



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 06:36 PM UTC

PDB ID : 1EZP / pdb_00001ezp
Title : GLOBAL FOLD OF MALTODEXTRIN BINDING PROTEIN COM-
PLEXED WITH BETA-CYCLODEXTRIN USING PEPTIDE ORIENTA-
TIONS FROM DIPOLAR COUPLINGS
Authors : Mueller, G.A.; Choy, W.Y.; Yang, D.; Forman-Kay, J.D.; Venters, R.A.; Kay,
L.E.
Deposited on : 2000-05-11

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

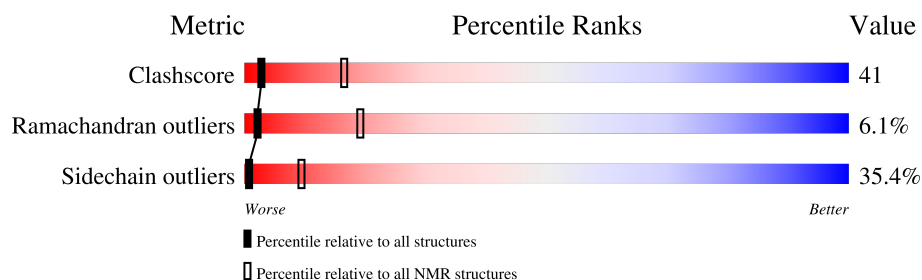
1 Overall quality at a glance

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	370	

2 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:231, A:241-A:370 (358)	1.87	9

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

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

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

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

3 Entry composition

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

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

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

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

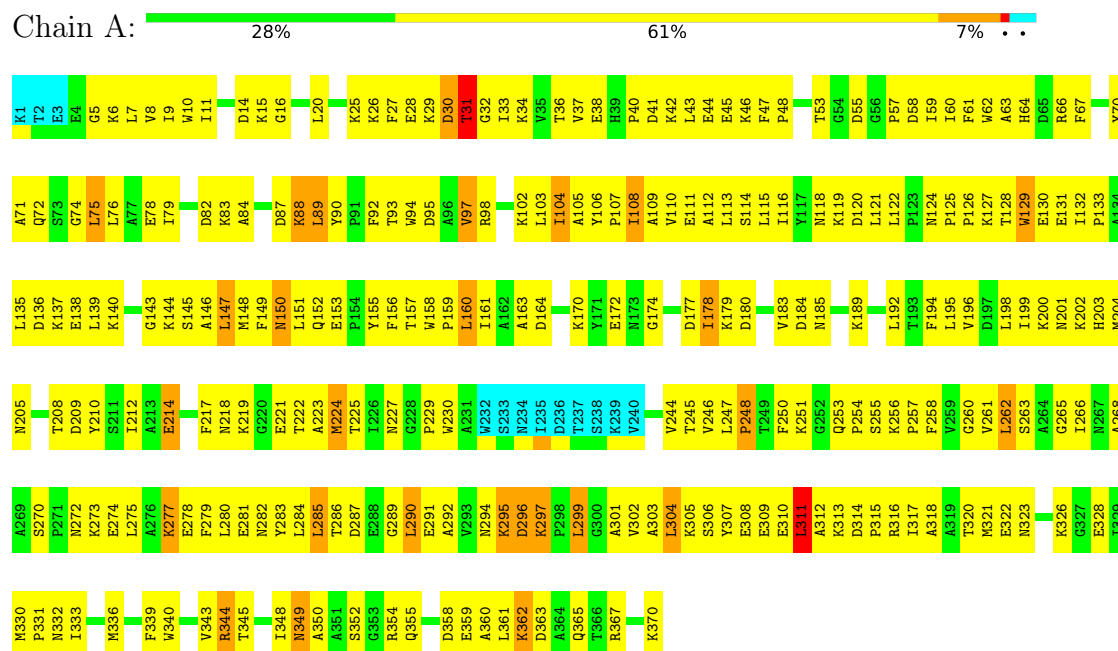
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	engineered mutation	UNP P02928

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

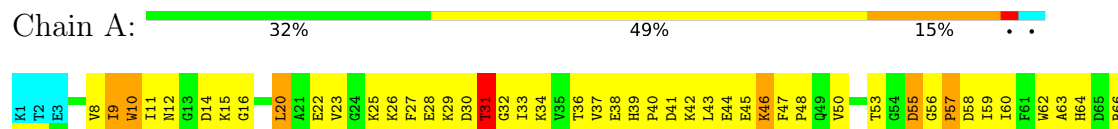


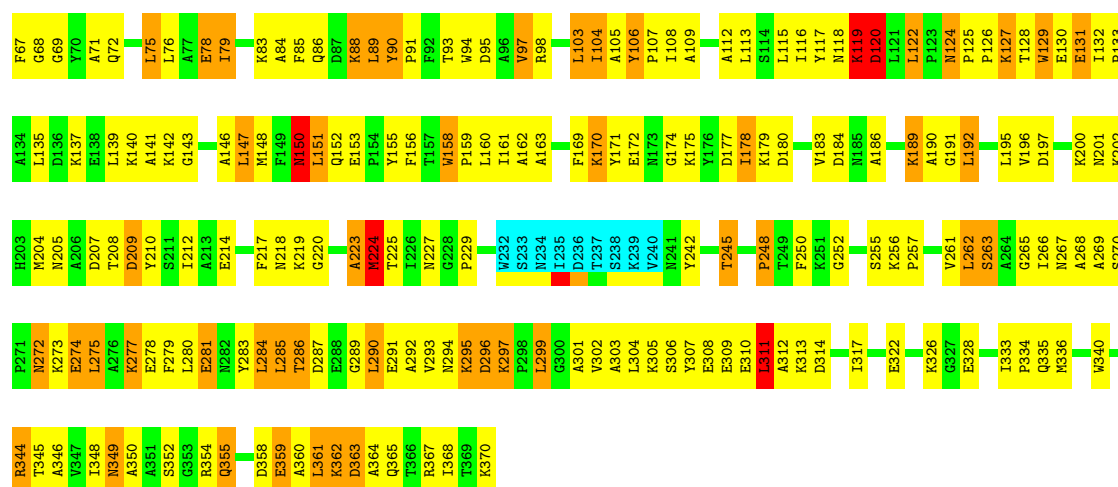
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

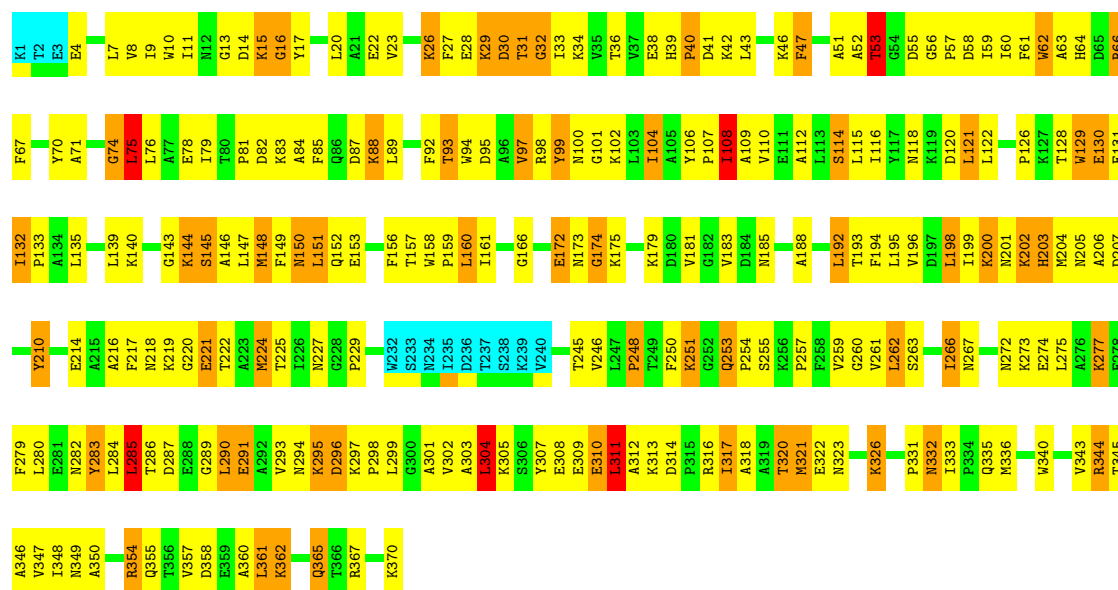




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

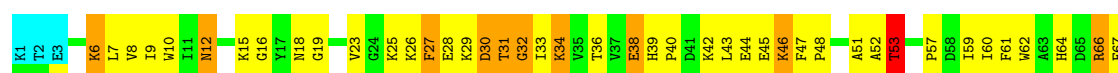
Chain A: 33% 46% 16% . .

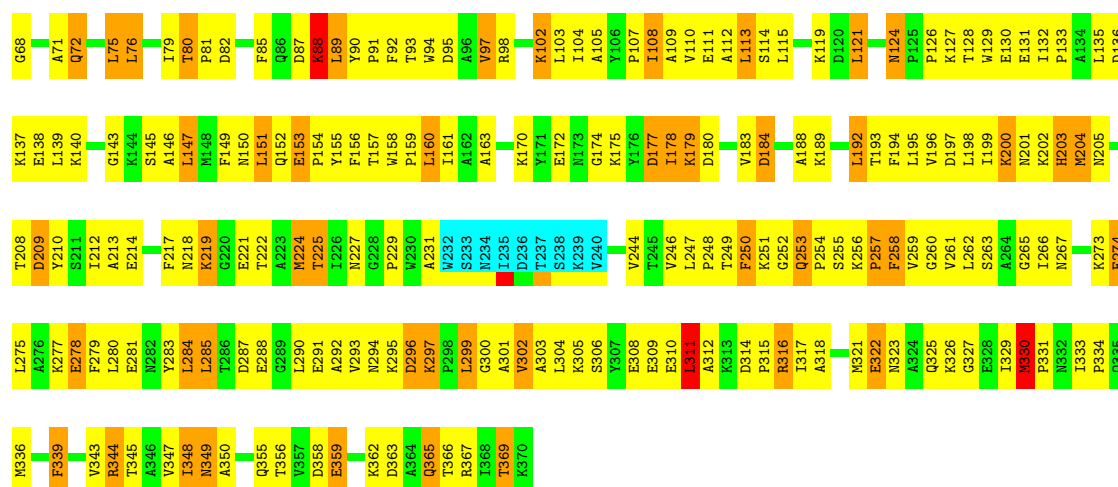


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 31% 49% 16% . .

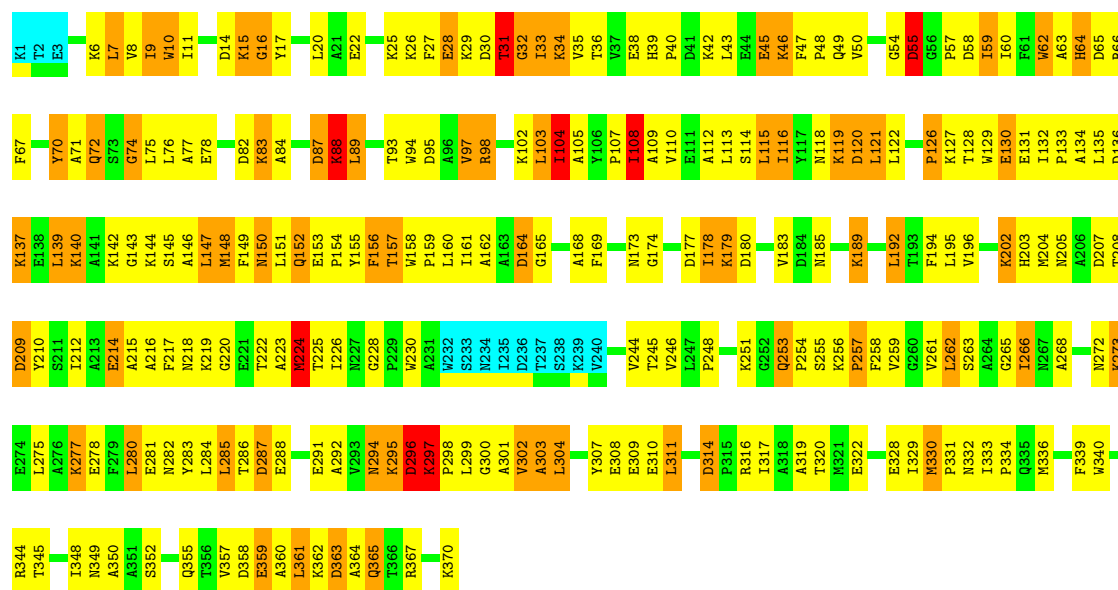




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

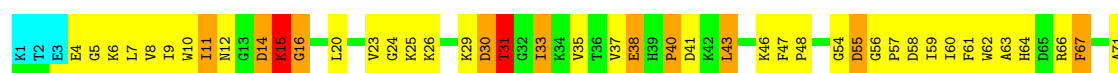
Chain A: 31% 45% 18% . .

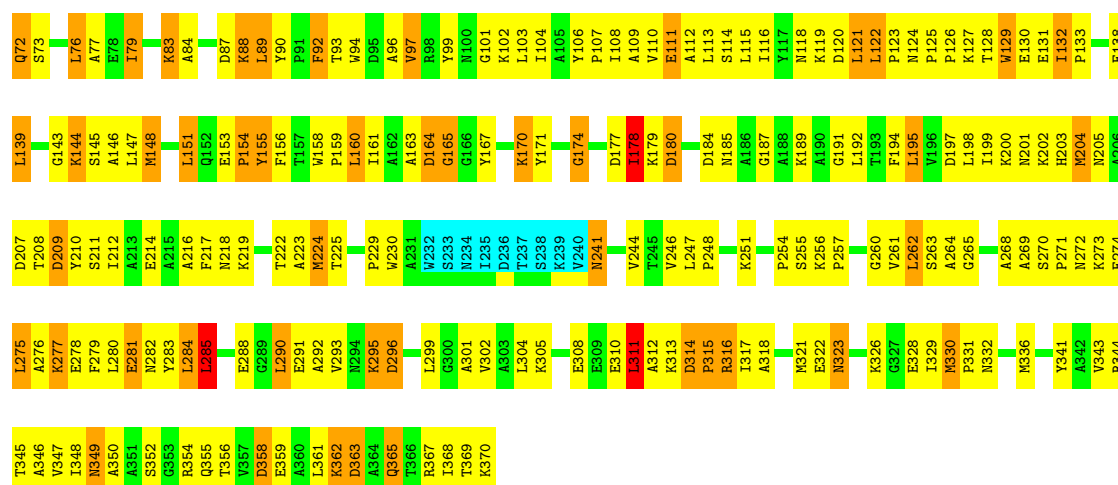


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 31% 49% 16% . .

