAL:HG21	0.87	1.69	1	5
1:A:263:GLN:HG3	1:A:313:LEU:HD21	0.87	1.47	16	5
1:A:239:ALA:CB	1:A:292:ILE:HD11	0.87	2.00	19	8
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CZ	0.87	2.04	12	20
1:A:310:VAL:HA	1:A:313:LEU:HD13	0.86	1.46	15	1
1:A:180:ILE:O	1:A:183:VAL:HG12	0.86	1.69	9	20
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:HB2	0.86	1.45	10	8
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:HD12	0.86	1.70	10	2
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:CD1	0.86	2.01	20	1
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:CD2	0.86	2.01	15	1
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:CD2	0.86	2.01	12	6
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:HG22	0.86	1.45	10	1
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:HB2	0.86	1.48	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:THR:O	1:A:251:ILE:HD13	0.85	1.71	3	4
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD13	0.85	1.44	7	4
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:HB2	0.85	1.48	6	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:CG	0.85	2.02	11	2
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:HD12	0.85	2.07	18	3
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD23	0.85	2.00	5	2
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:CB	0.85	2.01	10	6
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:SG	0.85	2.12	4	1
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:HD22	0.85	1.70	7	2
1:A:125:ALA:HB3	1:A:135:VAL:HG22	0.85	1.49	15	8
1:A:280:VAL:HG11	1:A:284:THR:HG21	0.85	1.46	12	14
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:CG	0.85	1.92	12	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD23	0.85	1.72	11	3
1:A:316:LEU:OXT	1:A:316:LEU:HD23	0.84	1.72	15	1
1:A:244:LEU:HG	1:A:292:ILE:HD12	0.84	1.48	14	1
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:HB1	0.84	1.49	20	4
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HG21	0.84	1.47	5	1
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HD11	0.84	2.06	5	4
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:O	0.84	1.73	19	2
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HD11	0.84	2.07	3	4
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD23	0.84	1.50	17	3
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HD21	0.84	2.07	12	3
1:A:150:SER:C	1:A:151:LEU:HD22	0.84	1.94	6	2
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:HD2	0.83	1.47	7	2
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:CD1	0.83	2.02	6	1
1:A:292:ILE:HD13	1:A:292:ILE:O	0.83	1.73	8	1
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:HD12	0.83	1.93	2	9
1:A:259:TYR:CE2	1:A:274:ILE:HG21	0.83	2.08	19	4
1:A:127:ARG:HB3	1:A:183:VAL:HG23	0.83	1.49	3	6
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CG2	0.83	2.03	5	1
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HB2	0.83	1.48	19	5
1:A:130:LEU:CD1	1:A:134:ILE:HG21	0.83	2.04	6	3
1:A:130:LEU:HD11	1:A:172:GLY:O	0.83	1.74	1	1
1:A:218:PHE:O	1:A:277:ILE:HG21	0.83	1.73	18	14
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:CD2	0.83	2.08	3	5
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD13	0.83	1.73	8	1
1:A:121:ILE:HD13	1:A:139:ASN:HA	0.82	1.49	10	20
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:CB	0.82	2.04	3	12
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:CB	0.82	2.04	13	4
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD13	0.82	1.49	11	2
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD21	0.82	1.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD12	0.82	1.51	7	3
1:A:166:ILE:HG21	1:A:202:LEU:HD11	0.82	1.49	1	6
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD11	0.82	2.04	12	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:291:LEU:O	0.82	1.75	13	5
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:CG1	0.81	2.05	10	5
1:A:224:LEU:HD21	1:A:228:VAL:HB	0.81	1.50	20	2
1:A:113:ALA:HB3	1:A:146:TYR:OH	0.81	1.75	10	8
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD13	0.81	1.96	5	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:HB3	0.81	1.53	4	3
1:A:308:THR:CG2	1:A:310:VAL:HG13	0.81	2.04	12	2
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:HD12	0.81	1.75	3	3
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD13	0.81	1.91	12	3
1:A:297:PRO:O	1:A:299:LEU:HD22	0.81	1.74	15	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:194:CYS:SG	0.81	2.16	11	4
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:HG22	0.80	1.51	16	20
1:A:249:SER:HB2	1:A:251:ILE:HD12	0.80	1.53	9	3
1:A:202:LEU:HD12	1:A:202:LEU:O	0.80	1.76	4	9
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:CD1	0.80	2.12	5	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:289:TYR:OH	0.80	1.74	8	8
1:A:157:ASP:CB	1:A:186:ILE:HD12	0.80	2.06	5	1
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HG12	0.80	1.51	14	1
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:CD1	0.80	2.06	4	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD22	0.80	1.50	4	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:251:ILE:HG22	0.80	1.77	15	2
1:A:219:CYS:SG	1:A:278:ALA:HB2	0.80	2.17	18	2
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:HB3	0.79	1.51	9	3
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:CE2	0.79	2.12	3	8
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:HD11	0.79	2.07	17	2
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:HG21	0.79	2.12	14	8
1:A:210:THR:HA	1:A:280:VAL:HG13	0.79	1.50	1	8
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:O	0.79	1.76	8	5
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:HG2	0.79	1.53	20	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CE1	0.79	2.12	11	13
1:A:245:VAL:HG23	1:A:288:SER:O	0.79	1.77	20	2
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:HG12	0.79	1.52	5	16
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD21	0.79	2.08	6	3
1:A:239:ALA:HB2	1:A:299:LEU:HD23	0.79	1.55	17	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:HG	0.78	1.55	18	8
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:SD	0.78	2.16	12	2
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD23	0.78	1.78	8	14
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG2	0.78	1.56	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:O	0.78	1.77	9	8
1:A:222:LEU:N	1:A:222:LEU:HD23	0.78	1.93	13	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:HD21	0.78	2.09	8	1
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HG2	0.78	1.54	2	2
1:A:230:MET:O	1:A:233:THR:HG22	0.78	1.79	20	1
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:CB	0.78	2.08	20	8
1:A:291:LEU:N	1:A:291:LEU:HD23	0.78	1.94	4	6
1:A:155:ALA:HB2	1:A:190:GLU:OE1	0.78	1.79	9	3
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:HD12	0.78	1.55	6	2
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:N	0.78	1.95	4	5
1:A:125:ALA:CB	1:A:130:LEU:HD11	0.77	2.00	5	1
1:A:256:ALA:HA	1:A:285:ILE:HG23	0.77	1.56	6	20
1:A:292:ILE:HG22	1:A:299:LEU:HD11	0.77	1.54	13	1
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:ILE:HD12	0.77	1.54	5	5
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HD13	0.77	1.53	13	2
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:HD12	0.77	1.79	1	3
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:NE	0.77	1.94	12	1
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:HD13	0.77	1.99	10	1
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:HB3	0.77	1.54	19	3
1:A:316:LEU:OXT	1:A:316:LEU:HD13	0.77	1.80	4	1
1:A:137:ARG:HB3	1:A:167:ALA:HB2	0.77	1.57	14	11
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:HG13	0.77	1.55	19	6
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:N	0.76	1.94	9	8
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD21	0.76	1.57	10	4
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:HG22	0.76	2.01	7	3
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HG23	0.76	1.56	17	2
1:A:296:ALA:HB1	1:A:297:PRO:CD	0.76	2.10	12	12
1:A:244:LEU:HD21	1:A:292:ILE:O	0.76	1.81	6	3
1:A:256:ALA:O	1:A:316:LEU:HD11	0.76	1.81	7	2
1:A:173:VAL:HG21	1:A:180:ILE:CG2	0.76	2.08	3	4
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:HD12	0.76	1.81	13	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:277:ILE:HG22	0.76	2.16	12	5
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:CD2	0.75	2.11	16	8
1:A:254:ALA:O	1:A:258:ILE:HD12	0.75	1.81	9	4
1:A:151:LEU:HB3	1:A:159:ILE:HD11	0.75	1.57	19	3
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:HD12	0.75	1.56	4	1
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:HD23	0.75	1.96	16	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:CG	0.75	2.12	16	8
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CD2	0.74	2.17	8	17
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:HD12	0.74	1.58	10	3
1:A:222:LEU:HD23	1:A:222:LEU:O	0.74	1.81	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:HG21	0.74	2.11	20	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG22	0.74	2.12	10	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:HA	0.74	1.56	4	8
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD13	0.74	1.81	12	2
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:HD12	0.74	1.83	20	7
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG13	0.74	1.59	6	1
1:A:298:ASP:C	1:A:299:LEU:HD13	0.74	2.02	20	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD22	0.74	1.83	16	2
1:A:293:TYR:HB3	1:A:299:LEU:HD11	0.74	1.58	11	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:198:ILE:N	0.74	1.98	16	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG23	0.74	2.12	17	1
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:HG23	0.73	1.83	4	3
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:HD13	0.73	1.81	10	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CG1	0.73	2.13	17	1
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:OG	0.73	1.81	5	3
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:HG23	0.73	1.84	15	12
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:HB3	0.73	1.58	14	3
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HG23	0.73	1.60	17	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HB3	0.73	1.58	18	8
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD12	0.73	2.14	10	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD22	0.73	2.04	8	3
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:SD	0.73	2.23	12	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:HD12	0.73	1.59	2	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG21	0.73	1.61	12	1
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HD21	0.72	1.82	12	3
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD11	0.72	1.97	9	1
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:HD12	0.72	1.84	10	4
1:A:310:VAL:HB	1:A:313:LEU:HD23	0.72	1.60	14	1
1:A:236:ALA:O	1:A:240:VAL:HG12	0.72	1.85	16	1
1:A:165:TYR:CD1	1:A:180:ILE:HG21	0.72	2.19	3	7
1:A:257:ALA:O	1:A:261:ALA:HB2	0.72	1.83	17	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:C	0.72	2.05	15	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:CG2	0.72	2.15	9	3
1:A:222:LEU:HD22	1:A:269:ARG:NH1	0.72	1.99	14	1
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD22	0.72	1.59	11	1
1:A:259:TYR:CZ	1:A:274:ILE:HG21	0.72	2.20	11	4
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:CG1	0.72	2.15	11	4
1:A:245:VAL:HG23	1:A:245:VAL:O	0.72	1.85	5	1
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CD2	0.72	2.19	6	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:310:VAL:O	0.72	1.84	17	1
1:A:207:ASP:C	1:A:208:LEU:HD12	0.72	2.05	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:ALA:CB	1:A:135:VAL:HG22	0.72	2.15	15	8
1:A:138:THR:CG2	1:A:164:LEU:HD22	0.72	2.15	17	18
1:A:228:VAL:HG11	1:A:262:SER:HA	0.72	1.61	14	6
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG22	0.72	1.61	10	1
1:A:256:ALA:HB2	1:A:285:ILE:HA	0.72	1.61	2	17
1:A:186:ILE:O	1:A:186:ILE:HG23	0.71	1.85	17	8
1:A:161:SER:CB	1:A:191:ILE:HD13	0.71	2.15	6	14
1:A:176:THR:HG23	1:A:177:PHE:N	0.71	1.98	6	19
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:HD23	0.71	1.85	5	1
1:A:145:VAL:HG22	1:A:145:VAL:O	0.71	1.85	1	2
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:HG3	0.71	1.62	9	2
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:HD21	0.71	1.62	15	3
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HG23	0.71	1.85	5	3
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:HA	0.71	1.60	11	1
1:A:186:ILE:HG23	1:A:186:ILE:O	0.71	1.85	3	11
1:A:245:VAL:HG13	1:A:245:VAL:O	0.71	1.84	14	9
1:A:244:LEU:HD21	1:A:292:ILE:C	0.71	2.06	11	3
1:A:206:VAL:HG23	1:A:282:ASP:OD2	0.71	1.84	15	1
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:HB3	0.71	1.61	18	5
1:A:292:ILE:HG12	1:A:299:LEU:HD21	0.71	1.60	11	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HG13	0.71	1.60	1	3
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD22	0.70	1.60	18	3
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:HD21	0.70	1.62	16	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:HB2	0.70	1.85	2	4
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG11	0.70	1.63	6	1
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD21	0.70	1.59	6	2
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:HB3	0.70	1.63	14	4
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HG13	0.70	1.63	7	3
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:O	0.70	1.86	6	1
1:A:127:ARG:CB	1:A:183:VAL:HG23	0.70	2.16	1	3
1:A:260:MET:O	1:A:260:MET:HE3	0.70	1.87	12	1
1:A:161:SER:OG	1:A:191:ILE:HD13	0.70	1.87	17	6
1:A:313:LEU:HD12	1:A:313:LEU:O	0.70	1.87	14	1
1:A:209:ILE:HD13	1:A:279:GLY:O	0.70	1.87	8	3
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:OE1	0.70	1.87	20	2
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:HB1	0.70	1.86	12	3
1:A:224:LEU:HD23	1:A:228:VAL:HG21	0.70	1.64	17	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:280:VAL:HG22	0.70	1.63	18	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:259:TYR:OH	0.70	1.86	9	1
1:A:235:ILE:HB	1:A:257:ALA:HB1	0.69	1.64	15	4
1:A:155:ALA:HB1	1:A:158:ALA:HB3	0.69	1.63	1	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:HG3	0.69	1.62	7	1
1:A:252:SER:CA	1:A:284:THR:HG23	0.69	2.17	2	12
1:A:169:ARG:NH1	1:A:199:LEU:HD22	0.69	2.02	3	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:O	0.69	1.87	8	3
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HD2	0.69	1.62	2	1
1:A:130:LEU:O	1:A:130:LEU:HD12	0.69	1.87	5	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:CD	0.69	2.18	19	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CB	0.69	2.17	5	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:HD1	0.69	1.46	5	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CD2	0.69	2.80	5	3
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD13	0.69	2.18	7	3
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:HG22	0.69	1.86	3	1
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HD11	0.69	2.23	14	2
1:A:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CE1	0.69	2.81	5	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:146:TYR:CD1	0.69	2.81	16	18
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:HD21	0.69	1.64	3	8
1:A:197:LEU:C	1:A:197:LEU:HD13	0.69	2.08	16	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:HB	0.68	1.65	3	6
1:A:207:ASP:HB2	1:A:283:VAL:HG11	0.68	1.65	6	2
1:A:221:ASN:OD1	1:A:222:LEU:HD23	0.68	1.86	3	1
1:A:300:PHE:CZ	1:A:304:PHE:CD2	0.68	2.81	4	1
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:NE2	0.68	2.02	1	1
1:A:209:ILE:HG21	1:A:279:GLY:O	0.68	1.89	19	11
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CZ	0.68	2.81	20	6
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:N	0.68	2.02	13	1
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:HD21	0.68	1.63	6	4
1:A:235:ILE:HG23	1:A:289:TYR:OH	0.68	1.89	19	2
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:O	0.68	1.88	13	2
1:A:186:ILE:C	1:A:186:ILE:HD13	0.68	2.09	17	12
1:A:206:VAL:HG11	1:A:282:ASP:N	0.68	2.03	4	5
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:VAL:HG13	0.68	1.65	7	1
1:A:197:LEU:C	1:A:197:LEU:HD22	0.68	2.07	13	1
1:A:186:ILE:HD13	1:A:186:ILE:C	0.67	2.09	15	7
1:A:245:VAL:HG22	1:A:245:VAL:O	0.67	1.87	6	2
1:A:117:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CE2	0.67	2.25	9	3
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:HD21	0.67	1.65	3	5
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:CB	0.67	2.19	4	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:267:GLU:HB3	0.67	1.67	17	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD12	0.67	1.89	3	2
1:A:197:LEU:HD22	1:A:197:LEU:C	0.67	2.08	16	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:134:ILE:HG21	0.67	2.19	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:HE22	0.66	1.49	18	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:HG21	0.66	1.89	9	3
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CZ	0.66	2.79	5	20
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG3	0.66	1.65	18	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD1	0.66	2.57	5	1
1:A:253:VAL:HG22	1:A:288:SER:OG	0.66	1.90	13	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:148:GLN:NE2	0.66	2.04	16	3
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG22	0.66	1.68	18	2
1:A:236:ALA:HB2	1:A:257:ALA:HB2	0.66	1.68	1	4
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:HG22	0.66	1.91	11	2
1:A:125:ALA:HA	1:A:130:LEU:HD12	0.66	1.67	12	2
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:HD23	0.66	2.06	4	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HB2	0.66	1.66	7	8
1:A:264:ALA:CB	1:A:300:PHE:CE2	0.66	2.78	5	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HD2	0.66	1.67	1	2
1:A:154:ARG:O	1:A:155:ALA:HB2	0.66	1.91	2	16
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:CD1	0.66	2.83	14	10
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:NE2	0.66	2.05	18	2
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:CD1	0.66	2.19	12	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG22	0.66	2.21	18	4
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:HD12	0.66	1.68	5	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD22	0.66	2.05	20	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HG2	0.66	1.66	7	1
1:A:260:MET:CA	1:A:316:LEU:HD23	0.66	2.21	12	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CE2	0.65	2.77	11	7
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:HB2	0.65	1.91	18	15
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:HD12	0.65	1.68	4	4
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HD12	0.65	1.91	2	3
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HG13	0.65	1.67	15	1
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:HG21	0.65	1.67	8	10
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HG21	0.65	1.67	20	3
1:A:130:LEU:HD13	1:A:168:CYS:SG	0.65	2.32	8	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:CB	0.65	2.20	12	2
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:HD22	0.65	2.21	19	3
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HD21	0.65	2.21	2	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CE1	0.65	2.80	10	12
1:A:299:LEU:H	1:A:299:LEU:HD22	0.65	1.52	20	5
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG12	0.65	2.22	5	3
1:A:252:SER:HA	1:A:280:VAL:HG11	0.65	1.66	11	4
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:CG2	0.65	2.80	3	11
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:CB	0.65	2.80	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:CB	0.65	2.22	2	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG13	0.65	2.27	17	1
1:A:252:SER:CB	1:A:280:VAL:HG11	0.65	2.21	13	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:CD	0.65	2.22	2	1
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:HD11	0.65	1.69	11	9
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:NE	0.65	2.07	19	1
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HB3	0.65	1.69	15	1
1:A:297:PRO:HG3	1:A:313:LEU:HD12	0.65	1.69	8	3
1:A:308:THR:HG23	1:A:309:PRO:HD2	0.65	1.69	6	7
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:CD1	0.65	2.21	19	4
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:CG1	0.65	2.80	17	2
1:A:209:ILE:N	1:A:209:ILE:HD12	0.64	2.07	8	6
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:HD11	0.64	1.69	19	2
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG22	0.64	1.93	15	1
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:CD2	0.64	2.80	12	6
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HG3	0.64	1.67	6	1
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CE2	0.64	2.81	17	6
1:A:264:ALA:CB	1:A:300:PHE:CZ	0.64	2.81	5	1
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:CB	0.64	2.22	1	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:CG2	0.64	2.81	20	2
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:HD13	0.64	1.91	6	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG13	0.64	2.22	6	1
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:HB3	0.64	1.91	15	1
1:A:258:ILE:HG22	1:A:274:ILE:HG13	0.64	1.70	6	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:HG2	0.64	1.69	11	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG13	0.64	1.67	18	2
1:A:207:ASP:HA	1:A:281:ALA:HB2	0.64	1.69	3	4
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CD2	0.64	2.81	8	5
1:A:270:THR:C	1:A:274:ILE:HG22	0.64	2.12	6	2
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:HD22	0.64	1.70	17	11
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:CD1	0.64	2.81	3	2
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:CG	0.64	2.22	2	2
1:A:249:SER:O	1:A:253:VAL:HG23	0.64	1.93	13	1
1:A:313:LEU:N	1:A:314:PRO:HD3	0.64	2.07	15	3
1:A:280:VAL:O	1:A:281:ALA:HB2	0.64	1.91	18	2
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:CG2	0.64	2.81	5	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:CB	0.64	2.81	8	4
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:CD	0.64	2.13	19	1
1:A:313:LEU:N	1:A:314:PRO:CD	0.64	2.61	15	3
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:CD2	0.64	2.81	19	2
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CE1	0.64	2.81	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:VAL:HG12	1:A:148:GLN:HE21	0.63	1.54	9	5
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:HG23	0.63	1.70	3	2
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:CB	0.63	2.24	17	14
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CZ	0.63	2.81	14	18
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:HG22	0.63	1.93	7	2
1:A:228:VAL:HG13	1:A:261:ALA:O	0.63	1.94	6	7
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE2	0.63	2.82	9	5
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG13	0.63	1.93	3	5
1:A:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CZ	0.63	2.87	5	1
1:A:127:ARG:HB2	1:A:183:VAL:HG23	0.63	1.69	1	2
1:A:289:TYR:HA	1:A:292:ILE:HG22	0.63	1.68	11	4
1:A:292:ILE:CG1	1:A:293:TYR:CE2	0.63	2.80	12	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:N	0.63	2.08	4	2
1:A:244:LEU:CG	1:A:292:ILE:HD12	0.63	2.23	14	1
1:A:124:MET:HA	1:A:183:VAL:HG21	0.63	1.70	17	2
1:A:121:ILE:CG2	1:A:138:THR:HG22	0.63	2.24	1	20
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HD12	0.63	1.94	5	1
1:A:260:MET:C	1:A:260:MET:HE3	0.63	2.14	12	1
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:CD	0.63	2.23	10	1
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:CD1	0.63	2.81	14	2
1:A:283:VAL:HG22	1:A:287:GLN:NE2	0.63	2.09	16	2
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:CB	0.63	2.81	17	5
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CE1	0.63	2.28	2	19
1:A:221:ASN:HB2	1:A:277:ILE:HD13	0.63	1.71	16	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:C	0.63	2.13	7	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:128:ILE:O	0.62	1.92	18	9
1:A:158:ALA:N	1:A:186:ILE:HG21	0.62	2.08	4	15
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:CD	0.62	2.62	5	2
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD13	0.62	1.94	12	1
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:CD1	0.62	2.24	13	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HB2	0.62	1.70	12	2
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:CD	0.62	2.23	2	1
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HG13	0.62	1.71	7	1
1:A:137:ARG:CB	1:A:167:ALA:HB2	0.62	2.25	7	7
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CD	0.62	2.24	2	2
1:A:128:ILE:O	1:A:128:ILE:HG22	0.62	1.94	6	6
1:A:206:VAL:HG11	1:A:282:ASP:H	0.62	1.53	11	5
1:A:251:ILE:HD13	1:A:251:ILE:N	0.62	2.10	10	1
1:A:177:PHE:CD1	1:A:315:GLN:NE2	0.62	2.67	4	2
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HD13	0.62	2.29	12	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:CA	0.62	2.24	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD23	0.62	2.24	14	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:H	0.62	1.54	4	1
1:A:125:ALA:HB3	1:A:135:VAL:CG2	0.62	2.23	18	7
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:CD2	0.62	2.25	16	3
1:A:306:PHE:N	1:A:306:PHE:CD1	0.62	2.66	9	1
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:HG21	0.62	2.15	14	2
1:A:165:TYR:HD1	1:A:180:ILE:HG21	0.62	1.54	12	5
1:A:245:VAL:HG23	1:A:287:GLN:CD	0.62	2.14	13	1
1:A:244:LEU:HD11	1:A:293:TYR:CA	0.62	2.24	20	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HD12	0.62	2.25	9	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HA	0.62	1.71	10	2
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:HG21	0.62	1.94	11	2
1:A:259:TYR:CE1	1:A:274:ILE:HG21	0.62	2.29	3	4
1:A:128:ILE:HG23	1:A:130:LEU:HG	0.62	1.72	13	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CD1	0.61	2.30	11	7
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:HE	0.61	1.53	12	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HD23	0.61	1.94	1	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:145:VAL:HG13	0.61	1.95	4	1
1:A:173:VAL:HG13	1:A:173:VAL:O	0.61	1.95	20	5
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:HD21	0.61	2.25	3	4
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:HG21	0.61	1.72	12	6
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:CD	0.61	2.25	1	3
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HD2	0.61	1.72	2	1
1:A:299:LEU:H	1:A:299:LEU:HD12	0.61	1.55	1	4
1:A:242:LEU:HB3	1:A:244:LEU:HD23	0.61	1.71	12	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:CD2	0.61	2.25	16	16
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HG	0.61	1.71	7	3
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:HE2	0.61	1.56	12	4
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:HG2	0.61	1.73	1	1
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:HD22	0.61	1.71	18	3
1:A:232:ALA:HB1	1:A:257:ALA:O	0.61	1.94	7	7
1:A:234:HIS:CE1	1:A:300:PHE:CG	0.61	2.89	10	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG22	0.61	2.31	20	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:N	0.61	2.11	3	3
1:A:245:VAL:HG11	1:A:287:GLN:O	0.61	1.95	2	1
1:A:163:CYS:SG	1:A:198:ILE:HD13	0.61	2.36	17	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:HD11	0.60	1.73	1	2
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:CG1	0.60	2.23	14	1
1:A:236:ALA:HB2	1:A:257:ALA:CB	0.60	2.26	3	7
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:HD12	0.60	1.73	15	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:CD1	0.60	2.84	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:VAL:C	1:A:208:LEU:HD12	0.60	2.16	13	1
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HD13	0.60	1.96	18	2
1:A:195:PHE:CD1	1:A:199:LEU:HD11	0.60	2.32	5	3
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:OE2	0.60	1.96	12	1
1:A:281:ALA:O	1:A:284:THR:HG22	0.60	1.97	13	2
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD13	0.60	2.26	13	1
1:A:245:VAL:HG13	1:A:292:ILE:HG13	0.60	1.72	2	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HA	0.60	1.72	17	1
1:A:292:ILE:HG23	1:A:292:ILE:O	0.60	1.96	18	5
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:H	0.60	1.56	13	2
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HD13	0.60	1.97	2	12
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ALA:N	0.60	2.11	13	18
1:A:278:ALA:O	1:A:280:VAL:HG23	0.60	1.96	18	4
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:CG	0.60	2.27	2	2
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD11	0.60	1.74	10	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HD12	0.60	2.27	15	1
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CD1	0.60	2.32	17	7
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:CB	0.60	2.80	13	10
1:A:166:ILE:CD1	1:A:198:ILE:HG22	0.60	2.27	16	4
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:HD11	0.59	2.32	19	5
1:A:293:TYR:CD1	1:A:313:LEU:O	0.59	2.55	12	1
1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:ASP:N	0.59	2.11	15	7
1:A:134:ILE:HG21	1:A:168:CYS:SG	0.59	2.37	14	5
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HG	0.59	1.54	3	4
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:HD12	0.59	1.72	2	7
1:A:207:ASP:H	1:A:281:ALA:HB1	0.59	1.56	20	4
1:A:232:ALA:HB1	1:A:257:ALA:C	0.59	2.18	1	3
1:A:125:ALA:CB	1:A:135:VAL:CG2	0.59	2.81	4	10
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:CB	0.59	2.81	11	14
1:A:113:ALA:HB1	1:A:156:ASN:ND2	0.59	2.12	4	1
1:A:260:MET:SD	1:A:313:LEU:HD13	0.59	2.38	3	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD22	0.59	2.32	9	3
1:A:264:ALA:CB	1:A:306:PHE:CE1	0.59	2.85	20	8
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:CG	0.59	2.90	13	7
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:HD2	0.59	2.13	5	1
1:A:219:CYS:SG	1:A:258:ILE:HD13	0.59	2.37	4	3
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG22	0.59	1.74	17	4
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:CD2	0.59	2.80	16	4
1:A:159:ILE:HG23	1:A:198:ILE:HD11	0.59	1.75	13	1
1:A:235:ILE:CG2	1:A:260:MET:CE	0.59	2.81	11	1
1:A:313:LEU:CG	1:A:313:LEU:O	0.59	2.49	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:ILE:HG12	1:A:160:ALA:HB1	0.59	1.73	1	2
1:A:160:ALA:O	1:A:164:LEU:HD23	0.59	1.97	3	17
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD13	0.59	1.74	9	3
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:HG2	0.59	1.74	6	3
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD21	0.59	2.23	19	2
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:CG2	0.59	2.81	20	6
1:A:163:CYS:SG	1:A:198:ILE:HG21	0.59	2.38	3	2
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:HD12	0.59	1.75	5	1
1:A:114:MET:CG	1:A:146:TYR:CE2	0.59	2.86	14	3
1:A:260:MET:CE	1:A:316:LEU:HD12	0.59	2.28	17	1
1:A:296:ALA:CB	1:A:297:PRO:CD	0.58	2.79	12	11
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG11	0.58	2.38	9	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:198:ILE:CG2	0.58	2.81	16	3
1:A:209:ILE:HG22	1:A:211:THR:H	0.58	1.58	13	6
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CE1	0.58	2.56	13	8
1:A:245:VAL:HB	1:A:246:PRO:HD3	0.58	1.74	12	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:CB	0.58	2.51	7	14
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HD12	0.58	1.98	3	3
1:A:141:LEU:CD2	1:A:202:LEU:CD2	0.58	2.81	19	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:CD1	0.58	2.86	12	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:277:ILE:O	0.58	2.56	20	7
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:CD1	0.58	2.81	13	1
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CZ	0.58	2.56	1	8
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:CE2	0.58	2.57	5	2
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:CD2	0.58	2.92	20	3
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:HB2	0.58	2.34	11	6
1:A:218:PHE:CE2	1:A:277:ILE:O	0.58	2.57	19	4
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:CE1	0.58	2.57	14	2
1:A:293:TYR:O	1:A:293:TYR:CG	0.58	2.57	13	3
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:OD1	0.58	1.98	12	1
1:A:161:SER:CB	1:A:191:ILE:CD1	0.58	2.81	17	10
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:CD1	0.58	2.81	16	2
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CE2	0.58	2.57	16	2
1:A:121:ILE:CG1	1:A:160:ALA:HB1	0.58	2.28	16	4
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CE1	0.58	2.91	20	2
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:HD12	0.58	2.18	4	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CB	0.58	2.28	2	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:HD12	0.58	2.34	2	1
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:CE1	0.58	2.57	7	13
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:CB	0.58	2.51	6	20
1:A:293:TYR:CD1	1:A:293:TYR:O	0.58	2.57	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:CD2	0.58	2.67	12	2
1:A:289:TYR:CE2	1:A:293:TYR:OH	0.58	2.56	12	1
1:A:293:TYR:CE2	1:A:314:PRO:O	0.58	2.57	20	1
1:A:291:LEU:N	1:A:291:LEU:CD2	0.58	2.65	4	2
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:O	0.58	2.57	6	2
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:O	0.58	2.57	7	2
1:A:176:THR:HG23	1:A:178:LYS:H	0.58	1.59	15	14
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:CG1	0.58	2.86	13	3
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HG22	0.58	2.33	5	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:179:GLU:CG	0.58	2.82	15	1
1:A:292:ILE:HG23	1:A:299:LEU:HD21	0.58	1.76	2	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:173:VAL:O	0.58	1.99	7	1
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:CB	0.57	2.29	18	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:172:GLY:O	0.57	1.98	8	2
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:CB	0.57	2.82	12	2
1:A:312:LYS:C	1:A:314:PRO:HD3	0.57	2.19	11	3
1:A:291:LEU:CD2	1:A:291:LEU:N	0.57	2.67	6	10
1:A:224:LEU:C	1:A:224:LEU:HD13	0.57	2.19	3	3
1:A:260:MET:CE	1:A:289:TYR:CE1	0.57	2.87	5	1
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:HD12	0.57	1.99	10	2
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:HG12	0.57	1.75	19	2
1:A:165:TYR:O	1:A:165:TYR:CD1	0.57	2.57	7	2
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD13	0.57	2.29	11	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:277:ILE:O	0.57	2.57	6	1
1:A:300:PHE:O	1:A:300:PHE:CD2	0.57	2.57	9	1
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:CG1	0.57	2.29	13	3
1:A:300:PHE:O	1:A:300:PHE:CD1	0.57	2.56	19	1
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:CB	0.57	2.29	11	4
1:A:206:VAL:HG13	1:A:208:LEU:CD2	0.57	2.30	18	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:CD1	0.57	2.67	9	1
1:A:166:ILE:CG2	1:A:202:LEU:HD11	0.57	2.29	15	2
1:A:157:ASP:C	1:A:186:ILE:HG21	0.57	2.20	12	16
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG22	0.57	2.28	10	3
1:A:165:TYR:CD1	1:A:165:TYR:O	0.57	2.57	2	3
1:A:177:PHE:CD1	1:A:315:GLN:OE1	0.57	2.57	8	2
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:O	0.57	2.57	7	2
1:A:204:THR:CG2	1:A:205:SER:N	0.57	2.67	6	1
1:A:120:GLU:OE1	1:A:160:ALA:HB3	0.57	1.99	18	1
1:A:296:ALA:HB1	1:A:312:LYS:HA	0.57	1.76	3	7
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:HD12	0.57	2.20	5	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:O	0.57	2.00	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:CG	0.57	2.30	12	1
1:A:269:ARG:NH1	1:A:274:ILE:CD1	0.57	2.67	10	1
1:A:274:ILE:CG2	1:A:275:GLY:N	0.57	2.68	12	11
1:A:271:GLN:HA	1:A:274:ILE:CG2	0.57	2.29	9	14