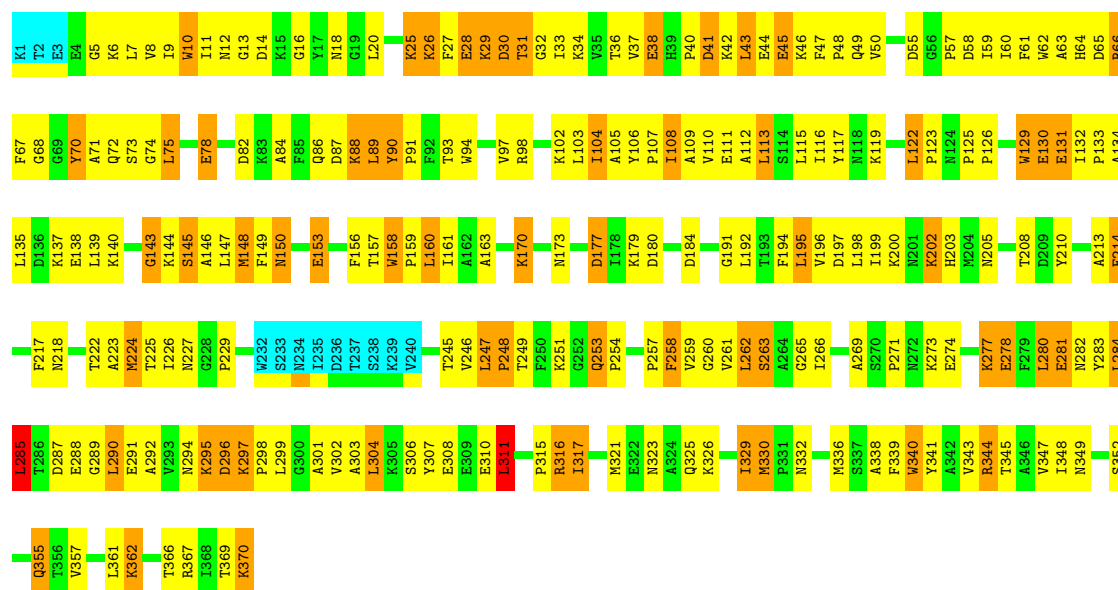




4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

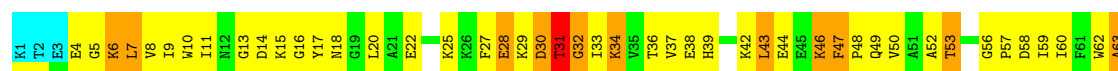
Chain A: 35% 44% 17% ..

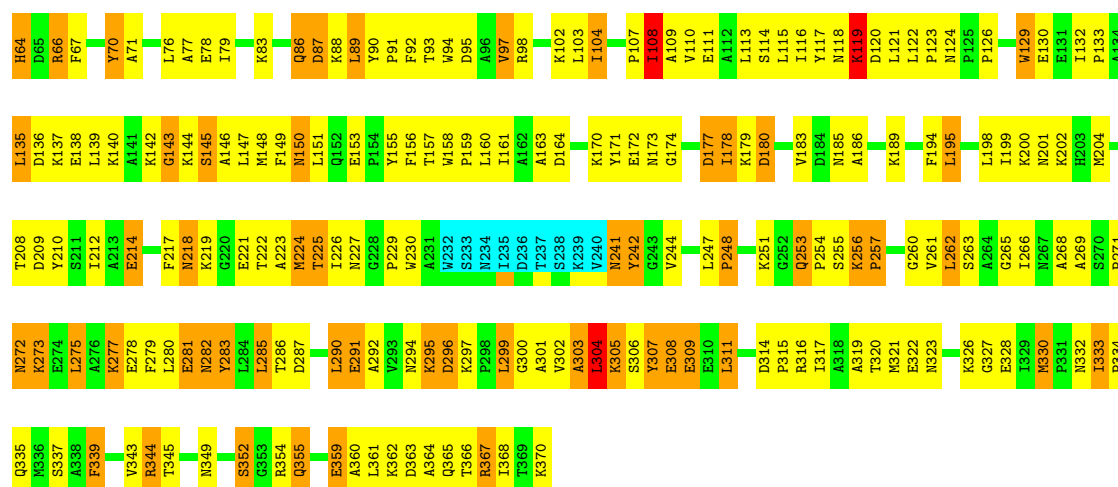


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 30% 48% 18% ..

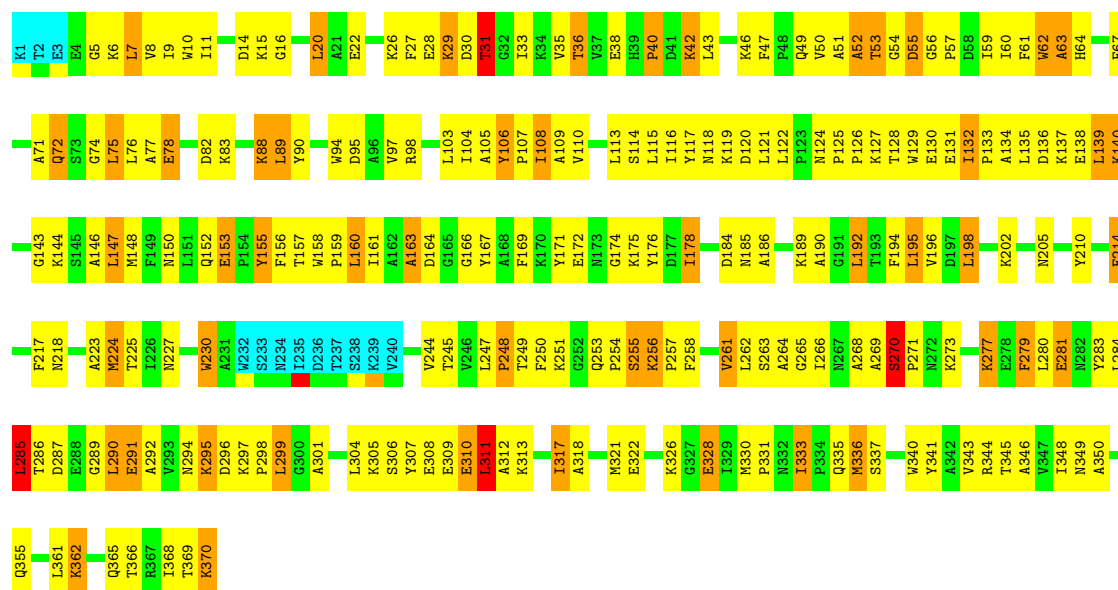




4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

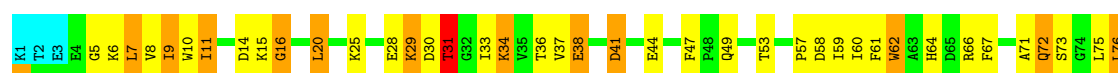
Chain A: 36% 46% 14% . .

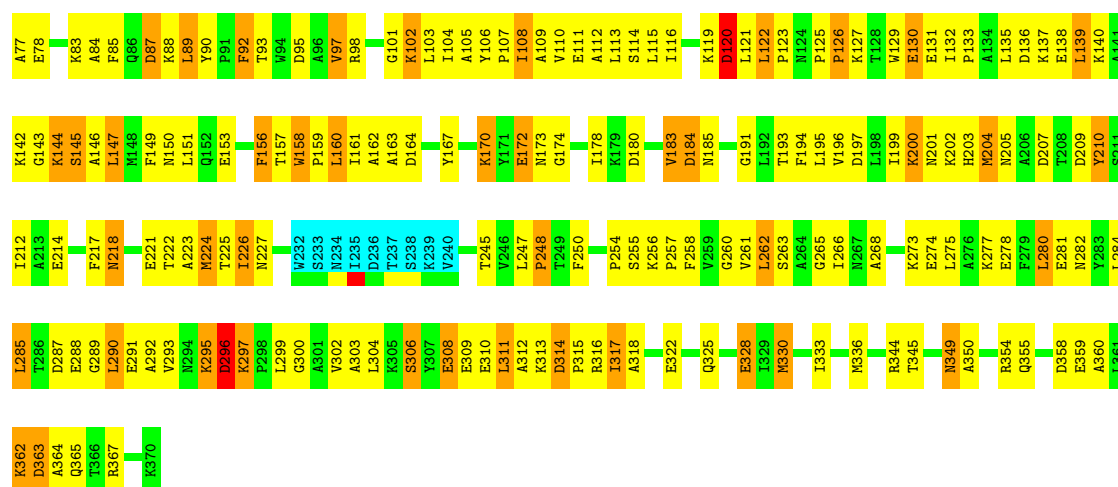


4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

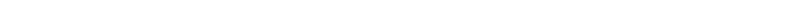
Chain A: 38% 43% 15% . .

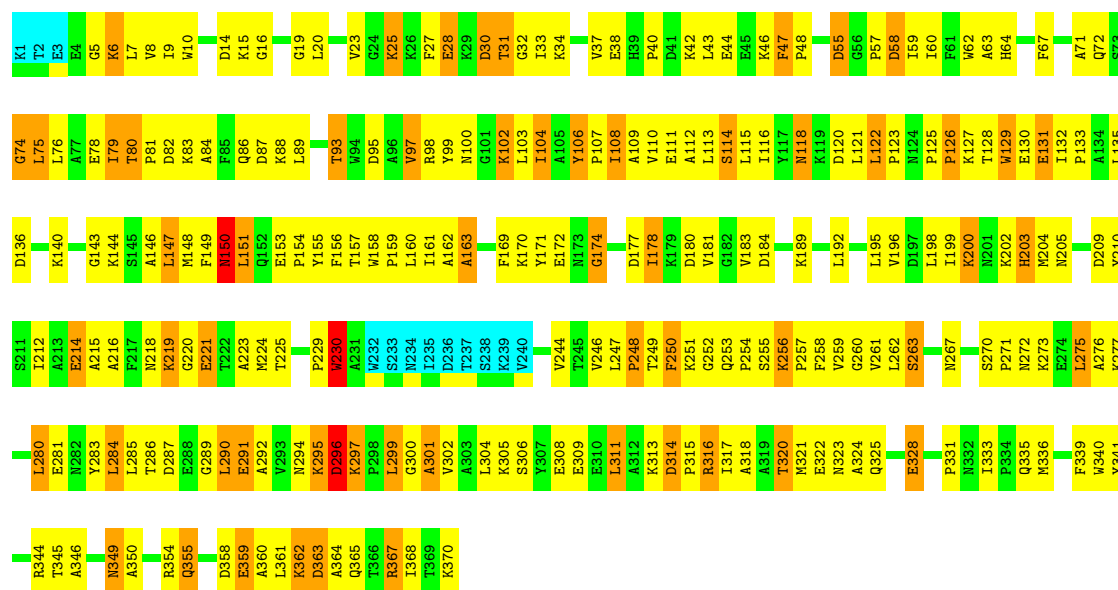




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A:  33% 48% 16% . .



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.5
CNS	refinement	0.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.37±0.01	0±0/2846 (0.0± 0.0%)	0.69±0.01	1±1/3861 (0.0± 0.0%)
All	All	0.37	0/28460 (0.0%)	0.69	14/38610 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	296	ASP	N-CA-C	-6.55	103.40	111.33	7	8
1	A	303	ALA	CA-C-O	5.42	121.08	117.94	9	1
1	A	224	MET	N-CA-C	5.11	115.89	107.20	8	4
1	A	118	ASN	N-CA-C	5.10	114.35	108.49	4	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	2779	2760	2757	225±17
All	All	27790	27600	27570	2248

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 41.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HG21	1.10	1.23	7	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HG2	1.05	1.20	4	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:HG23	1.05	1.26	8	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	1.05	1.25	7	4
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	1.04	1.27	7	8
1:A:111:GLU:HG2	1:A:229:PRO:HG2	1.04	1.26	10	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD3	1.01	1.29	5	2
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:HB2	1.00	1.33	8	4
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB3	1.00	1.34	9	7
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:HA	0.98	1.30	8	5
1:A:367:ARG:HD2	1:A:368:ILE:HG13	0.98	1.35	7	1
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:HG23	0.98	1.35	2	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB2	0.97	1.59	7	6
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB2	0.96	1.33	9	6
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD13	0.96	1.35	3	2
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:HG21	0.96	1.33	9	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB2	0.95	1.38	5	6
1:A:253:GLN:HG2	1:A:254:PRO:HD2	0.93	1.39	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HB2	0.92	1.39	2	7
1:A:253:GLN:HG3	1:A:254:PRO:HD2	0.92	1.38	2	2
1:A:148:MET:H	1:A:224:MET:HB3	0.91	1.25	2	4
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG21	0.91	1.41	6	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:HB3	0.91	1.43	5	4
1:A:259:VAL:HG12	1:A:329:ILE:HA	0.91	1.42	4	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HG3	0.91	1.43	9	2
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:HG2	0.90	1.42	1	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG23	0.89	1.40	10	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:208:THR:HB	0.88	1.43	1	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:HB2	0.88	1.46	8	4
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:HA3	0.88	1.43	9	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD23	0.86	1.46	9	3
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG23	0.86	2.05	9	2
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.86	2.06	8	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG12	0.86	1.45	1	2
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB3	0.86	1.45	9	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HG23	0.85	1.46	4	1
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:HB2	0.85	1.47	10	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.84	1.47	8	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:HA2	0.84	2.07	8	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:284:LEU:HD22	0.83	1.49	5	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:195:LEU:HD22	0.83	1.49	8	1
1:A:136:ASP:HB3	1:A:140:LYS:HD2	0.83	1.49	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:HD3	0.83	1.49	8	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HG	0.83	1.49	2	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD13	0.83	1.49	4	2
1:A:119:LYS:HD2	1:A:121:LEU:HD22	0.83	1.50	4	1
1:A:88:LYS:HD3	1:A:306:SER:HB2	0.83	1.51	3	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:60:ILE:HD12	0.82	1.34	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA2	0.82	2.09	7	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD21	0.82	1.48	5	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD12	0.82	1.51	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.82	1.49	1	2
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:HD3	0.81	1.51	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HB	0.81	1.53	4	7
1:A:129:TRP:HH2	1:A:224:MET:HE1	0.81	1.35	6	2
1:A:149:PHE:CD2	1:A:226:ILE:HD12	0.81	2.11	6	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:HB2	0.81	1.51	9	4
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG12	0.80	1.76	5	2
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	2.07	1	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HB	0.80	1.54	3	1
1:A:285:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HD11	0.80	1.54	6	2
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	1.54	5	2
1:A:210:TYR:O	1:A:214:GLU:HB2	0.80	1.75	2	10
1:A:129:TRP:CH2	1:A:224:MET:HE1	0.80	2.10	6	2
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HG23	0.79	2.12	5	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD2	0.79	2.07	6	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:HG22	0.79	1.37	7	1
1:A:67:PHE:HE2	1:A:105:ALA:HA	0.79	1.35	8	1
1:A:150:ASN:HB2	1:A:153:GLU:HB2	0.79	1.54	3	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:226:ILE:HG22	0.79	1.51	4	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.79	1.54	7	5
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:HD21	0.79	1.51	2	2
1:A:65:ASP:HB3	1:A:331:PRO:HG3	0.79	1.55	4	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:HE1	0.79	1.36	6	1
1:A:217:PHE:HD2	1:A:225:THR:HA	0.79	1.37	2	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:HD2	0.79	1.77	7	9
1:A:9:ILE:HG13	1:A:37:VAL:HA	0.79	1.50	9	2
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB3	0.78	1.77	6	3
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD13	0.78	1.51	7	2
1:A:176:TYR:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.78	2.13	8	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB3	0.78	1.52	6	1
1:A:311:LEU:CD2	1:A:317:ILE:HG21	0.78	2.08	9	2
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HG23	0.78	1.56	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HD12	0.77	1.53	1	1
1:A:311:LEU:CB	1:A:317:ILE:HG21	0.77	2.05	7	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:37:VAL:HA	0.77	2.10	9	2
1:A:109:ALA:N	1:A:302:VAL:HG11	0.77	1.94	7	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD12	0.77	1.79	3	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD13	0.77	1.55	2	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.77	1.79	3	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG13	0.76	1.54	9	2
1:A:225:THR:C	1:A:226:ILE:HD13	0.76	2.05	9	1
1:A:67:PHE:HE2	1:A:265:GLY:HA3	0.76	1.39	4	3
1:A:62:TRP:O	1:A:262:LEU:HG	0.76	1.81	3	3
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HG2	0.76	2.15	2	3
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG22	0.76	1.82	9	2
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:HD11	0.76	1.57	3	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:92:PHE:HB2	0.75	2.16	9	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB3	0.75	1.56	9	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HA	0.75	2.10	7	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:HB2	0.75	1.58	10	2
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD13	0.75	1.59	4	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CG	0.75	2.08	4	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HA	0.75	1.59	7	1
1:A:170:LYS:HG3	1:A:180:ASP:HB3	0.75	1.55	1	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:HB2	0.75	1.81	4	9
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HB2	0.75	1.59	1	3
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.75	1.59	5	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:HB	0.74	1.58	4	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	2.16	8	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:HD2	0.74	1.59	7	3
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE2	0.74	2.18	6	2
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB2	0.74	1.82	7	3
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:OG1	0.74	1.82	7	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HB2	0.74	1.83	4	3
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HB2	0.74	1.60	9	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB2	0.74	1.83	10	4
1:A:16:GLY:HA3	1:A:293:VAL:HG23	0.74	1.57	2	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HD12	0.74	2.17	3	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:33:ILE:HG21	0.74	2.18	7	2
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	1.57	4	4
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.74	2.12	9	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD2	0.74	1.43	10	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:HD21	0.74	1.43	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB2	0.73	1.83	7	1
1:A:359:GLU:O	1:A:363:ASP:HB2	0.73	1.83	7	6
1:A:134:ALA:HA	1:A:137:LYS:HD3	0.73	1.60	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:301:ALA:HB3	0.73	1.61	8	1
1:A:112:ALA:C	1:A:113:LEU:HD12	0.73	2.08	4	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:15:LYS:HB3	0.73	1.61	5	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG21	0.73	1.99	5	1
1:A:297:LYS:HD2	1:A:299:LEU:HD22	0.73	1.58	6	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:CD	0.73	2.12	8	2
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.73	1.84	7	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB3	0.73	1.84	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD2	0.73	2.13	10	3
1:A:147:LEU:HD12	1:A:224:MET:HG3	0.73	1.60	5	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:ND2	0.73	1.98	10	1
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG23	0.73	2.14	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CB	0.72	2.14	10	7
1:A:89:LEU:HA	1:A:304:LEU:HG	0.72	1.59	7	1
1:A:292:ALA:O	1:A:296:ASP:HB2	0.72	1.85	1	7
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HD12	0.72	1.59	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB2	0.72	1.60	10	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD13	0.72	1.84	3	2
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.72	2.15	7	4
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:CB	0.72	2.15	8	1
1:A:50:VAL:O	1:A:53:THR:HG22	0.72	1.85	1	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD12	0.72	2.14	2	1
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HB2	0.72	1.60	9	3
1:A:107:PRO:HA	1:A:262:LEU:O	0.72	1.85	3	8
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:HD23	0.72	1.61	5	1
1:A:272:ASN:HD22	1:A:275:LEU:HD13	0.72	1.45	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD13	0.72	2.14	7	3
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.72	2.14	8	1
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:HE2	0.71	1.45	3	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HG21	0.71	2.20	1	2
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:HG23	0.71	1.60	1	2
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD12	0.71	1.84	4	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:HG3	0.71	1.59	9	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:CB	0.71	2.14	3	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD2	0.71	2.16	8	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:HE2	0.71	1.62	8	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HB2	0.71	1.86	10	6
1:A:110:VAL:HA	1:A:260:GLY:O	0.71	1.85	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:GLN:HB3	1:A:104:ILE:HD13	0.71	1.62	5	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:HG23	0.71	2.21	9	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:H	0.71	1.45	9	4
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA2	0.71	2.21	7	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:105:ALA:HA	0.71	2.20	8	1
1:A:285:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD11	0.71	2.15	6	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD22	0.71	1.85	8	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.71	1.85	3	3
1:A:299:LEU:O	1:A:316:ARG:HB3	0.71	1.86	3	2
1:A:10:TRP:O	1:A:60:ILE:HG13	0.70	1.86	7	2
1:A:58:ASP:OD2	1:A:267:ASN:HB2	0.70	1.86	10	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG13	0.70	1.63	4	1
1:A:217:PHE:CB	1:A:225:THR:HG23	0.70	2.13	8	2
1:A:90:TYR:HD2	1:A:92:PHE:HB2	0.70	1.44	9	1
1:A:5:GLY:C	1:A:33:ILE:HG23	0.70	2.11	9	2
1:A:308:GLU:CD	1:A:321:MET:HE2	0.70	2.11	10	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:C	0.70	2.11	9	2
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG22	0.70	1.85	10	4
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:HB2	0.70	1.87	4	5
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HD3	0.70	1.86	7	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG3	0.70	1.62	8	2
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HD11	0.70	2.12	3	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.69	2.17	1	2
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.69	1.63	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG23	0.69	1.64	7	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:317:ILE:HD13	0.69	2.17	7	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:HG2	0.69	2.21	2	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.69	1.87	6	2
1:A:176:TYR:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.69	2.21	8	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG23	0.69	1.87	9	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CG2	0.69	2.17	1	7
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:CB	0.69	2.17	9	2
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD23	0.69	1.87	3	1
1:A:117:TYR:CZ	1:A:125:PRO:HG3	0.69	2.22	8	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CG	0.69	2.18	10	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:HB3	0.69	2.17	8	8
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HB2	0.69	1.63	2	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG2	0.69	2.17	4	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.88	1	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HG2	0.69	1.64	1	1
1:A:349:ASN:HD22	1:A:355:GLN:HG3	0.69	1.46	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.69	2.18	3	3
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:CG2	0.69	2.14	2	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:HG3	0.69	1.64	9	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:CD1	0.69	2.17	3	5
1:A:71:ALA:C	1:A:76:LEU:HB2	0.68	2.13	7	3
1:A:113:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.68	2.18	4	2
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD22	0.68	2.18	8	1
1:A:345:THR:CA	1:A:349:ASN:HB2	0.68	2.18	8	2
1:A:296:ASP:OD2	1:A:297:LYS:HE2	0.68	1.88	4	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:HA3	0.68	1.65	6	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:VAL:HA	0.68	1.62	7	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG3	0.68	2.18	9	1
1:A:112:ALA:O	1:A:229:PRO:HD3	0.68	1.88	6	3
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA3	0.68	2.23	3	2
1:A:111:GLU:HA	1:A:229:PRO:HG2	0.68	1.63	5	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HG2	0.68	1.88	10	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HG2	0.68	1.88	1	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD2	0.68	2.22	10	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CZ2	0.68	2.23	3	2
1:A:362:LYS:O	1:A:365:GLN:HG3	0.68	1.89	5	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB2	0.68	1.88	8	5
1:A:256:LYS:NZ	1:A:328:GLU:HG3	0.68	2.03	8	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.68	1.66	1	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:HD12	0.68	1.64	7	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:CD	0.68	2.19	10	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HA	0.68	1.65	4	3
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:O	0.68	1.89	9	6
1:A:9:ILE:HG12	1:A:36:THR:O	0.68	1.89	4	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG13	0.67	1.64	9	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HG2	0.67	1.89	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG12	0.67	1.67	6	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:HE1	0.67	1.64	7	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CB	0.67	2.18	1	8
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB2	0.67	2.16	5	6
1:A:156:PHE:C	1:A:159:PRO:HD2	0.67	2.15	9	5
1:A:257:PRO:O	1:A:328:GLU:HB2	0.67	1.88	4	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:CD1	0.67	2.19	7	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:CE3	0.67	2.22	9	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.67	1.90	3	4
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:CB	0.67	2.19	6	2
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HG13	0.67	2.14	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:OG	0.67	1.89	3	4
1:A:349:ASN:ND2	1:A:355:GLN:HG3	0.67	2.04	3	2
1:A:301:ALA:H	1:A:317:ILE:HG21	0.67	1.50	5	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:OG	0.67	1.90	10	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:CG	0.67	2.19	10	1
1:A:62:TRP:C	1:A:262:LEU:HG	0.67	2.15	3	4
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:HB2	0.67	1.66	5	4
1:A:258:PHE:HB3	1:A:330:MET:HB3	0.67	1.65	6	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:HZ3	0.66	1.51	3	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG23	0.66	1.67	3	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:CD2	0.66	2.19	4	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD1	0.66	2.20	3	2
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:HD13	0.66	1.67	1	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HD11	0.66	1.91	3	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:HG12	0.66	1.67	7	2
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:NH1	0.66	2.06	7	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG3	0.66	1.91	3	6
1:A:361:LEU:O	1:A:365:GLN:HB2	0.66	1.91	4	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:40:PRO:HG2	0.66	1.68	6	2
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CB	0.66	2.19	3	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HA	0.66	2.26	3	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:HD2	0.66	1.66	2	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CD1	0.66	2.26	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG13	0.66	1.91	1	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:14:ASP:HB2	0.66	1.66	8	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:248:PRO:HD2	0.65	2.06	8	2
1:A:136:ASP:O	1:A:140:LYS:HB2	0.65	1.91	7	2
1:A:311:LEU:CD1	1:A:314:ASP:HB2	0.65	2.20	1	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.65	1.51	7	3
1:A:129:TRP:O	1:A:133:PRO:HD3	0.65	1.90	9	3
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE3	0.65	2.27	7	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CB	0.65	2.19	2	5
1:A:99:TYR:CG	1:A:104:ILE:HD11	0.65	2.26	5	1
1:A:322:GLU:O	1:A:325:GLN:HB2	0.65	1.92	3	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:CG2	0.65	2.14	7	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.65	1.69	5	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD12	0.65	1.69	2	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG12	0.65	1.92	8	3
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD11	0.65	1.66	8	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG12	0.65	1.92	10	1
1:A:316:ARG:H	1:A:316:ARG:HD2	0.65	1.51	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:H	0.65	1.50	7	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:321:MET:HE2	0.65	1.92	10	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:CB	0.65	2.20	5	10
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HB2	0.65	1.92	2	2
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:H	0.65	1.50	10	1
1:A:134:ALA:O	1:A:137:LYS:HG2	0.64	1.91	8	3
1:A:209:ASP:CB	1:A:212:ILE:HD13	0.64	2.22	4	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:HD2	0.64	1.52	6	2
1:A:298:PRO:HG2	1:A:316:ARG:HH12	0.64	1.52	6	1
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:HD12	0.64	1.69	6	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:324:ALA:HB1	0.64	1.69	10	1
1:A:150:ASN:CB	1:A:153:GLU:HB2	0.64	2.21	3	1
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HB	0.64	2.27	1	1
1:A:286:THR:O	1:A:290:LEU:HB2	0.64	1.93	8	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HB3	0.64	2.22	10	4
1:A:117:TYR:CE1	1:A:125:PRO:HG3	0.64	2.28	8	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:H	0.64	1.51	10	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG1	0.64	2.20	1	2
1:A:113:LEU:HD23	1:A:227:ASN:C	0.64	2.17	8	2
1:A:99:TYR:OH	1:A:332:ASN:HB2	0.64	1.92	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:14:ASP:HB2	0.64	2.23	8	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD11	0.64	1.68	8	1
1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:LYS:HE3	0.64	1.67	10	1
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:CB	0.64	2.23	10	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG22	0.64	2.08	4	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG23	0.64	1.70	5	2
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:CE3	0.64	2.26	7	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CG	0.64	2.23	8	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HA	0.64	1.68	1	1
1:A:28:GLU:HB3	1:A:33:ILE:O	0.64	1.93	2	3
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB2	0.64	1.93	6	2
1:A:163:ALA:HA	1:A:254:PRO:O	0.64	1.93	7	3
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:CB	0.64	2.23	9	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HA	0.64	1.93	1	5
1:A:164:ASP:HB2	1:A:253:GLN:HB3	0.64	1.68	4	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HG	0.64	1.68	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB2	0.64	2.22	2	6
1:A:275:LEU:O	1:A:279:PHE:HB2	0.64	1.93	3	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:35:VAL:HB	0.64	1.70	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HG3	0.64	1.92	10	3
1:A:214:GLU:O	1:A:218:ASN:HB2	0.64	1.91	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:LEU:HB3	1:A:224:MET:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:36:THR:O	0.63	1.93	7	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	0.63	1.69	10	2
1:A:47:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.63	2.27	3	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HA	0.63	1.93	6	2
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG12	0.63	2.23	6	1
1:A:115:LEU:HB3	1:A:245:THR:O	0.63	1.93	9	4
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:N	0.63	2.09	1	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD12	0.63	1.70	7	1
1:A:161:ILE:HG13	1:A:191:GLY:HA3	0.63	1.69	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:CG2	0.63	2.24	4	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HG2	0.63	1.92	4	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CG	0.63	2.21	9	1
1:A:99:TYR:CD1	1:A:104:ILE:HD11	0.63	2.28	5	1
1:A:191:GLY:O	1:A:195:LEU:HB2	0.63	1.93	5	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:59:ILE:HD11	0.63	1.70	10	3
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CD1	0.63	2.23	1	3
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HB2	0.63	1.93	8	2
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HD2	0.63	1.94	9	1
1:A:297:LYS:CG	1:A:298:PRO:HD2	0.63	2.24	2	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HB2	0.63	2.18	2	3
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CA	0.63	2.23	4	3
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD1	0.63	2.24	4	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG23	0.63	2.24	4	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CG2	0.62	2.24	3	2
1:A:171:TYR:CZ	1:A:174:GLY:HA2	0.62	2.29	1	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CD1	0.62	2.24	8	2
1:A:109:ALA:HB1	1:A:111:GLU:OE2	0.62	1.93	6	1
1:A:200:LYS:O	1:A:204:MET:HG2	0.62	1.94	9	1
1:A:33:ILE:HG23	1:A:279:PHE:HE2	0.62	1.52	1	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HG22	0.62	1.70	9	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CG1	0.62	2.24	4	4
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.62	1.95	3	4
1:A:148:MET:N	1:A:224:MET:HB3	0.62	2.05	2	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CA	0.62	2.19	8	3
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.93	4	2
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HD13	0.62	1.70	4	3
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:HD21	0.62	2.24	8	1