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:CG2	0.57	2.87	19	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:HB2	0.57	2.34	17	4
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:HB3	0.57	2.35	9	4
1:A:259:TYR:CE2	1:A:274:ILE:CG2	0.57	2.86	19	2
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CB	0.57	2.29	12	1
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:CD2	0.57	2.57	10	1
1:A:207:ASP:CB	1:A:283:VAL:HG11	0.57	2.29	6	1
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:HD12	0.57	2.00	17	2
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CE2	0.57	2.98	9	2
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CD2	0.57	2.57	16	1
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:HD21	0.57	1.75	7	2
1:A:138:THR:HG23	1:A:163:CYS:CB	0.57	2.30	20	4
1:A:146:TYR:CG	1:A:146:TYR:O	0.57	2.57	19	5
1:A:169:ARG:CD	1:A:271:GLN:NE2	0.57	2.67	18	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:HA	0.57	1.76	3	12
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CE1	0.57	2.98	5	1
1:A:146:TYR:O	1:A:146:TYR:CD1	0.57	2.58	13	2
1:A:177:PHE:CG	1:A:315:GLN:OE1	0.57	2.57	13	1
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:HG11	0.57	2.30	19	1
1:A:221:ASN:CB	1:A:277:ILE:HD13	0.57	2.29	16	1
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:HD12	0.57	2.40	4	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:202:LEU:HD11	0.56	1.75	18	2
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CB	0.56	2.53	11	7
1:A:260:MET:HA	1:A:316:LEU:HD23	0.56	1.77	12	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:OXT	0.56	2.58	6	1
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HG	0.56	2.00	15	2
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:CB	0.56	2.53	18	1
1:A:204:THR:CG2	1:A:206:VAL:HG23	0.56	2.29	3	1
1:A:235:ILE:HG13	1:A:300:PHE:CD1	0.56	2.36	9	2
1:A:293:TYR:CD2	1:A:293:TYR:O	0.56	2.57	17	3
1:A:260:MET:N	1:A:316:LEU:HD23	0.56	2.15	12	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:225:PRO:O	0.56	1.99	20	1
1:A:300:PHE:CD2	1:A:300:PHE:O	0.56	2.57	2	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:CD	0.56	2.28	7	1
1:A:265:SER:OG	1:A:304:PHE:CZ	0.56	2.57	15	2
1:A:259:TYR:CZ	1:A:271:GLN:OE1	0.56	2.57	9	1
1:A:161:SER:HA	1:A:164:LEU:HD12	0.56	1.75	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:HD13	0.56	1.77	13	1
1:A:242:LEU:CD2	1:A:242:LEU:N	0.56	2.67	11	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:289:TYR:CE1	0.56	2.35	2	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG11	0.56	2.28	6	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:CD1	0.56	2.81	17	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:HB3	0.56	2.36	15	2
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:C	0.56	2.78	20	6
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:CG2	0.56	2.54	19	18
1:A:206:VAL:CG1	1:A:207:ASP:N	0.56	2.67	17	6
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HB3	0.56	1.76	3	1
1:A:310:VAL:HG23	1:A:311:ASP:N	0.56	2.15	20	6
1:A:274:ILE:HG23	1:A:275:GLY:N	0.56	2.15	16	13
1:A:249:SER:CB	1:A:250:PRO:CD	0.56	2.83	20	20
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:CD2	0.56	2.83	3	4
1:A:173:VAL:HG13	1:A:259:TYR:OH	0.56	2.01	8	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:159:ILE:CG1	0.56	2.83	16	4
1:A:235:ILE:HG23	1:A:299:LEU:HB2	0.56	1.78	12	1
1:A:211:THR:CG2	1:A:212:GLY:N	0.56	2.67	7	2
1:A:222:LEU:CD2	1:A:277:ILE:CD1	0.56	2.84	3	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:OE1	0.56	2.59	9	2
1:A:210:THR:HA	1:A:280:VAL:HG12	0.56	1.76	6	1
1:A:137:ARG:C	1:A:141:LEU:HD12	0.56	2.21	1	1
1:A:186:ILE:O	1:A:186:ILE:CG2	0.56	2.54	4	7
1:A:252:SER:HB3	1:A:280:VAL:HG11	0.56	1.77	13	1
1:A:240:VAL:HG23	1:A:253:VAL:HG11	0.56	1.75	19	1
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:HG21	0.56	2.21	11	2
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:CB	0.56	2.54	4	5
1:A:218:PHE:O	1:A:277:ILE:CG2	0.56	2.54	9	10
1:A:145:VAL:HG22	1:A:151:LEU:HD12	0.56	1.77	1	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD12	0.56	2.15	1	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:HG3	0.56	1.77	6	2
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:HB2	0.56	1.78	10	1
1:A:252:SER:HA	1:A:284:THR:HG23	0.56	1.77	2	11
1:A:224:LEU:HD12	1:A:267:GLU:OE1	0.56	2.01	9	3
1:A:169:ARG:NH2	1:A:199:LEU:CD1	0.56	2.69	18	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:208:LEU:HD21	0.56	1.78	18	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HB3	0.56	1.78	9	3
1:A:222:LEU:CD2	1:A:222:LEU:N	0.56	2.67	13	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:N	0.56	2.74	11	1
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:HD22	0.56	2.01	20	2
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:HA	0.56	2.36	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:HB2	0.56	1.78	4	3
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CD1	0.56	2.81	2	1
1:A:306:PHE:CD1	1:A:310:VAL:HG23	0.56	2.36	6	1
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:CG	0.56	2.31	9	1
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:HB	0.56	1.78	4	2
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:CA	0.55	2.32	19	5
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:HB2	0.55	2.36	5	1
1:A:264:ALA:HB3	1:A:300:PHE:CZ	0.55	2.36	5	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CE1	0.55	2.89	20	6
1:A:213:ASP:OD2	1:A:278:ALA:HB1	0.55	2.01	13	1
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:HG3	0.55	1.76	12	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:251:ILE:HG22	0.55	1.78	6	6
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:CB	0.55	2.85	11	3
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:CG	0.55	2.85	10	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:CA	0.55	2.55	15	2
1:A:186:ILE:CG2	1:A:186:ILE:O	0.55	2.54	8	12
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD22	0.55	2.32	1	2
1:A:293:TYR:CB	1:A:296:ALA:O	0.55	2.55	3	9
1:A:138:THR:HA	1:A:141:LEU:HD12	0.55	1.78	20	6
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:HB3	0.55	2.36	20	4
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:CG	0.55	2.22	19	3
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:CD1	0.55	2.84	6	1
1:A:249:SER:CB	1:A:250:PRO:HD2	0.55	2.32	20	20
1:A:214:PHE:CE2	1:A:251:ILE:HG12	0.55	2.37	3	14
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CE1	0.55	2.36	9	9
1:A:193:ARG:CB	1:A:193:ARG:CZ	0.55	2.84	8	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD22	0.55	2.16	8	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CD1	0.55	2.89	9	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:287:GLN:O	0.55	2.01	3	6
1:A:265:SER:O	1:A:266:ALA:HB3	0.55	2.02	12	1
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:CB	0.55	2.55	15	11
1:A:169:ARG:NH2	1:A:199:LEU:HD12	0.55	2.17	18	1
1:A:173:VAL:CG1	1:A:173:VAL:O	0.55	2.54	17	5
1:A:299:LEU:CD1	1:A:299:LEU:N	0.55	2.64	12	2
1:A:293:TYR:CE1	1:A:314:PRO:HA	0.55	2.36	17	3
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:N	0.55	2.74	11	1
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:CB	0.55	2.55	14	14
1:A:279:GLY:C	1:A:280:VAL:HG23	0.55	2.22	18	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:CG	0.55	2.31	11	2
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:HG22	0.55	2.02	5	4
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:HD21	0.55	2.01	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:264:ALA:O	1:A:304:PHE:CZ	0.55	2.59	12	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:306:PHE:CZ	0.55	2.95	16	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:235:ILE:HG12	0.55	2.37	10	1
1:A:296:ALA:HB3	1:A:312:LYS:CD	0.55	2.32	6	1
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:OG1	0.55	2.55	13	13
1:A:313:LEU:CD1	1:A:313:LEU:O	0.55	2.55	5	2
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:CD2	0.55	2.32	16	3
1:A:310:VAL:HG13	1:A:311:ASP:N	0.55	2.17	7	2
1:A:245:VAL:HG13	1:A:288:SER:O	0.55	2.02	12	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HG12	0.55	2.37	13	8
1:A:245:VAL:CG2	1:A:287:GLN:O	0.55	2.55	16	6
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:CD1	0.55	2.55	5	3
1:A:304:PHE:O	1:A:306:PHE:N	0.55	2.40	12	6
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CE2	0.55	2.37	13	2
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:CG	0.55	2.21	14	2
1:A:232:ALA:O	1:A:257:ALA:HB1	0.55	2.02	1	6
1:A:255:ALA:HB2	1:A:280:VAL:HG21	0.55	1.78	20	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:CG	0.54	2.55	16	3
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CB	0.54	2.55	3	15
1:A:251:ILE:O	1:A:254:ALA:HB3	0.54	2.01	16	10
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CB	0.54	2.55	6	12
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:CG	0.54	2.56	4	7
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:HB2	0.54	1.77	5	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG22	0.54	1.77	12	1
1:A:206:VAL:C	1:A:208:LEU:HD23	0.54	2.22	6	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:CB	0.54	2.56	15	19
1:A:228:VAL:CG2	1:A:267:GLU:CB	0.54	2.82	11	4
1:A:177:PHE:CD1	1:A:177:PHE:C	0.54	2.81	8	3
1:A:193:ARG:CG	1:A:194:CYS:N	0.54	2.71	17	3
1:A:117:ALA:HB2	1:A:156:ASN:HB3	0.54	1.78	1	2
1:A:275:GLY:CA	1:A:285:ILE:CD1	0.54	2.85	14	2
1:A:260:MET:HB3	1:A:289:TYR:CE1	0.54	2.36	11	1
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:OG	0.54	2.56	12	3
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:HD2	0.54	1.57	6	1
1:A:306:PHE:HE1	1:A:313:LEU:HD11	0.54	1.61	18	2
1:A:154:ARG:O	1:A:155:ALA:CB	0.54	2.56	2	12
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:HD11	0.54	1.78	6	2
1:A:292:ILE:HG13	1:A:293:TYR:CE2	0.54	2.38	12	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HD2	0.54	1.79	17	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:CG1	0.54	2.86	3	1
1:A:289:TYR:CE1	1:A:292:ILE:HG21	0.54	2.37	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD21	0.54	2.38	16	3
1:A:239:ALA:HB2	1:A:292:ILE:HD11	0.54	1.78	7	2
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HE	0.54	1.63	10	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:CG	0.54	2.70	18	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CZ	0.54	2.38	17	5
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:HG22	0.54	1.79	14	2
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:C	0.54	2.80	6	1
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:CB	0.54	2.91	5	2
1:A:301:PRO:O	1:A:302:THR:CB	0.54	2.55	8	6
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CG	0.54	2.56	6	5
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:NE2	0.54	2.76	11	2
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:CB	0.54	2.56	17	5
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG23	0.54	1.79	20	2
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CZ	0.54	3.00	5	3
1:A:124:MET:CE	1:A:125:ALA:HB2	0.54	2.33	4	1
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:HD21	0.54	2.38	15	1
1:A:218:PHE:C	1:A:218:PHE:CD1	0.54	2.79	3	2
1:A:270:THR:O	1:A:272:LYS:N	0.54	2.41	9	4
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:CG	0.54	2.56	12	8
1:A:242:LEU:O	1:A:242:LEU:HD12	0.54	2.03	19	1
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:CG	0.54	2.55	12	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CB	0.54	2.56	6	6
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CG	0.54	2.33	19	3
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:HG2	0.54	2.38	13	1
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:CG2	0.54	2.56	11	2
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HD12	0.54	2.38	10	1
1:A:316:LEU:O	1:A:316:LEU:CG	0.54	2.57	7	1
1:A:251:ILE:HD12	1:A:251:ILE:H	0.53	1.63	13	2
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:CA	0.53	2.32	17	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CE2	0.53	2.39	17	2
1:A:244:LEU:CD1	1:A:291:LEU:O	0.53	2.56	11	3
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:CA	0.53	2.56	13	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CG1	0.53	2.56	2	3
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CG	0.53	2.56	12	2
1:A:259:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD21	0.53	2.32	6	1
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:CB	0.53	2.57	11	18
1:A:239:ALA:HB3	1:A:253:VAL:HG11	0.53	1.80	10	2
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	0.53	2.02	18	1
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CG	0.53	2.38	17	8
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HG	0.53	1.81	12	3
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:HG12	0.53	1.80	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:CB	0.53	2.55	20	2
1:A:227:GLN:O	1:A:231:ALA:HB2	0.53	2.04	17	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:CG1	0.53	2.86	17	1
1:A:239:ALA:CB	1:A:253:VAL:HG11	0.53	2.34	15	2
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:CB	0.53	2.57	3	15
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:CG	0.53	2.57	8	2
1:A:207:ASP:OD1	1:A:283:VAL:CG1	0.53	2.56	17	2
1:A:176:THR:CG2	1:A:177:PHE:N	0.53	2.70	16	15
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:CG1	0.53	2.91	19	4
1:A:244:LEU:CD2	1:A:291:LEU:O	0.53	2.57	5	5
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:O	0.53	2.57	19	4
1:A:213:ASP:OD1	1:A:255:ALA:HB2	0.53	2.04	10	1
1:A:235:ILE:CG2	1:A:289:TYR:OH	0.53	2.57	15	12
1:A:273:GLU:CD	1:A:277:ILE:HD11	0.53	2.24	15	1
1:A:238:LYS:CB	1:A:299:LEU:O	0.53	2.57	9	5
1:A:209:ILE:CG2	1:A:279:GLY:O	0.53	2.57	3	7
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CG	0.53	2.57	13	3
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CD1	0.53	2.57	2	3
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG21	0.53	1.79	11	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:303:ASP:CG	0.53	2.81	17	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CG2	0.53	2.57	15	1
1:A:298:ASP:O	1:A:299:LEU:HB2	0.53	2.04	15	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:LEU:CD2	0.53	2.57	8	19
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:OG	0.53	2.56	1	3
1:A:117:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.53	2.38	20	3
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:O	0.53	2.57	14	5
1:A:177:PHE:C	1:A:177:PHE:CD1	0.53	2.81	17	5
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CE2	0.53	2.37	20	2
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:HG23	0.53	1.80	19	3
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:CG	0.53	2.56	19	1
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:OE1	0.53	2.03	10	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:HG21	0.53	1.80	6	1
1:A:297:PRO:CD	1:A:313:LEU:O	0.53	2.57	6	1
1:A:114:MET:O	1:A:118:PHE:CD1	0.53	2.61	8	3
1:A:269:ARG:CZ	1:A:273:GLU:O	0.53	2.57	9	1
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CD1	0.53	2.57	6	7
1:A:269:ARG:CZ	1:A:274:ILE:HD12	0.53	2.34	10	1
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:CD2	0.53	2.87	2	1
1:A:210:THR:CG2	1:A:252:SER:OG	0.53	2.57	6	1
1:A:117:ALA:HB2	1:A:156:ASN:HB2	0.53	1.80	2	4
1:A:191:ILE:O	1:A:195:PHE:CB	0.53	2.57	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CD2	0.53	2.57	16	4
1:A:128:ILE:O	1:A:129:ASN:CB	0.53	2.57	1	12
1:A:176:THR:CG2	1:A:315:GLN:O	0.53	2.57	7	6
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:CD1	0.53	2.57	4	2
1:A:244:LEU:HD12	1:A:244:LEU:O	0.53	2.03	6	3
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:CD1	0.53	2.57	2	1
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:CG	0.53	2.57	6	1
1:A:262:SER:CB	1:A:267:GLU:O	0.53	2.57	3	3
1:A:245:VAL:CG1	1:A:288:SER:O	0.53	2.56	19	3
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:CG	0.53	2.56	1	3
1:A:141:LEU:CD2	1:A:202:LEU:HD22	0.53	2.34	19	2
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CE2	0.53	2.97	5	1
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:CD1	0.53	2.57	8	3
1:A:280:VAL:CG1	1:A:284:THR:HG21	0.53	2.29	12	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:CG2	0.53	2.57	4	2
1:A:139:ASN:OD1	1:A:140:ASN:N	0.53	2.42	4	4
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CG	0.53	2.57	4	2
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE1	0.53	2.92	20	2
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:HB2	0.53	1.81	2	1
1:A:205:SER:O	1:A:207:ASP:N	0.53	2.42	15	2
1:A:121:ILE:HD11	1:A:142:PHE:CB	0.53	2.34	16	5
1:A:134:ILE:CD1	1:A:167:ALA:O	0.53	2.57	6	9
1:A:224:LEU:CD1	1:A:269:ARG:CG	0.53	2.87	17	2
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:CG2	0.53	2.57	3	1
1:A:180:ILE:O	1:A:183:VAL:CG1	0.53	2.57	12	14
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:HD23	0.53	2.04	8	1
1:A:172:GLY:HA2	1:A:271:GLN:N	0.53	2.18	9	3
1:A:142:PHE:CD1	1:A:142:PHE:C	0.53	2.82	17	6
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG13	0.53	1.79	10	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:CZ	0.53	2.57	10	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:287:GLN:O	0.53	2.57	2	1
1:A:227:GLN:O	1:A:231:ALA:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:CG	0.52	2.57	5	2
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CD	0.52	2.57	14	1
1:A:260:MET:CE	1:A:260:MET:O	0.52	2.57	13	3
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG11	0.52	1.79	11	1
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:CD2	0.52	2.57	11	1
1:A:144:GLN:CD	1:A:145:VAL:HG13	0.52	2.25	4	1
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:HB3	0.52	2.35	15	16
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:CG	0.52	2.57	17	5
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:CD1	0.52	2.57	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD13	0.52	2.19	5	2
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:CG	0.52	2.57	4	3
1:A:254:ALA:O	1:A:258:ILE:CD1	0.52	2.57	16	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:CB	0.52	2.87	2	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:315:GLN:HG3	0.52	2.39	17	1
1:A:247:GLY:O	1:A:249:SER:N	0.52	2.42	20	3
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CB	0.52	2.57	1	4
1:A:232:ALA:CB	1:A:257:ALA:O	0.52	2.57	1	5
1:A:203:GLU:OE1	1:A:286:ARG:CZ	0.52	2.57	8	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:HB2	0.52	2.39	20	2
1:A:289:TYR:CG	1:A:316:LEU:HA	0.52	2.40	6	4
1:A:145:VAL:CG2	1:A:145:VAL:O	0.52	2.57	1	2
1:A:245:VAL:CG1	1:A:245:VAL:O	0.52	2.57	16	3
1:A:242:LEU:HD22	1:A:242:LEU:N	0.52	2.20	11	1
1:A:260:MET:CB	1:A:316:LEU:O	0.52	2.57	11	1
1:A:221:ASN:CB	1:A:277:ILE:CD1	0.52	2.88	16	1
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD21	0.52	2.33	10	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:HB3	0.52	1.81	4	1
1:A:124:MET:HE1	1:A:164:LEU:HD12	0.52	1.81	4	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:186:ILE:CG2	0.52	2.58	2	1
1:A:313:LEU:CA	1:A:315:GLN:OE1	0.52	2.57	15	1
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HG	0.52	2.40	18	10
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:HB2	0.52	2.34	9	7
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:CA	0.52	2.97	5	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:CD2	0.52	2.57	1	1
1:A:128:ILE:O	1:A:130:LEU:CD2	0.52	2.57	16	1
1:A:247:GLY:CA	1:A:284:THR:OG1	0.52	2.57	20	1
1:A:278:ALA:CB	1:A:280:VAL:HG22	0.52	2.35	6	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:316:LEU:HD12	0.52	1.80	17	1
1:A:128:ILE:O	1:A:128:ILE:CG2	0.52	2.57	18	8
1:A:157:ASP:CB	1:A:186:ILE:HG21	0.52	2.34	8	6
1:A:174:PRO:O	1:A:176:THR:N	0.52	2.43	19	6
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:CB	0.52	2.57	11	13
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.57	14	2
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.43	20	3
1:A:113:ALA:CB	1:A:146:TYR:OH	0.52	2.57	4	3
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.81	20	1
1:A:270:THR:OG1	1:A:273:GLU:CG	0.52	2.57	20	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CG2	0.52	2.57	3	5
1:A:271:GLN:HA	1:A:274:ILE:HG22	0.52	1.80	1	11
1:A:222:LEU:C	1:A:222:LEU:HD23	0.52	2.25	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CG	0.52	2.57	3	2
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:O	0.52	2.57	5	1
1:A:312:LYS:CG	1:A:312:LYS:O	0.52	2.56	12	3
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:OXT	0.52	2.43	1	1
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:CG	0.52	2.57	2	2
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CG	0.52	2.40	16	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CG	0.52	2.35	2	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CD1	0.52	2.35	17	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:179:GLU:HG3	0.52	2.35	15	1
1:A:242:LEU:O	1:A:243:ASP:CB	0.52	2.57	12	7
1:A:209:ILE:O	1:A:211:THR:N	0.52	2.43	17	8
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG13	0.52	2.35	10	3
1:A:289:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD12	0.52	2.40	20	3
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:HD13	0.52	1.81	7	10
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:CD1	0.52	2.58	3	1
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:CD2	0.52	2.57	1	4
1:A:177:PHE:CB	1:A:315:GLN:OE1	0.52	2.57	14	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:HA	0.52	2.40	13	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:HG12	0.52	1.82	11	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:145:VAL:CG1	0.52	2.57	4	1
1:A:124:MET:CE	1:A:184:SER:OG	0.52	2.58	17	1
1:A:260:MET:CG	1:A:289:TYR:CE2	0.52	2.92	15	2
1:A:141:LEU:CB	1:A:163:CYS:SG	0.52	2.98	11	7
1:A:218:PHE:CD1	1:A:219:CYS:N	0.52	2.77	19	7
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:HD23	0.52	2.05	18	1
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:ND1	0.52	2.43	5	7
1:A:228:VAL:CG2	1:A:267:GLU:HB2	0.52	2.35	11	5
1:A:209:ILE:CB	1:A:279:GLY:O	0.52	2.58	11	6
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:HB3	0.52	2.40	8	5
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:N	0.52	2.43	8	6
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CB	0.52	2.57	14	6
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:HG13	0.52	2.45	9	1
1:A:303:ASP:O	1:A:305:LYS:N	0.52	2.43	1	3
1:A:135:VAL:O	1:A:139:ASN:ND2	0.52	2.43	2	3
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HD3	0.52	1.82	19	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:139:ASN:OD1	0.52	2.57	12	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.87	10	1
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:CD1	0.52	2.35	16	8
1:A:203:GLU:OE1	1:A:286:ARG:NH1	0.52	2.43	8	1
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:NH2	0.52	2.43	13	2
1:A:269:ARG:NH2	1:A:273:GLU:O	0.52	2.43	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:CD1	0.52	2.35	13	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:HG21	0.52	1.80	20	1
1:A:306:PHE:CD1	1:A:306:PHE:O	0.52	2.63	15	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:O	0.52	2.56	8	2
1:A:188:LYS:NZ	1:A:191:ILE:HD12	0.52	2.20	19	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:172:GLY:O	0.52	2.57	4	1
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CD	0.52	2.58	4	1
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:CD1	0.52	2.97	4	1
1:A:194:CYS:O	1:A:198:ILE:CD1	0.51	2.57	5	7
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:HB2	0.51	2.35	8	4
1:A:151:LEU:CD1	1:A:194:CYS:SG	0.51	2.98	16	4
1:A:240:VAL:HG22	1:A:253:VAL:HG21	0.51	1.82	1	1
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CZ	0.51	2.63	14	1
1:A:207:ASP:C	1:A:208:LEU:HD22	0.51	2.26	11	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:CZ	0.51	2.36	11	1
1:A:264:ALA:O	1:A:304:PHE:CE1	0.51	2.63	12	1
1:A:260:MET:SD	1:A:260:MET:N	0.51	2.83	16	1
1:A:293:TYR:CD2	1:A:315:GLN:HA	0.51	2.40	2	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:302:THR:HB	0.51	2.41	6	1
1:A:257:ALA:O	1:A:261:ALA:CB	0.51	2.57	17	1
1:A:260:MET:HG3	1:A:289:TYR:CE2	0.51	2.40	15	1
1:A:297:PRO:O	1:A:299:LEU:CD2	0.51	2.54	15	1
1:A:114:MET:HG3	1:A:146:TYR:CE2	0.51	2.40	14	3
1:A:280:VAL:O	1:A:281:ALA:CB	0.51	2.56	18	2
1:A:224:LEU:CD1	1:A:225:PRO:O	0.51	2.57	3	2
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:NH1	0.51	2.43	3	3
1:A:194:CYS:HA	1:A:197:LEU:HD12	0.51	1.80	1	2
1:A:150:SER:CB	1:A:197:LEU:HD22	0.51	2.35	6	2
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:CG	0.51	2.63	12	2
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:CG2	0.51	2.56	5	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:128:ILE:O	0.51	2.58	7	2
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:CB	0.51	2.57	10	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:CB	0.51	2.58	15	1
1:A:210:THR:CB	1:A:249:SER:OG	0.51	2.57	3	1
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:CZ	0.51	2.59	5	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.21	14	1
1:A:129:ASN:C	1:A:130:LEU:HD22	0.51	2.26	16	2
1:A:206:VAL:HG11	1:A:281:ALA:HA	0.51	1.82	20	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:168:CYS:SG	0.51	2.98	8	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:200:LYS:HE2	0.51	1.82	1	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG21	0.51	2.40	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:CG1	0.51	2.88	19	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:246:PRO:CD	0.51	2.36	12	1
1:A:202:LEU:CG	1:A:202:LEU:O	0.51	2.58	16	2
1:A:156:ASN:OD1	1:A:157:ASP:N	0.51	2.43	6	2
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:HB3	0.51	2.41	17	5
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:CG1	0.51	2.59	2	2
1:A:168:CYS:SG	1:A:169:ARG:N	0.51	2.83	4	5
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HD22	0.51	2.35	16	1
1:A:289:TYR:OH	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.05	20	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:C	0.51	2.26	2	1
1:A:161:SER:OG	1:A:191:ILE:CD1	0.51	2.57	17	1
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:CB	0.51	2.57	15	3
1:A:186:ILE:CD1	1:A:186:ILE:C	0.51	2.79	9	6
1:A:155:ALA:CB	1:A:190:GLU:OE1	0.51	2.58	9	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:N	0.51	2.43	19	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:288:SER:C	0.51	2.26	20	1
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:CD1	0.51	2.86	7	1
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HG	0.51	2.41	8	4
1:A:162:ALA:HB3	1:A:198:ILE:CD1	0.51	2.36	18	1
1:A:186:ILE:C	1:A:186:ILE:CD1	0.51	2.79	10	11
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HD11	0.51	2.31	13	1
1:A:186:ILE:HD13	1:A:187:SER:N	0.51	2.21	6	5
1:A:265:SER:HB2	1:A:304:PHE:CZ	0.51	2.41	3	5
1:A:271:GLN:CA	1:A:274:ILE:HG22	0.51	2.36	9	5
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:CG2	0.51	2.92	14	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CG	0.51	2.59	13	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CD2	0.51	2.94	19	1
1:A:284:THR:HG23	1:A:285:ILE:N	0.51	2.20	6	2
1:A:134:ILE:CG2	1:A:168:CYS:SG	0.51	2.98	14	5
1:A:293:TYR:HB2	1:A:296:ALA:O	0.51	2.06	8	14
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:CG2	0.51	2.35	16	10
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HD13	0.51	1.82	5	1
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HB2	0.51	1.81	1	1
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:VAL:CG1	0.51	2.59	1	1
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:CG	0.51	2.58	11	3
1:A:212:GLY:O	1:A:218:PHE:CZ	0.51	2.64	20	2
1:A:124:MET:CE	1:A:164:LEU:HD12	0.51	2.35	4	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:HB3	0.51	2.36	2	1
1:A:293:TYR:CE1	1:A:296:ALA:N	0.51	2.79	2	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:HG2	0.50	2.41	1	7
1:A:193:ARG:O	1:A:196:LYS:CG	0.50	2.59	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CE1	0.50	2.64	14	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:CD1	0.50	2.89	13	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:HB2	0.50	2.36	12	2
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:CG2	0.50	2.36	20	1
1:A:206:VAL:HG12	1:A:206:VAL:O	0.50	2.06	6	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:CD1	0.50	2.89	15	1
1:A:252:SER:HA	1:A:284:THR:CG2	0.50	2.37	2	14
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CD2	0.50	2.41	6	5
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CE2	0.50	2.64	3	1
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:HB2	0.50	2.41	2	5
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:C	0.50	2.80	6	6
1:A:289:TYR:CE2	1:A:292:ILE:HG21	0.50	2.41	19	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:CB	0.50	2.89	12	2
1:A:238:LYS:CG	1:A:299:LEU:O	0.50	2.59	20	1
1:A:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CE2	0.50	2.99	4	1
1:A:316:LEU:CD1	1:A:316:LEU:OXT	0.50	2.57	4	1
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:HB3	0.50	2.41	18	2
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HG	0.50	2.42	2	7
1:A:272:LYS:CG	1:A:273:GLU:N	0.50	2.73	5	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:CD2	0.50	2.99	6	2
1:A:157:ASP:N	1:A:157:ASP:OD1	0.50	2.43	1	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD12	0.50	2.35	16	1
1:A:169:ARG:NE	1:A:170:GLN:CG	0.50	2.74	6	1
1:A:171:GLU:HB3	1:A:272:LYS:CG	0.50	2.37	15	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:CG1	0.50	2.36	15	2
1:A:265:SER:OG	1:A:304:PHE:CE1	0.50	2.61	15	4
1:A:256:ALA:HB3	1:A:288:SER:OG	0.50	2.06	2	5
1:A:271:GLN:HE22	1:A:285:ILE:HD12	0.50	1.65	8	1
1:A:293:TYR:C	1:A:293:TYR:CD1	0.50	2.85	8	3
1:A:211:THR:HG23	1:A:212:GLY:N	0.50	2.21	12	2
1:A:168:CYS:C	1:A:173:VAL:CG2	0.50	2.79	16	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CD1	0.50	2.41	16	1
1:A:267:GLU:OE1	1:A:269:ARG:NH1	0.50	2.45	20	1
1:A:293:TYR:CE1	1:A:314:PRO:HB2	0.50	2.41	4	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:251:ILE:CG2	0.50	2.57	15	1
1:A:260:MET:HG3	1:A:289:TYR:CZ	0.50	2.42	8	2
1:A:193:ARG:HG3	1:A:194:CYS:N	0.50	2.22	17	3
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CE2	0.50	2.42	19	1
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:HB	0.50	2.37	6	2
1:A:166:ILE:HD13	1:A:166:ILE:N	0.50	2.20	12	3
1:A:283:VAL:CG2	1:A:287:GLN:OE1	0.50	2.60	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:CD2	0.50	2.59	6	1
1:A:259:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD21	0.50	2.41	6	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CG1	0.50	2.36	3	7
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HB2	0.50	2.07	7	16
1:A:269:ARG:HD3	1:A:274:ILE:HD12	0.50	1.82	13	1
1:A:173:VAL:N	1:A:270:THR:HG22	0.50	2.21	16	1
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:CD2	0.50	2.41	10	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HD12	0.50	1.83	4	1
1:A:259:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD11	0.50	2.36	4	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:HB2	0.50	2.42	4	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:ARG:CB	0.50	2.60	18	1
1:A:259:TYR:CG	1:A:274:ILE:HG12	0.50	2.42	19	6
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:HG12	0.50	2.42	7	3
1:A:176:THR:CG2	1:A:263:GLN:OE1	0.50	2.59	7	2
1:A:289:TYR:CE2	1:A:292:ILE:CG2	0.50	2.95	19	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:159:ILE:HG12	0.50	2.37	11	4
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG22	0.50	2.46	10	1
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:HD11	0.50	1.83	6	1
1:A:293:TYR:CD1	1:A:315:GLN:HB2	0.50	2.42	17	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:166:ILE:HG21	0.50	1.84	7	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:282:ASP:OD2	0.50	2.45	7	1
1:A:232:ALA:HA	1:A:261:ALA:HB2	0.50	1.82	8	5
1:A:150:SER:HB3	1:A:197:LEU:HD22	0.50	1.82	6	3
1:A:137:ARG:HB3	1:A:167:ALA:CB	0.50	2.37	18	6
1:A:204:THR:CG2	1:A:206:VAL:CG2	0.50	2.90	3	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:OXT	0.50	2.06	2	2
1:A:300:PHE:N	1:A:300:PHE:CD1	0.50	2.80	14	2
1:A:161:SER:HB3	1:A:191:ILE:HD13	0.50	1.84	11	2
1:A:260:MET:C	1:A:260:MET:CE	0.50	2.80	12	1
1:A:151:LEU:C	1:A:152:LYS:CD	0.50	2.81	2	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:129:ASN:N	0.50	2.45	17	1
1:A:296:ALA:HB1	1:A:312:LYS:HB3	0.50	1.83	15	1
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:HB3	0.50	2.37	5	10
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CZ	0.50	2.42	1	4
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CB	0.50	2.60	6	3
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD2	0.50	2.66	16	3
1:A:169:ARG:NH2	1:A:271:GLN:NE2	0.50	2.59	12	1
1:A:271:GLN:NE2	1:A:282:ASP:OD1	0.50	2.45	6	1
1:A:297:PRO:CG	1:A:313:LEU:HD23	0.50	2.37	6	1
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:HD3	0.50	2.22	6	1
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:CG	0.50	2.60	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:ASP:HB3	1:A:280:VAL:CG2	0.49	2.37	15	2
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:OG1	0.49	2.30	10	7
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:CG	0.49	2.37	3	1
1:A:298:ASP:O	1:A:299:LEU:C	0.49	2.51	10	8
1:A:124:MET:HB3	1:A:164:LEU:HD13	0.49	1.84	1	1
1:A:177:PHE:CE1	1:A:181:CYS:HB2	0.49	2.42	10	6
1:A:221:ASN:OD1	1:A:277:ILE:CD1	0.49	2.60	3	1
1:A:219:CYS:HA	1:A:277:ILE:HG22	0.49	1.84	3	2
1:A:277:ILE:HG22	1:A:277:ILE:O	0.49	2.08	13	1
1:A:177:PHE:CD2	1:A:180:ILE:HD11	0.49	2.41	2	2
1:A:293:TYR:CE1	1:A:295:ARG:C	0.49	2.86	17	3
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:CE	0.49	2.60	19	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:HG21	0.49	2.42	19	1
1:A:256:ALA:HB1	1:A:288:SER:CB	0.49	2.37	11	1
1:A:299:LEU:HD23	1:A:299:LEU:N	0.49	2.22	10	1
1:A:274:ILE:O	1:A:278:ALA:HB2	0.49	2.06	20	1
1:A:235:ILE:HD12	1:A:257:ALA:O	0.49	2.07	15	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HB2	0.49	2.07	13	18
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HB3	0.49	2.38	16	5
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CB	0.49	2.37	16	4
1:A:245:VAL:CG2	1:A:245:VAL:O	0.49	2.57	5	3
1:A:275:GLY:HA3	1:A:285:ILE:CD1	0.49	2.36	14	2
1:A:206:VAL:CG2	1:A:282:ASP:OD1	0.49	2.60	14	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:304:PHE:HB2	0.49	2.43	14	1
1:A:260:MET:CE	1:A:264:ALA:HB2	0.49	2.38	13	2
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:CG	0.49	2.59	19	1
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:HB2	0.49	2.42	4	3
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:CG1	0.49	2.37	11	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:HB	0.49	2.08	18	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:264:ALA:HB2	0.49	1.84	13	1
1:A:297:PRO:HG3	1:A:313:LEU:CB	0.49	2.37	16	3
1:A:114:MET:HG3	1:A:146:TYR:CD2	0.49	2.43	9	3
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:CG2	0.49	2.81	8	7
1:A:148:GLN:OE1	1:A:148:GLN:CA	0.49	2.59	3	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:306:PHE:CE1	0.49	3.01	5	1
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:CA	0.49	2.37	9	3
1:A:166:ILE:CG1	1:A:199:LEU:HD21	0.49	2.37	4	3
1:A:228:VAL:CG2	1:A:265:SER:HB3	0.49	2.37	10	4
1:A:208:LEU:O	1:A:208:LEU:HD12	0.49	2.08	19	1
1:A:245:VAL:CB	1:A:246:PRO:CD	0.49	2.91	12	1
1:A:191:ILE:HA	1:A:194:CYS:HG	0.49	1.66	13	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:TYR:CE2	1:A:315:GLN:N	0.49	2.80	2	2
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:HB2	0.49	1.83	14	2
1:A:155:ALA:HB1	1:A:158:ALA:CB	0.49	2.37	20	5
1:A:263:GLN:HE21	1:A:313:LEU:HD21	0.49	1.66	1	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:CE	0.49	2.37	11	1
1:A:284:THR:CG2	1:A:285:ILE:N	0.49	2.76	6	2