1:A:305:LYS:O	1:A:309:GLU:HB2	0.62	1.95	8	2
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD22	0.62	1.72	1	1
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HG21	0.62	1.54	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ILE:HG22	1:A:103:LEU:O	0.62	1.94	1	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:N	0.62	2.10	6	2
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD21	0.62	1.72	8	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:66:ARG:HD2	0.62	2.29	9	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:CB	0.62	2.25	6	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG12	0.62	1.72	5	2
1:A:194:PHE:O	1:A:198:LEU:HB2	0.62	1.95	8	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:VAL:HA	0.62	2.25	10	2
1:A:126:PRO:CG	1:A:131:GLU:HG3	0.62	2.24	10	1
1:A:304:LEU:HG	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.69	2	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:N	0.62	2.10	10	2
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:HB1	0.61	1.72	3	1
1:A:246:VAL:HB	1:A:322:GLU:HG3	0.61	1.70	3	1
1:A:64:HIS:NE2	1:A:105:ALA:HB1	0.61	2.10	4	1
1:A:119:LYS:CD	1:A:121:LEU:HD22	0.61	2.25	4	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:CB	0.61	2.25	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.61	1.95	7	6
1:A:128:THR:HG23	1:A:131:GLU:HB2	0.61	1.71	1	2
1:A:110:VAL:HB	1:A:301:ALA:HB3	0.61	1.71	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB3	0.61	1.96	4	1
1:A:108:ILE:O	1:A:302:VAL:HG21	0.61	1.95	4	2
1:A:355:GLN:HE21	1:A:360:ALA:HB2	0.61	1.55	4	1
1:A:261:VAL:HG22	1:A:330:MET:CE	0.61	2.25	5	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:262:LEU:O	0.61	1.94	10	2
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:HA	0.61	2.20	8	2
1:A:248:PRO:O	1:A:254:PRO:HB3	0.61	1.96	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:HG12	0.61	1.72	7	1
1:A:166:GLY:O	1:A:256:LYS:HD3	0.61	1.95	8	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.61	1.95	1	2
1:A:81:PRO:HA	1:A:85:PHE:CD2	0.61	2.29	2	1
1:A:166:GLY:HA2	1:A:185:ASN:HD21	0.61	1.56	8	1
1:A:130:GLU:C	1:A:133:PRO:HD2	0.61	2.21	5	6
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HD3	0.61	1.73	2	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:HE1	0.61	1.55	4	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB3	0.61	1.95	5	5
1:A:209:ASP:N	1:A:212:ILE:HD12	0.61	2.09	1	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD13	0.61	2.20	2	2
1:A:285:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD11	0.61	2.26	8	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:HA	0.61	1.72	9	4
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG13	0.60	1.73	2	3
1:A:303:ALA:CB	1:A:311:LEU:HG	0.60	2.26	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.60	1.73	7	1
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ILE:HD13	0.60	1.96	7	4
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:OG	0.60	1.94	2	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG13	0.60	2.25	2	1
1:A:259:VAL:CG1	1:A:329:ILE:HA	0.60	2.26	3	1
1:A:111:GLU:O	1:A:260:GLY:HA3	0.60	1.96	10	3
1:A:140:LYS:HA	1:A:144:LYS:O	0.60	1.96	7	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:223:ALA:HB2	0.60	1.71	9	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.12	6	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HG3	0.60	1.73	2	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:153:GLU:HB2	0.60	2.12	2	2
1:A:72:GLN:CG	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.27	3	2
1:A:6:LYS:HA	1:A:34:LYS:O	0.60	1.97	6	2
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD11	0.60	2.31	7	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CG1	0.60	2.26	8	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HA	0.60	1.72	10	1
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:HD3	0.60	2.10	10	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:33:ILE:HG21	0.60	2.31	3	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CB	0.60	2.27	4	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:CG2	0.60	2.25	7	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:245:THR:HG23	0.60	1.72	9	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.60	2.31	2	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HB	0.60	1.73	4	2
1:A:209:ASP:CG	1:A:212:ILE:HG12	0.60	2.21	7	1
1:A:303:ALA:HB2	1:A:311:LEU:HG	0.60	1.74	2	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HE2	0.60	1.71	3	1
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:H	0.60	1.38	4	1
1:A:298:PRO:HB2	1:A:314:ASP:OD2	0.60	1.96	4	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HB2	0.60	2.32	8	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:N	0.60	2.12	9	2
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CG	0.60	2.27	1	1
1:A:283:TYR:O	1:A:289:GLY:HA3	0.60	1.97	2	2
1:A:128:THR:O	1:A:131:GLU:HG2	0.60	1.97	4	1
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:OG1	0.60	1.97	7	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:HB2	0.59	1.96	10	3
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:CD1	0.59	2.26	2	1
1:A:62:TRP:O	1:A:263:SER:N	0.59	2.34	1	10
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB2	0.59	1.73	2	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:HB2	0.59	1.98	4	3
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:HB2	0.59	1.74	10	1
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG13	0.59	2.27	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG22	0.59	1.96	2	3
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG22	0.59	1.98	4	2
1:A:330:MET:SD	1:A:331:PRO:HD2	0.59	2.37	3	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:HB1	0.59	1.74	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.59	2.33	3	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:CZ3	0.59	2.32	3	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:37:VAL:HG22	0.59	1.74	6	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CD1	0.59	2.28	8	1
1:A:349:ASN:O	1:A:355:GLN:HB2	0.59	1.97	8	4
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HG13	0.59	2.33	2	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HG	0.59	1.75	8	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:PRO:HD3	0.59	1.73	2	2
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HD22	0.59	1.58	3	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:225:THR:O	0.59	1.96	2	1
1:A:364:ALA:O	1:A:367:ARG:HG3	0.59	1.97	10	2
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CD	0.59	2.28	9	1
1:A:259:VAL:CB	1:A:324:ALA:HB1	0.59	2.28	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HB	0.59	1.98	7	5
1:A:113:LEU:HG	1:A:228:GLY:CA	0.59	2.28	4	1
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:HG3	0.59	1.98	8	1
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:HD23	0.59	1.58	10	1
1:A:209:ASP:H	1:A:212:ILE:HD12	0.58	1.58	1	1
1:A:283:TYR:CD1	1:A:284:LEU:HD23	0.58	2.33	10	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:HE3	0.58	1.58	9	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:289:GLY:HA2	0.58	1.75	1	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HD11	0.58	1.75	8	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HB	0.58	1.73	3	3
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD22	0.58	2.22	4	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:O	0.58	1.99	6	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:CB	0.58	2.28	10	3
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:HG22	0.58	1.75	7	1
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:CG2	0.58	2.28	10	2
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD2	0.58	1.99	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:191:GLY:C	0.58	2.24	5	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:H	0.58	1.58	9	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.58	1.76	10	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG13	0.58	1.75	2	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.58	2.29	3	1
1:A:146:ALA:HA	1:A:222:THR:HB	0.58	1.75	3	1
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HB2	0.58	1.99	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.58	1.75	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HG2	0.58	1.99	3	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:HD3	0.58	2.27	8	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HG21	0.58	1.57	1	2
1:A:159:PRO:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.58	1.76	2	1
1:A:258:PHE:HA	1:A:328:GLU:O	0.58	1.98	8	4
1:A:123:PRO:O	1:A:125:PRO:HD3	0.58	1.98	10	3
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:NE1	0.58	2.13	8	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:36:THR:OG1	0.58	1.99	9	1
1:A:304:LEU:HD23	1:A:304:LEU:N	0.58	2.14	10	1
1:A:109:ALA:O	1:A:261:VAL:HA	0.58	1.99	5	5
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	0.58	1.99	4	3
1:A:219:LYS:HG2	1:A:221:GLU:HG3	0.58	1.74	3	1
1:A:255:SER:O	1:A:257:PRO:HD3	0.58	1.99	3	3
1:A:189:LYS:HD2	1:A:361:LEU:HD12	0.57	1.76	4	1
1:A:350:ALA:CA	1:A:355:GLN:HB3	0.57	2.26	5	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:HD2	0.57	1.76	6	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.57	2.33	7	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:135:LEU:HD11	0.57	1.75	7	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.57	1.99	2	3
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:O	0.57	1.98	7	2
1:A:163:ALA:CA	1:A:255:SER:HA	0.57	2.29	8	3
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:HB3	0.57	1.98	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA3	0.57	2.29	4	2
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:CD	0.57	2.25	8	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CG	0.57	2.28	9	2
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD12	0.57	1.99	1	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:CB	0.57	2.28	8	2
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:CE2	0.57	2.33	3	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:HD2	0.57	2.13	9	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:H	0.57	1.58	1	1
1:A:217:PHE:CZ	1:A:227:ASN:HB3	0.57	2.35	1	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HD13	0.57	1.59	4	2
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	5	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:CE	0.57	2.29	7	1
1:A:109:ALA:CA	1:A:302:VAL:HG11	0.57	2.28	7	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:C	0.57	2.24	9	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HB	0.57	2.25	1	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG2	0.57	2.28	2	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD13	0.57	2.24	2	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.57	2.33	2	1
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HB3	0.57	2.00	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG3	0.57	2.29	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CD1	0.57	2.30	6	3
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:CG2	0.57	2.29	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:CB	0.57	2.25	9	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD12	0.57	1.76	1	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB2	0.57	2.00	8	4
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:HB3	0.57	1.75	3	2
1:A:177:ASP:HB2	1:A:180:ASP:OD2	0.57	1.99	3	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:CG	0.57	2.25	5	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	6	1
1:A:129:TRP:HD1	1:A:248:PRO:HG2	0.57	1.58	2	2
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ARG:HG2	0.57	1.99	4	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HE2	0.57	1.99	4	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:277:LYS:HE3	0.57	1.77	2	1
1:A:189:LYS:NZ	1:A:362:LYS:HB3	0.57	2.14	4	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HD21	0.57	1.60	1	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:HA2	0.57	2.35	10	2
1:A:7:LEU:O	1:A:36:THR:HG22	0.57	1.99	7	1
1:A:225:THR:O	1:A:226:ILE:HD13	0.57	2.00	7	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.56	2.00	4	2
1:A:224:MET:HE1	1:A:226:ILE:HD11	0.56	1.77	4	1
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:HG2	0.56	1.75	6	1
1:A:186:ALA:O	1:A:189:LYS:HG3	0.56	2.00	1	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	3	3
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.56	2.29	3	1
1:A:7:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD2	0.56	2.00	4	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG12	0.56	1.99	4	2
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HD2	0.56	2.01	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD13	0.56	1.77	5	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HB2	0.56	2.34	6	1
1:A:25:LYS:HD2	1:A:34:LYS:HE3	0.56	1.77	9	1
1:A:156:PHE:HZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	1.60	9	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:HB3	0.56	1.61	1	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:CG1	0.56	2.30	7	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:155:TYR:CE2	0.56	2.35	8	1
1:A:108:ILE:C	1:A:302:VAL:HG21	0.56	2.25	4	2
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB3	0.56	1.78	9	4
1:A:308:GLU:C	1:A:311:LEU:HG	0.56	2.24	6	1
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:HG13	0.56	2.24	9	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.56	2.30	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CB	0.56	2.30	3	2
1:A:246:VAL:CG1	1:A:322:GLU:HB3	0.56	2.30	4	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG23	0.56	1.76	7	1
1:A:7:LEU:CG	1:A:59:ILE:HD11	0.56	2.30	8	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD13	0.56	2.29	2	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	2.36	9	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HD3	0.56	1.76	9	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:160:LEU:HG	0.56	2.36	8	1
1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:HD22	0.56	2.16	9	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD22	0.56	2.26	6	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:CD2	0.56	2.36	9	2
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:H	0.56	1.60	10	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:H	0.55	1.61	2	2
1:A:266:ILE:HG23	1:A:266:ILE:O	0.55	2.01	9	6
1:A:50:VAL:HG23	1:A:55:ASP:HB2	0.55	1.78	8	1
1:A:163:ALA:C	1:A:255:SER:HA	0.55	2.26	8	1
1:A:250:PHE:HZ	1:A:255:SER:HB2	0.55	1.60	10	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:253:GLN:HB3	0.55	2.31	4	1
1:A:230:TRP:HA	1:A:230:TRP:CE3	0.55	2.35	10	2
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.55	2.00	8	5
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG22	0.55	2.02	4	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.55	2.31	5	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HB2	0.55	2.01	9	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HD2	0.55	2.36	1	1
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:CG	0.55	2.30	2	1
1:A:224:MET:C	1:A:224:MET:HE2	0.55	2.25	3	1
1:A:349:ASN:C	1:A:355:GLN:HB3	0.55	2.26	4	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:301:ALA:HB3	0.55	2.30	8	2
1:A:151:LEU:CD1	1:A:208:THR:HB	0.55	2.25	1	1
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HG2	0.55	2.01	2	1
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:N	0.55	2.00	4	1
1:A:295:LYS:HG3	1:A:296:ASP:N	0.55	2.17	4	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:CD	0.55	2.30	7	2
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD23	0.55	2.32	5	1
1:A:311:LEU:O	1:A:318:ALA:HB2	0.55	2.01	10	1
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:CG2	0.55	2.30	1	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:NE1	0.55	2.15	1	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CZ	0.55	2.37	2	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:CE1	0.55	2.36	4	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:HG23	0.55	2.36	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD22	0.55	1.78	8	1
1:A:63:ALA:HB3	1:A:66:ARG:HG2	0.55	1.77	4	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:HD12	0.55	1.77	6	2
1:A:25:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.55	2.01	9	2
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:CD1	0.55	2.31	6	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HB2	0.55	1.79	9	1
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:HG22	0.55	1.78	8	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:160:LEU:HD13	0.55	2.37	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HA	0.55	1.78	3	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB3	0.55	1.77	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:294:ASN:HD22	0.55	1.62	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CG	0.55	2.31	6	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:CB	0.55	2.27	8	1
1:A:150:ASN:C	1:A:151:LEU:HD13	0.55	2.26	1	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CB	0.55	2.55	1	5
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HB	0.55	2.01	6	3
1:A:314:ASP:HB2	1:A:318:ALA:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HG2	0.55	2.02	4	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:HB3	0.55	1.78	10	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HG2	0.54	2.02	4	5
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:O	0.54	2.02	2	3
1:A:38:GLU:OE2	1:A:43:LEU:HD21	0.54	2.00	3	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:72:GLN:HA	1:A:76:LEU:HB3	0.54	1.79	4	1
1:A:194:PHE:HA	1:A:197:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.54	1.62	4	7
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HD13	0.54	1.63	4	1
1:A:83:LYS:O	1:A:87:ASP:HB2	0.54	2.02	7	4
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:HB	0.54	2.32	4	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CZ2	0.54	2.37	8	1
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:HD3	0.54	1.79	9	2
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB3	0.54	2.02	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:75:LEU:N	0.54	2.18	10	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.77	7	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG21	0.54	1.78	6	4
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.54	1.78	1	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.54	2.38	2	1
1:A:119:LYS:C	1:A:121:LEU:H	0.54	2.11	7	2
1:A:355:GLN:OE1	1:A:360:ALA:HB2	0.54	2.02	7	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.79	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:PRO:HA	1:A:316:ARG:HH12	0.54	1.62	2	1
1:A:106:TYR:HB2	1:A:264:ALA:HB3	0.54	1.80	5	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:OD1	0.54	2.03	5	1
1:A:67:PHE:CG	1:A:263:SER:HB3	0.54	2.38	10	1
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:CG2	0.54	2.32	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD22	0.54	2.33	1	2
1:A:170:LYS:CG	1:A:180:ASP:HB3	0.54	2.32	1	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:O	0.54	2.02	9	2
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD23	0.54	2.32	4	1
1:A:178:ILE:HD12	1:A:178:ILE:O	0.54	2.03	5	1
1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:HD12	0.54	2.18	6	1
1:A:299:LEU:HG	1:A:300:GLY:H	0.54	1.63	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.54	2.03	9	1
1:A:170:LYS:HD2	1:A:180:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:262:LEU:O	0.54	2.03	4	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB3	0.54	2.02	5	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG2	0.54	1.79	6	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:N	0.54	2.18	2	2
1:A:289:GLY:O	1:A:292:ALA:HB3	0.54	2.03	1	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:294:ASN:HD21	0.54	2.16	1	1
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:N	0.54	2.17	5	1
1:A:363:ASP:HA	1:A:366:THR:OG1	0.54	2.02	7	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:HB3	0.53	2.03	1	3
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:N	0.53	2.18	4	2
1:A:149:PHE:CD2	1:A:151:LEU:HA	0.53	2.38	3	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:HB2	0.53	1.78	4	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:CG2	0.53	2.33	9	2
1:A:184:ASP:CG	1:A:362:LYS:HA	0.53	2.28	6	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HB	0.53	2.03	7	1
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:265:GLY:O	1:A:266:ILE:HD13	0.53	2.03	6	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:CD1	0.53	2.33	9	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:224:MET:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:HD23	0.53	1.80	2	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HD13	0.53	2.31	4	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.53	2.33	10	1
1:A:277:LYS:HD3	1:A:281:GLU:OE1	0.53	2.03	3	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG22	0.53	1.80	3	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD3	0.53	2.04	5	3
1:A:333:ILE:HG23	1:A:336:MET:HB2	0.53	1.78	8	1
1:A:88:LYS:O	1:A:89:LEU:HD12	0.53	2.04	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:CD	0.53	2.34	6	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD21	0.53	2.38	7	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.53	2.04	1	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG2	0.53	1.80	4	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:HD12	0.53	2.18	4	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD23	0.53	2.29	5	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD11	0.53	2.39	7	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:OE1	0.53	2.04	7	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HD12	0.53	2.34	10	3
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD11	0.53	1.81	6	3
1:A:146:ALA:CA	1:A:222:THR:HB	0.53	2.34	3	2
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:HB2	0.53	2.04	4	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:40:PRO:HD3	0.53	2.39	5	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG12	0.53	1.81	7	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:102:LYS:HE3	0.53	2.18	10	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:CB	0.53	2.33	10	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:ND2	0.53	2.19	6	3
1:A:354:ARG:O	1:A:355:GLN:HG3	0.53	2.04	2	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD22	0.53	2.29	4	1
1:A:59:ILE:C	1:A:60:ILE:HG13	0.53	2.28	5	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:263:SER:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:HD1	0.53	1.64	4	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:O	0.53	2.04	5	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.53	1.81	9	1
1:A:47:PHE:N	1:A:48:PRO:HD2	0.52	2.19	6	6
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CB	0.52	2.32	4	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:288:GLU:HG2	0.52	2.19	6	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD12	0.52	2.04	6	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD3	0.52	2.19	7	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.52	2.20	10	9
1:A:144:LYS:HG3	1:A:145:SER:H	0.52	1.63	5	1
1:A:52:ALA:C	1:A:53:THR:HG23	0.52	2.30	8	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HD3	0.52	1.81	8	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB3	0.52	1.80	8	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG22	0.52	2.04	10	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:N	0.52	2.19	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:CB	0.52	2.87	8	7
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD13	0.52	1.81	4	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:365:GLN:NE2	0.52	2.20	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG21	0.52	1.80	7	1
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:CD2	0.52	2.33	2	2
1:A:284:LEU:O	1:A:285:LEU:HD12	0.52	2.05	2	1