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:CA	0.49	2.58	10	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CD2	0.49	2.42	20	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:292:ILE:HD12	0.49	1.85	6	1
1:A:265:SER:HB2	1:A:304:PHE:CE1	0.49	2.43	3	4
1:A:214:PHE:CE2	1:A:251:ILE:CG1	0.49	2.96	3	1
1:A:158:ALA:CA	1:A:191:ILE:HG12	0.49	2.38	5	1
1:A:260:MET:CE	1:A:297:PRO:HB3	0.49	2.38	8	5
1:A:235:ILE:HG21	1:A:289:TYR:HH	0.49	1.67	8	2
1:A:240:VAL:HG13	1:A:241:GLU:N	0.49	2.23	11	2
1:A:114:MET:N	1:A:146:TYR:OH	0.49	2.45	14	1
1:A:238:LYS:CD	1:A:299:LEU:O	0.49	2.60	20	2
1:A:202:LEU:CD1	1:A:202:LEU:O	0.49	2.57	4	1
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:CD	0.49	2.81	2	1
1:A:118:PHE:O	1:A:122:THR:HG23	0.49	2.08	6	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:CG2	0.49	2.34	17	1
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG21	0.49	2.48	17	1
1:A:312:LYS:C	1:A:314:PRO:CD	0.49	2.81	11	2
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:SD	0.49	2.98	18	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:251:ILE:CG2	0.49	2.38	14	3
1:A:275:GLY:HA2	1:A:285:ILE:CD1	0.49	2.38	19	1
1:A:223:CYS:CB	1:A:269:ARG:NH1	0.49	2.75	16	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:203:GLU:O	0.49	2.45	20	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:163:CYS:HB3	0.49	1.84	4	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:CD1	0.49	2.38	6	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CD2	0.49	2.42	17	1
1:A:301:PRO:O	1:A:302:THR:OG1	0.49	2.30	1	7
1:A:128:ILE:HD11	1:A:180:ILE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:165:TYR:CZ	1:A:177:PHE:HB2	0.49	2.43	11	3
1:A:306:PHE:CE2	1:A:311:ASP:HA	0.49	2.43	7	4
1:A:218:PHE:HD1	1:A:277:ILE:HG22	0.49	1.59	12	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD11	0.49	1.84	12	1
1:A:142:PHE:CD1	1:A:160:ALA:HB2	0.49	2.43	4	1
1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:OE1	0.49	2.61	2	1
1:A:204:THR:HG23	1:A:205:SER:N	0.49	2.22	6	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:HA	0.49	2.38	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:SER:O	1:A:267:GLU:N	0.48	2.46	19	10
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD12	0.48	2.38	18	1
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HB2	0.48	2.08	3	8
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CD1	0.48	2.43	2	7
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:HG21	0.48	1.82	17	2
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:CD1	0.48	2.37	5	1
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:CB	0.48	2.38	16	4
1:A:161:SER:HB2	1:A:191:ILE:HD13	0.48	1.85	8	2
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:C	0.48	2.67	1	1
1:A:199:LEU:O	1:A:203:GLU:N	0.48	2.45	19	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:CB	0.48	2.38	11	2
1:A:124:MET:HE1	1:A:157:ASP:OD1	0.48	2.08	10	1
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:H	0.48	1.64	6	3
1:A:124:MET:CE	1:A:164:LEU:CD1	0.48	2.91	4	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:293:TYR:CE2	1:A:314:PRO:HG2	0.48	2.43	15	1
1:A:297:PRO:HD3	1:A:313:LEU:N	0.48	2.23	2	7
1:A:171:GLU:CA	1:A:272:LYS:HB2	0.48	2.38	3	1
1:A:313:LEU:HG	1:A:313:LEU:O	0.48	2.08	6	2
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:CE1	0.48	2.43	14	1
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:HG2	0.48	2.08	19	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:131:PRO:HD2	0.48	2.38	17	2
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:O	0.48	2.60	6	1
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:CD1	0.48	2.38	15	1
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:CG1	0.48	2.61	3	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:191:ILE:CG1	0.48	2.38	5	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:GLU:N	0.48	2.76	11	2
1:A:210:THR:CA	1:A:280:VAL:HG13	0.48	2.33	1	2
1:A:234:HIS:C	1:A:234:HIS:CD2	0.48	2.86	14	1
1:A:297:PRO:HD3	1:A:313:LEU:O	0.48	2.08	6	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:228:VAL:CG2	0.48	2.36	17	1
1:A:248:ARG:CG	1:A:283:VAL:HG13	0.48	2.38	17	1
1:A:170:GLN:C	1:A:171:GLU:CG	0.48	2.81	15	5
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:HG2	0.48	1.85	18	1
1:A:263:GLN:HE21	1:A:313:LEU:HD11	0.48	1.69	9	1
1:A:293:TYR:N	1:A:294:PRO:HD3	0.48	2.22	12	1
1:A:262:SER:HB3	1:A:274:ILE:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:142:PHE:C	1:A:142:PHE:CD1	0.48	2.86	14	5
1:A:259:TYR:CZ	1:A:271:GLN:HG2	0.48	2.43	7	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HB	0.48	1.86	5	1
1:A:291:LEU:H	1:A:291:LEU:HD23	0.48	1.68	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:VAL:CG2	1:A:265:SER:OG	0.48	2.61	1	2
1:A:143:LYS:CD	1:A:143:LYS:C	0.48	2.82	2	1
1:A:224:LEU:CG	1:A:225:PRO:HD2	0.48	2.38	17	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:HG13	0.48	1.85	15	1
1:A:245:VAL:N	1:A:246:PRO:HD3	0.48	2.24	4	5
1:A:299:LEU:O	1:A:300:PHE:C	0.48	2.52	16	4
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:CG2	0.48	2.61	20	4
1:A:310:VAL:CG2	1:A:311:ASP:N	0.48	2.76	20	2
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:HB2	0.48	2.09	10	5
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:N	0.48	2.81	6	2
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CD1	0.48	2.43	11	2
1:A:114:MET:SD	1:A:146:TYR:CD2	0.48	3.07	6	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:235:ILE:CG1	0.48	2.97	10	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:C	0.48	2.87	6	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:295:ARG:C	0.48	2.87	17	1
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:C	0.48	2.52	15	3
1:A:186:ILE:O	1:A:187:SER:O	0.48	2.32	13	19
1:A:216:SER:O	1:A:229:GLN:NE2	0.48	2.47	18	1
1:A:137:ARG:CB	1:A:167:ALA:CB	0.48	2.92	3	4
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:CB	0.48	2.61	5	2
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:CD2	0.48	2.91	14	2
1:A:289:TYR:HH	1:A:299:LEU:HD23	0.48	1.69	20	1
1:A:232:ALA:CA	1:A:261:ALA:HB2	0.48	2.39	6	5
1:A:272:LYS:HG3	1:A:273:GLU:N	0.48	2.23	12	2
1:A:130:LEU:CD2	1:A:131:PRO:HD2	0.48	2.38	1	1
1:A:273:GLU:N	1:A:273:GLU:OE1	0.48	2.46	1	1
1:A:244:LEU:HD12	1:A:291:LEU:O	0.48	2.08	11	2
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:HB1	0.48	2.38	4	4
1:A:258:ILE:HG22	1:A:269:ARG:HH11	0.48	1.69	10	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HG3	0.48	2.39	15	1
1:A:173:VAL:HG21	1:A:179:GLU:HG3	0.48	1.84	15	1
1:A:310:VAL:O	1:A:312:LYS:N	0.48	2.46	13	14
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HB2	0.48	2.39	8	6
1:A:146:TYR:CD1	1:A:146:TYR:O	0.48	2.67	1	4
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HG	0.48	2.39	12	3
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:OG	0.48	2.32	14	4
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:CG2	0.48	2.39	9	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:CG1	0.48	2.39	16	1
1:A:185:ARG:CD	1:A:185:ARG:O	0.48	2.62	17	1
1:A:222:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG3	0.48	1.86	7	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:HG13	0.48	2.39	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:HE2	1:A:313:LEU:CD1	0.48	2.39	18	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CG2	0.48	2.39	7	2
1:A:224:LEU:CD1	1:A:224:LEU:C	0.48	2.82	3	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HA	0.48	2.39	10	2
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:HB1	0.47	1.86	19	2
1:A:293:TYR:O	1:A:293:TYR:CD1	0.47	2.67	5	1
1:A:225:PRO:CG	1:A:267:GLU:HG2	0.47	2.40	11	3
1:A:173:VAL:HG23	1:A:259:TYR:HH	0.47	1.68	9	1
1:A:218:PHE:HB2	1:A:221:ASN:ND2	0.47	2.24	14	1
1:A:285:ILE:O	1:A:316:LEU:HD11	0.47	2.09	14	1
1:A:213:ASP:CG	1:A:255:ALA:HB2	0.47	2.28	10	2
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:CG2	0.47	2.37	11	2
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD13	0.47	2.38	20	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HB3	0.47	1.86	2	1
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HB2	0.47	2.09	1	8
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:O	0.47	2.32	6	5
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:OD2	0.47	2.09	5	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:CD1	0.47	2.39	1	3
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:HD23	0.47	2.09	19	2
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:HA	0.47	2.39	12	2
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CD1	0.47	2.44	12	1
1:A:269:ARG:NH1	1:A:274:ILE:HD12	0.47	2.24	10	1
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HD21	0.47	1.85	2	1
1:A:260:MET:CE	1:A:316:LEU:CD1	0.47	2.92	17	1
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:HB2	0.47	2.09	11	11
1:A:269:ARG:NH1	1:A:273:GLU:O	0.47	2.48	12	3
1:A:265:SER:HB3	1:A:304:PHE:CZ	0.47	2.45	5	2
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:O	0.47	2.48	1	1
1:A:253:VAL:N	1:A:288:SER:OG	0.47	2.47	14	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:HA	0.47	2.09	13	2
1:A:293:TYR:CE1	1:A:313:LEU:O	0.47	2.67	12	1
1:A:256:ALA:O	1:A:316:LEU:CD1	0.47	2.60	2	2
1:A:313:LEU:O	1:A:315:GLN:OE1	0.47	2.31	17	1
1:A:262:SER:O	1:A:267:GLU:O	0.47	2.32	1	7
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:HD3	0.47	1.86	3	1
1:A:292:ILE:O	1:A:299:LEU:HD11	0.47	2.10	9	1
1:A:248:ARG:CG	1:A:252:SER:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:209:ILE:HD12	1:A:280:VAL:O	0.47	2.10	17	1
1:A:181:CYS:O	1:A:184:SER:O	0.47	2.33	18	17
1:A:209:ILE:O	1:A:211:THR:OG1	0.47	2.33	1	3
1:A:142:PHE:CD2	1:A:159:ILE:CG2	0.47	2.97	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:HIS:ND1	1:A:303:ASP:HB3	0.47	2.25	5	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:OE1	0.47	2.33	16	7
1:A:275:GLY:CA	1:A:285:ILE:HD11	0.47	2.40	14	1
1:A:260:MET:HB3	1:A:289:TYR:CE2	0.47	2.44	10	1
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HH11	0.47	1.69	2	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:278:ALA:O	0.47	2.62	6	1
1:A:210:THR:HG22	1:A:252:SER:OG	0.47	2.09	6	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:315:GLN:O	0.47	2.33	6	1
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:CD1	0.47	2.81	15	3
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:CB	0.47	2.97	18	1
1:A:173:VAL:O	1:A:259:TYR:OH	0.47	2.32	10	10
1:A:264:ALA:HB3	1:A:300:PHE:CE2	0.47	2.45	5	1
1:A:271:GLN:CA	1:A:274:ILE:CG2	0.47	2.92	9	3
1:A:298:ASP:O	1:A:300:PHE:N	0.47	2.48	16	3
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:HG13	0.47	2.10	13	1
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:CD2	0.47	2.94	15	3
1:A:265:SER:O	1:A:266:ALA:C	0.47	2.53	17	15
1:A:225:PRO:CG	1:A:267:GLU:HG3	0.47	2.40	8	8
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:CG	0.47	2.40	18	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:246:PRO:HD2	0.47	2.40	3	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:293:TYR:CE2	0.47	3.03	3	1
1:A:136:ASP:O	1:A:139:ASN:OD1	0.47	2.33	17	4
1:A:292:ILE:HG23	1:A:299:LEU:CD2	0.47	2.40	2	2
1:A:271:GLN:O	1:A:271:GLN:OE1	0.47	2.33	16	3
1:A:174:PRO:CB	1:A:268:LYS:HB2	0.47	2.40	6	3
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:CB	0.47	2.39	1	1
1:A:203:GLU:HG2	1:A:204:THR:N	0.47	2.25	1	1
1:A:232:ALA:HB1	1:A:258:ILE:HA	0.47	1.86	20	3
1:A:177:PHE:CE2	1:A:181:CYS:HB2	0.47	2.44	19	1
1:A:175:ARG:O	1:A:316:LEU:CD2	0.47	2.62	19	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:CG1	0.47	2.98	11	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:HG13	0.47	1.86	16	1
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:HB3	0.47	2.09	16	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:O	0.47	2.09	6	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:CD	0.47	2.92	7	1
1:A:316:LEU:O	1:A:316:LEU:HD23	0.47	2.10	7	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:296:ALA:HA	0.47	2.45	15	1
1:A:248:ARG:O	1:A:249:SER:O	0.47	2.33	2	3
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:HB3	0.47	2.10	10	13
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:CB	0.47	2.62	18	3
1:A:222:LEU:CD2	1:A:277:ILE:HD12	0.47	2.39	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HB2	0.47	2.10	5	5
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:CD2	0.47	2.39	9	4
1:A:166:ILE:HG21	1:A:202:LEU:CD1	0.47	2.40	19	2
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:CD	0.47	2.88	9	1
1:A:262:SER:HB2	1:A:274:ILE:CD1	0.47	2.40	9	1
1:A:114:MET:HB2	1:A:146:TYR:CE2	0.47	2.44	11	8
1:A:122:THR:HA	1:A:135:VAL:HG13	0.47	1.86	11	1
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:HD3	0.47	2.40	10	1
1:A:293:TYR:HB2	1:A:315:GLN:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:209:ILE:CG1	1:A:279:GLY:O	0.47	2.63	7	1
1:A:302:THR:O	1:A:304:PHE:N	0.47	2.48	10	7
1:A:171:GLU:HA	1:A:272:LYS:CB	0.47	2.39	3	1
1:A:121:ILE:HG13	1:A:160:ALA:HB1	0.47	1.86	20	3
1:A:114:MET:HB3	1:A:146:TYR:CE2	0.47	2.45	8	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:HG	0.47	2.40	8	2
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:H	0.47	1.68	16	5
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:SG	0.47	3.01	12	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HE3	0.47	2.40	2	1
1:A:202:LEU:C	1:A:202:LEU:HD12	0.47	2.30	7	1
1:A:124:MET:HA	1:A:183:VAL:CG2	0.47	2.39	4	4
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HG12	0.47	1.87	18	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD23	0.47	2.45	1	2
1:A:165:TYR:CE2	1:A:177:PHE:HB2	0.47	2.45	5	4
1:A:265:SER:HB3	1:A:304:PHE:CE1	0.47	2.45	5	2
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CE1	0.47	2.45	1	1
1:A:114:MET:HA	1:A:146:TYR:CZ	0.47	2.45	14	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HG3	0.47	1.84	14	1
1:A:222:LEU:H	1:A:222:LEU:HD23	0.47	1.63	13	1
1:A:173:VAL:CG1	1:A:180:ILE:HG22	0.47	2.18	19	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:CD2	0.47	2.83	11	1
1:A:138:THR:HG23	1:A:163:CYS:HB2	0.47	1.86	16	2
1:A:212:GLY:O	1:A:278:ALA:O	0.47	2.34	17	4
1:A:249:SER:O	1:A:252:SER:OG	0.47	2.33	20	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:244:LEU:O	0.47	2.63	6	1
1:A:292:ILE:O	1:A:293:TYR:C	0.47	2.52	17	1
1:A:293:TYR:CE2	1:A:296:ALA:HA	0.46	2.44	15	1
1:A:262:SER:CA	1:A:267:GLU:O	0.46	2.63	18	1
1:A:287:GLN:O	1:A:287:GLN:OE1	0.46	2.33	3	2
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:HG3	0.46	2.40	9	6
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HG21	0.46	2.45	16	3
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:CD1	0.46	2.57	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD21	0.46	2.29	1	2
1:A:213:ASP:CB	1:A:251:ILE:HG22	0.46	2.40	14	2
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:CB	0.46	2.92	12	3
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:CG2	0.46	2.63	16	1
1:A:263:GLN:HE21	1:A:316:LEU:HD23	0.46	1.68	4	1
1:A:171:GLU:HG3	1:A:272:LYS:CE	0.46	2.39	2	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HD3	0.46	1.87	2	1
1:A:239:ALA:HB2	1:A:299:LEU:CD2	0.46	2.35	17	2
1:A:260:MET:HE1	1:A:316:LEU:CD1	0.46	2.40	17	1
1:A:297:PRO:O	1:A:314:PRO:HG3	0.46	2.11	15	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CB	0.46	2.63	3	3
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.34	5	3
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:CD2	0.46	3.03	14	2
1:A:235:ILE:O	1:A:239:ALA:HB2	0.46	2.10	13	3
1:A:235:ILE:HG13	1:A:300:PHE:CD2	0.46	2.45	19	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:OG	0.46	2.32	19	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:278:ALA:HA	0.46	2.44	12	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CD	0.46	2.63	2	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CD1	0.46	2.99	17	1
1:A:265:SER:O	1:A:265:SER:OG	0.46	2.33	18	2
1:A:247:GLY:O	1:A:252:SER:OG	0.46	2.33	3	2
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:HB2	0.46	2.11	4	6
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:O	0.46	2.32	11	5
1:A:219:CYS:O	1:A:273:GLU:O	0.46	2.33	11	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:272:LYS:CB	0.46	2.41	12	1
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:N	0.46	2.49	6	2
1:A:199:LEU:HD12	1:A:286:ARG:NH1	0.46	2.24	4	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:HA	0.46	2.45	4	1
1:A:299:LEU:H	1:A:299:LEU:HD13	0.46	1.68	4	1
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:N	0.46	2.48	17	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HB3	0.46	2.10	8	11
1:A:209:ILE:O	1:A:210:THR:C	0.46	2.53	17	10
1:A:175:ARG:O	1:A:176:THR:HB	0.46	2.11	12	19
1:A:174:PRO:HA	1:A:259:TYR:OH	0.46	2.10	18	2
1:A:117:ALA:HB1	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.44	7	2
1:A:310:VAL:CG1	1:A:310:VAL:O	0.46	2.57	17	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HB2	0.46	2.41	15	7
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:N	0.46	2.49	1	18
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:OE1	0.46	2.33	2	2
1:A:199:LEU:CD2	1:A:199:LEU:N	0.46	2.78	17	3
1:A:269:ARG:HA	1:A:269:ARG:NE	0.46	2.25	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CZ	0.46	2.98	11	1
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:SD	0.46	2.74	16	1
1:A:259:TYR:O	1:A:263:GLN:OE1	0.46	2.34	16	1
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:HB2	0.46	1.88	4	1
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:HG3	0.46	2.11	15	1
1:A:190:GLU:O	1:A:194:CYS:SG	0.46	2.74	2	15
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:CG1	0.46	2.59	18	2
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG2	0.46	2.26	18	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:263:GLN:O	0.46	2.49	3	1
1:A:171:GLU:HA	1:A:272:LYS:HB2	0.46	1.88	3	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:159:ILE:CD1	0.46	2.40	8	2
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:HG2	0.46	2.11	4	2
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:OG	0.46	2.10	12	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:159:ILE:HD11	0.46	1.87	4	1