1:A:358:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HE3	0.52	2.03	3	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:O	0.52	2.04	6	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HD12	0.52	2.39	6	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD2	0.52	2.19	8	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CA	0.52	2.34	10	1
1:A:129:TRP:HE1	1:A:248:PRO:HD2	0.52	1.63	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HD12	0.52	1.81	6	4
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:CG	0.52	2.33	3	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.35	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD23	0.52	2.05	4	2
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB3	0.52	2.34	7	1
1:A:249:THR:CG2	1:A:254:PRO:HD3	0.52	2.29	10	1
1:A:294:ASN:OD1	1:A:302:VAL:HG11	0.52	2.05	2	1
1:A:294:ASN:ND2	1:A:298:PRO:HG3	0.52	2.20	4	1
1:A:111:GLU:HG3	1:A:260:GLY:HA3	0.52	1.82	5	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TRP:CD1	0.52	2.39	6	1
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:HD1	0.52	1.46	8	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:266:ILE:O	0.52	2.05	1	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:N	0.52	2.43	5	7
1:A:217:PHE:CE2	1:A:225:THR:HB	0.52	2.40	1	1
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.52	1.64	2	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:301:ALA:O	0.52	2.04	4	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CE2	0.52	2.40	6	1
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:CG	0.52	2.35	6	1
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:CB	0.52	2.34	7	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HG3	0.52	1.81	9	1
1:A:348:ILE:C	1:A:348:ILE:HD13	0.52	2.30	3	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:199:ILE:HG23	0.52	2.35	5	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:284:LEU:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HB2	0.52	1.80	7	1
1:A:302:VAL:HG11	1:A:304:LEU:HD12	0.52	1.82	1	1
1:A:159:PRO:O	1:A:255:SER:HB2	0.52	2.05	7	2
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HG	0.52	2.32	2	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:93:THR:HG21	0.52	1.82	3	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:CG2	0.52	2.29	4	1
1:A:55:ASP:OD2	1:A:75:LEU:HD12	0.52	2.05	4	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HG2	0.52	2.04	4	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.05	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:HD13	0.52	2.04	8	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:HE2	0.52	1.60	8	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:ASP:HB2	0.52	1.80	9	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG22	0.52	1.81	1	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CG1	0.52	2.34	5	2
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HB	0.52	2.30	3	3
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HB	0.52	1.81	3	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:38:GLU:HB3	0.52	2.40	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CA	0.52	2.34	7	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:102:LYS:HG2	0.52	1.82	9	1
1:A:11:ILE:O	1:A:40:PRO:HD2	0.51	2.05	1	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.51	2.35	2	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HA	0.51	2.36	3	1
1:A:121:LEU:HD23	1:A:121:LEU:C	0.51	2.30	4	1
1:A:154:PRO:HB3	1:A:340:TRP:HH2	0.51	1.65	4	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HG13	0.51	1.81	8	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG3	0.51	2.04	8	1
1:A:226:ILE:HD13	1:A:226:ILE:N	0.51	2.20	9	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB2	0.51	1.82	9	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.51	2.39	2	1
1:A:145:SER:HB3	1:A:222:THR:HG21	0.51	1.82	2	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG22	0.51	1.80	4	1
1:A:344:ARG:HD3	1:A:348:ILE:HG13	0.51	1.82	8	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:226:ILE:HG22	0.51	1.81	9	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:O	0.51	2.04	9	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HG3	0.51	2.05	1	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:CB	0.51	2.35	4	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG21	0.51	1.81	5	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:34:LYS:O	0.51	2.05	7	1
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:HG2	0.51	1.82	2	1
1:A:315:PRO:HG2	1:A:316:ARG:CD	0.51	2.35	5	1
1:A:129:TRP:HB2	1:A:249:THR:O	0.51	2.05	6	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD23	0.51	1.82	9	1
1:A:72:GLN:OE1	1:A:72:GLN:HA	0.51	2.04	10	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:174:GLY:HA2	0.51	2.06	1	1
1:A:297:LYS:O	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.05	1	1
1:A:196:VAL:HG12	1:A:200:LYS:HD2	0.51	1.83	2	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HD2	0.51	1.82	3	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.51	2.06	8	3
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:170:LYS:HD3	1:A:180:ASP:HB3	0.51	1.81	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HD11	0.51	1.81	9	1
1:A:25:LYS:O	1:A:28:GLU:HG3	0.51	2.04	10	1
1:A:94:TRP:CA	1:A:97:VAL:HG12	0.51	2.28	1	1
1:A:83:LYS:HE2	1:A:281:GLU:OE1	0.51	2.05	5	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:223:ALA:HB2	0.51	2.36	5	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:CG2	0.51	2.36	5	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HD12	0.51	2.05	5	1
1:A:314:ASP:OD1	1:A:317:ILE:HG13	0.51	2.06	5	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:C	0.51	2.30	6	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.51	2.06	1	2
1:A:363:ASP:O	1:A:366:THR:HG22	0.51	2.06	3	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HG12	0.51	2.41	4	1
1:A:184:ASP:HB3	1:A:365:GLN:HG3	0.51	1.83	10	1
1:A:113:LEU:HG	1:A:227:ASN:O	0.51	2.06	3	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.51	2.05	7	2
1:A:147:LEU:HD13	1:A:147:LEU:O	0.51	2.06	4	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:41:ASP:HB2	0.51	2.05	5	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HG	0.51	1.82	6	1
1:A:272:ASN:ND2	1:A:275:LEU:HB2	0.51	2.20	7	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:107:PRO:HD2	0.51	2.41	9	1
1:A:108:ILE:CB	1:A:262:LEU:HB3	0.51	2.27	9	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:CD2	0.51	2.35	9	1
1:A:9:ILE:O	1:A:10:TRP:HD1	0.51	1.89	3	2
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG13	0.51	2.36	4	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CB	0.51	2.35	6	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD13	0.51	1.83	10	2
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HB	0.51	1.83	9	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB3	0.51	1.83	9	1
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:CG	0.51	2.27	1	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:N	0.51	2.21	2	1
1:A:90:TYR:CD1	1:A:92:PHE:HB2	0.51	2.41	5	1
1:A:41:ASP:H	1:A:43:LEU:HD12	0.51	1.65	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HA	0.51	1.83	10	2
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:NE	0.51	2.21	6	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:279:PHE:CE2	0.51	2.41	8	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:268:ALA:HB3	0.51	1.80	8	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG22	0.50	1.83	2	1
1:A:90:TYR:CE2	1:A:92:PHE:HB2	0.50	2.41	7	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	0.50	1.83	6	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:117:TYR:CD2	0.50	2.40	7	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG3	0.50	1.83	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:301:ALA:HA	1:A:317:ILE:HG13	0.50	1.83	2	1
1:A:330:MET:CE	1:A:331:PRO:HD2	0.50	2.36	3	1
1:A:356:THR:HG23	1:A:359:GLU:HB2	0.50	1.82	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CD1	0.50	2.36	6	1
1:A:370:LYS:OXT	1:A:370:LYS:HG3	0.50	2.06	6	2
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HB2	0.50	2.04	2	2
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:N	0.50	2.21	6	2
1:A:125:PRO:HG2	1:A:131:GLU:OE2	0.50	2.06	5	1
1:A:196:VAL:HA	1:A:199:ILE:HD12	0.50	1.81	6	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:N	0.50	2.20	7	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:349:ASN:OD1	0.50	2.07	8	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:N	0.50	2.22	1	1
1:A:10:TRP:HA	1:A:38:GLU:O	0.50	2.06	5	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:218:ASN:N	0.50	2.80	6	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HB	0.50	1.82	1	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:ALA:HB2	0.50	2.06	1	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:267:ASN:HA	0.50	1.82	2	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	7	2
1:A:303:ALA:O	1:A:308:GLU:HB2	0.50	2.06	2	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD12	0.50	2.21	4	1
1:A:26:LYS:HZ1	1:A:288:GLU:HG2	0.50	1.66	6	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:CG2	0.50	2.17	7	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:333:ILE:HG21	0.50	2.41	8	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:CD1	0.50	2.31	2	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD23	0.50	2.42	3	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:CG2	0.50	2.36	3	1
1:A:62:TRP:HD1	1:A:63:ALA:H	0.50	1.50	7	2
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB3	0.50	2.36	7	2
1:A:333:ILE:O	1:A:336:MET:HG2	0.50	2.06	9	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:200:LYS:HE3	0.50	2.36	2	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:108:ILE:O	0.50	2.06	3	2
1:A:89:LEU:HG	1:A:94:TRP:CZ2	0.50	2.41	4	1
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:HE3	0.50	1.65	7	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:CG	0.50	2.37	2	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:94:TRP:HZ2	0.50	2.25	2	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:HD21	0.50	1.65	6	1
1:A:330:MET:HG2	1:A:331:PRO:HD2	0.50	1.84	4	1
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:CD1	0.49	2.36	1	1
1:A:51:ALA:HA	1:A:56:GLY:HA3	0.49	1.84	2	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.37	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HG2	0.49	1.83	6	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD22	0.49	2.07	8	1
1:A:157:THR:HA	1:A:195:LEU:HD21	0.49	1.84	8	1
1:A:124:ASN:O	1:A:126:PRO:HD3	0.49	2.07	1	3
1:A:147:LEU:CD1	1:A:224:MET:HG3	0.49	2.33	5	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD2	0.49	2.21	8	1
1:A:250:PHE:HD1	1:A:250:PHE:O	0.49	1.89	10	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB2	0.49	2.32	1	3
1:A:132:ILE:HG12	1:A:147:LEU:CD2	0.49	2.37	2	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:40:PRO:HG3	0.49	1.83	3	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:104:ILE:HD13	0.49	2.22	4	1
1:A:64:HIS:ND1	1:A:263:SER:HB3	0.49	2.23	4	2
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:HG2	0.49	1.83	3	1
1:A:28:GLU:HG3	1:A:34:LYS:HG3	0.49	1.83	4	1
1:A:284:LEU:C	1:A:290:LEU:HD23	0.49	2.33	5	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:139:LEU:HD11	0.49	2.38	7	1
1:A:178:ILE:HG23	1:A:178:ILE:O	0.49	2.06	10	1
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:N	0.49	2.23	10	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.49	2.75	2	4
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HA	0.49	2.30	2	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HE3	0.49	1.83	2	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD22	0.49	2.37	3	1
1:A:314:ASP:CG	1:A:318:ALA:HB2	0.49	2.33	5	1
1:A:214:GLU:HG2	1:A:217:PHE:CE2	0.49	2.42	8	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:HD12	0.49	2.08	1	1
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HD12	0.49	2.31	4	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HB2	0.49	2.38	4	1
1:A:286:THR:HG23	1:A:289:GLY:H	0.49	1.66	8	2
1:A:284:LEU:HD11	1:A:293:VAL:HG11	0.49	1.83	1	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.49	2.08	3	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HB3	0.49	1.84	5	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD13	0.49	2.38	8	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:255:SER:OG	0.49	2.08	4	2
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG23	0.49	1.83	3	1
1:A:311:LEU:HG	1:A:317:ILE:CD1	0.49	2.38	3	1
1:A:202:LYS:HA	1:A:202:LYS:NZ	0.49	2.23	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:OH	0.49	2.08	5	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:TRP:HE1	0.49	2.20	5	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.36	8	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:NZ	0.49	2.23	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:ILE:HG23	1:A:179:LYS:N	0.49	2.23	1	2
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:CD1	0.49	2.24	8	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:40:PRO:HD3	0.49	1.67	10	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:267:ASN:HD22	0.49	2.21	10	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB2	0.49	2.07	10	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:324:ALA:CB	0.49	2.38	10	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG23	0.49	1.83	2	1
1:A:302:VAL:CB	1:A:304:LEU:HD23	0.49	2.36	5	1
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD23	0.49	2.08	6	1
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:HD23	0.49	2.08	10	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:324:ALA:HB1	0.49	2.37	10	1
1:A:181:VAL:CG1	1:A:183:VAL:HG23	0.48	2.38	2	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CA	0.48	2.38	3	1
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.48	1.67	4	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:HG13	0.48	1.84	7	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG22	0.48	2.08	4	5
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.48	2.08	7	1
1:A:359:GLU:HA	1:A:363:ASP:OD2	0.48	2.08	7	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:HE1	0.48	1.67	8	1
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:ALA:HB3	0.48	2.07	10	1
1:A:355:GLN:NE2	1:A:360:ALA:HB2	0.48	2.23	1	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB3	0.48	1.85	3	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:LYS:HB2	0.48	2.09	4	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:O	0.48	2.07	5	2
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD23	0.48	2.33	5	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:224:MET:HE2	0.48	2.44	6	1
1:A:208:THR:OG1	1:A:213:ALA:HB2	0.48	2.08	6	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.48	1.85	6	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.48	2.30	7	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG23	0.48	2.09	7	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:97:VAL:O	0.48	2.08	1	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG12	0.48	2.07	3	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB3	0.48	2.08	5	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CE2	0.48	2.43	8	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CD	0.48	2.33	9	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:279:PHE:HZ	0.48	2.22	2	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG13	0.48	1.85	5	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG22	0.48	2.07	5	1
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD12	0.48	2.33	6	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:OD1	0.48	1.91	7	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:CA	0.48	2.29	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:HB	0.48	1.85	1	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG12	0.48	2.09	1	2
1:A:188:ALA:O	1:A:192:LEU:HB2	0.48	2.08	2	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.48	2.08	3	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:283:TYR:HE1	0.48	2.21	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HB3	0.48	2.07	4	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.08	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:CG2	0.48	2.38	7	1
1:A:68:GLY:O	1:A:104:ILE:HD11	0.48	2.08	1	1
1:A:88:LYS:C	1:A:89:LEU:HD12	0.48	2.33	2	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:94:TRP:HZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.48	1.69	4	1
1:A:253:GLN:CG	1:A:254:PRO:HD2	0.48	2.28	6	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HD12	0.48	1.86	7	1
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:CB	0.48	2.92	10	8
1:A:111:GLU:OE2	1:A:229:PRO:HB3	0.48	2.08	3	1
1:A:303:ALA:C	1:A:304:LEU:HD12	0.48	2.34	4	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG12	0.48	2.39	5	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:92:PHE:HB2	0.48	2.43	5	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD2	0.48	3.02	9	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.48	2.09	10	1
1:A:117:TYR:HD2	1:A:245:THR:OG1	0.48	1.91	1	1
1:A:290:LEU:CG	1:A:294:ASN:HD21	0.48	2.22	1	1
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.48	2.09	8	2
1:A:348:ILE:HD13	1:A:348:ILE:O	0.48	2.09	3	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:HB3	0.48	1.83	4	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:328:GLU:N	0.48	2.07	7	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD22	0.48	2.34	9	1
1:A:98:ARG:O	1:A:98:ARG:HG3	0.48	2.09	10	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HD12	0.48	2.43	1	3
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:CG2	0.48	2.38	1	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:O	0.48	2.08	2	2
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:HA3	0.48	2.09	2	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG12	0.48	1.86	3	2
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:OG	0.48	2.07	4	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:61:PHE:HB2	0.48	1.86	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:O	0.48	2.08	10	2
1:A:94:TRP:CZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.47	2.44	4	1
1:A:214:GLU:CG	1:A:218:ASN:HB2	0.47	2.32	6	1
1:A:42:LYS:HE3	1:A:43:LEU:HB3	0.47	1.85	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HD23	0.47	1.86	4	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB3	0.47	2.33	6	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:202:LYS:HE2	0.47	2.09	9	1
1:A:300:GLY:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	3	1
1:A:189:LYS:HZ1	1:A:362:LYS:HB3	0.47	1.68	4	1
1:A:297:LYS:O	1:A:297:LYS:HG2	0.47	2.08	4	1
1:A:96:ALA:HB2	1:A:329:ILE:HD11	0.47	1.85	5	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:327:GLY:C	0.47	2.17	7	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HG2	0.47	2.44	7	2
1:A:317:ILE:HD12	1:A:317:ILE:H	0.47	1.69	7	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:CG2	0.47	2.27	10	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.47	2.39	1	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:HB2	0.47	1.87	1	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:HG2	0.47	2.09	3	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.40	6	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:CA	0.47	2.97	7	2
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.47	2.34	7	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CE	0.47	2.40	7	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:108:ILE:O	0.47	2.10	1	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:303:ALA:N	0.47	2.24	1	2
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:H	0.47	1.68	2	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HG22	0.47	2.09	4	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:CG	0.47	2.39	6	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG12	0.47	1.87	7	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:285:LEU:HD11	0.47	2.09	9	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HG12	0.47	2.08	9	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:183:VAL:HG23	0.47	2.38	10	1
1:A:181:VAL:HB	1:A:365:GLN:NE2	0.47	2.25	2	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.47	2.10	3	1
1:A:344:ARG:CA	1:A:348:ILE:HD12	0.47	2.39	6	2
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HB2	0.47	2.37	5	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:223:ALA:HB2	0.47	1.86	5	2
1:A:316:ARG:H	1:A:316:ARG:CD	0.47	2.23	5	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HG23	0.47	2.40	6	1
1:A:195:LEU:HD23	1:A:199:ILE:HD11	0.47	1.86	6	1
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HG	0.47	2.10	6	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:328:GLU:HG2	0.47	2.10	7	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CB	0.47	2.34	9	2
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	8	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:255:SER:HB3	0.47	2.33	9	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:HG2	0.47	2.44	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:PHE:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.47	2.45	10	1
1:A:81:PRO:HB3	1:A:85:PHE:CD2	0.47	2.45	3	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:HE1	0.47	1.68	4	3
1:A:298:PRO:CG	1:A:316:ARG:HH12	0.47	2.22	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HG	0.47	1.86	7	2
1:A:202:LYS:HG3	1:A:203:HIS:H	0.47	1.69	2	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:OG1	0.47	2.10	4	1
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:64:HIS:CA	1:A:263:SER:HB2	0.47	2.23	9	1
1:A:292:ALA:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.47	2.36	5	1
1:A:71:ALA:O	1:A:76:LEU:HB2	0.47	2.09	7	2
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG23	0.47	2.10	7	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG23	0.47	2.11	10	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.46	2.63	10	7
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HG3	0.46	1.85	3	2
1:A:62:TRP:HE1	1:A:66:ARG:C	0.46	2.19	3	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:147:LEU:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.46	2.45	6	1
1:A:164:ASP:OD2	1:A:253:GLN:HB3	0.46	2.10	8	1
1:A:250:PHE:CZ	1:A:255:SER:HB2	0.46	2.44	10	1
1:A:10:TRP:N	1:A:59:ILE:O	0.46	2.48	1	4
1:A:113:LEU:HD21	1:A:227:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:183:VAL:HB	1:A:365:GLN:CD	0.46	2.35	3	1
1:A:329:ILE:O	1:A:330:MET:O	0.46	2.33	3	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:HB2	0.46	2.10	9	1
1:A:296:ASP:C	1:A:297:LYS:HG3	0.46	2.35	9	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:38:GLU:HB3	0.46	2.46	10	1
1:A:78:GLU:CA	1:A:104:ILE:HG22	0.46	2.40	1	1
1:A:287:ASP:HB2	1:A:291:GLU:OE2	0.46	2.10	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:N	0.46	2.83	6	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD22	0.46	2.40	9	1
1:A:62:TRP:CE2	1:A:67:PHE:CD2	0.46	3.03	3	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HB	0.46	2.33	3	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:CB	0.46	2.39	4	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:CD2	0.46	2.30	5	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:144:LYS:CB	0.46	2.41	4	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:O	0.46	2.33	5	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:283:TYR:HD2	0.46	1.71	5	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG13	0.46	2.10	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:THR:HB	1:A:130:GLU:HG2	0.46	1.87	10	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:59:ILE:HG21	0.46	1.87	5	2
1:A:275:LEU:O	1:A:278:GLU:HG3	0.46	2.11	3	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CD1	0.46	2.41	6	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:CD1	0.46	2.40	6	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HG23	0.46	2.11	7	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:H	0.46	2.09	3	1
1:A:88:LYS:CD	1:A:306:SER:HB2	0.46	2.35	3	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:ND2	0.46	2.24	3	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HG	0.46	2.41	6	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:GLN:N	0.46	2.26	1	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG23	0.46	2.11	4	1