1:A:142:PHE:CD1	1:A:146:TYR:HB2	0.46	2.45	2	1
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:HB3	0.46	2.11	4	14
1:A:207:ASP:HA	1:A:281:ALA:CB	0.46	2.41	6	12
1:A:186:ILE:O	1:A:188:LYS:N	0.46	2.48	5	1
1:A:271:GLN:O	1:A:271:GLN:NE2	0.46	2.48	8	2
1:A:179:GLU:OE1	1:A:179:GLU:O	0.46	2.33	2	2
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:NE	0.46	2.79	19	1
1:A:269:ARG:HB3	1:A:274:ILE:CD1	0.46	2.41	12	1
1:A:223:CYS:O	1:A:267:GLU:OE2	0.46	2.34	16	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:NH2	0.46	2.49	10	1
1:A:247:GLY:O	1:A:249:SER:O	0.46	2.34	20	1
1:A:151:LEU:O	1:A:153:GLY:N	0.46	2.48	2	1
1:A:169:ARG:NE	1:A:170:GLN:HG2	0.46	2.26	6	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:CG	0.46	2.41	6	1
1:A:224:LEU:CD1	1:A:225:PRO:HD2	0.46	2.41	8	6
1:A:130:LEU:CD2	1:A:168:CYS:SG	0.46	3.04	18	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:OG1	0.46	2.10	13	9
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.33	19	2
1:A:164:LEU:O	1:A:168:CYS:SG	0.46	2.74	16	11
1:A:266:ALA:N	1:A:307:ASP:HB3	0.46	2.26	16	5
1:A:178:LYS:O	1:A:181:CYS:SG	0.46	2.74	9	2
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:HD23	0.46	2.11	13	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HG13	0.46	2.46	13	1
1:A:165:TYR:O	1:A:168:CYS:SG	0.46	2.74	11	1
1:A:260:MET:HB3	1:A:316:LEU:O	0.46	2.11	11	1
1:A:179:GLU:O	1:A:179:GLU:OE2	0.46	2.34	10	2
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:CZ	0.46	2.69	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:SD	1:A:263:GLN:OE1	0.46	2.74	2	2
1:A:218:PHE:CD1	1:A:277:ILE:O	0.46	2.69	2	1
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HD23	0.46	2.11	15	2
1:A:169:ARG:HD2	1:A:271:GLN:NE2	0.46	2.25	18	1
1:A:147:GLU:O	1:A:148:GLN:O	0.46	2.34	1	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:254:ALA:HB3	0.46	2.11	19	1
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:CD2	0.46	2.38	11	1
1:A:245:VAL:HA	1:A:292:ILE:HG22	0.46	1.87	12	1
1:A:245:VAL:CB	1:A:246:PRO:HD3	0.46	2.41	12	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HA	0.46	2.40	12	1
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HB2	0.46	2.41	12	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG23	0.46	2.41	20	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:CG	0.46	2.41	6	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.74	6	1
1:A:151:LEU:O	1:A:159:ILE:HD11	0.46	2.11	17	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:VAL:N	0.46	2.26	7	1
1:A:289:TYR:HA	1:A:292:ILE:CG2	0.46	2.41	15	5
1:A:295:ARG:HB2	1:A:295:ARG:CZ	0.46	2.41	15	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:280:VAL:HG23	0.46	1.88	4	3
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:HG3	0.46	2.11	18	3
1:A:235:ILE:CG2	1:A:289:TYR:HH	0.46	2.24	20	2
1:A:312:LYS:O	1:A:313:LEU:C	0.46	2.53	9	6
1:A:114:MET:HG3	1:A:118:PHE:CE2	0.46	2.46	12	1
1:A:128:ILE:HG21	1:A:130:LEU:HD11	0.46	1.88	4	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:CD1	0.46	2.41	4	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:292:ILE:CG1	0.46	2.40	6	1
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:OD1	0.46	2.64	17	1
1:A:289:TYR:CE1	1:A:314:PRO:CB	0.45	2.99	15	1
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:HD2	0.45	1.63	3	1
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:O	0.45	2.74	3	4
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HB	0.45	1.87	5	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:SER:C	0.45	2.53	5	14
1:A:209:ILE:O	1:A:210:THR:OG1	0.45	2.34	5	2
1:A:258:ILE:CG2	1:A:274:ILE:HG13	0.45	2.41	9	1
1:A:197:LEU:CD1	1:A:197:LEU:C	0.45	2.79	16	2
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:HB	0.45	2.11	19	7
1:A:260:MET:O	1:A:260:MET:SD	0.45	2.74	19	1
1:A:260:MET:HG3	1:A:261:ALA:N	0.45	2.24	12	2
1:A:175:ARG:HG2	1:A:263:GLN:CB	0.45	2.41	7	2
1:A:174:PRO:HG2	1:A:268:LYS:CG	0.45	2.40	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD12	0.45	2.11	4	1
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:CG	0.45	2.63	7	2
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:HA	0.45	2.11	9	3
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HB3	0.45	2.11	18	5
1:A:293:TYR:CD1	1:A:293:TYR:C	0.45	2.90	18	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:313:LEU:HD11	0.45	2.45	18	1
1:A:292:ILE:HD12	1:A:299:LEU:HG	0.45	1.87	5	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:N	0.45	2.89	5	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:HD21	0.45	2.51	14	1
1:A:134:ILE:CD1	1:A:171:GLU:HG2	0.45	2.40	11	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HB	0.45	2.41	4	1
1:A:156:ASN:OD1	1:A:157:ASP:OD1	0.45	2.34	6	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HG	0.45	2.27	7	1
1:A:266:ALA:N	1:A:307:ASP:HB2	0.45	2.26	5	7
1:A:247:GLY:O	1:A:252:SER:CB	0.45	2.64	3	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CG2	0.45	2.41	3	1
1:A:308:THR:CG2	1:A:309:PRO:HD2	0.45	2.40	6	4
1:A:224:LEU:HD12	1:A:267:GLU:CD	0.45	2.32	9	1
1:A:175:ARG:CB	1:A:263:GLN:HB3	0.45	2.41	7	4
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:SG	0.45	2.75	16	1
1:A:247:GLY:O	1:A:248:ARG:C	0.45	2.55	20	1
1:A:270:THR:OG1	1:A:273:GLU:HG2	0.45	2.11	20	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HB3	0.45	2.40	6	1
1:A:176:THR:HB	1:A:263:GLN:NE2	0.45	2.25	15	1
1:A:238:LYS:HB2	1:A:299:LEU:O	0.45	2.11	12	5
1:A:175:ARG:CD	1:A:179:GLU:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:179:GLU:OE1	1:A:179:GLU:CA	0.45	2.64	8	1
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:HG2	0.45	2.10	8	2
1:A:148:GLN:OE1	1:A:197:LEU:HD23	0.45	2.12	9	2
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:HB2	0.45	2.42	19	1
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:CD1	0.45	2.99	19	1
1:A:250:PRO:C	1:A:251:ILE:CG1	0.45	2.85	16	7
1:A:222:LEU:CD2	1:A:222:LEU:O	0.45	2.59	12	2
1:A:292:ILE:HG13	1:A:293:TYR:CD2	0.45	2.45	12	1
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:HG22	0.45	2.12	16	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HA	0.45	2.45	7	2
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:CD	0.45	2.65	10	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:163:CYS:SG	0.45	2.98	4	1
1:A:293:TYR:CD2	1:A:315:GLN:CA	0.45	3.00	2	1
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CE2	0.45	2.46	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG13	0.45	1.85	17	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CG	0.45	2.41	17	1
1:A:302:THR:O	1:A:303:ASP:C	0.45	2.54	10	11
1:A:171:GLU:OE1	1:A:272:LYS:CD	0.45	2.65	18	1
1:A:178:LYS:HD2	1:A:314:PRO:CG	0.45	2.41	18	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:O	0.45	2.11	3	2
1:A:260:MET:SD	1:A:260:MET:O	0.45	2.74	14	1
1:A:120:GLU:OE2	1:A:157:ASP:OD1	0.45	2.34	13	1
1:A:188:LYS:HZ1	1:A:191:ILE:HD12	0.45	1.70	19	1
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:OG	0.45	2.34	20	2
1:A:310:VAL:CG1	1:A:311:ASP:N	0.45	2.78	7	2
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HG	0.45	2.41	12	1
1:A:308:THR:HG21	1:A:310:VAL:HG13	0.45	1.83	12	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:CG2	0.45	2.38	17	1
1:A:252:SER:OG	1:A:284:THR:HA	0.45	2.12	15	1
1:A:263:GLN:O	1:A:308:THR:HG21	0.45	2.12	15	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:HB2	0.45	2.11	15	1
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HB3	0.45	2.11	13	2
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HG3	0.45	2.12	18	4
1:A:130:LEU:CD1	1:A:172:GLY:O	0.45	2.57	1	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HB3	0.45	2.11	6	4
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:OG1	0.45	2.55	13	1
1:A:248:ARG:HG2	1:A:284:THR:CB	0.45	2.42	13	1
1:A:257:ALA:HA	1:A:260:MET:CG	0.45	2.42	11	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CZ	0.45	2.46	11	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:195:PHE:HA	0.45	2.42	16	1
1:A:252:SER:HA	1:A:280:VAL:CG1	0.45	2.42	20	2
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:CG2	0.45	2.55	4	2
1:A:163:CYS:CA	1:A:166:ILE:HG12	0.45	2.42	12	3
1:A:232:ALA:CB	1:A:258:ILE:HA	0.45	2.42	12	17
1:A:158:ALA:HB1	1:A:191:ILE:HG13	0.45	1.88	5	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HB	0.45	2.12	11	2
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:OG1	0.45	2.12	10	6
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:HB2	0.45	2.12	11	2
1:A:297:PRO:C	1:A:299:LEU:HD12	0.45	2.32	1	1
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:HG3	0.45	2.40	13	1
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:HB3	0.45	1.89	11	2
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CE1	0.45	2.46	2	2
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HG3	0.45	2.12	11	4
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:O	0.45	2.34	16	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:OG	0.45	2.33	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:OE1	0.45	2.33	4	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:292:ILE:HD11	0.45	1.85	17	1
1:A:234:HIS:NE2	1:A:303:ASP:OD1	0.45	2.50	17	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HD3	0.45	1.88	7	1
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:HG2	0.45	2.12	7	6
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:CG2	0.45	2.41	3	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:174:PRO:HD2	0.45	2.40	5	1
1:A:114:MET:CA	1:A:146:TYR:OH	0.45	2.65	14	1
1:A:224:LEU:C	1:A:224:LEU:CD1	0.45	2.84	2	2
1:A:168:CYS:C	1:A:271:GLN:OE1	0.45	2.55	19	1
1:A:222:LEU:N	1:A:273:GLU:OE1	0.45	2.49	11	1
1:A:304:PHE:CD1	1:A:304:PHE:C	0.45	2.90	12	1
1:A:140:ASN:O	1:A:143:LYS:CG	0.45	2.65	4	1
1:A:237:ARG:O	1:A:241:GLU:CB	0.45	2.65	4	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG12	0.45	2.45	7	1
1:A:191:ILE:O	1:A:195:PHE:HB2	0.45	2.12	14	8
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:HG2	0.45	2.41	11	4
1:A:138:THR:N	1:A:167:ALA:HB2	0.45	2.27	3	1
1:A:232:ALA:CB	1:A:261:ALA:HB2	0.45	2.41	4	3
1:A:216:SER:O	1:A:216:SER:OG	0.45	2.33	19	4
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HA	0.45	2.42	6	2
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:CG	0.45	2.84	20	2
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:CG1	0.45	2.42	6	4
1:A:193:ARG:O	1:A:197:LEU:HD12	0.45	2.12	15	2
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:VAL:HG11	0.45	2.12	15	1
1:A:120:GLU:OE1	1:A:160:ALA:CB	0.45	2.64	18	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:C	0.45	2.55	9	7
1:A:138:THR:HG23	1:A:164:LEU:HD22	0.45	1.89	2	3
1:A:179:GLU:O	1:A:179:GLU:OE1	0.45	2.34	8	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:O	0.45	2.33	8	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:293:TYR:N	0.45	2.68	9	1
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:OD2	0.45	2.70	19	1
1:A:310:VAL:HG23	1:A:311:ASP:H	0.45	1.72	12	1
1:A:195:PHE:CD1	1:A:195:PHE:C	0.45	2.90	10	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:316:LEU:HD13	0.44	1.89	15	1
1:A:206:VAL:CG2	1:A:282:ASP:OD2	0.44	2.62	15	1
1:A:134:ILE:HD12	1:A:167:ALA:O	0.44	2.11	3	2
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:N	0.44	2.50	3	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HA	0.44	1.89	5	3
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HD12	0.44	1.89	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HD11	0.44	2.12	2	1
1:A:269:ARG:NE	1:A:274:ILE:HD12	0.44	2.27	17	1
1:A:285:ILE:CG2	1:A:316:LEU:HD21	0.44	2.39	15	2
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:HB	0.44	2.12	13	8
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.42	18	1
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:CD1	0.44	2.42	5	2
1:A:169:ARG:NH1	1:A:170:GLN:OE1	0.44	2.50	5	1
1:A:292:ILE:CD1	1:A:299:LEU:HG	0.44	2.43	5	1
1:A:209:ILE:CD1	1:A:209:ILE:N	0.44	2.79	8	1
1:A:269:ARG:CB	1:A:274:ILE:HD12	0.44	2.43	9	1
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:CD	0.44	2.65	1	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:SD	0.44	2.75	6	3
1:A:176:THR:OG1	1:A:315:GLN:O	0.44	2.33	4	2
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:HD12	0.44	1.89	19	1
1:A:230:MET:HG3	1:A:234:HIS:NE2	0.44	2.27	19	2
1:A:112:ARG:O	1:A:116:ASN:OD1	0.44	2.35	12	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:CB	0.44	2.62	12	1
1:A:171:GLU:OE2	1:A:171:GLU:O	0.44	2.35	2	1
1:A:169:ARG:C	1:A:169:ARG:CD	0.44	2.85	17	1
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:HB3	0.44	2.43	6	2
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:HG23	0.44	2.12	18	5
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:CD1	0.44	2.43	14	14
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HG2	0.44	2.12	3	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:C	0.44	2.56	2	4
1:A:138:THR:CG2	1:A:164:LEU:HG	0.44	2.41	1	1
1:A:231:ALA:CA	1:A:234:HIS:CE1	0.44	3.01	14	1
1:A:197:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG13	0.44	2.41	13	1
1:A:293:TYR:N	1:A:294:PRO:CD	0.44	2.80	12	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:316:LEU:HG	0.44	1.89	16	1
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:HE2	0.44	2.42	10	1
1:A:263:GLN:HE21	1:A:316:LEU:HD12	0.44	1.71	15	1
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:CB	0.44	2.65	2	6
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:O	0.44	2.34	18	2
1:A:174:PRO:C	1:A:259:TYR:OH	0.44	2.56	5	5
1:A:193:ARG:O	1:A:196:LYS:HG2	0.44	2.13	5	1
1:A:177:PHE:CE1	1:A:180:ILE:CD1	0.44	2.86	19	2
1:A:179:GLU:HA	1:A:179:GLU:OE1	0.44	2.13	2	2
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HB3	0.44	2.12	4	7
1:A:178:LYS:CA	1:A:315:GLN:HG3	0.44	2.42	9	1
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:N	0.44	2.49	9	4
1:A:222:LEU:CD2	1:A:269:ARG:NH1	0.44	2.78	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:269:ARG:HD3	1:A:274:ILE:CD1	0.44	2.42	17	3
1:A:252:SER:OG	1:A:284:THR:OG1	0.44	2.34	12	2
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD3	0.44	2.42	7	2
1:A:161:SER:OG	1:A:184:SER:CB	0.44	2.66	11	1
1:A:269:ARG:HG3	1:A:270:THR:N	0.44	2.26	12	1
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.80	6	2
1:A:313:LEU:C	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.77	15	1
1:A:310:VAL:O	1:A:311:ASP:C	0.44	2.56	19	15
1:A:306:PHE:O	1:A:307:ASP:C	0.44	2.56	16	16
1:A:270:THR:O	1:A:271:GLN:C	0.44	2.55	3	4
1:A:219:CYS:HA	1:A:277:ILE:CG2	0.44	2.41	9	3
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:234:HIS:CB	1:A:303:ASP:OD2	0.44	2.65	14	1
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:CD1	0.44	2.42	13	4
1:A:224:LEU:CD1	1:A:269:ARG:HD2	0.44	2.42	10	2
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:CG2	0.44	2.43	11	2
1:A:114:MET:HG3	1:A:118:PHE:CZ	0.44	2.47	6	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HG23	0.44	1.89	17	1
1:A:169:ARG:HG3	1:A:170:GLN:N	0.44	2.27	15	5
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.65	15	2
1:A:259:TYR:CB	1:A:274:ILE:HG12	0.44	2.43	10	10
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:CD1	0.44	2.43	18	10
1:A:118:PHE:O	1:A:122:THR:HG22	0.44	2.13	3	2
1:A:304:PHE:O	1:A:305:LYS:C	0.44	2.55	11	9
1:A:281:ALA:HB1	1:A:283:VAL:HG12	0.44	1.90	3	2
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:C	0.44	2.55	2	5
1:A:273:GLU:OE1	1:A:273:GLU:CA	0.44	2.64	1	1
1:A:193:ARG:HG2	1:A:193:ARG:NH1	0.44	2.28	19	1
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:HB3	0.44	1.88	19	3
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:O	0.44	2.33	19	1
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CG	0.44	2.48	11	1
1:A:289:TYR:CG	1:A:292:ILE:HD11	0.44	2.47	12	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CA	0.44	2.43	10	1
1:A:234:HIS:ND1	1:A:303:ASP:HB2	0.44	2.28	20	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HG12	0.44	1.90	2	1
1:A:150:SER:OG	1:A:150:SER:O	0.44	2.36	7	1
1:A:276:ASP:O	1:A:277:ILE:C	0.44	2.56	18	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:161:SER:OG	1:A:184:SER:OG	0.44	2.33	3	2
1:A:248:ARG:NE	1:A:248:ARG:HA	0.44	2.28	2	2
1:A:220:SER:CB	1:A:224:LEU:HB3	0.44	2.43	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:297:PRO:CB	1:A:300:PHE:CZ	0.44	3.01	9	1
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:HD11	0.44	2.47	14	1
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:HB2	0.44	2.13	17	3
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:CG	0.44	2.43	19	2
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:ASP:H	0.44	1.73	17	5
1:A:166:ILE:O	1:A:167:ALA:C	0.44	2.56	10	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:292:ILE:CB	0.44	2.42	6	2
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:310:VAL:HB	1:A:313:LEU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:116:ASN:O	1:A:120:GLU:OE1	0.44	2.35	17	1
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG12	0.44	2.53	5	1
1:A:209:ILE:CD1	1:A:279:GLY:O	0.44	2.61	8	1
1:A:269:ARG:NE	1:A:269:ARG:HA	0.44	2.28	14	2
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:CD1	0.44	2.43	19	1
1:A:264:ALA:HB3	1:A:304:PHE:CE2	0.44	2.48	19	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:CG1	0.44	2.43	2	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:202:LEU:HD21	0.44	1.88	7	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:N	0.44	2.28	15	4
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:HB3	0.44	2.13	15	2
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CD	0.44	2.56	13	10
1:A:175:ARG:N	1:A:259:TYR:CE1	0.44	2.86	3	2
1:A:213:ASP:HB3	1:A:278:ALA:HB1	0.44	1.89	8	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:C	0.44	2.56	6	3
1:A:238:LYS:HB3	1:A:299:LEU:O	0.44	2.13	10	3
1:A:145:VAL:CG2	1:A:148:GLN:NE2	0.44	2.78	1	1
1:A:120:GLU:OE2	1:A:157:ASP:OD2	0.44	2.35	1	1
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:HG12	0.44	2.12	4	2