1:A:349:ASN:O	1:A:352:SER:HB2	0.46	2.11	7	1
1:A:355:GLN:HG3	1:A:360:ALA:HB2	0.46	1.86	9	1
1:A:297:LYS:HG2	1:A:298:PRO:HD2	0.46	1.88	8	2
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG2	0.46	2.11	3	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:154:PRO:HD2	0.46	1.87	5	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG23	0.46	2.11	6	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:ND2	0.46	2.26	9	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:263:SER:HB3	0.46	2.45	10	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB2	0.46	2.11	10	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.46	1.87	3	1
1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:HD13	0.46	2.26	5	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD12	0.46	1.87	10	2
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:H	0.46	2.21	9	2
1:A:344:ARG:HG3	1:A:344:ARG:HH11	0.46	1.71	7	1
1:A:129:TRP:HE3	1:A:132:ILE:HG12	0.46	1.70	8	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HD2	0.45	2.10	2	1
1:A:297:LYS:HG3	1:A:298:PRO:HD2	0.45	1.87	2	1
1:A:274:GLU:O	1:A:278:GLU:HG2	0.45	2.11	3	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:CD	0.45	2.35	4	3
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.45	2.46	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.63	8	1
1:A:205:ASN:HB3	1:A:207:ASP:OD2	0.45	2.10	9	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:H	0.45	2.19	1	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HG	0.45	2.11	3	1
1:A:148:MET:HE3	1:A:216:ALA:HB2	0.45	1.88	4	1
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HB2	0.45	1.88	5	1
1:A:111:GLU:HB2	1:A:229:PRO:HG3	0.45	1.88	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLU:N	1:A:33:ILE:HB	0.45	2.27	2	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HB3	0.45	2.47	3	1
1:A:330:MET:HE2	1:A:331:PRO:HD2	0.45	1.87	3	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.45	2.78	6	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:227:ASN:HB2	0.45	2.45	7	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:H	0.45	1.70	8	1
1:A:193:THR:O	1:A:196:VAL:HG12	0.45	2.12	9	1
1:A:58:ASP:C	1:A:59:ILE:HG13	0.45	2.37	6	3
1:A:283:TYR:CZ	1:A:284:LEU:HD13	0.45	2.47	2	1
1:A:310:GLU:O	1:A:312:ALA:N	0.45	2.50	3	4
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HG13	0.45	2.37	4	2
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB3	0.45	2.11	5	2
1:A:10:TRP:O	1:A:11:ILE:HG23	0.45	2.12	6	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HG12	0.45	1.88	8	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:153:GLU:HG3	0.45	2.11	10	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:40:PRO:HD3	0.45	2.42	5	1
1:A:146:ALA:C	1:A:222:THR:HB	0.45	2.36	7	2
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.91	8	1
1:A:9:ILE:O	1:A:38:GLU:HB2	0.45	2.11	9	1
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:CD2	0.45	2.24	10	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:CG	0.45	2.60	2	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:PHE:CZ	0.45	3.00	2	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:CG1	0.45	2.38	4	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:LYS:HG3	0.45	2.11	5	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:315:PRO:CD	0.45	2.95	5	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.45	2.47	8	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:156:PHE:CE2	0.45	3.04	10	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.45	2.12	3	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	0.45	1.89	9	1
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:CB	0.45	2.42	1	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:95:ASP:N	0.45	2.85	3	1
1:A:65:ASP:CB	1:A:331:PRO:HG3	0.45	2.36	4	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG21	0.45	1.88	5	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HD12	0.45	2.12	6	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HG21	0.45	2.42	5	1
1:A:259:VAL:O	1:A:330:MET:HE3	0.45	2.12	6	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG13	0.45	2.11	10	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HB2	0.45	2.11	10	1
1:A:64:HIS:N	1:A:261:VAL:O	0.44	2.49	2	6
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HD3	0.44	2.12	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:362:LYS:HG3	1:A:363:ASP:N	0.44	2.26	4	1
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD1	0.44	3.05	7	1
1:A:333:ILE:HD11	1:A:335:GLN:NE2	0.44	2.27	7	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:NE1	0.44	2.27	8	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:CD1	0.44	2.38	3	1
1:A:283:TYR:CG	1:A:284:LEU:N	0.44	2.86	4	1
1:A:317:ILE:HA	1:A:320:THR:CG2	0.44	2.43	4	1
1:A:62:TRP:C	1:A:262:LEU:HD23	0.44	2.38	5	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:62:TRP:HE1	0.44	2.17	6	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:N	0.44	2.80	7	3
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG22	0.44	1.88	8	1
1:A:295:LYS:O	1:A:296:ASP:C	0.44	2.59	1	4
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HG13	0.44	2.48	2	1
1:A:156:PHE:CG	1:A:157:THR:N	0.44	2.85	2	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:CD2	0.44	2.42	3	1
1:A:158:TRP:HH2	1:A:168:ALA:HB2	0.44	1.73	4	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD1	0.44	2.41	8	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:37:VAL:O	0.44	2.12	9	1
1:A:311:LEU:CA	1:A:315:PRO:HG2	0.44	2.41	10	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:O	0.44	2.71	3	2
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.44	2.65	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:CB	0.44	3.00	7	1
1:A:345:THR:C	1:A:349:ASN:HB2	0.44	2.37	8	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ALA:H	0.44	2.19	10	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:CB	0.44	2.42	1	1
1:A:344:ARG:HD2	1:A:345:THR:HG23	0.44	1.88	1	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:HG23	0.44	2.42	2	1
1:A:119:LYS:HZ3	1:A:221:GLU:HB3	0.44	1.72	7	1
1:A:222:THR:C	1:A:224:MET:H	0.44	2.19	7	2
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.44	2.27	3	1
1:A:170:LYS:HD2	1:A:180:ASP:CG	0.44	2.38	6	1
1:A:340:TRP:O	1:A:344:ARG:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG3	0.44	2.12	7	1
1:A:299:LEU:CD1	1:A:300:GLY:H	0.44	2.25	10	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:HG22	0.44	1.89	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD23	0.44	2.12	2	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HB2	0.44	2.43	4	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG12	0.44	2.12	4	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:359:GLU:HG2	0.44	2.13	5	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:HG13	0.44	2.12	7	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:261:VAL:HG13	1:A:261:VAL:O	0.44	2.13	9	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG13	0.44	1.89	10	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CG	0.44	2.65	1	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG13	0.44	2.13	2	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CA	0.44	2.43	4	1
1:A:200:LYS:HA	1:A:204:MET:HA	0.44	1.88	5	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HB2	0.44	1.90	7	1
1:A:244:VAL:HG13	1:A:244:VAL:O	0.44	2.13	8	2
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.44	2.40	2	1
1:A:348:ILE:HG23	1:A:349:ASN:N	0.44	2.28	3	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:59:ILE:HD11	0.44	2.42	8	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CG1	0.44	2.43	8	2
1:A:112:ALA:C	1:A:113:LEU:HD22	0.44	2.37	9	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:97:VAL:O	0.43	2.12	3	1
1:A:340:TRP:HA	1:A:340:TRP:CE3	0.43	2.47	4	1
1:A:153:GLU:CB	1:A:155:TYR:CE2	0.43	3.00	8	1
1:A:302:VAL:CG2	1:A:317:ILE:HG21	0.43	2.43	10	1
1:A:290:LEU:HG	1:A:294:ASN:ND2	0.43	2.28	1	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:CG1	0.43	2.42	2	1
1:A:165:GLY:C	1:A:187:GLY:HA3	0.43	2.38	5	1
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB3	0.43	2.42	6	1
1:A:329:ILE:HG23	1:A:329:ILE:O	0.43	2.13	6	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:13:GLY:H	0.43	1.72	7	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:344:ARG:N	0.43	2.28	8	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:67:PHE:CZ	0.43	2.48	5	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:OH	0.43	2.13	6	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:CD2	0.43	2.44	9	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.43	2.49	10	1
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:PRO:HG2	0.43	1.89	3	1
1:A:279:PHE:HE1	1:A:283:TYR:CE1	0.43	2.31	3	1
1:A:366:THR:O	1:A:369:THR:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:N	0.43	2.23	9	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:HB2	0.43	1.88	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:GLU:C	1:A:312:ALA:H	0.43	2.21	2	4
1:A:15:LYS:O	1:A:16:GLY:C	0.43	2.61	5	3
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG21	0.43	1.90	2	1
1:A:308:GLU:CD	1:A:321:MET:HE1	0.43	2.38	3	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:33:ILE:HG13	0.43	2.43	5	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD1	0.43	3.02	5	1
1:A:160:LEU:CB	1:A:195:LEU:HD21	0.43	2.32	5	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:184:ASP:CG	1:A:362:LYS:HG2	0.43	2.38	3	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD12	0.43	2.39	5	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:NZ	0.43	2.28	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:161:ILE:O	0.43	2.14	2	1
1:A:172:GLU:C	1:A:174:GLY:H	0.43	2.22	7	2
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD13	0.43	2.13	4	1
1:A:302:VAL:O	1:A:308:GLU:HG3	0.43	2.13	5	1
1:A:280:LEU:CG	1:A:284:LEU:HD13	0.43	2.44	6	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:CE2	0.43	3.06	7	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:248:PRO:HG2	0.43	2.48	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:64:HIS:H	0.43	2.32	8	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD13	0.43	2.39	1	1
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD13	0.43	2.44	1	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:314:ASP:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.43	1.88	7	1
1:A:11:ILE:N	1:A:40:PRO:HD3	0.43	2.28	8	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD1	0.43	2.49	1	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CB	0.43	2.67	2	3
1:A:149:PHE:CG	1:A:156:PHE:CE2	0.43	3.07	4	1
1:A:219:LYS:O	1:A:220:GLY:C	0.43	2.62	4	1
1:A:170:LYS:HB3	1:A:177:ASP:OD2	0.43	2.13	6	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:262:LEU:O	0.43	2.67	9	2
1:A:118:ASN:O	1:A:119:LYS:C	0.43	2.62	1	1
1:A:257:PRO:HB2	1:A:323:ASN:OD1	0.43	2.13	3	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:N	0.43	2.29	4	1
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:CD	0.43	2.44	4	3
1:A:300:GLY:C	1:A:317:ILE:HG22	0.43	2.39	4	1
1:A:148:MET:CB	1:A:216:ALA:HB3	0.43	2.43	5	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HA	0.43	2.44	7	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:36:THR:HB	0.43	1.91	8	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:247:LEU:HA	0.43	1.91	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:278:GLU:OE1	1:A:278:GLU:HA	0.43	2.14	9	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.42	1.91	1	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:103:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:HH2	0.42	1.74	2	1
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:N	0.42	2.29	2	1
1:A:90:TYR:HD2	1:A:93:THR:N	0.42	2.12	3	1
1:A:365:GLN:O	1:A:368:ILE:HG13	0.42	2.14	5	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.90	6	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:CA	0.42	3.02	9	1
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:CD	0.42	2.39	2	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:HG22	0.42	1.88	2	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:308:GLU:CA	0.42	2.44	2	1
1:A:67:PHE:CB	1:A:263:SER:HB3	0.42	2.44	3	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:223:ALA:HB2	0.42	2.44	5	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:NE1	0.42	2.19	6	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:OD1	0.42	2.14	6	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:CG2	0.42	2.43	7	1
1:A:114:SER:OG	1:A:319:ALA:HB1	0.42	2.14	7	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HG2	0.42	2.49	1	1
1:A:62:TRP:NE1	1:A:67:PHE:HB2	0.42	2.28	3	1
1:A:45:GLU:O	1:A:48:PRO:HG2	0.42	2.13	4	2
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.42	2.87	5	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:133:PRO:HG3	0.42	2.49	9	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:HD22	0.42	1.74	9	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:206:ALA:HB1	0.42	1.92	2	1
1:A:192:LEU:HG	1:A:361:LEU:HD23	0.42	1.91	4	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:HB2	0.42	2.14	6	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:145:SER:HA	0.42	1.90	6	1
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:HH11	0.42	1.74	7	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:361:LEU:C	0.42	2.39	7	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:34:LYS:HG2	0.42	1.90	3	1
1:A:119:LYS:C	1:A:121:LEU:N	0.42	2.78	7	2
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:C	0.42	2.62	5	1
1:A:65:ASP:HA	1:A:332:ASN:CG	0.42	2.39	6	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:304:LEU:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:26:LYS:C	1:A:29:LYS:HB2	0.42	2.40	8	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:CB	0.42	3.02	8	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:CB	0.42	2.43	10	1
1:A:250:PHE:C	1:A:252:GLY:H	0.42	2.22	1	2
1:A:308:GLU:CG	1:A:321:MET:HE1	0.42	2.44	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:PRO:HG2	1:A:131:GLU:HB3	0.42	1.90	4	1
1:A:285:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:302:VAL:O	1:A:303:ALA:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:HD1	0.42	2.30	8	1
1:A:51:ALA:C	1:A:53:THR:N	0.42	2.77	8	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:HG23	0.42	2.50	8	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG13	0.42	2.43	2	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CG1	0.42	2.45	3	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:N	0.42	2.30	4	1
1:A:256:LYS:HZ2	1:A:328:GLU:HG3	0.42	1.73	8	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.42	2.15	8	1
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLU:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:124:ASN:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.42	1.91	5	1
1:A:47:PHE:HA	1:A:50:VAL:HG12	0.42	1.92	6	1
1:A:229:PRO:CB	1:A:316:ARG:HB3	0.42	2.44	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:CG1	0.42	2.42	7	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB2	0.42	2.15	9	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:40:PRO:HD3	0.42	2.47	10	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:183:VAL:HG23	0.42	1.91	10	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:360:ALA:HB1	0.42	1.91	2	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:HG23	0.42	1.92	3	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:315:PRO:CD	0.42	2.44	5	1
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG2	0.42	2.45	8	2
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:CG	0.42	2.39	9	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CG2	0.42	2.68	2	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:HG	0.42	2.15	4	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:CB	0.42	2.44	4	1
1:A:158:TRP:CA	1:A:161:ILE:HG12	0.42	2.44	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD23	0.42	1.88	6	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HE2	0.42	1.91	7	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG12	0.41	2.14	1	1
1:A:52:ALA:C	1:A:53:THR:OG1	0.41	2.62	2	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.88	2	1
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:H	0.41	1.75	2	2
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.41	2.50	4	1
1:A:171:TYR:CD1	1:A:171:TYR:N	0.41	2.88	8	1
1:A:172:GLU:O	1:A:172:GLU:HG3	0.41	2.14	8	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:97:VAL:HG13	0.41	2.50	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:CD	0.41	2.83	10	1
1:A:127:LYS:CE	1:A:128:THR:HB	0.41	2.45	1	1
1:A:274:GLU:O	1:A:277:LYS:HG3	0.41	2.14	1	1
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD23	0.41	2.45	2	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:258:PHE:O	1:A:323:ASN:HB3	0.41	2.14	3	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:228:GLY:HA3	0.41	2.45	4	1
1:A:169:PHE:HE1	1:A:339:PHE:HE2	0.41	1.58	4	1
1:A:330:MET:CG	1:A:331:PRO:HD2	0.41	2.45	4	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:HD2	0.41	2.28	5	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:284:LEU:HD22	0.41	2.35	5	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:320:THR:HA	1:A:323:ASN:HD21	0.41	1.75	7	1
1:A:69:GLY:O	1:A:72:GLN:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:124:ASN:N	1:A:124:ASN:HD22	0.41	2.13	1	1
1:A:336:MET:O	1:A:339:PHE:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:CG2	0.41	3.04	7	1
1:A:163:ALA:HB1	1:A:253:GLN:O	0.41	2.16	7	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:C	0.41	2.40	8	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.41	2.15	9	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:181:VAL:HG12	1:A:183:VAL:HG23	0.41	1.91	2	1
1:A:318:ALA:O	1:A:321:MET:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:94:TRP:CE3	0.41	2.50	4	1
1:A:152:GLN:CD	1:A:348:ILE:HG12	0.41	2.41	4	1
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:H	0.41	1.76	5	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:HD13	0.41	1.91	6	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:HG22	0.41	1.92	7	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:299:LEU:HD11	0.41	1.91	8	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:C	0.41	2.40	8	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:CG	0.41	3.03	10	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:361:LEU:O	0.41	2.16	1	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.41	2.89	2	2
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:86:GLN:C	1:A:88:LYS:N	0.41	2.79	6	2
1:A:333:ILE:O	1:A:333:ILE:HG23	0.41	2.15	10	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HA	0.41	1.91	2	1
1:A:110:VAL:H	1:A:301:ALA:HA	0.41	1.75	3	1
1:A:308:GLU:C	1:A:311:LEU:HB2	0.41	2.41	3	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG23	1:A:317:ILE:HG22	0.41	1.92	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.41	2.16	5	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CD1	0.41	2.45	6	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD2	0.41	3.00	9	1
1:A:99:TYR:O	1:A:100:ASN:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:149:PHE:N	1:A:149:PHE:CD1	0.41	2.88	10	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD1	0.41	1.76	1	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:H	0.41	1.75	1	1
1:A:259:VAL:HG22	1:A:260:GLY:N	0.41	2.29	2	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:108:ILE:N	1:A:108:ILE:CD1	0.41	2.83	4	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:122:LEU:HD11	0.41	2.51	6	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:HB2	0.41	2.51	8	1
1:A:63:ALA:CA	1:A:262:LEU:HA	0.41	2.22	8	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:314:ASP:HB2	0.41	1.90	1	1
1:A:310:GLU:C	1:A:312:ALA:N	0.41	2.79	2	2
1:A:341:TYR:HA	1:A:344:ARG:HH11	0.41	1.75	6	1
1:A:254:PRO:CG	1:A:326:LYS:HD3	0.41	2.46	8	1
1:A:151:LEU:N	1:A:151:LEU:CD1	0.41	2.80	1	1
1:A:183:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD11	0.41	1.93	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:10:TRP:N	0.41	2.30	2	1
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:HD22	0.41	2.31	2	1
1:A:82:ASP:CG	1:A:83:LYS:H	0.41	2.23	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:217:PHE:CE1	0.41	3.09	4	1
1:A:161:ILE:O	1:A:161:ILE:CG1	0.41	2.67	4	1
1:A:277:LYS:HG3	1:A:278:GLU:N	0.41	2.31	4	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:248:PRO:HD3	0.41	2.45	5	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.41	2.50	6	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD21	0.41	1.93	6	1
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:CA	0.41	2.22	8	1
1:A:89:LEU:CG	1:A:94:TRP:HE1	0.41	2.28	8	1
1:A:258:PHE:CB	1:A:330:MET:HG2	0.41	2.46	9	1
1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:PRO:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:203:HIS:C	1:A:205:ASN:H	0.41	2.23	10	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:CH2	0.41	2.51	2	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CE1	0.41	2.51	4	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:139:LEU:HD11	0.41	1.93	7	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:321:MET:HG3	1:A:325:GLN:HG2	0.41	1.93	10	1
1:A:66:ARG:NH1	1:A:66:ARG:HG2	0.40	2.31	2	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:CG	0.40	3.04	4	1
1:A:113:LEU:CG	1:A:228:GLY:HA3	0.40	2.46	4	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:150:ASN:N	0.40	2.88	4	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:179:LYS:HG2	0.40	2.15	4	1
1:A:135:LEU:HD23	1:A:138:GLU:CD	0.40	2.41	6	1
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:CD1	0.40	2.94	6	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HB2	0.40	1.91	7	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:43:LEU:HD13	0.40	2.41	2	1
1:A:6:LYS:HA	1:A:33:ILE:CG2	0.40	2.46	8	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG22	0.40	1.93	10	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:N	0.40	2.54	10	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:HG2	0.40	1.93	2	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.40	2.84	4	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:339:PHE:HE2	0.40	2.34	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:CE2	0.40	2.51	5	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:CG2	0.40	2.25	6	1
1:A:35:VAL:HG22	1:A:279:PHE:HE1	0.40	1.76	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	8	1
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:O	0.40	2.69	8	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:CA	0.40	2.69	8	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:328:GLU:HG3	0.40	1.73	8	1
1:A:5:GLY:O	1:A:33:ILE:HG23	0.40	2.17	9	1
1:A:333:ILE:CG2	1:A:334:PRO:HD2	0.40	2.46	1	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:CB	0.40	2.70	2	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HD12	0.40	2.16	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:O	0.40	2.17	10	1
1:A:252:GLY:C	1:A:253:GLN:HG2	0.40	2.41	10	1
1:A:156:PHE:CA	1:A:159:PRO:HG2	0.40	2.45	3	1
1:A:221:GLU:C	1:A:222:THR:CG2	0.40	2.94	3	1
1:A:275:LEU:HD23	1:A:278:GLU:CD	0.40	2.42	3	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:321:MET:HE1	0.40	2.16	3	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:HG23	0.40	2.49	5	1
1:A:368:ILE:HG13	1:A:369:THR:N	0.40	2.31	5	1
1:A:156:PHE:HZ	1:A:224:MET:HE2	0.40	1.75	6	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:CD1	0.40	2.47	7	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:57:PRO:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:40:PRO:CA	1:A:43:LEU:HG	0.40	2.45	8	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:140:LYS:O	0.40	2.16	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:349:ASN:C	1:A:355:GLN:HB2	0.40	2.41	8	1
1:A:158:TRP:CB	1:A:159:PRO:HD3	0.40	2.45	9	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:263:SER:O	0.40	2.74	10	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	357/370 (96%)	280±3 (79±1%)	55±4 (15±1%)	22±3 (6±1%)	2	19
All	All	3570/3700 (96%)	2804 (79%)	547 (15%)	219 (6%)	2	19