1:A:252:SER:CB	1:A:280:VAL:CG1	0.44	2.95	13	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HG13	0.44	2.42	11	2
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.65	11	1
1:A:124:MET:CB	1:A:164:LEU:HG	0.44	2.43	16	2
1:A:148:GLN:O	1:A:149:LYS:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:297:PRO:CB	1:A:300:PHE:CE2	0.44	3.01	20	1
1:A:124:MET:HB2	1:A:183:VAL:HG21	0.44	1.90	4	1
1:A:205:SER:O	1:A:206:VAL:C	0.43	2.57	15	2
1:A:248:ARG:HD3	1:A:283:VAL:CG1	0.43	2.43	15	1
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:HG13	0.43	2.13	5	3
1:A:141:LEU:HB3	1:A:163:CYS:SG	0.43	2.53	6	5
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:CG	0.43	2.57	9	1
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:CG1	0.43	2.43	17	2
1:A:252:SER:HB3	1:A:280:VAL:CG1	0.43	2.43	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:ILE:CG1	1:A:293:TYR:CD2	0.43	3.01	12	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:261:ALA:HA	0.43	1.89	10	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:NE	0.43	2.28	10	1
1:A:249:SER:OG	1:A:250:PRO:HD2	0.43	2.13	20	1
1:A:140:ASN:O	1:A:143:LYS:HG2	0.43	2.12	4	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HB3	0.43	2.43	2	1
1:A:278:ALA:CB	1:A:280:VAL:CG2	0.43	2.96	6	1
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:HG12	0.43	1.89	12	3
1:A:222:LEU:HB2	1:A:273:GLU:CG	0.43	2.43	18	2
1:A:114:MET:CB	1:A:146:TYR:CE2	0.43	3.00	14	2
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:HD12	0.43	1.90	14	2
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HB3	0.43	2.43	13	1
1:A:220:SER:HA	1:A:269:ARG:NH2	0.43	2.28	10	2
1:A:234:HIS:CB	1:A:301:PRO:HG3	0.43	2.43	12	1
1:A:291:LEU:C	1:A:292:ILE:CG2	0.43	2.85	12	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HG	0.43	2.13	16	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:286:ARG:HD2	0.43	2.28	16	1
1:A:114:MET:O	1:A:114:MET:SD	0.43	2.76	10	1
1:A:297:PRO:CA	1:A:299:LEU:HD22	0.43	2.44	4	1
1:A:314:PRO:C	1:A:315:GLN:CG	0.43	2.86	6	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:OD1	0.43	2.71	17	1
1:A:286:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG2	0.43	2.27	7	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.41	15	1
1:A:289:TYR:CE1	1:A:299:LEU:HD23	0.43	2.49	15	1
1:A:193:ARG:O	1:A:194:CYS:C	0.43	2.56	16	4
1:A:141:LEU:HB2	1:A:163:CYS:SG	0.43	2.53	11	3
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:HB2	0.43	2.13	19	13
1:A:120:GLU:OE2	1:A:124:MET:SD	0.43	2.76	18	1
1:A:222:LEU:CG	1:A:273:GLU:HG2	0.43	2.43	18	1
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:HG2	0.43	1.90	3	1
1:A:210:THR:O	1:A:251:ILE:CD1	0.43	2.57	3	1
1:A:289:TYR:O	1:A:291:LEU:N	0.43	2.51	5	2
1:A:203:GLU:C	1:A:204:THR:OG1	0.43	2.57	1	9
1:A:282:ASP:OD1	1:A:282:ASP:O	0.43	2.35	9	1
1:A:220:SER:CB	1:A:224:LEU:HB2	0.43	2.43	19	1
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:CG1	0.43	2.43	11	1
1:A:272:LYS:HA	1:A:276:ASP:CB	0.43	2.42	11	1
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:CD1	0.43	2.64	10	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:CD1	0.43	3.01	10	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:HD3	0.43	2.13	10	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:280:VAL:HG22	0.43	1.89	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HG12	0.43	2.13	15	1
1:A:222:LEU:C	1:A:222:LEU:CD2	0.43	2.87	18	1
1:A:135:VAL:O	1:A:139:ASN:CG	0.43	2.57	3	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HG21	0.43	1.90	3	1
1:A:213:ASP:O	1:A:214:PHE:C	0.43	2.56	16	2
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:HB3	0.43	2.13	5	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:CB	0.43	3.07	5	1
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CD	0.43	2.57	12	2
1:A:142:PHE:CE2	1:A:146:TYR:CD1	0.43	3.06	8	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:HG	0.43	2.44	4	2
1:A:260:MET:CG	1:A:289:TYR:CE1	0.43	3.01	11	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:300:PHE:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:260:MET:CE	1:A:261:ALA:HA	0.43	2.42	10	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD22	0.43	2.42	4	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:299:LEU:CD1	0.43	2.44	15	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:174:PRO:HD2	0.43	1.90	5	1
1:A:216:SER:OG	1:A:216:SER:O	0.43	2.33	5	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:CD1	0.43	2.80	5	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:300:PHE:CE2	0.43	2.47	5	1
1:A:210:THR:HB	1:A:251:ILE:HD13	0.43	1.89	9	1
1:A:264:ALA:O	1:A:307:ASP:N	0.43	2.51	9	1
1:A:177:PHE:CD2	1:A:180:ILE:CG1	0.43	3.02	13	1
1:A:277:ILE:CG2	1:A:277:ILE:O	0.43	2.66	13	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:HB3	0.43	2.49	11	1
1:A:237:ARG:O	1:A:241:GLU:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:CB	0.43	2.41	2	1
1:A:220:SER:HA	1:A:224:LEU:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CG2	0.43	2.43	17	1
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:HB2	0.43	1.91	3	1
1:A:249:SER:HB3	1:A:250:PRO:HD2	0.43	1.90	2	4
1:A:256:ALA:HA	1:A:285:ILE:CG2	0.43	2.40	13	5
1:A:156:ASN:N	1:A:156:ASN:ND2	0.43	2.64	1	1
1:A:240:VAL:HG22	1:A:253:VAL:CB	0.43	2.44	19	1
1:A:205:SER:O	1:A:205:SER:OG	0.43	2.33	16	1
1:A:169:ARG:HA	1:A:173:VAL:CG1	0.43	2.43	4	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.96	15	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG3	0.43	2.27	18	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:272:LYS:CG	0.43	2.67	18	1
1:A:289:TYR:O	1:A:290:ARG:C	0.43	2.56	5	7
1:A:310:VAL:O	1:A:311:ASP:CG	0.43	2.57	19	2
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:OG1	0.43	2.57	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:ARG:HB2	1:A:193:ARG:CZ	0.43	2.44	8	1
1:A:178:LYS:CB	1:A:315:GLN:HG3	0.43	2.44	9	1
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:CD1	0.43	2.97	13	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:120:GLU:CG	1:A:157:ASP:OD2	0.43	2.67	11	1
1:A:244:LEU:HG	1:A:244:LEU:O	0.43	2.12	12	2
1:A:225:PRO:HD3	1:A:267:GLU:OE1	0.43	2.14	20	1
1:A:209:ILE:N	1:A:209:ILE:CD1	0.43	2.80	2	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:CG	0.43	2.97	15	1
1:A:248:ARG:HD3	1:A:283:VAL:CG2	0.43	2.44	15	2
1:A:193:ARG:O	1:A:195:PHE:N	0.43	2.52	16	3
1:A:210:THR:HB	1:A:249:SER:OG	0.43	2.13	3	1
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:CD2	0.43	2.43	19	1
1:A:172:GLY:HA2	1:A:271:GLN:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:240:VAL:O	1:A:241:GLU:C	0.43	2.57	11	1
1:A:169:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD11	0.43	1.90	20	1
1:A:218:PHE:N	1:A:218:PHE:CD1	0.43	2.86	7	2
1:A:213:ASP:CB	1:A:278:ALA:HB1	0.43	2.44	4	1
1:A:222:LEU:N	1:A:222:LEU:CD2	0.43	2.80	2	1
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:OH	0.43	2.73	10	4
1:A:218:PHE:CE2	1:A:277:ILE:HG22	0.43	2.49	18	1
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HG2	0.43	2.13	16	5
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:C	0.43	2.98	9	5
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:CB	0.43	2.66	14	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:304:PHE:CB	0.43	3.01	14	1
1:A:177:PHE:O	1:A:178:LYS:C	0.43	2.57	4	3
1:A:289:TYR:OH	1:A:297:PRO:HB3	0.43	2.14	6	2
1:A:209:ILE:HD13	1:A:209:ILE:N	0.43	2.28	10	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:HB2	0.43	2.14	20	2
1:A:151:LEU:HD22	1:A:151:LEU:N	0.43	2.28	6	1
1:A:295:ARG:CZ	1:A:295:ARG:CB	0.43	2.96	15	1
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HB2	0.43	2.13	18	3
1:A:151:LEU:HB3	1:A:159:ILE:CD1	0.43	2.44	3	2
1:A:206:VAL:O	1:A:206:VAL:HG12	0.43	2.14	3	2
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:HB3	0.43	2.44	9	3
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:HD3	0.43	2.14	13	8
1:A:210:THR:HG21	1:A:249:SER:OG	0.43	2.13	9	1
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HG3	0.43	2.13	1	3
1:A:174:PRO:O	1:A:175:ARG:HB2	0.43	2.14	11	3
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:OH	0.43	2.14	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:TYR:OH	1:A:169:ARG:NE	0.43	2.52	12	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:225:PRO:HD2	0.43	2.44	12	1
1:A:260:MET:CB	1:A:316:LEU:HA	0.43	2.44	12	1
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:NE2	0.43	2.52	10	1
1:A:174:PRO:HB3	1:A:270:THR:N	0.43	2.28	10	2
1:A:186:ILE:HD13	1:A:187:SER:HB2	0.43	1.91	20	1
1:A:289:TYR:CZ	1:A:315:GLN:HG3	0.43	2.49	17	1
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:HB2	0.42	2.14	18	3
1:A:248:ARG:N	1:A:248:ARG:HD2	0.42	2.29	18	2
1:A:245:VAL:HG22	1:A:246:PRO:HD2	0.42	1.89	3	1
1:A:259:TYR:HD2	1:A:316:LEU:HD23	0.42	1.74	5	1
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:HD3	0.42	2.13	1	1
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:HG2	0.42	2.14	11	1
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:HG2	0.42	2.14	12	1
1:A:272:LYS:HG2	1:A:276:ASP:CB	0.42	2.44	16	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CB	0.42	2.66	20	1
1:A:247:GLY:HA2	1:A:284:THR:OG1	0.42	2.13	20	1
1:A:124:MET:HE1	1:A:164:LEU:CD1	0.42	2.44	4	1
1:A:124:MET:C	1:A:124:MET:SD	0.42	2.97	4	1
1:A:252:SER:CA	1:A:284:THR:CG2	0.42	2.97	4	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:CA	0.42	2.97	6	1
1:A:180:ILE:HG13	1:A:181:CYS:N	0.42	2.29	15	1
1:A:187:SER:OG	1:A:187:SER:O	0.42	2.37	15	1
1:A:294:PRO:HD2	1:A:297:PRO:HG3	0.42	1.90	15	1
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:HB2	0.42	2.14	18	1
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:CG	0.42	2.67	3	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:173:VAL:HB	0.42	2.44	5	1
1:A:171:GLU:O	1:A:171:GLU:CD	0.42	2.57	8	1
1:A:228:VAL:HG11	1:A:262:SER:CA	0.42	2.44	8	1
1:A:145:VAL:CG1	1:A:148:GLN:NE2	0.42	2.81	9	1
1:A:200:LYS:HG3	1:A:201:ALA:N	0.42	2.29	1	1
1:A:139:ASN:C	1:A:139:ASN:OD1	0.42	2.57	14	2
1:A:141:LEU:HB3	1:A:198:ILE:CG2	0.42	2.44	14	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:LYS:C	0.42	2.57	12	3
1:A:214:PHE:O	1:A:215:MET:C	0.42	2.57	13	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HG2	0.42	2.14	13	1
1:A:120:GLU:CD	1:A:157:ASP:OD2	0.42	2.57	19	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.44	16	1
1:A:175:ARG:CG	1:A:263:GLN:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:174:PRO:CB	1:A:268:LYS:HB3	0.42	2.44	4	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:267:GLU:CB	0.42	2.43	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:CG1	0.42	2.44	15	2
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HB3	0.42	2.43	15	1
1:A:278:ALA:O	1:A:279:GLY:C	0.42	2.56	18	6
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:151:LEU:CG	1:A:159:ILE:HD11	0.42	2.44	8	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:C	0.42	2.57	8	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CD	0.42	2.57	8	1
1:A:234:HIS:HB3	1:A:301:PRO:CD	0.42	2.44	1	4
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:O	0.42	2.77	9	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.44	9	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:PRO:CD	0.42	2.44	1	1
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:ND1	0.42	2.30	2	3
1:A:188:LYS:CE	1:A:191:ILE:HD12	0.42	2.44	19	1
1:A:169:ARG:HA	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.15	19	1
1:A:245:VAL:HA	1:A:291:LEU:CD1	0.42	2.45	11	1
1:A:292:ILE:HG12	1:A:299:LEU:CD2	0.42	2.41	11	2
1:A:199:LEU:HD23	1:A:286:ARG:HD3	0.42	1.91	12	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CD1	0.42	2.66	16	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CA	0.42	3.02	16	2
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:O	0.42	2.37	10	1
1:A:219:CYS:SG	1:A:258:ILE:HG21	0.42	2.54	2	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HB	0.42	1.91	6	1
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD21	0.42	1.91	5	1
1:A:297:PRO:O	1:A:298:ASP:C	0.42	2.57	6	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:172:GLY:CA	0.42	2.45	19	1
1:A:225:PRO:HG2	1:A:228:VAL:HG23	0.42	1.90	19	1
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:HB3	0.42	2.13	11	2
1:A:259:TYR:OH	1:A:271:GLN:CA	0.42	2.67	11	1
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:HB3	0.42	2.15	20	2
1:A:139:ASN:OD1	1:A:139:ASN:C	0.42	2.57	2	1
1:A:209:ILE:C	1:A:210:THR:OG1	0.42	2.57	2	1
1:A:222:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD2	0.42	2.39	2	1
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:HG23	0.42	2.34	2	1
1:A:297:PRO:CA	1:A:299:LEU:HD12	0.42	2.44	2	2
1:A:167:ALA:O	1:A:171:GLU:HB2	0.42	2.15	6	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:173:VAL:O	0.42	2.68	7	1
1:A:209:ILE:HB	1:A:279:GLY:O	0.42	2.14	3	3
1:A:234:HIS:HB3	1:A:301:PRO:CG	0.42	2.45	3	2
1:A:207:ASP:N	1:A:281:ALA:HB1	0.42	2.29	9	1
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:HG3	0.42	2.14	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HG3	0.42	2.44	16	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ILE:HD12	0.42	2.14	16	1
1:A:164:LEU:HD22	1:A:164:LEU:N	0.42	2.29	10	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:HB3	0.42	2.14	6	2
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HG2	0.42	2.14	6	1
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:CD1	0.42	2.45	17	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:OXT	0.42	2.68	3	1
1:A:176:THR:HA	1:A:259:TYR:CE2	0.42	2.48	3	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:177:PHE:N	0.42	2.52	3	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG12	0.42	2.15	3	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HB2	0.42	2.13	14	4
1:A:303:ASP:O	1:A:304:PHE:C	0.42	2.58	8	2
1:A:145:VAL:HG22	1:A:151:LEU:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:128:ILE:O	1:A:129:ASN:HB2	0.42	2.14	10	2
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CA	0.42	2.45	12	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:316:LEU:CD2	0.42	3.03	16	1
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HG	0.42	2.15	10	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CG	0.42	3.08	4	1
1:A:262:SER:OG	1:A:267:GLU:O	0.42	2.34	17	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HG2	0.42	2.43	7	1
1:A:215:MET:N	1:A:215:MET:SD	0.42	2.93	18	1
1:A:297:PRO:CD	1:A:313:LEU:N	0.42	2.83	18	3
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:HA	0.42	2.43	18	3
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HB3	0.42	2.14	4	3
1:A:175:ARG:C	1:A:259:TYR:CZ	0.42	2.93	3	1
1:A:221:ASN:C	1:A:221:ASN:OD1	0.42	2.57	3	1
1:A:177:PHE:O	1:A:180:ILE:HG13	0.42	2.15	9	5
1:A:277:ILE:O	1:A:278:ALA:C	0.42	2.57	9	2
1:A:259:TYR:O	1:A:316:LEU:CD2	0.42	2.68	9	1
1:A:275:GLY:HA2	1:A:285:ILE:HD11	0.42	1.90	14	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG13	0.42	2.15	13	2
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:C	0.42	2.57	13	1
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:HB3	0.42	1.91	12	1
1:A:130:LEU:CG	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.45	16	1
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:HD22	0.42	1.91	16	1
1:A:259:TYR:CA	1:A:274:ILE:HG12	0.42	2.45	16	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:297:PRO:HB3	0.42	2.50	16	1
1:A:222:LEU:C	1:A:223:CYS:SG	0.42	2.98	4	2
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HA	0.42	2.15	4	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:HG2	0.42	2.14	2	1
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:HD3	0.42	2.15	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HB3	0.42	2.15	6	1
1:A:169:ARG:O	1:A:170:GLN:C	0.42	2.57	18	1
1:A:221:ASN:ND2	1:A:277:ILE:HD13	0.42	2.30	3	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:HB3	0.42	2.14	20	3
1:A:269:ARG:CB	1:A:274:ILE:CD1	0.42	2.98	9	1
1:A:252:SER:C	1:A:288:SER:OG	0.42	2.57	14	1
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HD2	0.42	2.15	14	1
1:A:292:ILE:HG13	1:A:292:ILE:O	0.42	2.15	10	2
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CG1	0.42	2.68	6	4
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:HD23	0.42	2.13	11	1
1:A:162:ALA:O	1:A:166:ILE:HG12	0.42	2.15	12	3
1:A:114:MET:HG2	1:A:146:TYR:CE2	0.42	2.50	16	1
1:A:223:CYS:CB	1:A:269:ARG:HD2	0.42	2.44	16	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:OG	0.42	2.14	20	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ILE:HG13	0.42	2.15	6	3
1:A:224:LEU:HD22	1:A:225:PRO:HD2	0.42	1.92	2	2
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:HG13	0.42	1.91	9	1
1:A:121:ILE:CG1	1:A:160:ALA:CB	0.42	2.96	16	2
1:A:292:ILE:HG22	1:A:299:LEU:CD1	0.42	2.36	13	1
1:A:247:GLY:HA2	1:A:287:GLN:NE2	0.42	2.30	19	1
1:A:242:LEU:HB3	1:A:244:LEU:CD2	0.42	2.43	12	1
1:A:164:LEU:HA	1:A:164:LEU:HD13	0.42	1.75	2	2
1:A:291:LEU:O	1:A:291:LEU:HG	0.42	2.15	6	3
1:A:175:ARG:HG2	1:A:263:GLN:HB3	0.42	1.91	7	2
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HG2	0.42	2.15	20	2
1:A:258:ILE:O	1:A:261:ALA:HB3	0.42	2.14	20	1
1:A:299:LEU:CD2	1:A:299:LEU:N	0.42	2.74	20	1
1:A:140:ASN:N	1:A:140:ASN:OD1	0.42	2.52	6	1
1:A:265:SER:C	1:A:307:ASP:HB3	0.42	2.35	6	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:260:MET:N	0.42	2.29	17	1
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:HD22	0.42	2.15	7	1
1:A:295:ARG:CG	1:A:295:ARG:O	0.42	2.68	7	1
1:A:289:TYR:HB3	1:A:316:LEU:O	0.42	2.15	15	1
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:CG2	0.42	2.43	1	3
1:A:292:ILE:CD1	1:A:299:LEU:HD11	0.42	2.44	18	1
1:A:220:SER:OG	1:A:224:LEU:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:HG	0.42	2.15	5	2
1:A:235:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HB2	0.42	2.45	5	1
1:A:193:ARG:NH2	1:A:193:ARG:HB2	0.42	2.30	8	1
1:A:271:GLN:NE2	1:A:285:ILE:HD12	0.42	2.30	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:HG2	0.42	2.15	9	2