All 66 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	16	GLY	10
1	A	31	THR	10
1	A	143	GLY	10
1	A	257	PRO	10
1	A	311	LEU	10
1	A	97	VAL	9
1	A	248	PRO	8
1	A	108	ILE	8
1	A	32	GLY	7
1	A	150	ASN	7
1	A	178	ILE	7
1	A	174	GLY	7
1	A	55	ASP	5
1	A	88	LYS	5
1	A	120	ASP	5
1	A	126	PRO	5
1	A	285	LEU	5
1	A	53	THR	4
1	A	74	GLY	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	315	PRO	4
1	A	41	ASP	3
1	A	119	LYS	3
1	A	40	PRO	3
1	A	75	LEU	3
1	A	101	GLY	3
1	A	304	LEU	3
1	A	154	PRO	3
1	A	302	VAL	3
1	A	54	GLY	3
1	A	5	GLY	3
1	A	163	ALA	3
1	A	15	LYS	2
1	A	56	GLY	2
1	A	205	ASN	2
1	A	220	GLY	2
1	A	82	ASP	2
1	A	331	PRO	2
1	A	165	GLY	2
1	A	303	ALA	2
1	A	241	ASN	2
1	A	63	ALA	2
1	A	230	TRP	2
1	A	57	PRO	1
1	A	223	ALA	1
1	A	268	ALA	1
1	A	272	ASN	1
1	A	100	ASN	1
1	A	166	GLY	1
1	A	221	GLU	1
1	A	326	LYS	1
1	A	327	GLY	1
1	A	330	MET	1
1	A	59	ILE	1
1	A	104	ILE	1
1	A	254	PRO	1
1	A	297	LYS	1
1	A	72	GLN	1
1	A	121	LEU	1
1	A	123	PRO	1
1	A	332	ASN	1
1	A	87	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	52	ALA	1
1	A	270	SER	1
1	A	271	PRO	1
1	A	301	ALA	1
1	A	313	LYS	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	285/297 (96%)	183±7 (64±2%)	100±8 (35±3%)	1 9
All	All	2839/2970 (96%)	1834 (65%)	1005 (35%)	1 9

All 228 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	195	LEU	10
1	A	29	LYS	9
1	A	89	LEU	9
1	A	103	LEU	9
1	A	202	LYS	9
1	A	280	LEU	9
1	A	285	LEU	9
1	A	295	LYS	9
1	A	299	LEU	9
1	A	367	ARG	9
1	A	160	LEU	9
1	A	20	LEU	8
1	A	38	GLU	8
1	A	42	LYS	8
1	A	88	LYS	8
1	A	98	ARG	8
1	A	273	LYS	8
1	A	277	LYS	8
1	A	290	LEU	8
1	A	322	GLU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	362	LYS	8
1	A	370	LYS	8
1	A	102	LYS	8
1	A	25	LYS	7
1	A	46	LYS	7
1	A	75	LEU	7
1	A	119	LYS	7
1	A	122	LEU	7
1	A	127	LYS	7
1	A	129	TRP	7
1	A	140	LYS	7
1	A	148	MET	7
1	A	153	GLU	7
1	A	192	LEU	7
1	A	200	LYS	7
1	A	204	MET	7
1	A	224	MET	7
1	A	262	LEU	7
1	A	275	LEU	7
1	A	297	LYS	7
1	A	309	GLU	7
1	A	336	MET	7
1	A	344	ARG	7
1	A	15	LYS	7
1	A	203	HIS	7
1	A	251	LYS	7
1	A	330	MET	7
1	A	26	LYS	6
1	A	31	THR	6
1	A	34	LYS	6
1	A	44	GLU	6
1	A	55	ASP	6
1	A	66	ARG	6
1	A	78	GLU	6
1	A	83	LYS	6
1	A	104	ILE	6
1	A	147	LEU	6
1	A	151	LEU	6
1	A	170	LYS	6
1	A	177	ASP	6
1	A	201	ASN	6
1	A	218	ASN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	219	LYS	6
1	A	256	LYS	6
1	A	274	GLU	6
1	A	281	GLU	6
1	A	284	LEU	6
1	A	305	LYS	6
1	A	311	LEU	6
1	A	354	ARG	6
1	A	361	LEU	6
1	A	30	ASP	6
1	A	121	LEU	6
1	A	135	LEU	6
1	A	194	PHE	6
1	A	198	LEU	6
1	A	28	GLU	6
1	A	14	ASP	5
1	A	120	ASP	5
1	A	172	GLU	5
1	A	189	LYS	5
1	A	306	SER	5
1	A	313	LYS	5
1	A	326	LYS	5
1	A	340	TRP	5
1	A	349	ASN	5
1	A	352	SER	5
1	A	359	GLU	5
1	A	363	ASP	5
1	A	365	GLN	5
1	A	47	PHE	5
1	A	144	LYS	5
1	A	179	LYS	5
1	A	185	ASN	5
1	A	205	ASN	5
1	A	253	GLN	5
1	A	314	ASP	5
1	A	321	MET	5
1	A	6	LYS	5
1	A	138	GLU	5
1	A	316	ARG	5
1	A	49	GLN	5
1	A	214	GLU	5
1	A	39	HIS	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	43	LEU	4
1	A	45	GLU	4
1	A	79	ILE	4
1	A	124	ASN	4
1	A	131	GLU	4
1	A	142	LYS	4
1	A	175	LYS	4
1	A	207	ASP	4
1	A	209	ASP	4
1	A	270	SER	4
1	A	328	GLU	4
1	A	335	GLN	4
1	A	355	GLN	4
1	A	62	TRP	4
1	A	70	TYR	4
1	A	87	ASP	4
1	A	95	ASP	4
1	A	130	GLU	4
1	A	145	SER	4
1	A	152	GLN	4
1	A	173	ASN	4
1	A	291	GLU	4
1	A	310	GLU	4
1	A	317	ILE	4
1	A	72	GLN	4
1	A	113	LEU	4
1	A	137	LYS	4
1	A	288	GLU	4
1	A	7	LEU	4
1	A	139	LEU	4
1	A	164	ASP	4
1	A	180	ASP	4
1	A	296	ASP	4
1	A	230	TRP	4
1	A	9	ILE	3
1	A	10	TRP	3
1	A	86	GLN	3
1	A	90	TYR	3
1	A	106	TYR	3
1	A	150	ASN	3
1	A	158	TRP	3
1	A	197	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	245	THR	3
1	A	263	SER	3
1	A	278	GLU	3
1	A	286	THR	3
1	A	307	TYR	3
1	A	4	GLU	3
1	A	17	TYR	3
1	A	36	THR	3
1	A	53	THR	3
1	A	92	PHE	3
1	A	108	ILE	3
1	A	114	SER	3
1	A	132	ILE	3
1	A	272	ASN	3
1	A	304	LEU	3
1	A	332	ASN	3
1	A	333	ILE	3
1	A	18	ASN	3
1	A	76	LEU	3
1	A	128	THR	3
1	A	184	ASP	3
1	A	247	LEU	3
1	A	339	PHE	3
1	A	22	GLU	3
1	A	178	ILE	3
1	A	73	SER	3
1	A	341	TYR	3
1	A	41	ASP	2
1	A	93	THR	2
1	A	193	THR	2
1	A	210	TYR	2
1	A	227	ASN	2
1	A	266	ILE	2
1	A	282	ASN	2
1	A	283	TYR	2
1	A	320	THR	2
1	A	80	THR	2
1	A	82	ASP	2
1	A	115	LEU	2
1	A	225	THR	2
1	A	250	PHE	2
1	A	258	PHE	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	294	ASN	2
1	A	33	ILE	2
1	A	64	HIS	2
1	A	156	PHE	2
1	A	157	THR	2
1	A	11	ILE	2
1	A	111	GLU	2
1	A	155	TYR	2
1	A	241	ASN	2
1	A	255	SER	2
1	A	358	ASP	2
1	A	325	GLN	2
1	A	308	GLU	2
1	A	337	SER	2
1	A	118	ASN	2
1	A	221	GLU	2
1	A	169	PHE	1
1	A	99	TYR	1
1	A	12	ASN	1
1	A	27	PHE	1
1	A	199	ILE	1
1	A	267	ASN	1
1	A	348	ILE	1
1	A	369	THR	1
1	A	116	ILE	1
1	A	287	ASP	1
1	A	67	PHE	1
1	A	167	TYR	1
1	A	323	ASN	1
1	A	329	ILE	1
1	A	242	TYR	1
1	A	136	ASP	1
1	A	261	VAL	1
1	A	279	PHE	1
1	A	366	THR	1
1	A	368	ILE	1
1	A	85	PHE	1
1	A	183	VAL	1
1	A	226	ILE	1
1	A	58	ASP	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 oligosaccharides 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