1:A:259:TYR:C	1:A:316:LEU:HD21	0.42	2.35	9	1
1:A:266:ALA:HA	1:A:308:THR:OG1	0.42	2.14	11	2
1:A:211:THR:O	1:A:211:THR:HG22	0.42	2.15	11	1
1:A:165:TYR:CZ	1:A:169:ARG:NE	0.42	2.88	12	1
1:A:268:LYS:O	1:A:269:ARG:NH1	0.42	2.52	20	1
1:A:171:GLU:HG3	1:A:272:LYS:CG	0.42	2.45	4	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:267:GLU:OE1	0.42	2.14	2	1
1:A:136:ASP:O	1:A:140:ASN:CG	0.42	2.58	6	1
1:A:222:LEU:CD2	1:A:222:LEU:C	0.42	2.88	7	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:HG23	0.41	2.15	18	1
1:A:210:THR:OG1	1:A:249:SER:OG	0.41	2.35	3	1
1:A:244:LEU:O	1:A:246:PRO:HD3	0.41	2.15	5	2
1:A:272:LYS:HG3	1:A:273:GLU:CG	0.41	2.45	5	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:OG	0.41	2.75	9	1
1:A:178:LYS:N	1:A:315:GLN:HG3	0.41	2.30	9	1
1:A:121:ILE:HG12	1:A:138:THR:HG22	0.41	1.91	1	1
1:A:223:CYS:HB2	1:A:269:ARG:NH2	0.41	2.30	14	1
1:A:248:ARG:HG3	1:A:283:VAL:HG13	0.41	1.92	11	2
1:A:224:LEU:HD21	1:A:228:VAL:CB	0.41	2.35	20	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:HD11	0.41	1.92	4	1
1:A:293:TYR:HB2	1:A:315:GLN:HB2	0.41	1.91	17	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:HG13	0.41	2.50	17	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:CD2	0.41	2.63	15	1
1:A:259:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD11	0.41	2.51	15	1
1:A:139:ASN:OD1	1:A:139:ASN:N	0.41	2.52	3	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:CG2	0.41	2.45	5	1
1:A:300:PHE:CG	1:A:306:PHE:CZ	0.41	3.09	5	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HG3	0.41	1.90	8	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:CG1	0.41	2.45	14	1
1:A:206:VAL:HG23	1:A:282:ASP:OD1	0.41	2.14	14	1
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:248:ARG:N	0.41	2.30	4	1
1:A:312:LYS:HG3	1:A:312:LYS:O	0.41	2.15	4	1
1:A:269:ARG:NH2	1:A:274:ILE:HD12	0.41	2.29	2	1
1:A:258:ILE:HG22	1:A:274:ILE:CG1	0.41	2.43	6	1
1:A:255:ALA:HB2	1:A:278:ALA:HB1	0.41	1.93	6	1
1:A:171:GLU:CD	1:A:171:GLU:O	0.41	2.58	7	2
1:A:246:PRO:HD2	1:A:291:LEU:CD2	0.41	2.45	17	1
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CE2	0.41	3.07	7	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:166:ILE:HB	0.41	2.44	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:HG3	0.41	2.15	6	3
1:A:169:ARG:NH2	1:A:170:GLN:NE2	0.41	2.67	14	1
1:A:297:PRO:CG	1:A:313:LEU:HG	0.41	2.46	14	1
1:A:164:LEU:O	1:A:168:CYS:HB2	0.41	2.15	19	1
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:CE	0.41	2.98	10	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:HB2	0.41	2.14	20	1
1:A:242:LEU:O	1:A:243:ASP:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:273:GLU:OE1	1:A:273:GLU:O	0.41	2.38	17	1
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:HG12	0.41	2.49	5	1
1:A:174:PRO:CA	1:A:269:ARG:O	0.41	2.69	8	2
1:A:291:LEU:HG	1:A:291:LEU:O	0.41	2.16	19	2
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:HG13	0.41	1.92	2	1
1:A:283:VAL:CG2	1:A:287:GLN:NE2	0.41	2.84	6	1
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.64	5	1
1:A:290:ARG:C	1:A:291:LEU:HD23	0.41	2.34	8	1
1:A:277:ILE:O	1:A:279:GLY:N	0.41	2.53	9	1
1:A:292:ILE:O	1:A:293:TYR:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:278:ALA:HA	0.41	2.51	1	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:HD12	0.41	2.46	14	1
1:A:316:LEU:HG	1:A:316:LEU:O	0.41	2.16	13	1
1:A:240:VAL:HG23	1:A:253:VAL:CG1	0.41	2.43	19	1
1:A:149:LYS:O	1:A:150:SER:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:272:LYS:HA	0.41	1.93	12	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HG	0.41	2.51	10	1
1:A:177:PHE:O	1:A:179:GLU:N	0.41	2.54	4	1
1:A:190:GLU:OE1	1:A:190:GLU:HA	0.41	2.15	4	1
1:A:224:LEU:CB	1:A:225:PRO:CD	0.41	2.98	17	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HG3	0.41	1.92	17	1
1:A:145:VAL:CG2	1:A:198:ILE:HG12	0.41	2.45	7	1
1:A:285:ILE:O	1:A:316:LEU:OXT	0.41	2.38	15	1
1:A:296:ALA:N	1:A:297:PRO:HD3	0.41	2.31	15	1
1:A:313:LEU:HA	1:A:315:GLN:OE1	0.41	2.15	15	1
1:A:164:LEU:N	1:A:164:LEU:HD22	0.41	2.30	9	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CG1	0.41	2.45	1	1
1:A:176:THR:HB	1:A:263:GLN:OE1	0.41	2.15	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:CB	0.41	3.03	14	1
1:A:234:HIS:NE2	1:A:304:PHE:HB2	0.41	2.30	14	1
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:HD22	0.41	1.93	19	1
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:HB3	0.41	1.92	19	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:HD11	0.41	2.50	12	1
1:A:175:ARG:HB3	1:A:263:GLN:NE2	0.41	2.30	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:CG	0.41	2.99	4	1
1:A:125:ALA:HB2	1:A:135:VAL:CG2	0.41	2.45	4	1
1:A:242:LEU:HG	1:A:242:LEU:O	0.41	2.15	4	1
1:A:151:LEU:C	1:A:152:LYS:HD2	0.41	2.36	2	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:C	0.41	2.58	15	1
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:CB	0.41	2.43	3	1
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:242:LEU:O	1:A:242:LEU:HG	0.41	2.16	1	1
1:A:210:THR:HB	1:A:252:SER:OG	0.41	2.15	13	1
1:A:248:ARG:HG3	1:A:283:VAL:CG1	0.41	2.45	11	1
1:A:289:TYR:CG	1:A:292:ILE:CD1	0.41	3.04	12	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:300:PHE:CD2	0.41	3.08	10	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:CD2	0.41	2.98	10	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:225:PRO:N	0.41	2.30	20	1
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:CD2	0.41	2.46	4	1
1:A:202:LEU:HD12	1:A:202:LEU:C	0.41	2.35	2	1
1:A:269:ARG:NH2	1:A:274:ILE:CD1	0.41	2.84	2	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:271:GLN:OE1	0.41	2.74	17	1
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:CD	0.41	2.68	17	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:169:ARG:HB2	0.41	2.31	15	1
1:A:262:SER:HB3	1:A:267:GLU:O	0.41	2.15	18	1
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:N	0.41	2.53	18	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:ARG:HB2	0.41	2.15	5	2
1:A:140:ASN:O	1:A:144:GLN:CD	0.41	2.59	3	1
1:A:112:ARG:O	1:A:113:ALA:C	0.41	2.58	5	1
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:HG22	0.41	2.56	9	1
1:A:165:TYR:HA	1:A:168:CYS:HG	0.41	1.76	1	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:199:LEU:HD22	0.41	1.92	1	1
1:A:209:ILE:HD12	1:A:209:ILE:N	0.41	2.30	14	1
1:A:134:ILE:CD1	1:A:171:GLU:HB2	0.41	2.38	11	1
1:A:165:TYR:CD1	1:A:169:ARG:HB3	0.41	2.51	16	1
1:A:193:ARG:C	1:A:195:PHE:N	0.41	2.74	16	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:C	0.41	2.89	20	1
1:A:281:ALA:O	1:A:285:ILE:HG13	0.41	2.16	20	1
1:A:169:ARG:CG	1:A:170:GLN:N	0.41	2.83	4	1
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:CD2	0.41	2.45	4	1
1:A:262:SER:CB	1:A:274:ILE:CD1	0.41	2.99	6	1
1:A:213:ASP:HB2	1:A:278:ALA:O	0.41	2.16	6	1
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:HG11	0.41	1.92	17	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD2	0.41	2.45	17	1
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:CD2	0.41	2.68	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG13	0.41	2.45	15	1
1:A:292:ILE:CG1	1:A:292:ILE:O	0.41	2.69	15	1
1:A:304:PHE:C	1:A:306:PHE:N	0.41	2.74	17	4
1:A:293:TYR:CG	1:A:296:ALA:O	0.41	2.74	3	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:HG23	0.41	2.49	3	1
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:292:ILE:HD12	1:A:299:LEU:HD22	0.41	1.93	8	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:172:GLY:O	0.41	2.16	1	1
1:A:305:LYS:O	1:A:305:LYS:HG3	0.41	2.16	1	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HG3	0.41	2.16	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:HB3	0.41	2.51	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:CG	0.41	3.09	14	1
1:A:260:MET:HA	1:A:263:GLN:NE2	0.41	2.31	13	1
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:CA	0.41	3.04	19	1
1:A:262:SER:OG	1:A:269:ARG:HG2	0.41	2.16	19	1
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:CG	0.41	2.98	12	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:316:LEU:HA	0.41	1.91	12	1
1:A:219:CYS:O	1:A:224:LEU:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:HG12	0.41	1.93	17	2
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:CB	0.41	2.87	10	1
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:CB	0.41	2.45	4	1
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:124:MET:CG	1:A:184:SER:HG	0.41	2.28	2	1
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:CG	0.41	2.94	17	1
1:A:174:PRO:HB2	1:A:268:LYS:HB2	0.41	1.92	17	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HG	0.41	2.16	15	1
1:A:137:ARG:HD2	1:A:137:ARG:N	0.41	2.29	18	1
1:A:262:SER:HB2	1:A:267:GLU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:310:VAL:C	1:A:312:LYS:N	0.41	2.75	14	4
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:HG	0.41	2.16	1	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:146:TYR:CE1	0.41	3.09	14	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:HA	0.41	1.91	19	1
1:A:202:LEU:HG	1:A:202:LEU:O	0.41	2.15	11	1
1:A:271:GLN:HA	1:A:271:GLN:OE1	0.41	2.14	10	1
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:HG	0.41	2.16	20	1
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:CA	0.41	2.46	4	1
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:HG3	0.41	2.16	2	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:HB	0.41	2.15	6	1
1:A:256:ALA:HB1	1:A:288:SER:OG	0.41	2.16	6	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:OD1	0.41	2.15	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:SER:HG	1:A:304:PHE:HZ	0.41	1.51	7	1
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:ILE:CD1	0.40	2.45	15	1
1:A:296:ALA:O	1:A:312:LYS:HG3	0.40	2.16	15	1
1:A:247:GLY:HA3	1:A:287:GLN:NE2	0.40	2.31	18	2
1:A:221:ASN:OD1	1:A:277:ILE:HD13	0.40	2.16	3	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:CA	0.40	2.69	3	1
1:A:300:PHE:O	1:A:300:PHE:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:HB3	0.40	2.16	1	1
1:A:306:PHE:C	1:A:308:THR:N	0.40	2.73	12	2
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:HB2	0.40	2.17	19	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:N	0.40	2.55	19	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:CD1	0.40	2.86	4	1
1:A:235:ILE:HD11	1:A:300:PHE:CE1	0.40	2.51	4	1
1:A:158:ALA:HA	1:A:191:ILE:HG12	0.40	1.94	2	1
1:A:222:LEU:HB2	1:A:273:GLU:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:248:ARG:N	1:A:287:GLN:OE1	0.40	2.53	17	1
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:HA	0.40	1.74	5	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD22	0.40	2.14	8	1
1:A:287:GLN:OE1	1:A:290:ARG:HD3	0.40	2.16	9	1
1:A:174:PRO:HB3	1:A:269:ARG:O	0.40	2.16	1	1
1:A:128:ILE:O	1:A:130:LEU:HD23	0.40	2.16	16	1
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:CD1	0.40	2.44	4	1
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:HD13	0.40	2.31	15	1
1:A:260:MET:N	1:A:316:LEU:HD13	0.40	2.31	15	1
1:A:316:LEU:OXT	1:A:316:LEU:CD2	0.40	2.58	15	1
1:A:222:LEU:HD21	1:A:277:ILE:HD12	0.40	1.92	3	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:316:LEU:N	0.40	2.54	3	1
1:A:225:PRO:HG3	1:A:267:GLU:CD	0.40	2.36	5	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:HA	0.40	2.16	8	1
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:HG13	0.40	1.94	9	2
1:A:297:PRO:C	1:A:299:LEU:N	0.40	2.75	9	1
1:A:124:MET:O	1:A:183:VAL:CG2	0.40	2.57	1	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:225:PRO:HD2	0.40	1.94	13	1
1:A:120:GLU:HG3	1:A:157:ASP:OD2	0.40	2.17	19	1
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:HB	0.40	2.46	19	1
1:A:299:LEU:HD12	1:A:299:LEU:H	0.40	1.76	19	1
1:A:292:ILE:HG12	1:A:292:ILE:O	0.40	2.15	11	1
1:A:149:LYS:CD	1:A:149:LYS:O	0.40	2.69	10	1
1:A:248:ARG:N	1:A:287:GLN:NE2	0.40	2.70	10	1
1:A:234:HIS:HB2	1:A:300:PHE:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:253:VAL:HA	1:A:288:SER:OG	0.40	2.16	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:HA	0.40	2.41	15	1
1:A:308:THR:OG1	1:A:309:PRO:HD2	0.40	2.15	15	1
1:A:121:ILE:HD13	1:A:139:ASN:CA	0.40	2.36	3	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:HB3	0.40	2.57	5	1
1:A:222:LEU:HG	1:A:222:LEU:O	0.40	2.16	5	1
1:A:161:SER:HB2	1:A:191:ILE:CD1	0.40	2.45	8	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:159:ILE:HG12	0.40	2.45	14	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:CG2	0.40	2.45	19	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HG23	0.40	1.92	19	1
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CD1	0.40	2.74	11	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:293:TYR:CE2	0.40	3.09	11	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:HG	0.40	2.57	16	1
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HG2	0.40	2.16	10	1
1:A:251:ILE:CD1	1:A:251:ILE:N	0.40	2.77	10	1
1:A:286:ARG:HG2	1:A:290:ARG:CD	0.40	2.47	10	1
1:A:283:VAL:HG22	1:A:287:GLN:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD23	0.40	1.88	10	1
1:A:190:GLU:HA	1:A:193:ARG:CD	0.40	2.46	20	1
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:176:THR:HB	1:A:260:MET:SD	0.40	2.57	17	1
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:CD2	0.40	3.05	15	1
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:H	0.40	1.75	15	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HD3	0.40	1.93	3	1
1:A:247:GLY:HA3	1:A:284:THR:OG1	0.40	2.16	3	1
1:A:166:ILE:CG2	1:A:202:LEU:CD1	0.40	2.99	8	1
1:A:177:PHE:CE1	1:A:315:GLN:NE2	0.40	2.89	9	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:213:ASP:O	0.40	2.38	1	1
1:A:238:LYS:HE2	1:A:299:LEU:O	0.40	2.15	14	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:HB3	0.40	2.42	14	1
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:CD	0.40	2.69	13	1
1:A:289:TYR:CZ	1:A:292:ILE:HG21	0.40	2.51	19	1
1:A:190:GLU:O	1:A:194:CYS:HB2	0.40	2.17	11	1
1:A:256:ALA:CB	1:A:285:ILE:HA	0.40	2.44	11	1
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD23	0.40	1.89	16	1
1:A:223:CYS:HB2	1:A:269:ARG:NH1	0.40	2.31	16	1
1:A:269:ARG:HA	1:A:269:ARG:CZ	0.40	2.46	16	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:291:LEU:CB	0.40	2.46	10	1
1:A:224:LEU:CB	1:A:225:PRO:HD2	0.40	2.47	17	1
1:A:313:LEU:CD1	1:A:314:PRO:HD2	0.40	2.46	17	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HG	0.40	2.16	17	1
1:A:220:SER:HB2	1:A:224:LEU:CB	0.40	2.47	7	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	204/208 (98%)	152±4 (74±2%)	33±4 (16±2%)	19±3 (9±1%)	2	11
All	All	4080/4160 (98%)	3034 (74%)	665 (16%)	381 (9%)	2	11

All 61 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	187	SER	20
1	A	176	THR	19
1	A	155	ALA	19
1	A	204	THR	17
1	A	295	ARG	17
1	A	171	GLU	17
1	A	312	LYS	17
1	A	203	GLU	17
1	A	209	ILE	16
1	A	296	ALA	14
1	A	280	VAL	14
1	A	301	PRO	13
1	A	185	ARG	13
1	A	223	CYS	12
1	A	206	VAL	11
1	A	207	ASP	9
1	A	154	ARG	9
1	A	302	THR	8
1	A	315	GLN	8
1	A	175	ARG	8
1	A	174	PRO	7
1	A	270	THR	7
1	A	311	ASP	6
1	A	172	GLY	6
1	A	247	GLY	5
1	A	251	ILE	5
1	A	152	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	246	PRO	4
1	A	249	SER	4
1	A	271	GLN	4
1	A	248	ARG	4
1	A	150	SER	3
1	A	148	GLN	3
1	A	266	ALA	3
1	A	304	PHE	3
1	A	306	PHE	2
1	A	243	ASP	2
1	A	292	ILE	2
1	A	153	GLY	2
1	A	281	ALA	2
1	A	297	PRO	2
1	A	310	VAL	2
1	A	112	ARG	2
1	A	244	LEU	1
1	A	205	SER	1
1	A	293	TYR	1
1	A	305	LYS	1
1	A	299	LEU	1
1	A	314	PRO	1
1	A	129	ASN	1
1	A	279	GLY	1
1	A	245	VAL	1
1	A	210	THR	1
1	A	202	LEU	1
1	A	291	LEU	1
1	A	294	PRO	1
1	A	166	ILE	1
1	A	211	THR	1
1	A	208	LEU	1
1	A	131	PRO	1
1	A	303	ASP	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	174/176 (99%)	123±4 (70±2%)	51±4 (30±2%)	2	17
All	All	3480/3520 (99%)	2453 (70%)	1027 (30%)	2	17

All 131 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	249	SER	20
1	A	306	PHE	19
1	A	304	PHE	19
1	A	186	ILE	19
1	A	202	LEU	18
1	A	244	LEU	18
1	A	149	LYS	17
1	A	285	ILE	16
1	A	270	THR	16
1	A	169	ARG	16
1	A	189	LYS	16
1	A	223	CYS	15
1	A	289	TYR	15
1	A	154	ARG	15
1	A	274	ILE	14
1	A	316	LEU	14
1	A	284	THR	14
1	A	312	LYS	14
1	A	268	LYS	13
1	A	290	ARG	13
1	A	315	GLN	13
1	A	214	PHE	13
1	A	218	PHE	13
1	A	269	ARG	13
1	A	217	ARG	13
1	A	178	LYS	13
1	A	115	MET	12
1	A	221	ASN	12
1	A	215	MET	12
1	A	200	LYS	12
1	A	271	GLN	12
1	A	248	ARG	11
1	A	226	LYS	11
1	A	127	ARG	11
1	A	299	LEU	10
1	A	262	SER	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	287	GLN	10
1	A	243	ASP	10
1	A	230	MET	10
1	A	132	ARG	10
1	A	237	ARG	10
1	A	152	LYS	10
1	A	148	GLN	10
1	A	204	THR	10
1	A	137	ARG	10
1	A	180	ILE	10
1	A	185	ARG	9
1	A	205	SER	9
1	A	150	SER	9
1	A	282	ASP	9
1	A	171	GLU	9
1	A	196	LYS	9
1	A	295	ARG	9
1	A	305	LYS	9
1	A	210	THR	9
1	A	265	SER	8
1	A	193	ARG	8
1	A	184	SER	8
1	A	298	ASP	8
1	A	303	ASP	8
1	A	267	GLU	8
1	A	272	LYS	8
1	A	241	GLU	8
1	A	238	LYS	8
1	A	119	LYS	7
1	A	188	LYS	7
1	A	120	GLU	7
1	A	136	ASP	7
1	A	259	TYR	7
1	A	260	MET	7
1	A	114	MET	7
1	A	208	LEU	7
1	A	129	ASN	7
1	A	222	LEU	7
1	A	203	GLU	7
1	A	197	LEU	6
1	A	273	GLU	6
1	A	219	CYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	311	ASP	6
1	A	175	ARG	6
1	A	220	SER	6
1	A	112	ARG	6
1	A	286	ARG	6
1	A	292	ILE	5
1	A	310	VAL	5
1	A	147	GLU	5
1	A	139	ASN	5
1	A	190	GLU	5
1	A	161	SER	5
1	A	224	LEU	5
1	A	211	THR	5
1	A	252	SER	5
1	A	181	CYS	4
1	A	207	ASP	4
1	A	126	ASP	4
1	A	133	ASN	4
1	A	144	GLN	4
1	A	313	LEU	4
1	A	302	THR	4
1	A	179	GLU	4
1	A	143	LYS	4
1	A	216	SER	4
1	A	307	ASP	4
1	A	263	GLN	3
1	A	227	GLN	3
1	A	124	MET	3
1	A	213	ASP	3
1	A	288	SER	3
1	A	157	ASP	3
1	A	291	LEU	3
1	A	229	GLN	2
1	A	276	ASP	2
1	A	187	SER	2
1	A	151	LEU	2
1	A	164	LEU	2
1	A	170	GLN	2
1	A	199	LEU	1
1	A	245	VAL	1
1	A	116	ASN	1
1	A	122	THR	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	258	ILE	1
1	A	293	TYR	1
1	A	176	THR	1
1	A	141	LEU	1
1	A	168	CYS	1
1	A	300	PHE	1
1	A	308	THR	1
1	A	280	VAL	1
1	A	138	THR	1
1	A	251	ILE	1
1	A	173	VAL	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided