



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 11:19 AM UTC

PDB ID : 2F33 / pdb\_00002f33  
Title : NMR solution structure of Ca<sup>2+</sup>-loaded calbindin D28K  
Authors : Kojetin, D.J.; Venters, R.A.; Kordys, D.R.; Thompson, R.J.; Kumar, R.; Cavanagh, J.  
Deposited on : 2005-11-18

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

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

A user guide is available at

<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                                                             |

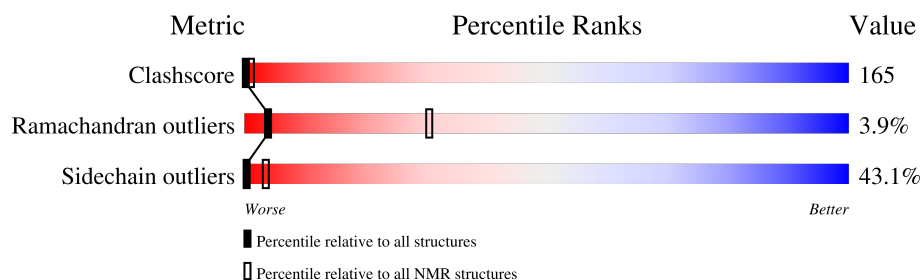
# 1 Overall quality at a glance

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1   | A     | 263    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations, lowest energy*.

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

| Well-defined (core) protein residues |                                 |                   |              |
|--------------------------------------|---------------------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core                    | Residue range (total)           | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1                                    | A:1-A:155, A:160-A:261<br>(257) | 0.89              | 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. No single-model clusters were found.

| Cluster number | Models              |
|----------------|---------------------|
| 1              | 1, 2, 5, 6, 7, 8, 9 |
| 2              | 3, 4, 10            |

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4192 atoms, of which 2085 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Calbindin.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |      |      |     |     |    | Trace |
|-----|-------|----------|-------|------|------|-----|-----|----|-------|
| 1   | A     | 261      | Total | C    | H    | N   | O   | S  | 0     |
|     |       |          | 4192  | 1336 | 2085 | 342 | 418 | 11 |       |

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

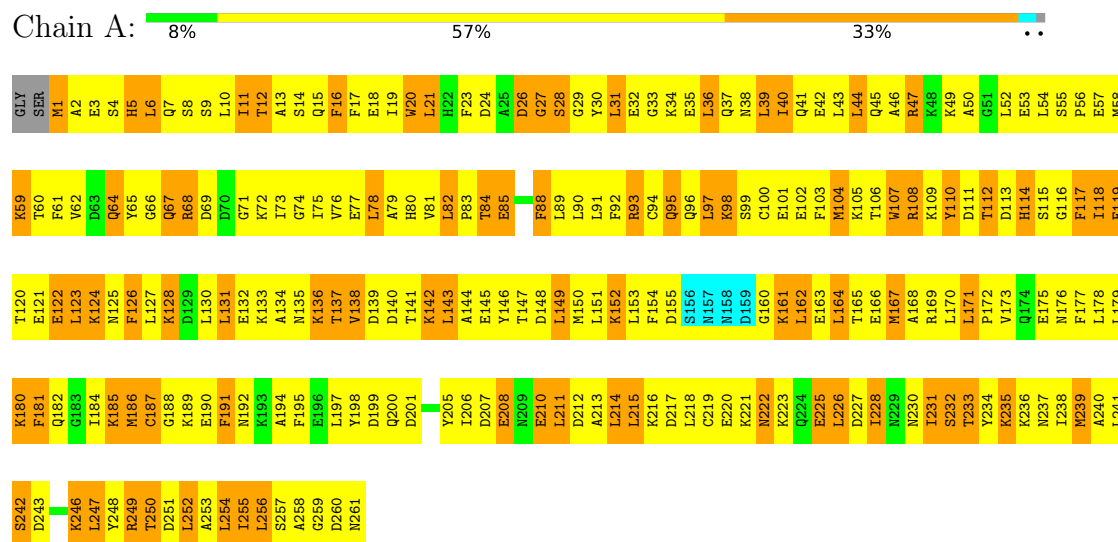
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment          | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|------------------|------------|
| A     | -1      | GLY      | -      | cloning artifact | UNP P07171 |
| A     | 0       | SER      | -      | cloning artifact | UNP P07171 |

## 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: Calbindin

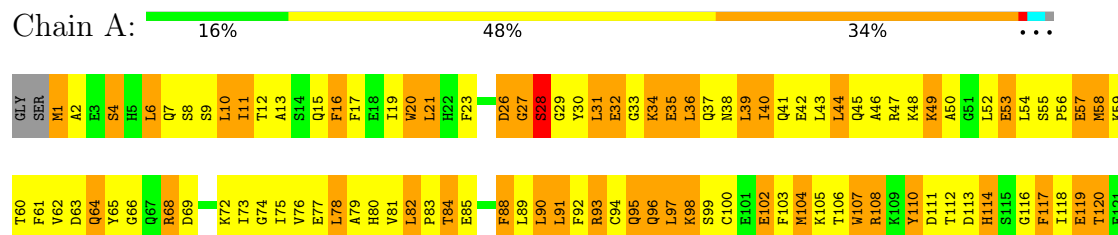


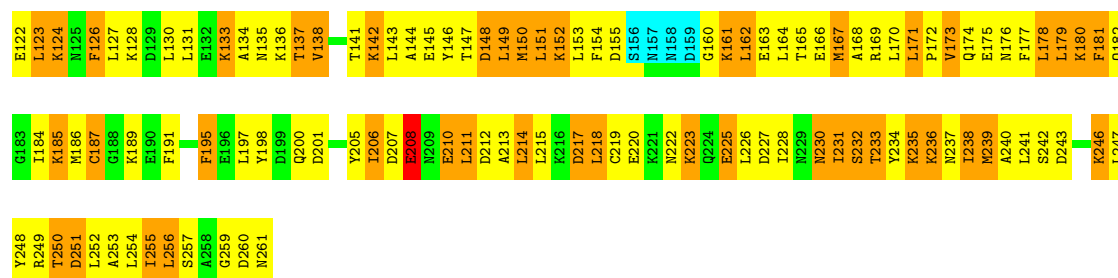
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Calbindin

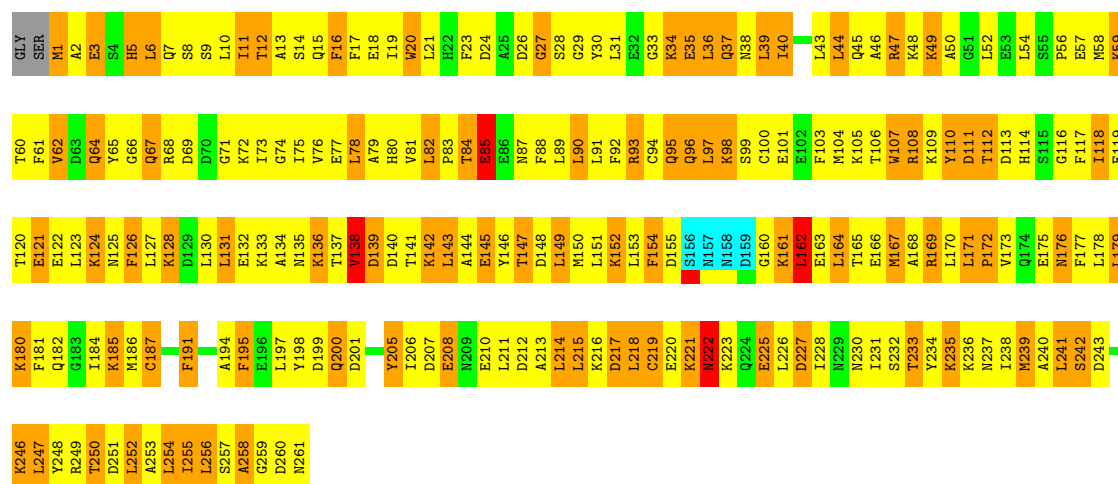




## 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Calbindin

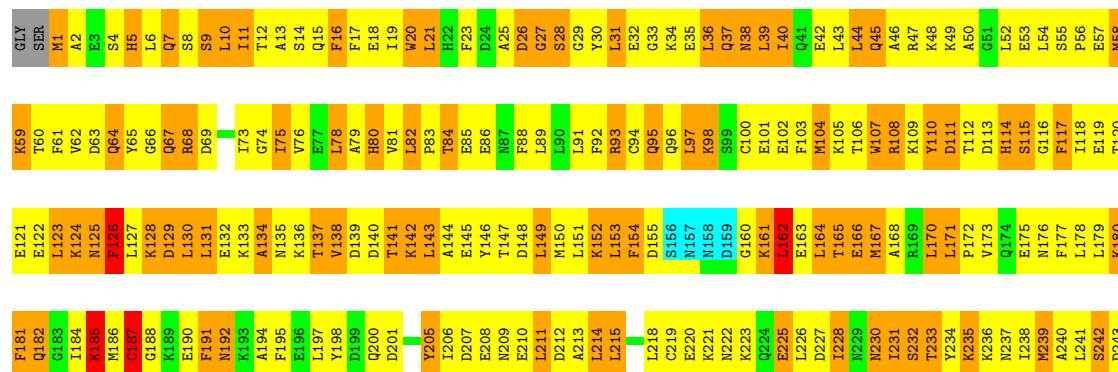
Chain A: 12% 51% 33%



## 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Calbindin

Chain A: 11% 50% 36%

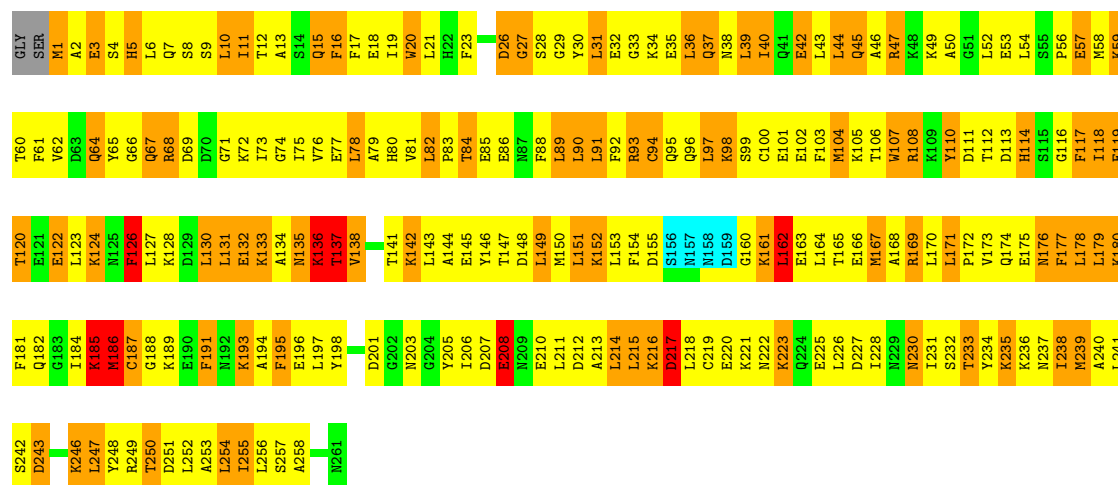




#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Calbindin

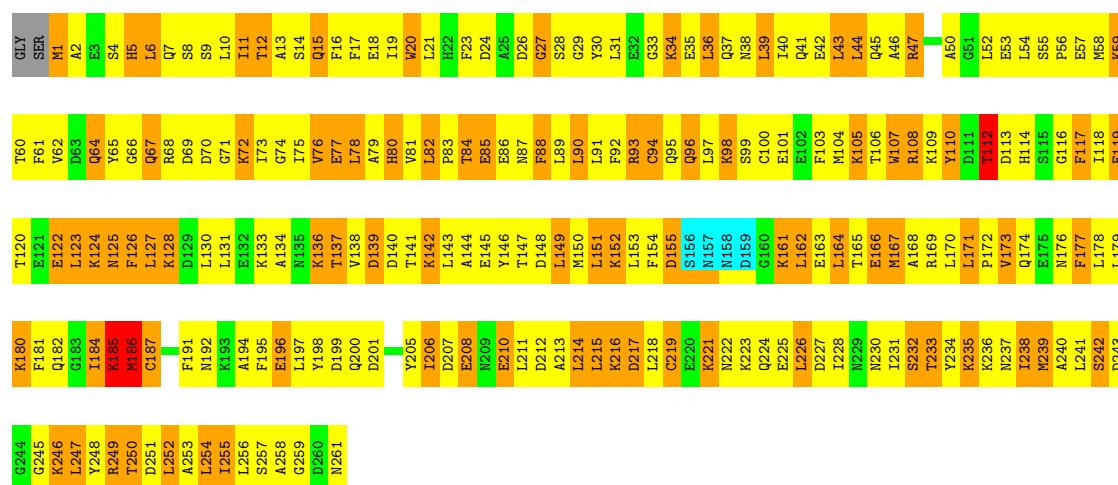
Chain A: 13% 51% 32% ...



#### 4.2.5 Score per residue for model 5

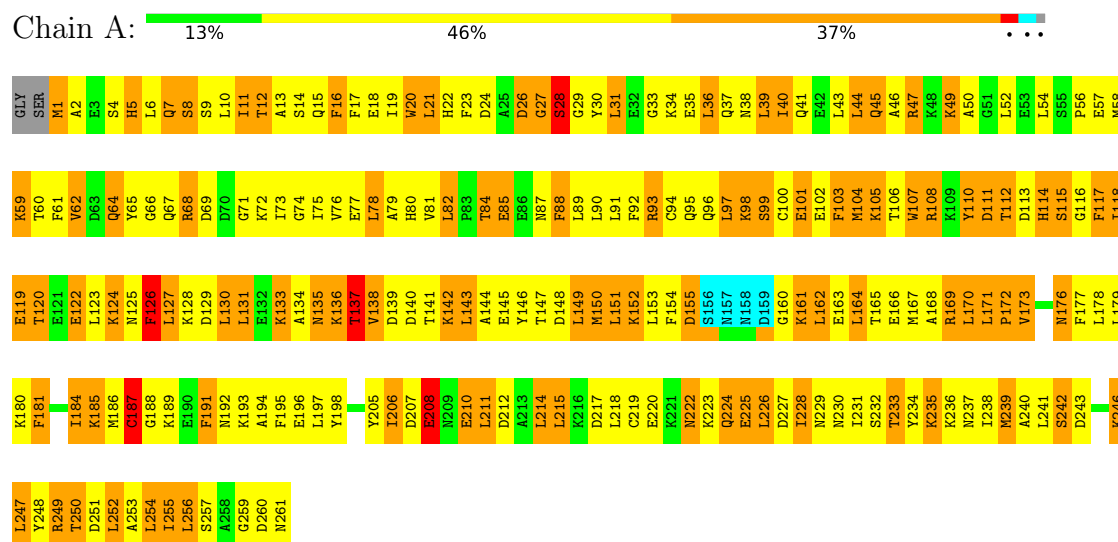
- Molecule 1: Calbindin

Chain A: 11% 52% 33% ...



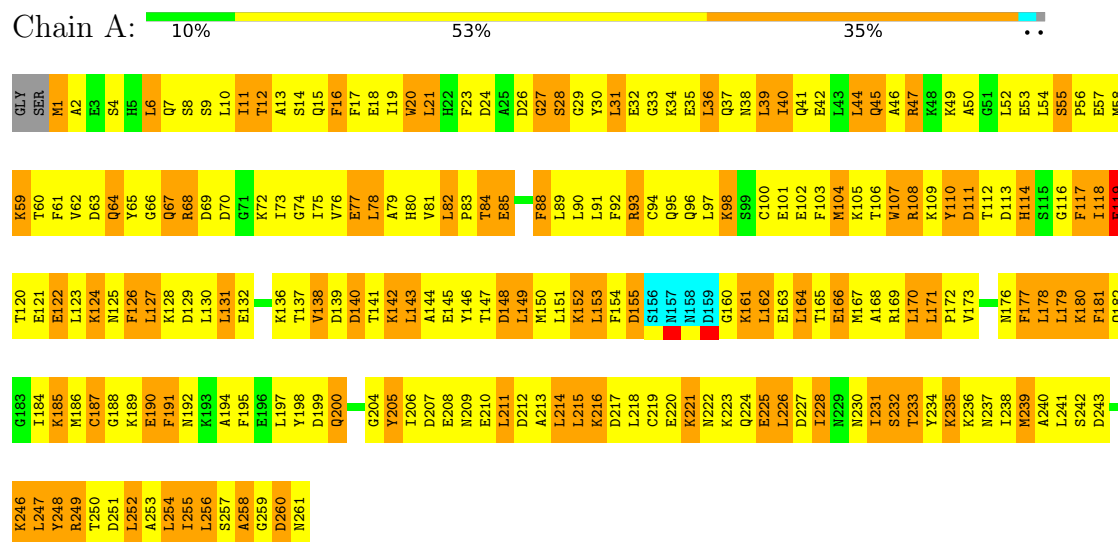
## 4.2.6 Score per residue for model 6

### • Molecule 1: Calbindin



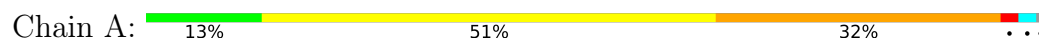
## 4.2.7 Score per residue for model 7

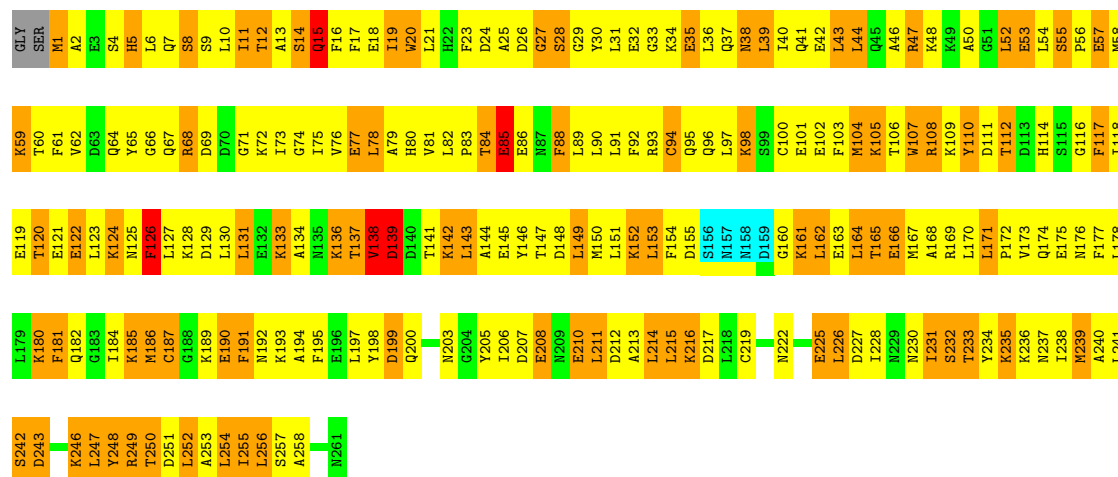
### • Molecule 1: Calbindin



## 4.2.8 Score per residue for model 8

### • Molecule 1: Calbindin

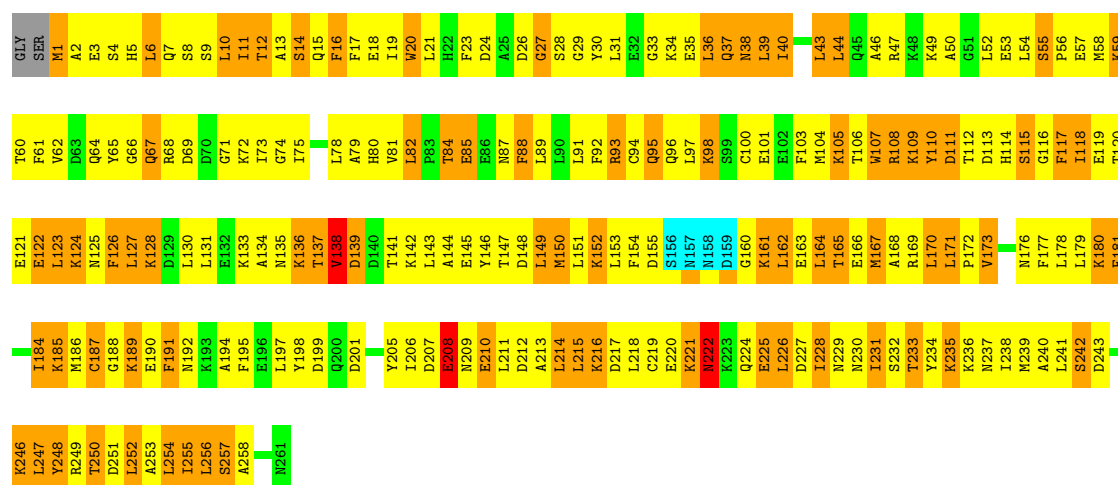




#### 4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: Calbindin

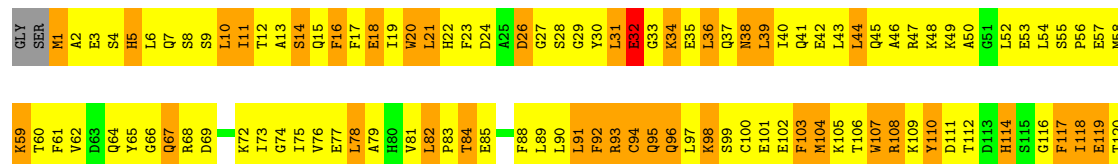
Chain A: 14% 51% 32% ...



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Calbindin

Chain A: 9% 54% 34% ...



|      |      |      |
|------|------|------|
| E121 | F181 | D243 |
| E122 | Q182 | G244 |
| L123 | G183 | G245 |
| K124 | I184 | K246 |
| N125 | K185 | L247 |
| F126 | M186 | Y248 |
| L127 | C187 | R249 |
| K128 | G188 | T250 |
| D129 | K189 | D251 |
| L130 | F190 | L252 |
| L131 | F191 | A253 |
| E132 | M192 | L254 |
| K133 | K193 | L255 |
| A134 | A194 | L256 |
| N135 | F195 | S257 |
| K136 | E196 | A258 |
| T137 | L197 | G259 |
| V138 | Y198 | D260 |
| D139 | D199 | N261 |
| D140 | Q200 |      |
| T141 |      |      |
| K142 | Y205 |      |
| L143 | I206 |      |
| A144 | D207 |      |
| E145 | E208 |      |
| Y146 | N209 |      |
| T147 | E210 |      |
| D148 | L211 |      |
| L149 | D212 |      |
| M150 | A213 |      |
| L151 | L214 |      |
| K152 | L215 |      |
| L153 | K216 |      |
| F154 | D217 |      |
| D155 | L218 |      |
| S156 | C219 |      |
| N157 | E220 |      |
| N158 | K221 |      |
| D159 | N222 |      |
| G160 | K223 |      |
| K161 | Q224 |      |
| L162 | E225 |      |
| E163 | L226 |      |
| L164 | D227 |      |
| T165 | I228 |      |
| E166 | N229 |      |
| M167 | N230 |      |
| A168 | I231 |      |
| R169 | S232 |      |
| L170 | T233 |      |
| L171 | Y234 |      |
| P172 | K235 |      |
| V173 | K236 |      |
| Q174 | N237 |      |
| E175 | L238 |      |
| N176 | M239 |      |
| F177 | A240 |      |
| L178 | L241 |      |
| L179 | S242 |      |
| K180 |      |      |

## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 900 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| CNS           | refinement     | 1.0     |

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     | 0.58±0.02    | 0±0/2109 ( 0.0± 0.0%) | 0.95±0.01   | 2±1/2829 ( 0.1± 0.0%) |
| All | All   | 0.59         | 0/21090 ( 0.0%)       | 0.95        | 23/28290 ( 0.1%)      |

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     | 126 | PHE  | CA-CB-CG | 7.21  | 121.02      | 113.80   | 4      | 4     |
| 1   | A     | 217 | ASP  | N-CA-C   | -6.16 | 104.48      | 111.07   | 1      | 5     |
| 1   | A     | 19  | ILE  | CB-CA-C  | -5.92 | 104.28      | 112.04   | 8      | 1     |
| 1   | A     | 162 | LEU  | N-CA-C   | 5.91  | 118.03      | 108.34   | 4      | 3     |
| 1   | A     | 248 | TYR  | N-CA-C   | -5.84 | 100.32      | 109.25   | 3      | 5     |
| 1   | A     | 37  | GLN  | N-CA-C   | -5.63 | 105.29      | 111.82   | 2      | 4     |
| 1   | A     | 15  | GLN  | N-CA-C   | -5.05 | 105.67      | 111.07   | 8      | 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     | 2077  | 2064     | 2062     | 682±31  |
| All | All   | 20770 | 20640    | 20620    | 6818    |

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 165.

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

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:205:TYR:CZ   | 1:A:246:LYS:HB3  | 1.13     | 1.79        | 8      | 7     |
| 1:A:128:LYS:HA   | 1:A:131:LEU:HD22 | 1.10     | 1.19        | 6      | 2     |
| 1:A:11:ILE:HG12  | 1:A:84:THR:HA    | 1.08     | 1.23        | 8      | 2     |
| 1:A:242:SER:HA   | 1:A:247:LEU:HD13 | 1.07     | 1.18        | 3      | 6     |
| 1:A:214:LEU:HD11 | 1:A:256:LEU:HD21 | 1.06     | 1.27        | 10     | 2     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:253:ALA:HB2  | 1.06     | 1.85        | 4      | 5     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:HD13 | 1.06     | 1.27        | 7      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:163:GLU:HB3  | 1.05     | 1.87        | 1      | 9     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:HG   | 1.05     | 1.23        | 9      | 7     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:143:LEU:HB2  | 1.03     | 1.26        | 4      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:HD21 | 1.02     | 1.31        | 3      | 7     |
| 1:A:247:LEU:HD11 | 1:A:251:ASP:HB2  | 1.02     | 1.25        | 7      | 5     |
| 1:A:103:PHE:CE1  | 1:A:171:LEU:HD11 | 1.00     | 1.88        | 8      | 1     |
| 1:A:150:MET:HE1  | 1:A:167:MET:HE3  | 1.00     | 1.28        | 10     | 2     |
| 1:A:94:CYS:HA    | 1:A:97:LEU:HD23  | 1.00     | 1.27        | 8      | 4     |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:143:LEU:HB2  | 1.00     | 1.34        | 10     | 3     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:HD22 | 0.99     | 1.31        | 1      | 4     |
| 1:A:47:ARG:HG2   | 1:A:54:LEU:HA    | 0.99     | 1.32        | 10     | 9     |
| 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:231:ILE:HG22 | 0.99     | 1.34        | 9      | 3     |
| 1:A:207:ASP:HB3  | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.98     | 1.35        | 2      | 1     |
| 1:A:7:GLN:HB3    | 1:A:52:LEU:HD12  | 0.98     | 1.35        | 7      | 5     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:131:LEU:HB3  | 0.97     | 1.32        | 3      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:HG11  | 0.97     | 1.35        | 1      | 4     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.96     | 1.32        | 5      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:246:LYS:HB3  | 0.96     | 1.96        | 6      | 7     |
| 1:A:47:ARG:HG3   | 1:A:54:LEU:HD12  | 0.96     | 1.37        | 1      | 1     |
| 1:A:121:GLU:HA   | 1:A:124:LYS:HD3  | 0.95     | 1.37        | 3      | 2     |
| 1:A:254:LEU:HD23 | 1:A:254:LEU:H    | 0.95     | 1.21        | 7      | 5     |
| 1:A:218:LEU:HB2  | 1:A:226:LEU:HG   | 0.95     | 1.36        | 9      | 2     |
| 1:A:58:MET:O     | 1:A:62:VAL:HG23  | 0.94     | 1.62        | 8      | 4     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.94     | 1.39        | 9      | 6     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.94     | 1.62        | 5      | 2     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.94     | 1.39        | 9      | 6     |
| 1:A:205:TYR:CZ   | 1:A:246:LYS:HD3  | 0.94     | 1.97        | 2      | 4     |
| 1:A:20:TRP:HA    | 1:A:23:PHE:CZ    | 0.94     | 1.97        | 7      | 10    |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.94     | 1.35        | 3      | 3     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:253:ALA:HA   | 0.94     | 1.96        | 5      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:147:THR:HB   | 0.94     | 1.40        | 6      | 6     |
| 1:A:91:LEU:HD23  | 1:A:136:LYS:HD2  | 0.94     | 1.34        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.94     | 1.98        | 6      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HG2  | 1:A:225:GLU:HA   | 0.93     | 1.39        | 7      | 8     |
| 1:A:13:ALA:HB1   | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.93     | 1.39        | 1      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CE2  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.93     | 2.56        | 4      | 6     |
| 1:A:131:LEU:HB2  | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.93     | 1.38        | 3      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HD23 | 1:A:252:LEU:HG   | 0.93     | 1.40        | 10     | 1     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:164:LEU:HD21 | 0.93     | 2.03        | 7      | 8     |
| 1:A:39:LEU:HD22  | 1:A:39:LEU:C     | 0.93     | 1.89        | 8      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:256:LEU:HG   | 0.92     | 1.99        | 1      | 2     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:54:LEU:CD2   | 0.92     | 1.93        | 5      | 4     |
| 1:A:20:TRP:HA    | 1:A:23:PHE:CE1   | 0.91     | 1.99        | 8      | 10    |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HD22 | 0.91     | 1.95        | 1      | 5     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:CE2  | 0.91     | 1.99        | 9      | 6     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:226:LEU:HD21 | 0.91     | 2.00        | 8      | 2     |
| 1:A:218:LEU:HA   | 1:A:221:LYS:HG2  | 0.91     | 1.41        | 9      | 3     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:HD3  | 0.91     | 2.00        | 10     | 2     |
| 1:A:23:PHE:CG    | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.91     | 1.99        | 8      | 10    |
| 1:A:191:PHE:HB2  | 1:A:256:LEU:HD12 | 0.91     | 1.42        | 10     | 4     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:134:ALA:HB2  | 0.90     | 1.42        | 8      | 4     |
| 1:A:131:LEU:HG   | 1:A:138:VAL:HB   | 0.90     | 1.42        | 6      | 2     |
| 1:A:94:CYS:O     | 1:A:97:LEU:HD12  | 0.90     | 1.66        | 2      | 5     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:151:LEU:HD11 | 0.90     | 1.42        | 4      | 4     |
| 1:A:164:LEU:HD23 | 1:A:178:LEU:HD11 | 0.90     | 1.42        | 6      | 2     |
| 1:A:4:SER:O      | 1:A:8:SER:HB2    | 0.90     | 1.67        | 4      | 8     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.89     | 2.02        | 3      | 5     |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:235:LYS:HB2  | 0.89     | 1.42        | 8      | 7     |
| 1:A:241:LEU:HB3  | 1:A:251:ASP:HB3  | 0.89     | 1.43        | 5      | 7     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:19:ILE:HG12  | 0.89     | 1.42        | 8      | 3     |
| 1:A:110:TYR:CE1  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.89     | 2.61        | 10     | 4     |
| 1:A:89:LEU:HA    | 1:A:92:PHE:HB3   | 0.89     | 1.45        | 6      | 7     |
| 1:A:242:SER:CB   | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.89     | 1.96        | 6      | 6     |
| 1:A:61:PHE:O     | 1:A:65:TYR:HB2   | 0.88     | 1.68        | 9      | 10    |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:238:ILE:HG21 | 0.88     | 1.45        | 6      | 2     |
| 1:A:95:GLN:HB3   | 1:A:171:LEU:HD22 | 0.88     | 1.43        | 8      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD12 | 1:A:255:ILE:N    | 0.88     | 1.83        | 1      | 2     |
| 1:A:211:LEU:HD22 | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.88     | 1.43        | 9      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HB3  | 1:A:143:LEU:HG   | 0.88     | 1.46        | 9      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CZ2  | 1:A:254:LEU:HD13 | 0.88     | 2.03        | 3      | 2     |
| 1:A:119:GLU:HB2  | 1:A:122:GLU:HB2  | 0.88     | 1.45        | 10     | 9     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:HG   | 0.88     | 1.44        | 10     | 7     |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:92:PHE:N     | 0.88     | 1.84        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:2:ALA:N      | 0.88     | 1.83        | 6      | 4     |
| 1:A:39:LEU:HD23  | 1:A:40:ILE:N     | 0.88     | 1.83        | 6      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HA    | 1:A:103:PHE:HB2  | 0.88     | 1.45        | 10     | 3     |
| 1:A:247:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.87     | 2.00        | 3      | 6     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.87     | 1.46        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:131:LEU:HD13 | 0.87     | 1.44        | 3      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE3  | 1:A:256:LEU:HD13 | 0.87     | 1.43        | 10     | 5     |
| 1:A:96:GLN:HA    | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.87     | 1.46        | 8      | 8     |
| 1:A:97:LEU:HD13  | 1:A:98:LYS:H     | 0.87     | 1.28        | 2      | 5     |
| 1:A:249:ARG:HA   | 1:A:252:LEU:HD22 | 0.87     | 1.47        | 6      | 3     |
| 1:A:7:GLN:HB2    | 1:A:52:LEU:HD12  | 0.87     | 1.44        | 10     | 3     |
| 1:A:231:ILE:HG13 | 1:A:234:TYR:HD2  | 0.87     | 1.29        | 10     | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD13 | 1:A:215:LEU:N    | 0.86     | 1.84        | 9      | 7     |
| 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:LEU:HD23 | 0.86     | 1.46        | 5      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CZ   | 1:A:171:LEU:HD21 | 0.86     | 2.04        | 8      | 2     |
| 1:A:85:GLU:HB3   | 1:A:88:PHE:HB3   | 0.86     | 1.44        | 9      | 6     |
| 1:A:10:LEU:HD12  | 1:A:85:GLU:HA    | 0.86     | 1.45        | 9      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HB3   | 1:A:52:LEU:O     | 0.86     | 1.69        | 1      | 3     |
| 1:A:181:PHE:HA   | 1:A:184:ILE:HD12 | 0.86     | 1.46        | 2      | 8     |
| 1:A:76:VAL:HB    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.86     | 1.47        | 2      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.86     | 1.46        | 7      | 2     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:147:THR:HG21 | 0.86     | 1.48        | 5      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HG    | 1:A:40:ILE:N     | 0.86     | 1.84        | 4      | 8     |
| 1:A:88:PHE:HB3   | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.86     | 1.47        | 3      | 3     |
| 1:A:128:LYS:HA   | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.86     | 1.48        | 7      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HD13  | 1:A:11:ILE:H     | 0.86     | 1.28        | 2      | 2     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:225:GLU:HG3  | 0.86     | 1.46        | 5      | 6     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:255:ILE:HG23 | 0.86     | 2.06        | 5      | 2     |
| 1:A:179:LEU:HD13 | 1:A:180:LYS:N    | 0.86     | 1.86        | 1      | 3     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:246:LYS:HD3  | 0.86     | 2.06        | 2      | 2     |
| 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:171:LEU:O    | 0.85     | 1.70        | 2      | 2     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.85     | 2.00        | 5      | 3     |
| 1:A:207:ASP:CB   | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.85     | 2.02        | 2      | 2     |
| 1:A:198:TYR:HB2  | 1:A:206:ILE:HD11 | 0.85     | 1.48        | 1      | 4     |
| 1:A:149:LEU:HD13 | 1:A:150:MET:N    | 0.85     | 1.87        | 8      | 8     |
| 1:A:104:MET:HG3  | 1:A:164:LEU:HD11 | 0.85     | 1.45        | 3      | 1     |
| 1:A:171:LEU:C    | 1:A:171:LEU:HD13 | 0.84     | 1.96        | 5      | 5     |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:246:LYS:HD3  | 0.84     | 2.07        | 4      | 6     |
| 1:A:179:LEU:HD22 | 1:A:180:LYS:N    | 0.84     | 1.87        | 2      | 4     |
| 1:A:54:LEU:HG    | 1:A:58:MET:HB3   | 0.84     | 1.44        | 3      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HD2  | 1:A:249:ARG:C    | 0.84     | 1.97        | 6      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:184:ILE:HD11 | 1:A:226:LEU:HG   | 0.84     | 1.49        | 5      | 4     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:205:TYR:C    | 0.84     | 2.54        | 7      | 3     |
| 1:A:12:THR:HB    | 1:A:145:GLU:HB3  | 0.84     | 1.47        | 4      | 10    |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:151:LEU:HD13 | 0.84     | 1.49        | 6      | 2     |
| 1:A:43:LEU:HG    | 1:A:58:MET:HE2   | 0.84     | 1.47        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:146:TYR:HE2  | 0.84     | 1.30        | 5      | 3     |
| 1:A:142:LYS:O    | 1:A:146:TYR:HB2  | 0.84     | 1.72        | 2      | 9     |
| 1:A:168:ALA:O    | 1:A:171:LEU:HD12 | 0.84     | 1.71        | 5      | 8     |
| 1:A:186:MET:CE   | 1:A:256:LEU:HD13 | 0.84     | 2.01        | 10     | 7     |
| 1:A:211:LEU:HD13 | 1:A:252:LEU:HD13 | 0.84     | 1.50        | 9      | 2     |
| 1:A:54:LEU:HG    | 1:A:58:MET:HB2   | 0.84     | 1.46        | 10     | 9     |
| 1:A:101:GLU:HA   | 1:A:237:ASN:CG   | 0.84     | 1.98        | 8      | 4     |
| 1:A:206:ILE:HG13 | 1:A:210:GLU:HB3  | 0.84     | 1.48        | 3      | 3     |
| 1:A:235:LYS:HE3  | 1:A:239:MET:HG3  | 0.83     | 1.50        | 8      | 6     |
| 1:A:162:LEU:HD11 | 1:A:166:GLU:OE2  | 0.83     | 1.73        | 3      | 2     |
| 1:A:165:THR:HA   | 1:A:168:ALA:HB3  | 0.83     | 1.47        | 8      | 9     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:246:LYS:HD3  | 0.83     | 2.06        | 4      | 6     |
| 1:A:36:LEU:HD23  | 1:A:65:TYR:HB3   | 0.83     | 1.50        | 10     | 4     |
| 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.83     | 1.50        | 5      | 2     |
| 1:A:13:ALA:H     | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.83     | 1.33        | 7      | 1     |
| 1:A:242:SER:HA   | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.83     | 1.47        | 4      | 2     |
| 1:A:214:LEU:O    | 1:A:214:LEU:HD22 | 0.83     | 1.73        | 7      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HD11 | 1:A:251:ASP:CB   | 0.83     | 2.02        | 7      | 3     |
| 1:A:143:LEU:HD12 | 1:A:144:ALA:N    | 0.83     | 1.89        | 1      | 5     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:19:ILE:HA    | 0.83     | 1.50        | 5      | 4     |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.83     | 2.09        | 5      | 6     |
| 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:OD1  | 0.83     | 1.73        | 8      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CD1   | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.83     | 2.08        | 8      | 10    |
| 1:A:128:LYS:HA   | 1:A:131:LEU:CD2  | 0.83     | 2.02        | 6      | 2     |
| 1:A:111:ASP:HB3  | 1:A:114:HIS:HA   | 0.82     | 1.51        | 7      | 3     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:HD2  | 0.82     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CD1  | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.82     | 2.03        | 10     | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.82     | 2.09        | 2      | 6     |
| 1:A:104:MET:HE3  | 1:A:241:LEU:HD13 | 0.82     | 1.48        | 3      | 3     |
| 1:A:123:LEU:HD12 | 1:A:147:THR:HG23 | 0.82     | 1.49        | 5      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:2:ALA:H      | 0.82     | 1.33        | 10     | 2     |
| 1:A:36:LEU:O     | 1:A:40:ILE:HB    | 0.82     | 1.74        | 1      | 4     |
| 1:A:16:PHE:HA    | 1:A:19:ILE:HD12  | 0.82     | 1.52        | 7      | 6     |
| 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:O    | 0.82     | 1.74        | 5      | 9     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.82     | 2.09        | 6      | 1     |
| 1:A:10:LEU:HA    | 1:A:83:PRO:O     | 0.82     | 1.74        | 8      | 7     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:127:LEU:CD2  | 1:A:147:THR:HB   | 0.82     | 2.05        | 10     | 6     |
| 1:A:13:ALA:HA    | 1:A:16:PHE:HD2   | 0.82     | 1.32        | 9      | 7     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HD11 | 0.82     | 2.10        | 4      | 1     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:171:LEU:HD23 | 0.82     | 1.72        | 10     | 2     |
| 1:A:95:GLN:HG3   | 1:A:171:LEU:HA   | 0.82     | 1.50        | 3      | 4     |
| 1:A:97:LEU:HD13  | 1:A:98:LYS:N     | 0.82     | 1.88        | 6      | 5     |
| 1:A:150:MET:O    | 1:A:166:GLU:HG3  | 0.82     | 1.75        | 1      | 9     |
| 1:A:211:LEU:HD13 | 1:A:235:LYS:O    | 0.82     | 1.74        | 10     | 1     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.82     | 1.74        | 2      | 4     |
| 1:A:128:LYS:CA   | 1:A:131:LEU:HD22 | 0.82     | 2.02        | 6      | 1     |
| 1:A:103:PHE:CD2  | 1:A:171:LEU:HD11 | 0.82     | 2.09        | 10     | 1     |
| 1:A:242:SER:HB3  | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.81     | 1.52        | 2      | 5     |
| 1:A:89:LEU:HA    | 1:A:92:PHE:HB2   | 0.81     | 1.51        | 1      | 4     |
| 1:A:13:ALA:HA    | 1:A:16:PHE:CD2   | 0.81     | 2.10        | 7      | 4     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.81     | 2.11        | 9      | 2     |
| 1:A:54:LEU:HD23  | 1:A:59:LYS:HA    | 0.81     | 1.51        | 6      | 10    |
| 1:A:10:LEU:HD12  | 1:A:85:GLU:CD    | 0.81     | 2.00        | 8      | 1     |
| 1:A:116:GLY:HA2  | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.81     | 1.53        | 1      | 1     |
| 1:A:57:GLU:O     | 1:A:61:PHE:HB2   | 0.81     | 1.74        | 8      | 10    |
| 1:A:219:CYS:HB2  | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.81     | 1.52        | 7      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.81     | 1.53        | 3      | 5     |
| 1:A:126:PHE:CZ   | 1:A:167:MET:HE1  | 0.81     | 2.10        | 2      | 4     |
| 1:A:154:PHE:CB   | 1:A:166:GLU:HB3  | 0.81     | 2.05        | 8      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:206:ILE:HD12 | 0.81     | 2.11        | 6      | 2     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:HB2   | 0.81     | 1.74        | 6      | 3     |
| 1:A:162:LEU:HD21 | 1:A:166:GLU:HG2  | 0.81     | 1.53        | 8      | 1     |
| 1:A:60:THR:O     | 1:A:64:GLN:N     | 0.81     | 2.12        | 5      | 10    |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.81     | 2.10        | 9      | 2     |
| 1:A:17:PHE:CG    | 1:A:153:LEU:HD21 | 0.80     | 2.10        | 6      | 5     |
| 1:A:23:PHE:CD1   | 1:A:31:LEU:HD11  | 0.80     | 2.11        | 2      | 8     |
| 1:A:227:ASP:O    | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.80     | 1.75        | 2      | 8     |
| 1:A:54:LEU:HB3   | 1:A:59:LYS:HD2   | 0.80     | 1.54        | 5      | 3     |
| 1:A:104:MET:HB3  | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.80     | 1.53        | 10     | 3     |
| 1:A:177:PHE:HB3  | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.80     | 2.11        | 10     | 4     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:HD11 | 0.80     | 1.52        | 9      | 3     |
| 1:A:96:GLN:CB    | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.80     | 2.06        | 5      | 6     |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:128:LYS:N    | 0.80     | 1.92        | 5      | 1     |
| 1:A:164:LEU:CD1  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.80     | 2.07        | 7      | 1     |
| 1:A:110:TYR:HE2  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.80     | 1.93        | 4      | 6     |
| 1:A:92:PHE:HA    | 1:A:146:TYR:CE2  | 0.80     | 2.12        | 4      | 4     |
| 1:A:39:LEU:HD23  | 1:A:40:ILE:H     | 0.80     | 1.36        | 6      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:HD21 | 0.80     | 2.11        | 8      | 2     |
| 1:A:254:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:H    | 0.80     | 1.36        | 8      | 2     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:163:GLU:HB3  | 0.80     | 2.12        | 6      | 10    |
| 1:A:92:PHE:CD2   | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.80     | 2.12        | 5      | 2     |
| 1:A:211:LEU:HB2  | 1:A:247:LEU:HD21 | 0.80     | 1.53        | 5      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:HB2  | 0.80     | 1.51        | 7      | 8     |
| 1:A:13:ALA:HB1   | 1:A:149:LEU:HG   | 0.80     | 1.52        | 4      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE3  | 1:A:256:LEU:CD1  | 0.80     | 2.07        | 5      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:LYS:N    | 0.80     | 1.92        | 7      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:147:THR:OG1  | 0.79     | 1.76        | 8      | 7     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:CG   | 0.79     | 2.07        | 9      | 8     |
| 1:A:43:LEU:HD21  | 1:A:58:MET:HG3   | 0.79     | 1.50        | 3      | 1     |
| 1:A:252:LEU:N    | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.79     | 1.92        | 9      | 3     |
| 1:A:251:ASP:HA   | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.79     | 1.55        | 7      | 3     |
| 1:A:205:TYR:C    | 1:A:205:TYR:HD1  | 0.79     | 1.86        | 7      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.79     | 2.07        | 1      | 3     |
| 1:A:95:GLN:HA    | 1:A:103:PHE:CG   | 0.79     | 2.13        | 9      | 7     |
| 1:A:96:GLN:HB3   | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.79     | 1.55        | 5      | 2     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:226:LEU:HD21 | 0.79     | 2.12        | 8      | 2     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HG   | 0.79     | 2.07        | 2      | 2     |
| 1:A:43:LEU:HD23  | 1:A:54:LEU:HD11  | 0.79     | 1.55        | 8      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD23 | 1:A:215:LEU:N    | 0.79     | 1.93        | 5      | 3     |
| 1:A:36:LEU:HD12  | 1:A:68:ARG:HB3   | 0.79     | 1.53        | 8      | 1     |
| 1:A:168:ALA:CA   | 1:A:171:LEU:HG   | 0.79     | 2.07        | 9      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD12  | 1:A:54:LEU:HD21  | 0.79     | 1.55        | 10     | 1     |
| 1:A:198:TYR:CZ   | 1:A:214:LEU:HA   | 0.79     | 2.13        | 5      | 9     |
| 1:A:186:MET:O    | 1:A:187:CYS:HB2  | 0.79     | 1.77        | 6      | 9     |
| 1:A:33:GLY:HA2   | 1:A:69:ASP:O     | 0.79     | 1.78        | 4      | 6     |
| 1:A:44:LEU:HG    | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.79     | 1.55        | 9      | 3     |
| 1:A:241:LEU:HD12 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.78     | 1.54        | 1      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG12 | 1:A:255:ILE:HG21 | 0.78     | 1.55        | 10     | 2     |
| 1:A:54:LEU:CG    | 1:A:58:MET:HB3   | 0.78     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD23 | 1:A:178:LEU:HD13 | 0.78     | 1.53        | 7      | 3     |
| 1:A:247:LEU:N    | 1:A:247:LEU:HD13 | 0.78     | 1.92        | 5      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CB   | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.78     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.78     | 1.55        | 9      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:HD11 | 0.78     | 2.13        | 10     | 1     |
| 1:A:105:LYS:HA   | 1:A:240:ALA:O    | 0.78     | 1.79        | 9      | 8     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:238:ILE:HB   | 0.78     | 1.56        | 5      | 5     |
| 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:234:TYR:HB3  | 0.78     | 1.54        | 7      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HG2   | 1:A:54:LEU:CA    | 0.78     | 2.08        | 5      | 9     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:154:PHE:CD2  | 1:A:166:GLU:HB2  | 0.78     | 2.14        | 3      | 6     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:226:LEU:HD21 | 0.78     | 2.14        | 10     | 2     |
| 1:A:206:ILE:CG1  | 1:A:210:GLU:HB3  | 0.78     | 2.08        | 2      | 4     |
| 1:A:247:LEU:CG   | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.77     | 2.07        | 9      | 3     |
| 1:A:254:LEU:CD2  | 1:A:255:ILE:HD12 | 0.77     | 2.09        | 9      | 2     |
| 1:A:214:LEU:HG   | 1:A:249:ARG:HH12 | 0.77     | 1.39        | 9      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:19:ILE:CA    | 0.77     | 2.10        | 5      | 2     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.77     | 1.79        | 6      | 2     |
| 1:A:39:LEU:HD13  | 1:A:40:ILE:N     | 0.77     | 1.93        | 8      | 1     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.77     | 1.54        | 9      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:226:LEU:HD21 | 0.77     | 2.12        | 10     | 1     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:CG1  | 0.77     | 2.10        | 9      | 7     |
| 1:A:1:MET:C      | 1:A:1:MET:HE3    | 0.77     | 2.04        | 7      | 2     |
| 1:A:241:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.77     | 1.55        | 7      | 2     |
| 1:A:222:ASN:HB3  | 1:A:225:GLU:HG2  | 0.77     | 1.53        | 6      | 8     |
| 1:A:36:LEU:HD21  | 1:A:65:TYR:HB3   | 0.77     | 1.56        | 3      | 4     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:HE2  | 0.77     | 1.57        | 6      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HB3  | 1:A:234:TYR:CE1  | 0.77     | 2.15        | 2      | 4     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:178:LEU:HD22 | 0.77     | 2.14        | 9      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:104:MET:HG3  | 0.77     | 2.15        | 10     | 2     |
| 1:A:95:GLN:HG3   | 1:A:171:LEU:HD22 | 0.77     | 1.57        | 10     | 1     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:169:ARG:HG2  | 0.77     | 1.80        | 10     | 7     |
| 1:A:234:TYR:O    | 1:A:238:ILE:HG13 | 0.77     | 1.80        | 4      | 6     |
| 1:A:151:LEU:HG   | 1:A:162:LEU:HD23 | 0.77     | 1.57        | 8      | 2     |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:235:LYS:HB3  | 0.77     | 1.56        | 7      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:CA   | 0.77     | 2.09        | 1      | 3     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.77     | 2.14        | 6      | 2     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:249:ARG:HD3  | 0.77     | 2.15        | 10     | 2     |
| 1:A:188:GLY:HA2  | 1:A:191:PHE:CD2  | 0.77     | 2.14        | 3      | 3     |
| 1:A:75:ILE:HG22  | 1:A:92:PHE:CZ    | 0.77     | 2.14        | 5      | 4     |
| 1:A:84:THR:HG22  | 1:A:89:LEU:HD11  | 0.77     | 1.54        | 10     | 4     |
| 1:A:31:LEU:HG    | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.77     | 1.56        | 10     | 4     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.76     | 2.15        | 7      | 6     |
| 1:A:110:TYR:HE1  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.76     | 1.97        | 10     | 4     |
| 1:A:138:VAL:HG23 | 1:A:143:LEU:HD22 | 0.76     | 1.57        | 3      | 1     |
| 1:A:146:TYR:CE1  | 1:A:150:MET:HE3  | 0.76     | 2.15        | 9      | 5     |
| 1:A:16:PHE:CD2   | 1:A:82:LEU:HD11  | 0.76     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.76     | 2.10        | 9      | 3     |
| 1:A:107:TRP:HZ3  | 1:A:162:LEU:HD13 | 0.76     | 1.39        | 5      | 6     |
| 1:A:23:PHE:CE2   | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.76     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.76     | 2.11        | 1      | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:104:MET:HB3  | 1:A:241:LEU:CD2  | 0.76     | 2.10        | 10     | 2     |
| 1:A:108:ARG:HD3  | 1:A:241:LEU:HA   | 0.76     | 1.57        | 6      | 1     |
| 1:A:43:LEU:CG    | 1:A:58:MET:HE2   | 0.76     | 2.11        | 4      | 2     |
| 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:234:TYR:HD2  | 0.76     | 1.40        | 6      | 4     |
| 1:A:146:TYR:HA   | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.76     | 1.57        | 6      | 8     |
| 1:A:14:SER:HB2   | 1:A:149:LEU:HB2  | 0.76     | 1.57        | 3      | 3     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:137:THR:HA   | 0.76     | 1.58        | 9      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:HD13 | 0.75     | 1.80        | 6      | 4     |
| 1:A:241:LEU:CB   | 1:A:251:ASP:HB3  | 0.75     | 2.11        | 8      | 9     |
| 1:A:47:ARG:HG3   | 1:A:54:LEU:CD1   | 0.75     | 2.09        | 1      | 1     |
| 1:A:212:ASP:HA   | 1:A:235:LYS:HB2  | 0.75     | 1.58        | 5      | 8     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:62:VAL:HG13  | 0.75     | 1.80        | 6      | 3     |
| 1:A:227:ASP:O    | 1:A:231:ILE:HB   | 0.75     | 1.82        | 10     | 2     |
| 1:A:249:ARG:HD2  | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.75     | 1.59        | 9      | 1     |
| 1:A:208:GLU:CA   | 1:A:239:MET:HE3  | 0.75     | 2.11        | 1      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HD21 | 1:A:251:ASP:HB2  | 0.75     | 1.58        | 4      | 2     |
| 1:A:116:GLY:HA3  | 1:A:250:THR:O    | 0.75     | 1.82        | 5      | 5     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:CG   | 0.75     | 2.09        | 9      | 5     |
| 1:A:215:LEU:HB3  | 1:A:231:ILE:HG23 | 0.75     | 1.58        | 1      | 1     |
| 1:A:68:ARG:HG3   | 1:A:71:GLY:HA3   | 0.75     | 1.57        | 8      | 6     |
| 1:A:85:GLU:C     | 1:A:89:LEU:HD12  | 0.75     | 2.06        | 2      | 7     |
| 1:A:247:LEU:HD23 | 1:A:252:LEU:CG   | 0.75     | 2.10        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD21 | 1:A:162:LEU:HD12 | 0.75     | 1.56        | 5      | 4     |
| 1:A:130:LEU:O    | 1:A:133:LYS:HG3  | 0.75     | 1.82        | 1      | 1     |
| 1:A:231:ILE:O    | 1:A:234:TYR:N    | 0.75     | 2.20        | 10     | 8     |
| 1:A:215:LEU:HB2  | 1:A:231:ILE:HG23 | 0.75     | 1.56        | 3      | 6     |
| 1:A:40:ILE:HG21  | 1:A:62:VAL:HA    | 0.75     | 1.59        | 10     | 2     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:253:ALA:HA   | 0.75     | 2.16        | 10     | 2     |
| 1:A:96:GLN:HB2   | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.75     | 1.58        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.75     | 1.58        | 3      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE1  | 1:A:237:ASN:HB3  | 0.75     | 1.42        | 6      | 1     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:231:ILE:HD12 | 0.75     | 1.56        | 10     | 1     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:HA   | 0.75     | 1.57        | 1      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HD13 | 1:A:226:LEU:HD21 | 0.75     | 1.57        | 1      | 4     |
| 1:A:128:LYS:HA   | 1:A:131:LEU:HD21 | 0.75     | 1.59        | 9      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:HG   | 0.74     | 1.81        | 2      | 4     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.74     | 2.17        | 10     | 2     |
| 1:A:162:LEU:CD2  | 1:A:166:GLU:HG2  | 0.74     | 2.11        | 8      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HB3  | 1:A:231:ILE:HD12 | 0.74     | 1.58        | 1      | 1     |
| 1:A:148:ASP:O    | 1:A:152:LYS:HD2  | 0.74     | 1.81        | 8      | 3     |
| 1:A:54:LEU:HG    | 1:A:58:MET:CB    | 0.74     | 2.12        | 3      | 5     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:149:LEU:C    | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.74     | 2.06        | 4      | 4     |
| 1:A:20:TRP:CZ2   | 1:A:75:ILE:HD13  | 0.74     | 2.17        | 1      | 3     |
| 1:A:205:TYR:OH   | 1:A:246:LYS:HD3  | 0.74     | 1.83        | 10     | 2     |
| 1:A:110:TYR:HE1  | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.74     | 2.00        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:238:ILE:CG2  | 0.74     | 2.12        | 6      | 3     |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:131:LEU:HD13 | 0.74     | 1.57        | 10     | 1     |
| 1:A:141:THR:O    | 1:A:145:GLU:HG2  | 0.74     | 1.82        | 1      | 8     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:171:LEU:HB3  | 0.74     | 1.82        | 6      | 7     |
| 1:A:12:THR:O     | 1:A:16:PHE:HB3   | 0.74     | 1.82        | 10     | 3     |
| 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:235:LYS:CB   | 0.74     | 2.12        | 10     | 2     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.74     | 1.57        | 1      | 1     |
| 1:A:241:LEU:HB2  | 1:A:251:ASP:HB3  | 0.74     | 1.57        | 8      | 4     |
| 1:A:82:LEU:HD12  | 1:A:82:LEU:O     | 0.74     | 1.83        | 8      | 2     |
| 1:A:181:PHE:HE1  | 1:A:256:LEU:HB3  | 0.74     | 1.42        | 7      | 4     |
| 1:A:226:LEU:HD23 | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.74     | 2.17        | 4      | 2     |
| 1:A:149:LEU:HD22 | 1:A:149:LEU:O    | 0.74     | 1.82        | 4      | 3     |
| 1:A:17:PHE:O     | 1:A:21:LEU:HB2   | 0.74     | 1.82        | 8      | 10    |
| 1:A:36:LEU:HD11  | 1:A:73:ILE:HG12  | 0.74     | 1.58        | 7      | 4     |
| 1:A:96:GLN:CA    | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.74     | 2.12        | 1      | 7     |
| 1:A:148:ASP:O    | 1:A:152:LYS:HG2  | 0.74     | 1.82        | 3      | 7     |
| 1:A:214:LEU:HD11 | 1:A:256:LEU:CD2  | 0.74     | 2.09        | 10     | 3     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.74     | 1.60        | 7      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HG3  | 1:A:225:GLU:CB   | 0.74     | 2.13        | 2      | 2     |
| 1:A:212:ASP:HA   | 1:A:215:LEU:HD11 | 0.74     | 1.59        | 8      | 7     |
| 1:A:242:SER:CB   | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.74     | 2.12        | 5      | 1     |
| 1:A:58:MET:O     | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.74     | 1.82        | 2      | 2     |
| 1:A:36:LEU:HD22  | 1:A:68:ARG:HB3   | 0.73     | 1.58        | 9      | 5     |
| 1:A:126:PHE:HZ   | 1:A:167:MET:HE1  | 0.73     | 1.42        | 2      | 1     |
| 1:A:169:ARG:HG2  | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.73     | 1.58        | 10     | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE2   | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.73     | 2.18        | 7      | 7     |
| 1:A:88:PHE:CG    | 1:A:142:LYS:HG2  | 0.73     | 2.18        | 2      | 1     |
| 1:A:103:PHE:HE2  | 1:A:171:LEU:HD23 | 0.73     | 1.44        | 5      | 3     |
| 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:172:PRO:HD2  | 0.73     | 1.58        | 7      | 3     |
| 1:A:249:ARG:HD2  | 1:A:249:ARG:O    | 0.73     | 1.82        | 10     | 3     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:HD22 | 0.73     | 1.43        | 5      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.73     | 2.17        | 6      | 2     |
| 1:A:78:LEU:O     | 1:A:81:VAL:HG12  | 0.73     | 1.82        | 9      | 10    |
| 1:A:107:TRP:CZ2  | 1:A:164:LEU:HD12 | 0.73     | 2.18        | 7      | 6     |
| 1:A:108:ARG:HD2  | 1:A:241:LEU:HA   | 0.73     | 1.59        | 1      | 4     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.73     | 1.83        | 9      | 4     |
| 1:A:36:LEU:HD11  | 1:A:65:TYR:HB3   | 0.73     | 1.61        | 8      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:215:LEU:HB3  | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.73     | 1.60        | 10     | 1     |
| 1:A:149:LEU:O    | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.73     | 1.83        | 6      | 5     |
| 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:234:TYR:HB2  | 0.73     | 1.60        | 7      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:237:ASN:HB3  | 0.73     | 2.17        | 5      | 4     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:206:ILE:HG21 | 0.73     | 2.19        | 5      | 2     |
| 1:A:191:PHE:CD1  | 1:A:253:ALA:HB2  | 0.73     | 2.17        | 4      | 3     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:HE3  | 0.73     | 1.61        | 3      | 5     |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:79:ALA:HB2   | 0.73     | 2.19        | 3      | 6     |
| 1:A:13:ALA:O     | 1:A:17:PHE:HB2   | 0.73     | 1.83        | 10     | 5     |
| 1:A:238:ILE:HG12 | 1:A:255:ILE:HG12 | 0.73     | 1.60        | 3      | 3     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:HG    | 0.73     | 1.83        | 7      | 2     |
| 1:A:247:LEU:N    | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.73     | 2.52        | 5      | 1     |
| 1:A:95:GLN:CG    | 1:A:171:LEU:HD22 | 0.73     | 2.14        | 10     | 2     |
| 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:172:PRO:HD2  | 0.73     | 1.60        | 8      | 2     |
| 1:A:179:LEU:HD22 | 1:A:179:LEU:C    | 0.73     | 2.09        | 7      | 5     |
| 1:A:171:LEU:C    | 1:A:171:LEU:CD1  | 0.72     | 2.62        | 5      | 7     |
| 1:A:171:LEU:HG   | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.72     | 1.58        | 2      | 4     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:HG23 | 0.72     | 2.19        | 5      | 2     |
| 1:A:247:LEU:HD11 | 1:A:249:ARG:HA   | 0.72     | 1.61        | 4      | 2     |
| 1:A:54:LEU:HD23  | 1:A:59:LYS:CA    | 0.72     | 2.14        | 6      | 8     |
| 1:A:130:LEU:HD13 | 1:A:133:LYS:HE3  | 0.72     | 1.58        | 5      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:HD23 | 0.72     | 1.83        | 6      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.72     | 1.60        | 6      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HG3  | 1:A:225:GLU:CA   | 0.72     | 2.14        | 4      | 2     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:1:MET:C      | 0.72     | 2.09        | 5      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:138:VAL:HG11 | 0.72     | 1.60        | 5      | 1     |
| 1:A:252:LEU:HD13 | 1:A:252:LEU:N    | 0.72     | 1.99        | 6      | 3     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.72     | 1.59        | 6      | 2     |
| 1:A:78:LEU:HD22  | 1:A:81:VAL:HG11  | 0.72     | 1.60        | 6      | 6     |
| 1:A:23:PHE:CD1   | 1:A:31:LEU:HD21  | 0.72     | 2.19        | 4      | 4     |
| 1:A:226:LEU:HD22 | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.72     | 2.20        | 10     | 5     |
| 1:A:151:LEU:HG   | 1:A:160:GLY:O    | 0.72     | 1.84        | 4      | 6     |
| 1:A:2:ALA:HB1    | 1:A:6:LEU:HD12   | 0.72     | 1.60        | 7      | 3     |
| 1:A:149:LEU:CD2  | 1:A:153:LEU:HD11 | 0.72     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CB    | 1:A:89:LEU:HG    | 0.72     | 2.15        | 3      | 2     |
| 1:A:11:ILE:HG13  | 1:A:84:THR:HA    | 0.72     | 1.62        | 5      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD22 | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.72     | 2.19        | 5      | 9     |
| 1:A:256:LEU:O    | 1:A:256:LEU:HD12 | 0.72     | 1.84        | 1      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HG    | 1:A:54:LEU:CD2   | 0.72     | 2.14        | 9      | 3     |
| 1:A:128:LYS:HA   | 1:A:138:VAL:HG11 | 0.72     | 1.59        | 3      | 2     |
| 1:A:206:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.72     | 1.59        | 3      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:104:MET:HE3  | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.72     | 1.61        | 1      | 4     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:163:GLU:CB   | 0.72     | 2.73        | 5      | 8     |
| 1:A:187:CYS:HA   | 1:A:258:ALA:HB2  | 0.72     | 1.61        | 10     | 1     |
| 1:A:236:LYS:O    | 1:A:239:MET:HB3  | 0.72     | 1.84        | 1      | 3     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:163:GLU:C    | 0.72     | 2.68        | 6      | 6     |
| 1:A:242:SER:HA   | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.72     | 2.09        | 3      | 2     |
| 1:A:104:MET:HE2  | 1:A:237:ASN:OD1  | 0.72     | 1.85        | 8      | 3     |
| 1:A:151:LEU:HB3  | 1:A:152:LYS:CE   | 0.72     | 2.14        | 6      | 3     |
| 1:A:10:LEU:HG    | 1:A:10:LEU:O     | 0.71     | 1.83        | 8      | 7     |
| 1:A:44:LEU:HA    | 1:A:54:LEU:HD13  | 0.71     | 1.60        | 3      | 6     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:131:LEU:CB   | 0.71     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:121:GLU:HA   | 1:A:124:LYS:CD   | 0.71     | 2.14        | 10     | 2     |
| 1:A:20:TRP:CE3   | 1:A:31:LEU:HD23  | 0.71     | 2.19        | 3      | 4     |
| 1:A:110:TYR:HE2  | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.71     | 2.02        | 4      | 3     |
| 1:A:238:ILE:CD1  | 1:A:255:ILE:HG21 | 0.71     | 2.15        | 3      | 5     |
| 1:A:40:ILE:CG1   | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.71     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.71     | 1.85        | 8      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:HD22 | 0.71     | 1.63        | 2      | 4     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:CD2  | 0.71     | 2.21        | 2      | 4     |
| 1:A:34:LYS:O     | 1:A:38:ASN:N     | 0.71     | 2.23        | 3      | 8     |
| 1:A:182:GLN:HA   | 1:A:185:LYS:HD3  | 0.71     | 1.62        | 7      | 1     |
| 1:A:2:ALA:HA     | 1:A:19:ILE:HG23  | 0.71     | 1.62        | 4      | 8     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:231:ILE:HG13 | 0.71     | 1.61        | 3      | 5     |
| 1:A:247:LEU:HD22 | 1:A:248:TYR:N    | 0.71     | 2.00        | 4      | 2     |
| 1:A:39:LEU:C     | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.71     | 2.61        | 8      | 1     |
| 1:A:118:ILE:O    | 1:A:161:LYS:HB2  | 0.71     | 1.86        | 6      | 5     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:CD2  | 0.71     | 2.03        | 8      | 4     |
| 1:A:246:LYS:CE   | 1:A:246:LYS:HA   | 0.71     | 2.16        | 3      | 2     |
| 1:A:247:LEU:CB   | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.71     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HG3  | 1:A:225:GLU:HA   | 0.71     | 1.61        | 4      | 2     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:255:ILE:HD13 | 0.71     | 1.62        | 4      | 4     |
| 1:A:117:PHE:CD2  | 1:A:161:LYS:HE2  | 0.71     | 2.21        | 10     | 1     |
| 1:A:161:LYS:HZ2  | 1:A:163:GLU:HB2  | 0.71     | 1.46        | 5      | 1     |
| 1:A:227:ASP:C    | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.70     | 2.11        | 2      | 5     |
| 1:A:235:LYS:O    | 1:A:239:MET:HB2  | 0.70     | 1.85        | 7      | 9     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.70     | 2.16        | 2      | 4     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.70     | 2.15        | 2      | 4     |
| 1:A:116:GLY:CA   | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.70     | 2.15        | 7      | 1     |
| 1:A:176:ASN:O    | 1:A:179:LEU:HD12 | 0.70     | 1.85        | 4      | 5     |
| 1:A:249:ARG:HD3  | 1:A:252:LEU:HG   | 0.70     | 1.63        | 3      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:O     | 0.70     | 1.84        | 8      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:143:LEU:CA   | 0.70     | 2.16        | 6      | 1     |
| 1:A:14:SER:HB3   | 1:A:149:LEU:HB2  | 0.70     | 1.62        | 5      | 2     |
| 1:A:231:ILE:HA   | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.70     | 2.22        | 3      | 6     |
| 1:A:95:GLN:OE1   | 1:A:170:LEU:HD11 | 0.70     | 1.86        | 8      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD13 | 1:A:180:LYS:H    | 0.70     | 1.45        | 1      | 5     |
| 1:A:123:LEU:HD22 | 1:A:126:PHE:CG   | 0.70     | 2.21        | 3      | 4     |
| 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:171:LEU:C    | 0.70     | 2.12        | 2      | 2     |
| 1:A:235:LYS:HE2  | 1:A:236:LYS:HA   | 0.70     | 1.63        | 4      | 4     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:132:GLU:N    | 0.70     | 2.01        | 2      | 1     |
| 1:A:126:PHE:O    | 1:A:130:LEU:HD23 | 0.70     | 1.86        | 8      | 2     |
| 1:A:40:ILE:CG2   | 1:A:62:VAL:HG13  | 0.70     | 2.16        | 1      | 3     |
| 1:A:177:PHE:CD2  | 1:A:181:PHE:CD2  | 0.70     | 2.80        | 6      | 5     |
| 1:A:147:THR:O    | 1:A:151:LEU:HD22 | 0.70     | 1.87        | 4      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:237:ASN:HB3  | 0.70     | 2.22        | 7      | 10    |
| 1:A:16:PHE:HE2   | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.70     | 1.47        | 10     | 5     |
| 1:A:206:ILE:HD11 | 1:A:211:LEU:N    | 0.70     | 2.01        | 10     | 2     |
| 1:A:88:PHE:HA    | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.70     | 1.63        | 8      | 1     |
| 1:A:207:ASP:HB3  | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.70     | 1.64        | 1      | 2     |
| 1:A:198:TYR:HB3  | 1:A:206:ILE:HD12 | 0.70     | 1.64        | 2      | 3     |
| 1:A:252:LEU:O    | 1:A:255:ILE:HB   | 0.70     | 1.87        | 9      | 7     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:CD1  | 0.70     | 2.40        | 7      | 2     |
| 1:A:61:PHE:CG    | 1:A:81:VAL:HG21  | 0.69     | 2.22        | 2      | 7     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.69     | 1.86        | 6      | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB2   | 1:A:72:LYS:HD2   | 0.69     | 1.64        | 10     | 2     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:130:LEU:CB   | 0.69     | 2.17        | 1      | 2     |
| 1:A:207:ASP:HA   | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.69     | 1.64        | 7      | 3     |
| 1:A:162:LEU:HD13 | 1:A:163:GLU:O    | 0.69     | 1.87        | 9      | 3     |
| 1:A:179:LEU:HD11 | 1:A:180:LYS:CD   | 0.69     | 2.17        | 5      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD11  | 1:A:78:LEU:HD21  | 0.69     | 1.63        | 6      | 2     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HB2  | 0.69     | 2.22        | 6      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:C     | 0.69     | 2.12        | 8      | 1     |
| 1:A:104:MET:HG2  | 1:A:164:LEU:HD21 | 0.69     | 1.64        | 9      | 2     |
| 1:A:253:ALA:O    | 1:A:257:SER:N    | 0.69     | 2.25        | 7      | 9     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.69     | 1.62        | 8      | 1     |
| 1:A:80:HIS:HB3   | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.69     | 1.62        | 2      | 2     |
| 1:A:177:PHE:O    | 1:A:181:PHE:HB2  | 0.69     | 1.86        | 10     | 9     |
| 1:A:20:TRP:HB3   | 1:A:78:LEU:HD22  | 0.69     | 1.64        | 1      | 2     |
| 1:A:31:LEU:HB3   | 1:A:36:LEU:CD1   | 0.69     | 2.17        | 7      | 8     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:256:LEU:HB3  | 0.69     | 2.22        | 8      | 6     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.69     | 1.87        | 7      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CA    | 1:A:23:PHE:CE1   | 0.69     | 2.76        | 4      | 10    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:85:GLU:O     | 1:A:89:LEU:HD12  | 0.69     | 1.86        | 4      | 3     |
| 1:A:43:LEU:HD12  | 1:A:44:LEU:N     | 0.69     | 2.02        | 6      | 1     |
| 1:A:104:MET:HE2  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.69     | 2.03        | 7      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:HB2  | 0.69     | 2.23        | 8      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:CB    | 0.69     | 2.18        | 7      | 6     |
| 1:A:118:ILE:HB   | 1:A:123:LEU:HD23 | 0.69     | 1.63        | 3      | 8     |
| 1:A:164:LEU:O    | 1:A:168:ALA:N    | 0.69     | 2.26        | 3      | 10    |
| 1:A:132:GLU:HG2  | 1:A:137:THR:HA   | 0.69     | 1.63        | 4      | 1     |
| 1:A:104:MET:CB   | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.69     | 2.18        | 6      | 3     |
| 1:A:105:LYS:HB2  | 1:A:240:ALA:HB1  | 0.69     | 1.65        | 3      | 3     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:HB2  | 0.69     | 1.87        | 1      | 2     |
| 1:A:215:LEU:CB   | 1:A:231:ILE:HG23 | 0.69     | 2.18        | 1      | 2     |
| 1:A:117:PHE:HB2  | 1:A:161:LYS:CD   | 0.69     | 2.17        | 2      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD22 | 1:A:214:LEU:C    | 0.69     | 2.12        | 7      | 3     |
| 1:A:43:LEU:CD2   | 1:A:58:MET:HE2   | 0.69     | 2.18        | 5      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:HB    | 0.69     | 1.65        | 5      | 1     |
| 1:A:10:LEU:HD12  | 1:A:85:GLU:HG2   | 0.68     | 1.64        | 1      | 3     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:165:THR:N    | 0.68     | 2.61        | 6      | 8     |
| 1:A:31:LEU:HD12  | 1:A:36:LEU:HA    | 0.68     | 1.62        | 3      | 3     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:138:VAL:HB   | 0.68     | 1.63        | 8      | 3     |
| 1:A:101:GLU:HA   | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.68     | 2.03        | 8      | 4     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:195:PHE:CD1  | 0.68     | 2.80        | 5      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HH12 | 1:A:256:LEU:HD11 | 0.68     | 1.47        | 7      | 1     |
| 1:A:136:LYS:HD3  | 1:A:138:VAL:HG23 | 0.68     | 1.65        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:255:ILE:HD12 | 0.68     | 2.23        | 10     | 1     |
| 1:A:55:SER:HB3   | 1:A:58:MET:HG3   | 0.68     | 1.65        | 5      | 2     |
| 1:A:92:PHE:HA    | 1:A:146:TYR:OH   | 0.68     | 1.88        | 5      | 8     |
| 1:A:30:TYR:CE2   | 1:A:173:VAL:HG11 | 0.68     | 2.22        | 2      | 8     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:HD13  | 0.68     | 2.23        | 5      | 3     |
| 1:A:84:THR:O     | 1:A:85:GLU:HG2   | 0.68     | 1.88        | 9      | 5     |
| 1:A:91:LEU:CD1   | 1:A:138:VAL:HG11 | 0.68     | 2.17        | 5      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:HD23 | 0.68     | 1.87        | 9      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HG3   | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.68     | 1.65        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:HA    | 1:A:133:LYS:HE2  | 0.68     | 1.63        | 2      | 1     |
| 1:A:121:GLU:HA   | 1:A:124:LYS:HD2  | 0.68     | 1.64        | 7      | 3     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:138:VAL:HB   | 0.68     | 1.65        | 3      | 2     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:CZ   | 0.68     | 2.23        | 10     | 2     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.68     | 1.65        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:146:TYR:CE2  | 0.68     | 2.23        | 1      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.68     | 2.81        | 6      | 6     |
| 1:A:136:LYS:HE2  | 1:A:138:VAL:HA   | 0.68     | 1.66        | 8      | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.68     | 2.81        | 2      | 1     |
| 1:A:58:MET:HE3   | 1:A:82:LEU:HA    | 0.68     | 1.65        | 5      | 4     |
| 1:A:216:LYS:HG3  | 1:A:231:ILE:HG21 | 0.68     | 1.64        | 7      | 1     |
| 1:A:219:CYS:CB   | 1:A:231:ILE:HD12 | 0.68     | 2.18        | 10     | 1     |
| 1:A:198:TYR:CB   | 1:A:206:ILE:HD11 | 0.68     | 2.18        | 1      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:170:LEU:HD22 | 0.68     | 2.23        | 8      | 2     |
| 1:A:118:ILE:HG13 | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.68     | 2.23        | 10     | 3     |
| 1:A:249:ARG:HG2  | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.68     | 2.19        | 8      | 1     |
| 1:A:10:LEU:HD12  | 1:A:84:THR:O     | 0.68     | 1.88        | 4      | 4     |
| 1:A:138:VAL:HG22 | 1:A:142:LYS:CB   | 0.68     | 2.19        | 2      | 2     |
| 1:A:154:PHE:CG   | 1:A:166:GLU:HB2  | 0.68     | 2.23        | 3      | 2     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:256:LEU:HA   | 0.68     | 2.23        | 4      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CZ   | 1:A:246:LYS:CB   | 0.68     | 2.70        | 8      | 5     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:195:PHE:CE1  | 0.68     | 2.82        | 5      | 1     |
| 1:A:118:ILE:CB   | 1:A:123:LEU:HD23 | 0.68     | 2.19        | 3      | 8     |
| 1:A:47:ARG:HG3   | 1:A:52:LEU:O     | 0.68     | 1.88        | 9      | 8     |
| 1:A:180:LYS:HG2  | 1:A:225:GLU:CA   | 0.68     | 2.18        | 10     | 8     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:170:LEU:HB2  | 0.68     | 2.24        | 7      | 1     |
| 1:A:150:MET:HE1  | 1:A:167:MET:CE   | 0.68     | 2.16        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:47:ARG:HD2   | 0.68     | 1.89        | 9      | 2     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:255:ILE:HD11 | 0.68     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:206:ILE:O    | 1:A:247:LEU:HB2  | 0.68     | 1.89        | 10     | 1     |
| 1:A:206:ILE:HG22 | 1:A:247:LEU:HB3  | 0.67     | 1.67        | 1      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE1   | 1:A:78:LEU:HD12  | 0.67     | 2.24        | 6      | 4     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.67     | 1.65        | 5      | 2     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.67     | 1.89        | 7      | 1     |
| 1:A:12:THR:HB    | 1:A:145:GLU:CB   | 0.67     | 2.19        | 4      | 3     |
| 1:A:143:LEU:C    | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.67     | 2.14        | 2      | 6     |
| 1:A:218:LEU:HA   | 1:A:221:LYS:CG   | 0.67     | 2.18        | 9      | 4     |
| 1:A:118:ILE:HG13 | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.67     | 2.23        | 6      | 3     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:HB    | 0.67     | 1.66        | 6      | 4     |
| 1:A:177:PHE:O    | 1:A:181:PHE:N    | 0.67     | 2.26        | 7      | 4     |
| 1:A:247:LEU:HD13 | 1:A:247:LEU:H    | 0.67     | 1.50        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HD13 | 0.67     | 2.19        | 9      | 1     |
| 1:A:47:ARG:CB    | 1:A:52:LEU:O     | 0.67     | 2.42        | 1      | 10    |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HD13 | 0.67     | 2.15        | 7      | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB1   | 1:A:149:LEU:CD1  | 0.67     | 2.17        | 1      | 1     |
| 1:A:97:LEU:C     | 1:A:97:LEU:HD22  | 0.67     | 2.14        | 6      | 5     |
| 1:A:120:THR:O    | 1:A:124:LYS:HD3  | 0.67     | 1.90        | 1      | 4     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:151:LEU:CD1  | 0.67     | 2.19        | 4      | 2     |
| 1:A:151:LEU:HB3  | 1:A:152:LYS:HE3  | 0.67     | 1.66        | 10     | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:127:LEU:CD2  | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.67     | 2.20        | 7      | 2     |
| 1:A:226:LEU:HD22 | 1:A:234:TYR:CZ   | 0.67     | 2.25        | 8      | 1     |
| 1:A:54:LEU:CG    | 1:A:58:MET:HB2   | 0.67     | 2.19        | 10     | 4     |
| 1:A:149:LEU:CD2  | 1:A:153:LEU:HD22 | 0.67     | 2.18        | 5      | 3     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.67     | 1.65        | 8      | 1     |
| 1:A:93:ARG:O     | 1:A:97:LEU:N     | 0.67     | 2.26        | 8      | 8     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:171:LEU:HA   | 0.67     | 1.66        | 1      | 1     |
| 1:A:24:ASP:CG    | 1:A:31:LEU:HD22  | 0.67     | 2.14        | 6      | 5     |
| 1:A:92:PHE:HA    | 1:A:146:TYR:CZ   | 0.67     | 2.23        | 10     | 4     |
| 1:A:149:LEU:HD22 | 1:A:149:LEU:C    | 0.67     | 2.15        | 6      | 4     |
| 1:A:88:PHE:O     | 1:A:91:LEU:HG    | 0.67     | 1.90        | 10     | 2     |
| 1:A:127:LEU:CD2  | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.67     | 2.20        | 5      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HB3  | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.67     | 1.67        | 10     | 2     |
| 1:A:119:GLU:HA   | 1:A:161:LYS:HG3  | 0.67     | 1.66        | 7      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HB3  | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.67     | 1.65        | 8      | 1     |
| 1:A:33:GLY:HA3   | 1:A:69:ASP:O     | 0.67     | 1.90        | 10     | 4     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:HD13 | 0.67     | 1.65        | 1      | 4     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:253:ALA:HB2  | 0.67     | 2.24        | 2      | 6     |
| 1:A:11:ILE:HG13  | 1:A:82:LEU:HD13  | 0.67     | 1.67        | 8      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:19:ILE:CG1   | 0.67     | 2.20        | 2      | 8     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:HG23  | 0.67     | 1.90        | 3      | 10    |
| 1:A:23:PHE:CD2   | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.67     | 2.25        | 3      | 9     |
| 1:A:144:ALA:O    | 1:A:147:THR:HG22 | 0.67     | 1.89        | 1      | 5     |
| 1:A:151:LEU:HB2  | 1:A:152:LYS:CE   | 0.67     | 2.20        | 1      | 2     |
| 1:A:43:LEU:HD21  | 1:A:58:MET:CG    | 0.67     | 2.20        | 3      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CE2  | 1:A:164:LEU:HD12 | 0.67     | 2.25        | 8      | 4     |
| 1:A:253:ALA:O    | 1:A:257:SER:HB3  | 0.66     | 1.90        | 6      | 3     |
| 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.66     | 2.25        | 10     | 4     |
| 1:A:13:ALA:N     | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.66     | 2.05        | 7      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.66     | 1.65        | 7      | 1     |
| 1:A:246:LYS:HZ3  | 1:A:246:LYS:C    | 0.66     | 1.98        | 7      | 1     |
| 1:A:231:ILE:HG13 | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.66     | 2.20        | 10     | 1     |
| 1:A:35:GLU:O     | 1:A:39:LEU:N     | 0.66     | 2.28        | 6      | 10    |
| 1:A:107:TRP:CD1  | 1:A:108:ARG:N    | 0.66     | 2.63        | 5      | 10    |
| 1:A:188:GLY:O    | 1:A:191:PHE:HD2  | 0.66     | 1.74        | 10     | 3     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:249:ARG:HG2  | 0.66     | 2.24        | 10     | 3     |
| 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.66     | 2.25        | 9      | 2     |
| 1:A:110:TYR:CE2  | 1:A:126:PHE:CG   | 0.66     | 2.83        | 4      | 5     |
| 1:A:31:LEU:HB3   | 1:A:36:LEU:HD12  | 0.66     | 1.67        | 5      | 5     |
| 1:A:205:TYR:OH   | 1:A:246:LYS:O    | 0.66     | 2.14        | 6      | 3     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:CB    | 0.66     | 2.19        | 5      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:206:ILE:HD12 | 1:A:249:ARG:HB2  | 0.66     | 1.65        | 9      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD23  | 1:A:136:LYS:CD   | 0.66     | 2.19        | 3      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD11 | 1:A:180:LYS:HD2  | 0.66     | 1.68        | 7      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:143:LEU:CB   | 0.66     | 2.15        | 4      | 2     |
| 1:A:173:VAL:HA   | 1:A:176:ASN:CG   | 0.66     | 2.15        | 3      | 3     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.66     | 2.24        | 8      | 4     |
| 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:235:LYS:HA   | 0.66     | 1.67        | 5      | 6     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.66     | 2.05        | 5      | 2     |
| 1:A:95:GLN:HB3   | 1:A:172:PRO:HD2  | 0.66     | 1.66        | 6      | 1     |
| 1:A:2:ALA:HA     | 1:A:6:LEU:HG     | 0.66     | 1.66        | 10     | 1     |
| 1:A:89:LEU:O     | 1:A:93:ARG:HD3   | 0.66     | 1.91        | 6      | 5     |
| 1:A:151:LEU:HA   | 1:A:162:LEU:HD23 | 0.66     | 1.68        | 10     | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HD13 | 0.66     | 1.68        | 1      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:78:LEU:HB3   | 0.66     | 2.26        | 8      | 3     |
| 1:A:31:LEU:HB2   | 1:A:73:ILE:CG1   | 0.66     | 2.21        | 3      | 5     |
| 1:A:121:GLU:O    | 1:A:125:ASN:HB2  | 0.66     | 1.90        | 8      | 4     |
| 1:A:191:PHE:CD1  | 1:A:192:ASN:N    | 0.66     | 2.64        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:H     | 1:A:91:LEU:HD12  | 0.66     | 1.50        | 4      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HA   | 1:A:231:ILE:HD13 | 0.66     | 1.67        | 8      | 2     |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:234:TYR:CE1  | 0.66     | 2.26        | 3      | 5     |
| 1:A:242:SER:CA   | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.66     | 2.19        | 4      | 2     |
| 1:A:239:MET:O    | 1:A:242:SER:HB3  | 0.66     | 1.90        | 4      | 3     |
| 1:A:13:ALA:CB    | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.66     | 2.20        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:138:VAL:HB   | 0.66     | 2.19        | 8      | 2     |
| 1:A:211:LEU:HD23 | 1:A:239:MET:HG2  | 0.66     | 1.66        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:234:TYR:HD1  | 0.66     | 2.08        | 7      | 3     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:CG   | 0.66     | 2.15        | 7      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:39:LEU:HB2   | 0.66     | 2.25        | 7      | 7     |
| 1:A:152:LYS:HE3  | 1:A:152:LYS:N    | 0.66     | 2.05        | 10     | 7     |
| 1:A:239:MET:HE2  | 1:A:242:SER:HB3  | 0.66     | 1.68        | 4      | 2     |
| 1:A:16:PHE:CD1   | 1:A:78:LEU:HD12  | 0.66     | 2.26        | 7      | 4     |
| 1:A:85:GLU:HB2   | 1:A:89:LEU:HG    | 0.66     | 1.68        | 3      | 2     |
| 1:A:206:ILE:HD11 | 1:A:210:GLU:C    | 0.66     | 2.16        | 3      | 2     |
| 1:A:36:LEU:O     | 1:A:40:ILE:HD12  | 0.66     | 1.89        | 5      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HB    | 1:A:170:LEU:HB3  | 0.66     | 1.68        | 6      | 2     |
| 1:A:76:VAL:HB    | 1:A:170:LEU:O    | 0.66     | 1.90        | 7      | 2     |
| 1:A:94:CYS:HB3   | 1:A:130:LEU:HD11 | 0.65     | 1.68        | 2      | 1     |
| 1:A:171:LEU:CG   | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.65     | 2.20        | 10     | 2     |
| 1:A:217:ASP:O    | 1:A:221:LYS:HG2  | 0.65     | 1.91        | 5      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HD12 | 1:A:248:TYR:O    | 0.65     | 1.92        | 3      | 6     |
| 1:A:218:LEU:HD11 | 1:A:256:LEU:HD22 | 0.65     | 1.67        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:96:GLN:HG3   | 1:A:172:PRO:HB3  | 0.65     | 1.66        | 6      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.65     | 1.67        | 6      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:131:LEU:H    | 0.65     | 1.50        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:CD1  | 0.65     | 2.09        | 9      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CD1  | 1:A:103:PHE:C    | 0.65     | 2.74        | 6      | 8     |
| 1:A:143:LEU:HD12 | 1:A:143:LEU:C    | 0.65     | 2.16        | 4      | 3     |
| 1:A:177:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:HG12 | 0.65     | 2.26        | 5      | 6     |
| 1:A:242:SER:CA   | 1:A:247:LEU:HD13 | 0.65     | 2.08        | 7      | 5     |
| 1:A:7:GLN:HE22   | 1:A:58:MET:HE1   | 0.65     | 1.51        | 4      | 1     |
| 1:A:36:LEU:O     | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.65     | 1.91        | 4      | 2     |
| 1:A:126:PHE:CE1  | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.65     | 2.26        | 4      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CE1  | 1:A:165:THR:HB   | 0.65     | 2.27        | 8      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE1   | 1:A:78:LEU:HB3   | 0.65     | 2.26        | 2      | 6     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:131:LEU:HA   | 0.65     | 1.68        | 6      | 3     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:HG   | 0.65     | 1.91        | 4      | 4     |
| 1:A:185:LYS:HG3  | 1:A:256:LEU:C    | 0.65     | 2.16        | 7      | 1     |
| 1:A:31:LEU:O     | 1:A:32:GLU:O     | 0.65     | 2.13        | 10     | 1     |
| 1:A:191:PHE:CD1  | 1:A:191:PHE:C    | 0.65     | 2.74        | 3      | 6     |
| 1:A:195:PHE:CG   | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.65     | 2.26        | 7      | 4     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.65     | 2.21        | 2      | 1     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.65     | 2.22        | 5      | 3     |
| 1:A:106:THR:HG22 | 1:A:110:TYR:OH   | 0.65     | 1.91        | 3      | 6     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:31:LEU:HD11  | 0.65     | 2.26        | 4      | 2     |
| 1:A:119:GLU:HA   | 1:A:161:LYS:CG   | 0.65     | 2.22        | 7      | 1     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:231:ILE:HD11 | 0.65     | 1.68        | 5      | 3     |
| 1:A:238:ILE:CG1  | 1:A:255:ILE:HG21 | 0.65     | 2.22        | 10     | 2     |
| 1:A:6:LEU:HD11   | 1:A:43:LEU:HD12  | 0.65     | 1.68        | 5      | 1     |
| 1:A:222:ASN:HB3  | 1:A:225:GLU:CG   | 0.65     | 2.21        | 8      | 7     |
| 1:A:131:LEU:CB   | 1:A:138:VAL:HB   | 0.65     | 2.22        | 10     | 2     |
| 1:A:1:MET:HA     | 1:A:5:HIS:CE1    | 0.65     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:95:GLN:CB    | 1:A:171:LEU:HD22 | 0.65     | 2.21        | 8      | 2     |
| 1:A:171:LEU:CD1  | 1:A:171:LEU:C    | 0.65     | 2.70        | 9      | 1     |
| 1:A:10:LEU:CD1   | 1:A:85:GLU:HG2   | 0.65     | 2.21        | 4      | 4     |
| 1:A:39:LEU:HG    | 1:A:40:ILE:H     | 0.65     | 1.50        | 9      | 6     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HG   | 0.65     | 2.25        | 1      | 1     |
| 1:A:227:ASP:O    | 1:A:231:ILE:N    | 0.65     | 2.29        | 3      | 7     |
| 1:A:251:ASP:CA   | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.65     | 2.22        | 7      | 2     |
| 1:A:110:TYR:CD2  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.65     | 2.85        | 4      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:HG23 | 0.65     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:CG1   | 0.65     | 2.22        | 9      | 5     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.65     | 1.69        | 1      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:75:ILE:HG12  | 1:A:169:ARG:HB2  | 0.65     | 1.67        | 6      | 3     |
| 1:A:123:LEU:O    | 1:A:126:PHE:HB3  | 0.65     | 1.92        | 4      | 7     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:131:LEU:CA   | 0.65     | 2.21        | 2      | 2     |
| 1:A:96:GLN:CB    | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.65     | 2.22        | 2      | 1     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:62:VAL:CG1   | 0.65     | 2.44        | 5      | 3     |
| 1:A:76:VAL:HG22  | 1:A:92:PHE:HE1   | 0.65     | 1.52        | 5      | 1     |
| 1:A:147:THR:O    | 1:A:151:LEU:HB2  | 0.65     | 1.91        | 10     | 2     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:226:LEU:HB3  | 0.65     | 2.31        | 8      | 1     |
| 1:A:206:ILE:HG13 | 1:A:210:GLU:HB2  | 0.65     | 1.67        | 10     | 1     |
| 1:A:46:ALA:O     | 1:A:50:ALA:HB3   | 0.64     | 1.91        | 5      | 10    |
| 1:A:181:PHE:HA   | 1:A:184:ILE:CD1  | 0.64     | 2.20        | 2      | 6     |
| 1:A:212:ASP:CA   | 1:A:235:LYS:HB2  | 0.64     | 2.22        | 1      | 4     |
| 1:A:16:PHE:HE1   | 1:A:78:LEU:HB3   | 0.64     | 1.52        | 10     | 6     |
| 1:A:75:ILE:HG22  | 1:A:92:PHE:CE2   | 0.64     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:239:MET:HE1  | 1:A:245:GLY:HA2  | 0.64     | 1.69        | 5      | 2     |
| 1:A:75:ILE:O     | 1:A:79:ALA:HB2   | 0.64     | 1.93        | 8      | 3     |
| 1:A:108:ARG:CB   | 1:A:241:LEU:HD22 | 0.64     | 2.22        | 8      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD2   | 1:A:142:LYS:HD2  | 0.64     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:206:ILE:O    | 1:A:247:LEU:N    | 0.64     | 2.30        | 1      | 6     |
| 1:A:2:ALA:HB1    | 1:A:6:LEU:CD1    | 0.64     | 2.23        | 4      | 3     |
| 1:A:7:GLN:HG2    | 1:A:50:ALA:HB3   | 0.64     | 1.69        | 10     | 2     |
| 1:A:111:ASP:CG   | 1:A:118:ILE:HD13 | 0.64     | 2.17        | 6      | 2     |
| 1:A:224:GLN:HB2  | 1:A:225:GLU:OE1  | 0.64     | 1.91        | 9      | 3     |
| 1:A:205:TYR:CG   | 1:A:246:LYS:NZ   | 0.64     | 2.65        | 7      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HG   | 1:A:143:LEU:O    | 0.64     | 1.92        | 8      | 2     |
| 1:A:195:PHE:O    | 1:A:199:ASP:HB2  | 0.64     | 1.92        | 7      | 3     |
| 1:A:123:LEU:CG   | 1:A:151:LEU:HD11 | 0.64     | 2.23        | 8      | 3     |
| 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:235:LYS:HB2  | 0.64     | 1.69        | 3      | 1     |
| 1:A:80:HIS:HB2   | 1:A:89:LEU:HD22  | 0.64     | 1.68        | 6      | 3     |
| 1:A:249:ARG:HG2  | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.64     | 1.67        | 4      | 1     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.64     | 2.08        | 6      | 1     |
| 1:A:47:ARG:CD    | 1:A:53:GLU:O     | 0.64     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:89:LEU:HA    | 1:A:92:PHE:CB    | 0.64     | 2.22        | 1      | 7     |
| 1:A:154:PHE:CD1  | 1:A:154:PHE:O    | 0.64     | 2.50        | 5      | 5     |
| 1:A:138:VAL:O    | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.64     | 1.92        | 5      | 2     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.64     | 1.68        | 10     | 4     |
| 1:A:94:CYS:HB3   | 1:A:130:LEU:HD22 | 0.64     | 1.70        | 10     | 2     |
| 1:A:20:TRP:O     | 1:A:31:LEU:HD21  | 0.64     | 1.91        | 10     | 4     |
| 1:A:218:LEU:CB   | 1:A:226:LEU:HG   | 0.64     | 2.20        | 9      | 2     |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:181:PHE:CD1  | 0.64     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:130:LEU:HB2  | 0.64     | 1.92        | 1      | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:HA    | 1:A:133:LYS:CE   | 0.64     | 2.22        | 2      | 1     |
| 1:A:207:ASP:CA   | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.64     | 2.23        | 2      | 3     |
| 1:A:205:TYR:HD1  | 1:A:206:ILE:N    | 0.64     | 1.91        | 3      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG21  | 1:A:96:GLN:HE21  | 0.64     | 1.52        | 4      | 1     |
| 1:A:39:LEU:CD2   | 1:A:40:ILE:N     | 0.64     | 2.60        | 6      | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB2   | 1:A:88:PHE:CZ    | 0.64     | 2.28        | 1      | 2     |
| 1:A:184:ILE:HD13 | 1:A:226:LEU:HD23 | 0.64     | 1.68        | 7      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CE2  | 1:A:167:MET:HE1  | 0.64     | 2.27        | 7      | 3     |
| 1:A:126:PHE:HD1  | 1:A:127:LEU:N    | 0.64     | 1.90        | 3      | 4     |
| 1:A:54:LEU:HB3   | 1:A:59:LYS:CD    | 0.64     | 2.22        | 4      | 3     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.64     | 2.23        | 4      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HB3  | 1:A:160:GLY:HA2  | 0.64     | 1.70        | 4      | 1     |
| 1:A:13:ALA:CB    | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.64     | 2.22        | 7      | 2     |
| 1:A:47:ARG:HD2   | 1:A:53:GLU:O     | 0.64     | 1.93        | 1      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HD13 | 1:A:151:LEU:N    | 0.64     | 2.07        | 1      | 1     |
| 1:A:181:PHE:HA   | 1:A:184:ILE:HB   | 0.64     | 1.70        | 1      | 6     |
| 1:A:205:TYR:CZ   | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.64     | 2.86        | 6      | 6     |
| 1:A:107:TRP:CZ3  | 1:A:118:ILE:HG12 | 0.64     | 2.27        | 9      | 4     |
| 1:A:119:GLU:O    | 1:A:123:LEU:HB2  | 0.64     | 1.93        | 3      | 4     |
| 1:A:79:ALA:CB    | 1:A:89:LEU:HD21  | 0.64     | 2.23        | 4      | 2     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.64     | 2.32        | 8      | 3     |
| 1:A:214:LEU:C    | 1:A:214:LEU:HD22 | 0.64     | 2.18        | 8      | 4     |
| 1:A:17:PHE:CG    | 1:A:153:LEU:HD13 | 0.64     | 2.28        | 8      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CE1   | 1:A:146:TYR:CG   | 0.63     | 2.86        | 1      | 1     |
| 1:A:207:ASP:CB   | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.63     | 2.23        | 1      | 3     |
| 1:A:6:LEU:HD22   | 1:A:19:ILE:CG2   | 0.63     | 2.24        | 9      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.63     | 2.86        | 2      | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:231:ILE:O    | 0.63     | 2.46        | 6      | 7     |
| 1:A:76:VAL:O     | 1:A:80:HIS:HB2   | 0.63     | 1.92        | 3      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:165:THR:OG1  | 0.63     | 2.51        | 8      | 6     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.63     | 2.28        | 9      | 2     |
| 1:A:126:PHE:CE1  | 1:A:130:LEU:HD21 | 0.63     | 2.27        | 5      | 2     |
| 1:A:150:MET:HA   | 1:A:166:GLU:CD   | 0.63     | 2.18        | 10     | 2     |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:235:LYS:CB   | 0.63     | 2.23        | 5      | 8     |
| 1:A:91:LEU:O     | 1:A:94:CYS:HB2   | 0.63     | 1.93        | 5      | 4     |
| 1:A:138:VAL:HB   | 1:A:142:LYS:CB   | 0.63     | 2.24        | 1      | 1     |
| 1:A:208:GLU:CB   | 1:A:239:MET:HE3  | 0.63     | 2.23        | 1      | 3     |
| 1:A:103:PHE:O    | 1:A:106:THR:HB   | 0.63     | 1.93        | 2      | 7     |
| 1:A:55:SER:HB3   | 1:A:58:MET:HG2   | 0.63     | 1.69        | 10     | 1     |
| 1:A:246:LYS:HE3  | 1:A:246:LYS:HA   | 0.63     | 1.71        | 10     | 1     |
| 1:A:2:ALA:O      | 1:A:6:LEU:HB2    | 0.63     | 1.92        | 7      | 10    |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:33:GLY:C     | 1:A:69:ASP:HA    | 0.63     | 2.17        | 10     | 4     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:CG1   | 0.63     | 2.17        | 1      | 4     |
| 1:A:17:PHE:CD2   | 1:A:153:LEU:HD21 | 0.63     | 2.28        | 2      | 2     |
| 1:A:205:TYR:HB2  | 1:A:248:TYR:HA   | 0.63     | 1.71        | 2      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HB3  | 1:A:138:VAL:HB   | 0.63     | 1.70        | 7      | 3     |
| 1:A:213:ALA:O    | 1:A:216:LYS:HG3  | 0.63     | 1.93        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.63     | 2.23        | 6      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:137:THR:HG22 | 0.63     | 1.71        | 1      | 1     |
| 1:A:168:ALA:HB2  | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.63     | 1.70        | 6      | 2     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:127:LEU:HD23 | 0.63     | 1.69        | 3      | 2     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:253:ALA:HB1  | 0.63     | 2.28        | 3      | 1     |
| 1:A:17:PHE:O     | 1:A:20:TRP:HD1   | 0.63     | 1.76        | 10     | 10    |
| 1:A:195:PHE:HA   | 1:A:198:TYR:CD2  | 0.63     | 2.28        | 10     | 4     |
| 1:A:219:CYS:HB3  | 1:A:231:ILE:CG1  | 0.63     | 2.23        | 4      | 6     |
| 1:A:47:ARG:HG2   | 1:A:54:LEU:HD12  | 0.63     | 1.69        | 4      | 9     |
| 1:A:238:ILE:HD11 | 1:A:255:ILE:HG21 | 0.63     | 1.68        | 3      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HD12 | 1:A:248:TYR:N    | 0.63     | 2.09        | 3      | 6     |
| 1:A:97:LEU:HD12  | 1:A:98:LYS:N     | 0.63     | 2.09        | 7      | 5     |
| 1:A:219:CYS:CB   | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.63     | 2.22        | 9      | 2     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:CD1  | 0.63     | 2.46        | 7      | 2     |
| 1:A:17:PHE:CD1   | 1:A:153:LEU:HD21 | 0.63     | 2.28        | 10     | 5     |
| 1:A:104:MET:HE3  | 1:A:241:LEU:CD1  | 0.63     | 2.24        | 3      | 3     |
| 1:A:161:LYS:NZ   | 1:A:163:GLU:HB2  | 0.63     | 2.08        | 5      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:218:LEU:HG   | 0.63     | 1.71        | 5      | 1     |
| 1:A:23:PHE:HD1   | 1:A:31:LEU:HD11  | 0.63     | 1.52        | 5      | 8     |
| 1:A:35:GLU:O     | 1:A:39:LEU:HB3   | 0.63     | 1.93        | 7      | 5     |
| 1:A:110:TYR:O    | 1:A:112:THR:N    | 0.63     | 2.32        | 9      | 7     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:218:LEU:HD21 | 0.63     | 1.68        | 6      | 4     |
| 1:A:241:LEU:CD2  | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.63     | 2.24        | 3      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HD13  | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.63     | 1.70        | 4      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.63     | 1.69        | 4      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CG   | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.63     | 2.28        | 9      | 4     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.63     | 1.93        | 7      | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB2   | 1:A:72:LYS:HE2   | 0.63     | 1.70        | 9      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:235:LYS:HB3  | 0.63     | 1.70        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:234:TYR:CB   | 0.63     | 2.24        | 7      | 1     |
| 1:A:150:MET:HE2  | 1:A:167:MET:HG2  | 0.63     | 1.71        | 9      | 1     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:OG1   | 0.62     | 2.13        | 7      | 7     |
| 1:A:126:PHE:CD1  | 1:A:126:PHE:C    | 0.62     | 2.77        | 2      | 10    |
| 1:A:44:LEU:HD12  | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.62     | 1.70        | 2      | 2     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:171:LEU:N    | 0.62     | 2.32        | 4      | 6     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:79:ALA:HA    | 0.62     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD13  | 1:A:40:ILE:H     | 0.62     | 1.51        | 8      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD22 | 1:A:214:LEU:O    | 0.62     | 1.94        | 8      | 4     |
| 1:A:3:GLU:HG3    | 1:A:49:LYS:HE2   | 0.62     | 1.71        | 4      | 2     |
| 1:A:47:ARG:CG    | 1:A:54:LEU:HD12  | 0.62     | 2.24        | 3      | 4     |
| 1:A:245:GLY:O    | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.62     | 1.94        | 3      | 2     |
| 1:A:107:TRP:CZ3  | 1:A:162:LEU:HD13 | 0.62     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:149:LEU:HG   | 0.62     | 1.94        | 7      | 1     |
| 1:A:39:LEU:CG    | 1:A:40:ILE:N     | 0.62     | 2.61        | 9      | 9     |
| 1:A:44:LEU:CD2   | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.62     | 2.23        | 6      | 2     |
| 1:A:207:ASP:HB3  | 1:A:246:LYS:CE   | 0.62     | 2.20        | 2      | 5     |
| 1:A:212:ASP:HA   | 1:A:215:LEU:CD1  | 0.62     | 2.24        | 10     | 8     |
| 1:A:95:GLN:HA    | 1:A:103:PHE:CB   | 0.62     | 2.25        | 8      | 5     |
| 1:A:249:ARG:HD3  | 1:A:252:LEU:CG   | 0.62     | 2.24        | 3      | 1     |
| 1:A:149:LEU:HD23 | 1:A:153:LEU:HD22 | 0.62     | 1.70        | 5      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CZ   | 1:A:104:MET:HG3  | 0.62     | 2.28        | 8      | 2     |
| 1:A:108:ARG:NH1  | 1:A:113:ASP:O    | 0.62     | 2.32        | 6      | 1     |
| 1:A:241:LEU:CD1  | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.62     | 2.23        | 1      | 2     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.62     | 1.70        | 1      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.62     | 2.87        | 2      | 3     |
| 1:A:151:LEU:C    | 1:A:152:LYS:HE3  | 0.62     | 2.19        | 10     | 2     |
| 1:A:94:CYS:CA    | 1:A:97:LEU:HD23  | 0.62     | 2.24        | 9      | 4     |
| 1:A:181:PHE:CA   | 1:A:184:ILE:HD12 | 0.62     | 2.23        | 2      | 5     |
| 1:A:219:CYS:HA   | 1:A:226:LEU:O    | 0.62     | 1.93        | 10     | 4     |
| 1:A:145:GLU:O    | 1:A:149:LEU:HB3  | 0.62     | 1.94        | 2      | 5     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:132:GLU:HB2  | 0.62     | 1.94        | 3      | 3     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:HB3  | 0.62     | 1.71        | 3      | 3     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:CG   | 0.62     | 2.23        | 5      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HG22  | 1:A:92:PHE:HZ    | 0.62     | 1.55        | 6      | 4     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:CD2  | 0.62     | 2.24        | 1      | 3     |
| 1:A:150:MET:O    | 1:A:162:LEU:HD21 | 0.62     | 1.95        | 10     | 3     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:238:ILE:HD12 | 0.62     | 1.71        | 4      | 1     |
| 1:A:80:HIS:HA    | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.62     | 1.71        | 6      | 2     |
| 1:A:102:GLU:O    | 1:A:105:LYS:HB2  | 0.62     | 1.95        | 6      | 1     |
| 1:A:41:GLN:HA    | 1:A:44:LEU:HD11  | 0.62     | 1.69        | 7      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:146:TYR:HE2  | 0.62     | 1.54        | 10     | 1     |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.62     | 2.30        | 3      | 5     |
| 1:A:211:LEU:HD23 | 1:A:235:LYS:O    | 0.62     | 1.95        | 2      | 3     |
| 1:A:252:LEU:N    | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.62     | 2.62        | 6      | 2     |
| 1:A:28:SER:HB2   | 1:A:32:GLU:HG3   | 0.62     | 1.72        | 3      | 2     |
| 1:A:94:CYS:O     | 1:A:97:LEU:HD23  | 0.62     | 1.95        | 5      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.62     | 1.71        | 6      | 1     |
| 1:A:115:SER:O    | 1:A:250:THR:HB   | 0.62     | 1.94        | 6      | 2     |
| 1:A:186:MET:HB3  | 1:A:190:GLU:HB3  | 0.62     | 1.69        | 7      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HD2   | 1:A:146:TYR:HB2  | 0.62     | 1.52        | 8      | 1     |
| 1:A:247:LEU:C    | 1:A:247:LEU:HD13 | 0.62     | 2.18        | 1      | 2     |
| 1:A:85:GLU:HB3   | 1:A:88:PHE:HB2   | 0.62     | 1.71        | 4      | 3     |
| 1:A:107:TRP:CE2  | 1:A:164:LEU:HD23 | 0.62     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.62     | 1.71        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:255:ILE:HG12 | 0.62     | 2.30        | 8      | 3     |
| 1:A:246:LYS:HE2  | 1:A:246:LYS:HA   | 0.62     | 1.70        | 7      | 1     |
| 1:A:114:HIS:HB3  | 1:A:251:ASP:OD2  | 0.62     | 1.93        | 10     | 1     |
| 1:A:20:TRP:CB    | 1:A:78:LEU:HD22  | 0.62     | 2.25        | 1      | 2     |
| 1:A:20:TRP:HB2   | 1:A:78:LEU:HD13  | 0.62     | 1.72        | 9      | 2     |
| 1:A:29:GLY:O     | 1:A:30:TYR:CD1   | 0.62     | 2.53        | 5      | 10    |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HA   | 0.62     | 2.24        | 7      | 4     |
| 1:A:242:SER:HA   | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.62     | 2.24        | 4      | 2     |
| 1:A:36:LEU:CD1   | 1:A:73:ILE:HG12  | 0.62     | 2.25        | 5      | 7     |
| 1:A:44:LEU:CG    | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.62     | 2.25        | 2      | 3     |
| 1:A:95:GLN:CD    | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.62     | 2.20        | 2      | 1     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:CB   | 0.62     | 2.24        | 8      | 4     |
| 1:A:103:PHE:CD1  | 1:A:104:MET:N    | 0.62     | 2.68        | 6      | 3     |
| 1:A:7:GLN:O      | 1:A:8:SER:CB     | 0.62     | 2.48        | 8      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HD12 | 1:A:162:LEU:HD23 | 0.62     | 1.72        | 10     | 1     |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.62     | 2.24        | 4      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HB3  | 1:A:225:GLU:HB2  | 0.62     | 1.71        | 6      | 2     |
| 1:A:172:PRO:O    | 1:A:176:ASN:HB2  | 0.62     | 1.95        | 8      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HG13  | 1:A:170:LEU:HG   | 0.62     | 1.70        | 10     | 1     |
| 1:A:207:ASP:HB3  | 1:A:246:LYS:HG2  | 0.61     | 1.69        | 9      | 5     |
| 1:A:11:ILE:HD13  | 1:A:11:ILE:N     | 0.61     | 2.06        | 2      | 2     |
| 1:A:36:LEU:HA    | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.61     | 1.72        | 10     | 4     |
| 1:A:88:PHE:CE1   | 1:A:89:LEU:HG    | 0.61     | 2.30        | 6      | 2     |
| 1:A:216:LYS:HG3  | 1:A:231:ILE:HD12 | 0.61     | 1.71        | 9      | 2     |
| 1:A:107:TRP:CD2  | 1:A:164:LEU:HD23 | 0.61     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:12:THR:CB    | 1:A:145:GLU:HB3  | 0.61     | 2.25        | 5      | 8     |
| 1:A:205:TYR:CZ   | 1:A:246:LYS:CD   | 0.61     | 2.80        | 2      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD23  | 1:A:58:MET:HE2   | 0.61     | 1.72        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD22 | 1:A:247:LEU:HG   | 0.61     | 1.71        | 5      | 1     |
| 1:A:58:MET:O     | 1:A:62:VAL:HG13  | 0.61     | 1.96        | 9      | 2     |
| 1:A:118:ILE:O    | 1:A:161:LYS:HG2  | 0.61     | 1.95        | 7      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HB2  | 1:A:138:VAL:HB   | 0.61     | 1.71        | 10     | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:LYS:N    | 0.61     | 2.10        | 1      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:215:LEU:HG   | 1:A:234:TYR:HB2  | 0.61     | 1.70        | 1      | 1     |
| 1:A:20:TRP:HE3   | 1:A:78:LEU:HG    | 0.61     | 1.54        | 6      | 6     |
| 1:A:76:VAL:HG21  | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.61     | 2.10        | 4      | 1     |
| 1:A:104:MET:HE3  | 1:A:241:LEU:CD2  | 0.61     | 2.25        | 1      | 2     |
| 1:A:106:THR:O    | 1:A:110:TYR:CZ   | 0.61     | 2.54        | 1      | 9     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.61     | 2.49        | 6      | 2     |
| 1:A:110:TYR:CD1  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.61     | 2.89        | 10     | 2     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:206:ILE:N    | 0.61     | 2.68        | 10     | 2     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:HB   | 0.61     | 1.72        | 3      | 2     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:142:LYS:CB   | 0.61     | 2.26        | 8      | 5     |
| 1:A:176:ASN:HB2  | 1:A:178:LEU:HD23 | 0.61     | 1.70        | 9      | 2     |
| 1:A:124:LYS:HG3  | 1:A:147:THR:HG21 | 0.61     | 1.72        | 6      | 1     |
| 1:A:151:LEU:C    | 1:A:152:LYS:HE2  | 0.61     | 2.21        | 7      | 3     |
| 1:A:246:LYS:HA   | 1:A:246:LYS:CE   | 0.61     | 2.25        | 10     | 1     |
| 1:A:101:GLU:HA   | 1:A:237:ASN:OD1  | 0.61     | 1.95        | 4      | 4     |
| 1:A:144:ALA:HA   | 1:A:147:THR:HG22 | 0.61     | 1.71        | 8      | 6     |
| 1:A:100:CYS:HB3  | 1:A:172:PRO:HB2  | 0.61     | 1.73        | 6      | 2     |
| 1:A:11:ILE:HG12  | 1:A:84:THR:CA    | 0.61     | 2.13        | 8      | 1     |
| 1:A:87:ASN:HB3   | 1:A:136:LYS:CE   | 0.61     | 2.26        | 9      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CE1  | 1:A:165:THR:OG1  | 0.61     | 2.52        | 4      | 3     |
| 1:A:30:TYR:HB3   | 1:A:72:LYS:HG2   | 0.61     | 1.72        | 5      | 4     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:171:LEU:HB2  | 0.61     | 1.71        | 2      | 1     |
| 1:A:223:LYS:HE2  | 1:A:227:ASP:HA   | 0.61     | 1.72        | 4      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.61     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:15:GLN:O     | 1:A:18:GLU:N     | 0.61     | 2.34        | 10     | 8     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HD22 | 0.61     | 2.31        | 3      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HE2  | 1:A:163:GLU:C    | 0.61     | 2.03        | 8      | 3     |
| 1:A:177:PHE:HB3  | 1:A:234:TYR:CZ   | 0.61     | 2.30        | 4      | 1     |
| 1:A:145:GLU:O    | 1:A:149:LEU:HD23 | 0.61     | 1.96        | 7      | 1     |
| 1:A:94:CYS:SG    | 1:A:106:THR:HG21 | 0.61     | 2.36        | 8      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:172:PRO:CD   | 0.61     | 2.26        | 10     | 1     |
| 1:A:95:GLN:HG3   | 1:A:171:LEU:CA   | 0.60     | 2.25        | 3      | 3     |
| 1:A:138:VAL:CG1  | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.60     | 2.22        | 9      | 5     |
| 1:A:184:ILE:CD1  | 1:A:226:LEU:HG   | 0.60     | 2.25        | 6      | 4     |
| 1:A:227:ASP:HB2  | 1:A:230:ASN:HB2  | 0.60     | 1.73        | 9      | 1     |
| 1:A:57:GLU:O     | 1:A:61:PHE:N     | 0.60     | 2.34        | 5      | 10    |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:CG   | 0.60     | 2.26        | 9      | 4     |
| 1:A:165:THR:O    | 1:A:169:ARG:HG2  | 0.60     | 1.96        | 6      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:HD22 | 0.60     | 1.72        | 8      | 1     |
| 1:A:73:ILE:HD12  | 1:A:78:LEU:HB2   | 0.60     | 1.72        | 10     | 5     |
| 1:A:211:LEU:O    | 1:A:215:LEU:HG   | 0.60     | 1.96        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.60     | 1.70        | 10     | 1     |
| 1:A:125:ASN:O    | 1:A:128:LYS:HB2  | 0.60     | 1.97        | 5      | 4     |
| 1:A:205:TYR:HB2  | 1:A:247:LEU:O    | 0.60     | 1.94        | 2      | 3     |
| 1:A:29:GLY:HA2   | 1:A:169:ARG:HH21 | 0.60     | 1.57        | 5      | 1     |
| 1:A:206:ILE:HG12 | 1:A:210:GLU:HB2  | 0.60     | 1.72        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:CD     | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.60     | 2.22        | 6      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HD2   | 1:A:82:LEU:HD11  | 0.60     | 1.54        | 8      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:218:LEU:HD11 | 0.60     | 1.73        | 10     | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:247:LEU:HD21 | 0.60     | 2.26        | 10     | 1     |
| 1:A:47:ARG:O     | 1:A:52:LEU:N     | 0.60     | 2.35        | 8      | 10    |
| 1:A:61:PHE:CB    | 1:A:81:VAL:HG23  | 0.60     | 2.26        | 8      | 3     |
| 1:A:78:LEU:O     | 1:A:78:LEU:HD13  | 0.60     | 1.97        | 4      | 5     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HD13 | 0.60     | 2.32        | 2      | 3     |
| 1:A:238:ILE:O    | 1:A:247:LEU:HD21 | 0.60     | 1.97        | 9      | 6     |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:251:ASP:HB2  | 0.60     | 2.15        | 7      | 3     |
| 1:A:47:ARG:CG    | 1:A:54:LEU:HA    | 0.60     | 2.26        | 7      | 3     |
| 1:A:127:LEU:C    | 1:A:127:LEU:HD22 | 0.60     | 2.21        | 7      | 1     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:HD22  | 0.60     | 1.95        | 10     | 1     |
| 1:A:169:ARG:CG   | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.60     | 2.26        | 10     | 1     |
| 1:A:1:MET:HE3    | 1:A:5:HIS:CD2    | 0.60     | 2.31        | 2      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CE1  | 1:A:126:PHE:CG   | 0.60     | 2.90        | 5      | 4     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:138:VAL:HG23 | 0.60     | 1.73        | 4      | 1     |
| 1:A:7:GLN:HG3    | 1:A:50:ALA:CB    | 0.60     | 2.27        | 6      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:CZ   | 0.60     | 2.90        | 9      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.60     | 2.26        | 10     | 1     |
| 1:A:100:CYS:HB3  | 1:A:172:PRO:HG2  | 0.60     | 1.71        | 2      | 5     |
| 1:A:137:THR:O    | 1:A:138:VAL:HG22 | 0.60     | 1.97        | 3      | 1     |
| 1:A:118:ILE:HG22 | 1:A:122:GLU:HB3  | 0.60     | 1.74        | 6      | 5     |
| 1:A:149:LEU:O    | 1:A:153:LEU:HB2  | 0.60     | 1.96        | 4      | 2     |
| 1:A:218:LEU:CB   | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.60     | 2.26        | 6      | 3     |
| 1:A:7:GLN:HE22   | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.60     | 1.55        | 6      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:130:LEU:HD22 | 0.60     | 1.73        | 7      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HD11  | 1:A:39:LEU:HG    | 0.60     | 1.72        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:OE1   | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.60     | 1.96        | 9      | 1     |
| 1:A:75:ILE:HG13  | 1:A:169:ARG:HG3  | 0.60     | 1.73        | 1      | 2     |
| 1:A:136:LYS:O    | 1:A:137:THR:HG23 | 0.60     | 1.95        | 4      | 3     |
| 1:A:31:LEU:O     | 1:A:72:LYS:HG3   | 0.60     | 1.96        | 6      | 3     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:138:VAL:HG22 | 0.60     | 1.73        | 1      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.60     | 1.74        | 7      | 2     |
| 1:A:151:LEU:HD23 | 1:A:161:LYS:N    | 0.60     | 2.12        | 3      | 1     |
| 1:A:147:THR:O    | 1:A:151:LEU:HD13 | 0.60     | 1.96        | 9      | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.60     | 2.32        | 5      | 2     |
| 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:LEU:CD2  | 0.60     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:108:ARG:HG2  | 1:A:114:HIS:CG   | 0.60     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HA   | 1:A:110:TYR:OH   | 0.60     | 1.97        | 5      | 8     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:149:LEU:HD23 | 0.60     | 1.96        | 1      | 1     |
| 1:A:210:GLU:O    | 1:A:214:LEU:N    | 0.60     | 2.35        | 7      | 10    |
| 1:A:118:ILE:CG1  | 1:A:123:LEU:HD23 | 0.60     | 2.27        | 8      | 8     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:253:ALA:CB   | 0.60     | 2.82        | 7      | 5     |
| 1:A:77:GLU:HA    | 1:A:80:HIS:CE1   | 0.60     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HD13  | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.60     | 1.73        | 8      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HH21 | 1:A:256:LEU:HD21 | 0.60     | 1.57        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE2  | 1:A:255:ILE:HG12 | 0.59     | 1.55        | 7      | 2     |
| 1:A:226:LEU:HA   | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.59     | 2.32        | 10     | 6     |
| 1:A:121:GLU:CA   | 1:A:124:LYS:HD3  | 0.59     | 2.23        | 3      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CD1  | 1:A:127:LEU:N    | 0.59     | 2.71        | 10     | 4     |
| 1:A:241:LEU:HB3  | 1:A:251:ASP:CB   | 0.59     | 2.23        | 5      | 3     |
| 1:A:176:ASN:ND2  | 1:A:178:LEU:HB2  | 0.59     | 2.12        | 5      | 2     |
| 1:A:104:MET:HE1  | 1:A:237:ASN:OD1  | 0.59     | 1.97        | 6      | 2     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:130:LEU:HD13 | 0.59     | 1.74        | 7      | 1     |
| 1:A:208:GLU:O    | 1:A:235:LYS:HD2  | 0.59     | 1.97        | 10     | 2     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.59     | 1.73        | 9      | 2     |
| 1:A:198:TYR:HB3  | 1:A:210:GLU:HB3  | 0.59     | 1.74        | 10     | 1     |
| 1:A:247:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.59     | 1.72        | 2      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CD1  | 1:A:218:LEU:HD22 | 0.59     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CD1   | 1:A:62:VAL:HA    | 0.59     | 2.28        | 8      | 1     |
| 1:A:89:LEU:O     | 1:A:93:ARG:HG2   | 0.59     | 1.97        | 8      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.59     | 1.72        | 8      | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:231:ILE:HG22 | 0.59     | 2.22        | 9      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HG    | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.59     | 1.72        | 1      | 4     |
| 1:A:126:PHE:C    | 1:A:126:PHE:HD1  | 0.59     | 2.05        | 2      | 5     |
| 1:A:146:TYR:CA   | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.59     | 2.26        | 8      | 3     |
| 1:A:85:GLU:HB2   | 1:A:88:PHE:CD1   | 0.59     | 2.32        | 9      | 3     |
| 1:A:163:GLU:HG2  | 1:A:164:LEU:H    | 0.59     | 1.57        | 8      | 3     |
| 1:A:211:LEU:O    | 1:A:214:LEU:HB3  | 0.59     | 1.98        | 3      | 4     |
| 1:A:75:ILE:HB    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.59     | 1.74        | 4      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:170:LEU:HD11 | 0.59     | 2.33        | 4      | 1     |
| 1:A:133:LYS:HE2  | 1:A:133:LYS:N    | 0.59     | 2.11        | 4      | 1     |
| 1:A:206:ILE:HG23 | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.59     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:59:LYS:C     | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.59     | 2.23        | 7      | 2     |
| 1:A:17:PHE:CD2   | 1:A:153:LEU:HB3  | 0.59     | 2.32        | 8      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD11 | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.59     | 1.74        | 9      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:HA   | 0.59     | 1.74        | 1      | 2     |
| 1:A:87:ASN:CA    | 1:A:136:LYS:HE3  | 0.59     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.59     | 1.74        | 5      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:143:LEU:HA   | 0.59     | 1.73        | 6      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE3    | 1:A:2:ALA:N      | 0.59     | 2.12        | 7      | 1     |
| 1:A:32:GLU:HB2   | 1:A:35:GLU:CD    | 0.59     | 2.23        | 10     | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:HG13  | 0.59     | 1.74        | 4      | 3     |
| 1:A:79:ALA:HB1   | 1:A:89:LEU:HD21  | 0.59     | 1.74        | 9      | 3     |
| 1:A:100:CYS:O    | 1:A:103:PHE:CE2  | 0.59     | 2.56        | 7      | 6     |
| 1:A:205:TYR:OH   | 1:A:246:LYS:HB3  | 0.59     | 1.96        | 1      | 5     |
| 1:A:120:THR:O    | 1:A:124:LYS:HB3  | 0.59     | 1.98        | 9      | 3     |
| 1:A:138:VAL:HG22 | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.59     | 1.75        | 2      | 1     |
| 1:A:181:PHE:O    | 1:A:184:ILE:HB   | 0.59     | 1.97        | 8      | 2     |
| 1:A:20:TRP:CE3   | 1:A:78:LEU:HG    | 0.59     | 2.32        | 4      | 4     |
| 1:A:88:PHE:CZ    | 1:A:92:PHE:CD1   | 0.59     | 2.91        | 7      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HB3  | 1:A:143:LEU:CG   | 0.59     | 2.24        | 9      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HB2  | 1:A:138:VAL:CG1  | 0.59     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:93:ARG:O     | 1:A:96:GLN:HG3   | 0.59     | 1.97        | 5      | 2     |
| 1:A:168:ALA:O    | 1:A:171:LEU:CD1  | 0.59     | 2.49        | 1      | 6     |
| 1:A:154:PHE:CD1  | 1:A:165:THR:HB   | 0.59     | 2.33        | 3      | 1     |
| 1:A:79:ALA:HB3   | 1:A:89:LEU:HD21  | 0.59     | 1.74        | 6      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:65:TYR:HB2   | 0.59     | 1.72        | 6      | 2     |
| 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:235:LYS:N    | 0.59     | 2.12        | 8      | 2     |
| 1:A:166:GLU:OE1  | 1:A:170:LEU:HD21 | 0.59     | 1.96        | 9      | 1     |
| 1:A:39:LEU:C     | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.59     | 2.23        | 2      | 6     |
| 1:A:180:LYS:HG2  | 1:A:225:GLU:CB   | 0.59     | 2.28        | 10     | 3     |
| 1:A:184:ILE:HG23 | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.59     | 1.73        | 2      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HG22  | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.59     | 1.75        | 2      | 1     |
| 1:A:84:THR:O     | 1:A:85:GLU:CG    | 0.59     | 2.50        | 9      | 3     |
| 1:A:110:TYR:CD1  | 1:A:126:PHE:HB2  | 0.59     | 2.33        | 3      | 2     |
| 1:A:161:LYS:HE3  | 1:A:163:GLU:N    | 0.59     | 2.12        | 4      | 1     |
| 1:A:88:PHE:HD2   | 1:A:142:LYS:O    | 0.59     | 1.80        | 9      | 2     |
| 1:A:249:ARG:C    | 1:A:249:ARG:CD   | 0.59     | 2.71        | 6      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.59     | 1.74        | 9      | 2     |
| 1:A:44:LEU:N     | 1:A:44:LEU:HD13  | 0.59     | 2.13        | 10     | 1     |
| 1:A:95:GLN:CG    | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.59     | 2.28        | 10     | 1     |
| 1:A:177:PHE:CB   | 1:A:234:TYR:CE1  | 0.59     | 2.86        | 5      | 6     |
| 1:A:181:PHE:O    | 1:A:185:LYS:HG2  | 0.59     | 1.98        | 2      | 1     |
| 1:A:185:LYS:CA   | 1:A:258:ALA:HA   | 0.59     | 2.28        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:OG   | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.59     | 1.98        | 5      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG2  | 1:A:218:LEU:HD13 | 0.59     | 2.27        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:146:TYR:HA   | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.59     | 1.73        | 7      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD13  | 1:A:44:LEU:H     | 0.59     | 1.56        | 10     | 1     |
| 1:A:178:LEU:HD23 | 1:A:178:LEU:N    | 0.58     | 2.13        | 4      | 3     |
| 1:A:93:ARG:HA    | 1:A:170:LEU:HD21 | 0.58     | 1.74        | 2      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.58     | 1.74        | 2      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:172:PRO:N    | 0.58     | 2.12        | 2      | 2     |
| 1:A:30:TYR:O     | 1:A:32:GLU:HG2   | 0.58     | 1.98        | 3      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CE1  | 1:A:130:LEU:CD1  | 0.58     | 2.86        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD23  | 1:A:131:LEU:O    | 0.58     | 1.98        | 4      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HB2  | 1:A:167:MET:HE1  | 0.58     | 1.73        | 8      | 2     |
| 1:A:80:HIS:CA    | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.58     | 2.28        | 6      | 1     |
| 1:A:187:CYS:O    | 1:A:191:PHE:HB3  | 0.58     | 1.98        | 10     | 1     |
| 1:A:105:LYS:HG3  | 1:A:240:ALA:O    | 0.58     | 1.98        | 9      | 2     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:CB   | 0.58     | 2.27        | 5      | 4     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:162:LEU:HG   | 0.58     | 1.75        | 8      | 4     |
| 1:A:249:ARG:HH11 | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.58     | 1.57        | 9      | 2     |
| 1:A:246:LYS:CE   | 1:A:246:LYS:CA   | 0.58     | 2.81        | 7      | 2     |
| 1:A:6:LEU:HD13   | 1:A:19:ILE:HG21  | 0.58     | 1.74        | 2      | 2     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:HB2  | 0.58     | 1.72        | 3      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.58     | 2.91        | 1      | 6     |
| 1:A:11:ILE:HG12  | 1:A:84:THR:OG1   | 0.58     | 1.99        | 2      | 2     |
| 1:A:243:ASP:N    | 1:A:246:LYS:O    | 0.58     | 2.36        | 3      | 6     |
| 1:A:5:HIS:HB2    | 1:A:19:ILE:HD11  | 0.58     | 1.75        | 5      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:162:LEU:HD12 | 0.58     | 2.28        | 5      | 1     |
| 1:A:136:LYS:HD2  | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.58     | 2.28        | 5      | 1     |
| 1:A:185:LYS:HB2  | 1:A:258:ALA:HB2  | 0.58     | 1.75        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:178:LEU:HD21 | 0.58     | 2.33        | 1      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CG   | 1:A:249:ARG:HG3  | 0.58     | 2.34        | 1      | 1     |
| 1:A:242:SER:CB   | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.58     | 2.27        | 1      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HG   | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.58     | 1.74        | 3      | 1     |
| 1:A:120:THR:HA   | 1:A:151:LEU:HD21 | 0.58     | 1.74        | 9      | 3     |
| 1:A:105:LYS:CB   | 1:A:240:ALA:HB1  | 0.58     | 2.28        | 7      | 1     |
| 1:A:166:GLU:HA   | 1:A:169:ARG:CD   | 0.58     | 2.28        | 1      | 3     |
| 1:A:168:ALA:CB   | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.58     | 2.28        | 6      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HG3   | 1:A:103:PHE:CD2  | 0.58     | 2.34        | 8      | 1     |
| 1:A:56:PRO:HA    | 1:A:59:LYS:CD    | 0.58     | 2.29        | 10     | 5     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:253:ALA:CB   | 0.58     | 2.87        | 10     | 5     |
| 1:A:206:ILE:HD12 | 1:A:249:ARG:CG   | 0.58     | 2.27        | 4      | 1     |
| 1:A:87:ASN:HA    | 1:A:136:LYS:HE3  | 0.58     | 1.75        | 5      | 1     |
| 1:A:105:LYS:CA   | 1:A:240:ALA:HB1  | 0.58     | 2.29        | 7      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG12 | 1:A:255:ILE:HG13 | 0.58     | 1.75        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:184:ILE:HG12 | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.58     | 1.73        | 1      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG12 | 1:A:225:GLU:HG3  | 0.58     | 1.76        | 4      | 3     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:143:LEU:N    | 0.58     | 2.14        | 2      | 3     |
| 1:A:219:CYS:O    | 1:A:223:LYS:HD2  | 0.58     | 1.98        | 2      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CB    | 1:A:142:LYS:CB   | 0.58     | 2.82        | 7      | 3     |
| 1:A:184:ILE:HD13 | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.58     | 1.74        | 6      | 1     |
| 1:A:1:MET:CE     | 1:A:19:ILE:HA    | 0.58     | 2.29        | 1      | 2     |
| 1:A:44:LEU:CB    | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.58     | 2.29        | 1      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:184:ILE:HG21 | 0.58     | 2.34        | 1      | 3     |
| 1:A:149:LEU:HD23 | 1:A:153:LEU:HD13 | 0.58     | 1.76        | 3      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD22 | 1:A:255:ILE:N    | 0.58     | 2.13        | 9      | 2     |
| 1:A:139:ASP:O    | 1:A:142:LYS:HG2  | 0.58     | 1.98        | 10     | 1     |
| 1:A:103:PHE:CG   | 1:A:104:MET:N    | 0.58     | 2.72        | 6      | 6     |
| 1:A:154:PHE:O    | 1:A:155:ASP:C    | 0.58     | 2.47        | 7      | 10    |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:181:PHE:HD2  | 0.58     | 1.58        | 2      | 3     |
| 1:A:254:LEU:H    | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.58     | 2.01        | 7      | 2     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.58     | 2.29        | 10     | 2     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:CD1  | 0.58     | 2.28        | 7      | 2     |
| 1:A:58:MET:O     | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.58     | 1.99        | 7      | 1     |
| 1:A:37:GLN:O     | 1:A:41:GLN:HB2   | 0.58     | 1.99        | 10     | 4     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:HD23 | 0.58     | 2.31        | 5      | 3     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:THR:HB   | 0.58     | 1.99        | 3      | 9     |
| 1:A:149:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:C    | 0.58     | 2.23        | 3      | 6     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.58     | 1.76        | 7      | 1     |
| 1:A:100:CYS:O    | 1:A:103:PHE:CD1  | 0.58     | 2.57        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:CG   | 0.58     | 2.17        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:CB   | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.58     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:206:ILE:O    | 1:A:247:LEU:HB3  | 0.57     | 1.98        | 7      | 5     |
| 1:A:247:LEU:HD13 | 1:A:248:TYR:C    | 0.57     | 2.23        | 1      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:19:ILE:HG13  | 0.57     | 1.76        | 2      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD11  | 1:A:58:MET:HE3   | 0.57     | 1.76        | 2      | 2     |
| 1:A:88:PHE:CE2   | 1:A:146:TYR:CG   | 0.57     | 2.92        | 6      | 3     |
| 1:A:195:PHE:HE2  | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.57     | 1.57        | 6      | 1     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.57     | 1.98        | 9      | 2     |
| 1:A:7:GLN:O      | 1:A:52:LEU:HD13  | 0.57     | 1.99        | 8      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.57     | 2.14        | 9      | 4     |
| 1:A:79:ALA:O     | 1:A:84:THR:HB    | 0.57     | 1.99        | 10     | 4     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:146:TYR:CE1  | 0.57     | 2.91        | 2      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:146:TYR:CD1  | 0.57     | 2.92        | 3      | 2     |
| 1:A:100:CYS:HB2  | 1:A:176:ASN:CG   | 0.57     | 2.24        | 6      | 3     |
| 1:A:253:ALA:HA   | 1:A:256:LEU:CD2  | 0.57     | 2.29        | 2      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:179:LEU:HD11 | 1:A:180:LYS:HD3  | 0.57     | 1.76        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:HE2   | 1:A:141:THR:HB   | 0.57     | 1.59        | 10     | 1     |
| 1:A:173:VAL:HA   | 1:A:176:ASN:OD1  | 0.57     | 1.98        | 5      | 4     |
| 1:A:138:VAL:CG2  | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.57     | 2.30        | 4      | 1     |
| 1:A:185:LYS:HG2  | 1:A:258:ALA:HA   | 0.57     | 1.76        | 7      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:CD2  | 0.57     | 2.52        | 9      | 1     |
| 1:A:136:LYS:CD   | 1:A:138:VAL:N    | 0.57     | 2.67        | 9      | 1     |
| 1:A:2:ALA:CB     | 1:A:19:ILE:HG23  | 0.57     | 2.29        | 7      | 3     |
| 1:A:226:LEU:HB3  | 1:A:231:ILE:HD11 | 0.57     | 1.75        | 5      | 2     |
| 1:A:168:ALA:HB1  | 1:A:178:LEU:HB3  | 0.57     | 1.76        | 4      | 4     |
| 1:A:154:PHE:HZ   | 1:A:163:GLU:HB3  | 0.57     | 1.58        | 3      | 1     |
| 1:A:162:LEU:HD21 | 1:A:166:GLU:CG   | 0.57     | 2.29        | 8      | 2     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:232:SER:HA   | 0.57     | 2.29        | 3      | 1     |
| 1:A:47:ARG:NH1   | 1:A:58:MET:HE1   | 0.57     | 2.14        | 5      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.57     | 1.99        | 5      | 1     |
| 1:A:125:ASN:HA   | 1:A:128:LYS:HG3  | 0.57     | 1.76        | 8      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CE1  | 1:A:165:THR:CB   | 0.57     | 2.88        | 8      | 1     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:171:LEU:CD2  | 0.57     | 2.52        | 10     | 1     |
| 1:A:54:LEU:CD1   | 1:A:58:MET:HB2   | 0.57     | 2.30        | 1      | 2     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:CB    | 0.57     | 2.53        | 6      | 10    |
| 1:A:110:TYR:CE2  | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.57     | 2.92        | 1      | 2     |
| 1:A:166:GLU:HA   | 1:A:169:ARG:HD3  | 0.57     | 1.76        | 1      | 2     |
| 1:A:6:LEU:HD21   | 1:A:43:LEU:HD12  | 0.57     | 1.76        | 8      | 3     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:CD1  | 0.57     | 2.53        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.57     | 2.93        | 6      | 1     |
| 1:A:1:MET:HB2    | 1:A:5:HIS:CE1    | 0.57     | 2.33        | 8      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD22 | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.57     | 1.77        | 9      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG12 | 1:A:143:LEU:HB2  | 0.57     | 1.77        | 9      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HZ   | 1:A:165:THR:HG1  | 0.57     | 1.41        | 9      | 1     |
| 1:A:206:ILE:CD1  | 1:A:249:ARG:HD3  | 0.57     | 2.29        | 9      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CD2   | 1:A:31:LEU:HD23  | 0.57     | 2.34        | 10     | 5     |
| 1:A:88:PHE:CZ    | 1:A:92:PHE:CE2   | 0.57     | 2.93        | 1      | 1     |
| 1:A:88:PHE:O     | 1:A:88:PHE:CD1   | 0.57     | 2.58        | 1      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:CB   | 0.57     | 2.29        | 9      | 7     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:249:ARG:CG   | 0.57     | 2.88        | 5      | 4     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:255:ILE:O    | 0.57     | 2.58        | 2      | 1     |
| 1:A:161:LYS:HD2  | 1:A:162:LEU:N    | 0.57     | 2.15        | 8      | 4     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.57     | 1.77        | 4      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD11   | 1:A:43:LEU:CD1   | 0.57     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:10:LEU:O     | 1:A:10:LEU:HD23  | 0.57     | 1.99        | 7      | 3     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:218:LEU:CG   | 0.57     | 2.30        | 5      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:6:LEU:O      | 1:A:7:GLN:OE1    | 0.57     | 2.23        | 1      | 1     |
| 1:A:32:GLU:O     | 1:A:36:LEU:HD13  | 0.57     | 2.00        | 7      | 3     |
| 1:A:106:THR:O    | 1:A:110:TYR:CE1  | 0.57     | 2.58        | 4      | 6     |
| 1:A:191:PHE:O    | 1:A:195:PHE:HB2  | 0.57     | 1.99        | 1      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.57     | 2.30        | 7      | 2     |
| 1:A:247:LEU:CG   | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.57     | 2.30        | 6      | 2     |
| 1:A:96:GLN:OE1   | 1:A:171:LEU:HA   | 0.57     | 1.99        | 4      | 1     |
| 1:A:239:MET:HA   | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.57     | 2.30        | 6      | 2     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.57     | 2.53        | 7      | 2     |
| 1:A:182:GLN:O    | 1:A:185:LYS:HB2  | 0.57     | 1.99        | 7      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HD23 | 1:A:221:LYS:HE2  | 0.57     | 1.75        | 7      | 1     |
| 1:A:151:LEU:CG   | 1:A:162:LEU:HD23 | 0.57     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:100:CYS:HB3  | 1:A:172:PRO:CG   | 0.57     | 2.29        | 4      | 10    |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:234:TYR:HB3  | 0.57     | 1.76        | 1      | 1     |
| 1:A:218:LEU:CB   | 1:A:226:LEU:HD13 | 0.57     | 2.29        | 1      | 3     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:CA   | 0.57     | 2.30        | 7      | 5     |
| 1:A:93:ARG:HB2   | 1:A:96:GLN:HG3   | 0.57     | 1.76        | 3      | 1     |
| 1:A:137:THR:O    | 1:A:138:VAL:O    | 0.57     | 2.22        | 10     | 3     |
| 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:235:LYS:CA   | 0.57     | 2.29        | 3      | 3     |
| 1:A:107:TRP:HZ2  | 1:A:116:GLY:O    | 0.57     | 1.82        | 9      | 2     |
| 1:A:95:GLN:CB    | 1:A:172:PRO:HD2  | 0.57     | 2.29        | 6      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:143:LEU:CB   | 0.57     | 2.20        | 10     | 2     |
| 1:A:136:LYS:HD2  | 1:A:138:VAL:HG23 | 0.57     | 1.75        | 9      | 1     |
| 1:A:14:SER:O     | 1:A:17:PHE:HB3   | 0.57     | 2.00        | 2      | 5     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:CD2   | 0.57     | 2.35        | 2      | 2     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:SD   | 0.57     | 2.40        | 9      | 6     |
| 1:A:100:CYS:SG   | 1:A:175:GLU:HB3  | 0.57     | 2.40        | 3      | 2     |
| 1:A:11:ILE:CG1   | 1:A:82:LEU:HD13  | 0.57     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CD1   | 1:A:16:PHE:C     | 0.57     | 2.80        | 2      | 7     |
| 1:A:131:LEU:HB3  | 1:A:137:THR:HA   | 0.57     | 1.77        | 8      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HB3   | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.57     | 2.30        | 2      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CG    | 1:A:146:TYR:CZ   | 0.57     | 2.92        | 2      | 1     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.57     | 2.52        | 9      | 4     |
| 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:C    | 0.57     | 2.25        | 3      | 2     |
| 1:A:104:MET:HE2  | 1:A:240:ALA:HB3  | 0.57     | 1.76        | 6      | 2     |
| 1:A:191:PHE:HB2  | 1:A:256:LEU:CD1  | 0.57     | 2.24        | 10     | 3     |
| 1:A:44:LEU:HB3   | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.57     | 1.76        | 7      | 1     |
| 1:A:108:ARG:HB3  | 1:A:241:LEU:HD22 | 0.57     | 1.77        | 7      | 2     |
| 1:A:131:LEU:CD2  | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.57     | 2.30        | 9      | 1     |
| 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:234:TYR:HE2  | 0.57     | 1.59        | 9      | 1     |
| 1:A:251:ASP:N    | 1:A:251:ASP:OD1  | 0.56     | 2.38        | 1      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:141:THR:O    | 1:A:145:GLU:HB2  | 0.56     | 2.00        | 2      | 1     |
| 1:A:31:LEU:CB    | 1:A:36:LEU:HD12  | 0.56     | 2.30        | 4      | 4     |
| 1:A:54:LEU:O     | 1:A:59:LYS:HD3   | 0.56     | 1.99        | 4      | 3     |
| 1:A:247:LEU:HD12 | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.56     | 1.75        | 4      | 1     |
| 1:A:73:ILE:HD13  | 1:A:78:LEU:HD23  | 0.56     | 1.74        | 5      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:HG13  | 0.56     | 1.76        | 8      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD11  | 1:A:62:VAL:HB    | 0.56     | 1.76        | 10     | 1     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:OH   | 0.56     | 2.00        | 10     | 1     |
| 1:A:90:LEU:HA    | 1:A:93:ARG:HD3   | 0.56     | 1.76        | 4      | 2     |
| 1:A:146:TYR:HA   | 1:A:149:LEU:CD1  | 0.56     | 2.29        | 8      | 4     |
| 1:A:168:ALA:HB2  | 1:A:178:LEU:HD13 | 0.56     | 1.75        | 3      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CD1   | 1:A:79:ALA:HA    | 0.56     | 2.35        | 5      | 2     |
| 1:A:255:ILE:CG2  | 1:A:256:LEU:HD23 | 0.56     | 2.28        | 6      | 1     |
| 1:A:136:LYS:C    | 1:A:137:THR:HG23 | 0.56     | 2.25        | 9      | 1     |
| 1:A:104:MET:CE   | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.56     | 2.29        | 2      | 3     |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HG   | 0.56     | 2.29        | 1      | 1     |
| 1:A:12:THR:CG2   | 1:A:145:GLU:HB3  | 0.56     | 2.30        | 6      | 6     |
| 1:A:40:ILE:CG2   | 1:A:62:VAL:HB    | 0.56     | 2.31        | 10     | 5     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:163:GLU:CG   | 0.56     | 2.89        | 2      | 4     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:256:LEU:HB2  | 0.56     | 1.76        | 2      | 1     |
| 1:A:117:PHE:CG   | 1:A:161:LYS:HE2  | 0.56     | 2.36        | 3      | 2     |
| 1:A:137:THR:O    | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.56     | 2.01        | 4      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:127:LEU:C    | 0.56     | 2.25        | 5      | 1     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.56     | 2.54        | 6      | 1     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.56     | 1.99        | 8      | 2     |
| 1:A:15:GLN:O     | 1:A:19:ILE:HG13  | 0.56     | 1.99        | 8      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG12 | 1:A:138:VAL:O    | 0.56     | 1.99        | 9      | 2     |
| 1:A:215:LEU:O    | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.56     | 2.00        | 8      | 1     |
| 1:A:10:LEU:CD1   | 1:A:85:GLU:HA    | 0.56     | 2.27        | 9      | 1     |
| 1:A:148:ASP:O    | 1:A:152:LYS:HE3  | 0.56     | 2.00        | 9      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.56     | 2.30        | 10     | 1     |
| 1:A:76:VAL:HA    | 1:A:92:PHE:CE1   | 0.56     | 2.36        | 5      | 3     |
| 1:A:168:ALA:CA   | 1:A:171:LEU:HD12 | 0.56     | 2.30        | 2      | 2     |
| 1:A:124:LYS:NZ   | 1:A:151:LEU:HD23 | 0.56     | 2.16        | 4      | 1     |
| 1:A:249:ARG:NH1  | 1:A:256:LEU:HD21 | 0.56     | 2.15        | 4      | 1     |
| 1:A:58:MET:SD    | 1:A:82:LEU:HA    | 0.56     | 2.41        | 10     | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB3   | 1:A:72:LYS:CG    | 0.56     | 2.30        | 10     | 3     |
| 1:A:166:GLU:OE1  | 1:A:170:LEU:HD13 | 0.56     | 2.01        | 10     | 2     |
| 1:A:23:PHE:CD2   | 1:A:39:LEU:HA    | 0.56     | 2.35        | 6      | 4     |
| 1:A:212:ASP:O    | 1:A:215:LEU:HG   | 0.56     | 2.01        | 10     | 2     |
| 1:A:36:LEU:HG    | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.56     | 1.76        | 6      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:75:ILE:HB    | 1:A:170:LEU:CB   | 0.56     | 2.31        | 7      | 2     |
| 1:A:13:ALA:H     | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.56     | 2.11        | 7      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:75:ILE:HG22  | 0.56     | 2.36        | 1      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CD2  | 1:A:166:GLU:N    | 0.56     | 2.74        | 8      | 6     |
| 1:A:180:LYS:O    | 1:A:184:ILE:HG13 | 0.56     | 2.01        | 1      | 2     |
| 1:A:10:LEU:H     | 1:A:10:LEU:HD23  | 0.56     | 1.59        | 2      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG13  | 1:A:77:GLU:N     | 0.56     | 2.16        | 2      | 4     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:128:LYS:HG2  | 0.56     | 2.31        | 4      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG13  | 1:A:92:PHE:CE1   | 0.56     | 2.36        | 5      | 1     |
| 1:A:185:LYS:HA   | 1:A:258:ALA:HA   | 0.56     | 1.77        | 5      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.56     | 1.77        | 7      | 2     |
| 1:A:128:LYS:HG2  | 1:A:143:LEU:HD11 | 0.56     | 1.77        | 9      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:HG22 | 0.56     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:36:LEU:CD2   | 1:A:65:TYR:CD1   | 0.56     | 2.89        | 1      | 3     |
| 1:A:30:TYR:CG    | 1:A:72:LYS:HE3   | 0.56     | 2.36        | 4      | 2     |
| 1:A:107:TRP:CD2  | 1:A:164:LEU:CD2  | 0.56     | 2.88        | 3      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CE1  | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.56     | 2.88        | 5      | 2     |
| 1:A:150:MET:CE   | 1:A:167:MET:HE3  | 0.56     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:89:LEU:HG    | 0.56     | 2.36        | 6      | 3     |
| 1:A:103:PHE:CZ   | 1:A:104:MET:CG   | 0.56     | 2.89        | 6      | 1     |
| 1:A:10:LEU:HD12  | 1:A:85:GLU:CG    | 0.56     | 2.30        | 8      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD21  | 1:A:58:MET:SD    | 0.56     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD11  | 1:A:73:ILE:CG1   | 0.56     | 2.31        | 10     | 3     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:184:ILE:HG21 | 0.56     | 2.35        | 1      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HA    | 1:A:142:LYS:HD2  | 0.56     | 1.77        | 3      | 1     |
| 1:A:107:TRP:O    | 1:A:110:TYR:CE1  | 0.56     | 2.59        | 9      | 4     |
| 1:A:88:PHE:CA    | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.56     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:147:THR:CG2  | 0.56     | 2.31        | 7      | 2     |
| 1:A:100:CYS:HA   | 1:A:172:PRO:HG2  | 0.56     | 1.76        | 6      | 1     |
| 1:A:167:MET:HA   | 1:A:170:LEU:CD2  | 0.56     | 2.31        | 7      | 2     |
| 1:A:136:LYS:HD2  | 1:A:138:VAL:N    | 0.56     | 2.15        | 9      | 1     |
| 1:A:181:PHE:HB3  | 1:A:255:ILE:O    | 0.56     | 2.00        | 9      | 1     |
| 1:A:120:THR:O    | 1:A:124:LYS:HD2  | 0.56     | 2.01        | 10     | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.56     | 1.77        | 1      | 1     |
| 1:A:5:HIS:HB2    | 1:A:19:ILE:HG12  | 0.56     | 1.77        | 4      | 4     |
| 1:A:20:TRP:O     | 1:A:24:ASP:HB2   | 0.56     | 2.01        | 5      | 5     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:238:ILE:HG22 | 0.56     | 1.77        | 2      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CD1  | 1:A:249:ARG:HD2  | 0.56     | 2.36        | 3      | 1     |
| 1:A:246:LYS:HE3  | 1:A:246:LYS:CA   | 0.56     | 2.30        | 10     | 2     |
| 1:A:239:MET:HE3  | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.56     | 2.31        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:47:ARG:NE    | 0.56     | 2.54        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:36:LEU:CD1   | 1:A:68:ARG:HB3   | 0.56     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:61:PHE:O     | 1:A:65:TYR:CB    | 0.56     | 2.52        | 5      | 5     |
| 1:A:100:CYS:SG   | 1:A:175:GLU:HB2  | 0.56     | 2.41        | 10     | 2     |
| 1:A:117:PHE:CE1  | 1:A:254:LEU:HB3  | 0.56     | 2.36        | 2      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:246:LYS:NZ   | 0.56     | 2.74        | 7      | 2     |
| 1:A:113:ASP:O    | 1:A:114:HIS:HB3  | 0.56     | 2.01        | 6      | 1     |
| 1:A:186:MET:HG2  | 1:A:190:GLU:HB3  | 0.56     | 1.76        | 9      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:HG   | 0.55     | 2.00        | 1      | 4     |
| 1:A:238:ILE:CB   | 1:A:252:LEU:HD22 | 0.55     | 2.30        | 1      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:146:TYR:CE1  | 0.55     | 2.95        | 2      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HD13 | 1:A:221:LYS:HD3  | 0.55     | 1.77        | 2      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HB3  | 1:A:235:LYS:HG2  | 0.55     | 1.78        | 3      | 1     |
| 1:A:178:LEU:HD22 | 1:A:178:LEU:H    | 0.55     | 1.61        | 9      | 2     |
| 1:A:104:MET:O    | 1:A:107:TRP:HD1  | 0.55     | 1.84        | 6      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HG   | 1:A:138:VAL:CB   | 0.55     | 2.27        | 6      | 1     |
| 1:A:50:ALA:C     | 1:A:52:LEU:HD22  | 0.55     | 2.26        | 9      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD11 | 1:A:150:MET:SD   | 0.55     | 2.41        | 9      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CZ   | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.55     | 2.35        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HZ   | 1:A:255:ILE:HD12 | 0.55     | 1.60        | 10     | 1     |
| 1:A:234:TYR:O    | 1:A:238:ILE:HD12 | 0.55     | 2.01        | 10     | 1     |
| 1:A:184:ILE:HD13 | 1:A:226:LEU:CD2  | 0.55     | 2.31        | 3      | 2     |
| 1:A:54:LEU:HD11  | 1:A:58:MET:HB3   | 0.55     | 1.79        | 9      | 4     |
| 1:A:116:GLY:HA2  | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.55     | 1.78        | 7      | 2     |
| 1:A:247:LEU:HD21 | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.55     | 1.77        | 6      | 1     |
| 1:A:45:GLN:O     | 1:A:49:LYS:HB2   | 0.55     | 2.00        | 4      | 5     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:CE   | 0.55     | 2.30        | 6      | 5     |
| 1:A:110:TYR:OH   | 1:A:126:PHE:CZ   | 0.55     | 2.55        | 7      | 3     |
| 1:A:106:THR:O    | 1:A:110:TYR:CE2  | 0.55     | 2.60        | 3      | 4     |
| 1:A:107:TRP:HE1  | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.55     | 1.59        | 5      | 1     |
| 1:A:178:LEU:O    | 1:A:182:GLN:HG3  | 0.55     | 2.01        | 5      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:147:THR:HG23 | 0.55     | 1.77        | 7      | 1     |
| 1:A:56:PRO:HA    | 1:A:59:LYS:CE    | 0.55     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:HA   | 1:A:126:PHE:HB3  | 0.55     | 1.79        | 10     | 4     |
| 1:A:142:LYS:O    | 1:A:146:TYR:CB   | 0.55     | 2.55        | 10     | 3     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:HG    | 0.55     | 2.37        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE1  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.55     | 1.99        | 8      | 2     |
| 1:A:17:PHE:O     | 1:A:20:TRP:CD1   | 0.55     | 2.60        | 7      | 9     |
| 1:A:207:ASP:CA   | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.55     | 2.32        | 8      | 5     |
| 1:A:173:VAL:HG12 | 1:A:179:LEU:HB3  | 0.55     | 1.76        | 4      | 2     |
| 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.55     | 2.31        | 2      | 3     |
| 1:A:47:ARG:HG3   | 1:A:53:GLU:O     | 0.55     | 2.01        | 4      | 7     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:246:LYS:CB   | 0.55     | 2.84        | 6      | 5     |
| 1:A:58:MET:HE3   | 1:A:82:LEU:CA    | 0.55     | 2.32        | 5      | 2     |
| 1:A:207:ASP:HB2  | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.55     | 1.77        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:CG   | 0.55     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:82:LEU:HD11  | 0.55     | 2.36        | 8      | 1     |
| 1:A:118:ILE:N    | 1:A:162:LEU:O    | 0.55     | 2.39        | 9      | 7     |
| 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:176:ASN:HD22 | 0.55     | 1.61        | 3      | 3     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:234:TYR:N    | 0.55     | 2.40        | 7      | 7     |
| 1:A:13:ALA:CB    | 1:A:149:LEU:HG   | 0.55     | 2.30        | 4      | 5     |
| 1:A:31:LEU:HD12  | 1:A:73:ILE:HD11  | 0.55     | 1.78        | 8      | 2     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:255:ILE:CD1  | 0.55     | 2.31        | 4      | 1     |
| 1:A:85:GLU:OE2   | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.55     | 2.01        | 5      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.55     | 2.30        | 9      | 2     |
| 1:A:31:LEU:O     | 1:A:36:LEU:HD13  | 0.55     | 2.01        | 10     | 1     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:HD13  | 0.55     | 2.02        | 10     | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:239:MET:N    | 0.55     | 2.16        | 10     | 1     |
| 1:A:61:PHE:CE2   | 1:A:65:TYR:CE2   | 0.55     | 2.95        | 1      | 5     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:146:TYR:CZ   | 0.55     | 2.95        | 2      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CE2  | 1:A:164:LEU:CD1  | 0.55     | 2.90        | 2      | 4     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:142:LYS:CB   | 0.55     | 2.29        | 3      | 1     |
| 1:A:162:LEU:HD21 | 1:A:166:GLU:CB   | 0.55     | 2.32        | 3      | 1     |
| 1:A:15:GLN:O     | 1:A:18:GLU:HB3   | 0.55     | 2.02        | 8      | 4     |
| 1:A:131:LEU:CG   | 1:A:138:VAL:HB   | 0.55     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:186:MET:HG2  | 1:A:221:LYS:HE2  | 0.55     | 1.79        | 5      | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB3   | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.55     | 2.32        | 7      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.55     | 1.78        | 6      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:O    | 0.55     | 2.02        | 7      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD23 | 1:A:254:LEU:N    | 0.55     | 2.06        | 7      | 1     |
| 1:A:7:GLN:CG     | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.55     | 2.31        | 9      | 1     |
| 1:A:105:LYS:O    | 1:A:109:LYS:HD2  | 0.55     | 2.01        | 9      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:134:ALA:CB   | 0.55     | 2.32        | 10     | 1     |
| 1:A:139:ASP:CB   | 1:A:142:LYS:HD3  | 0.55     | 2.30        | 10     | 1     |
| 1:A:75:ILE:CG1   | 1:A:169:ARG:HG3  | 0.55     | 2.32        | 4      | 2     |
| 1:A:107:TRP:HA   | 1:A:110:TYR:CZ   | 0.55     | 2.37        | 3      | 4     |
| 1:A:122:GLU:O    | 1:A:126:PHE:HB3  | 0.55     | 2.02        | 3      | 2     |
| 1:A:254:LEU:N    | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.55     | 2.16        | 4      | 1     |
| 1:A:116:GLY:HA3  | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.55     | 1.79        | 7      | 1     |
| 1:A:166:GLU:HG3  | 1:A:167:MET:H    | 0.55     | 1.62        | 8      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HE2  | 1:A:165:THR:N    | 0.55     | 1.99        | 2      | 3     |
| 1:A:198:TYR:HE2  | 1:A:249:ARG:HH21 | 0.55     | 1.44        | 3      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD11 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.55     | 1.79        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:88:PHE:N     | 1:A:142:LYS:HD2  | 0.55     | 2.17        | 9      | 1     |
| 1:A:27:GLY:C     | 1:A:29:GLY:H     | 0.55     | 2.10        | 6      | 10    |
| 1:A:169:ARG:HG3  | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.55     | 1.78        | 1      | 1     |
| 1:A:198:TYR:O    | 1:A:210:GLU:HG2  | 0.55     | 2.01        | 10     | 4     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:162:LEU:HB2  | 0.55     | 1.76        | 2      | 3     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:132:GLU:H    | 0.55     | 1.62        | 2      | 1     |
| 1:A:136:LYS:CE   | 1:A:138:VAL:HA   | 0.55     | 2.32        | 2      | 1     |
| 1:A:241:LEU:N    | 1:A:241:LEU:HD22 | 0.55     | 2.17        | 2      | 1     |
| 1:A:252:LEU:N    | 1:A:252:LEU:HD13 | 0.55     | 2.17        | 2      | 1     |
| 1:A:54:LEU:HD23  | 1:A:59:LYS:HG3   | 0.55     | 1.78        | 5      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD13 | 1:A:214:LEU:C    | 0.55     | 2.26        | 9      | 2     |
| 1:A:97:LEU:HD12  | 1:A:98:LYS:HB2   | 0.55     | 1.79        | 7      | 2     |
| 1:A:17:PHE:CE2   | 1:A:153:LEU:HB3  | 0.55     | 2.37        | 8      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CD2  | 1:A:166:GLU:HB3  | 0.55     | 2.37        | 8      | 1     |
| 1:A:36:LEU:CD2   | 1:A:68:ARG:HB3   | 0.54     | 2.33        | 2      | 4     |
| 1:A:73:ILE:CD1   | 1:A:78:LEU:HD23  | 0.54     | 2.32        | 5      | 5     |
| 1:A:139:ASP:C    | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.54     | 2.28        | 2      | 3     |
| 1:A:179:LEU:HD13 | 1:A:179:LEU:C    | 0.54     | 2.27        | 9      | 3     |
| 1:A:36:LEU:HD12  | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.54     | 1.79        | 5      | 3     |
| 1:A:216:LYS:CA   | 1:A:231:ILE:HG21 | 0.54     | 2.32        | 8      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:138:VAL:CB   | 0.54     | 2.33        | 2      | 3     |
| 1:A:138:VAL:HG22 | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.54     | 1.78        | 8      | 2     |
| 1:A:13:ALA:HA    | 1:A:16:PHE:HB3   | 0.54     | 1.80        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB3   | 1:A:103:PHE:CE2  | 0.54     | 2.37        | 5      | 3     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:234:TYR:HB3  | 0.54     | 2.33        | 1      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:142:LYS:HG2  | 0.54     | 2.36        | 2      | 1     |
| 1:A:96:GLN:HB2   | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.54     | 1.77        | 6      | 2     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:169:ARG:CG   | 0.54     | 2.56        | 6      | 3     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:225:GLU:HB2  | 0.54     | 1.77        | 3      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CB   | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.54     | 2.90        | 4      | 1     |
| 1:A:146:TYR:CE1  | 1:A:150:MET:HE2  | 0.54     | 2.37        | 5      | 2     |
| 1:A:76:VAL:O     | 1:A:79:ALA:HB3   | 0.54     | 2.03        | 8      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HE2  | 1:A:147:THR:HG23 | 0.54     | 1.79        | 8      | 1     |
| 1:A:166:GLU:CD   | 1:A:170:LEU:HD21 | 0.54     | 2.27        | 9      | 1     |
| 1:A:252:LEU:O    | 1:A:256:LEU:HG   | 0.54     | 2.03        | 9      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:93:ARG:HG3   | 0.54     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:17:PHE:CE2   | 1:A:153:LEU:HG   | 0.54     | 2.37        | 4      | 2     |
| 1:A:30:TYR:CD2   | 1:A:74:GLY:HA2   | 0.54     | 2.37        | 1      | 7     |
| 1:A:79:ALA:HB2   | 1:A:92:PHE:CZ    | 0.54     | 2.38        | 1      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CB   | 1:A:166:GLU:HB2  | 0.54     | 2.32        | 4      | 6     |
| 1:A:140:ASP:HA   | 1:A:143:LEU:HG   | 0.54     | 1.78        | 2      | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:206:ILE:HA   | 1:A:210:GLU:OE1  | 0.54     | 2.03        | 4      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.54     | 2.91        | 9      | 3     |
| 1:A:39:LEU:HD13  | 1:A:40:ILE:HB    | 0.54     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:136:LYS:HE2  | 1:A:138:VAL:CA   | 0.54     | 2.32        | 8      | 1     |
| 1:A:167:MET:C    | 1:A:171:LEU:HD23 | 0.54     | 2.26        | 8      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD12  | 1:A:54:LEU:CD2   | 0.54     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:131:LEU:N    | 1:A:131:LEU:HD23 | 0.54     | 2.18        | 10     | 1     |
| 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:HG13 | 0.54     | 1.80        | 10     | 1     |
| 1:A:88:PHE:CZ    | 1:A:92:PHE:CD2   | 0.54     | 2.96        | 6      | 4     |
| 1:A:108:ARG:CD   | 1:A:241:LEU:HA   | 0.54     | 2.33        | 7      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:247:LEU:O    | 0.54     | 2.60        | 5      | 3     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:131:LEU:CB   | 0.54     | 2.33        | 2      | 1     |
| 1:A:115:SER:O    | 1:A:250:THR:HG22 | 0.54     | 2.01        | 3      | 1     |
| 1:A:117:PHE:HA   | 1:A:162:LEU:O    | 0.54     | 2.03        | 4      | 4     |
| 1:A:108:ARG:HD3  | 1:A:241:LEU:CA   | 0.54     | 2.31        | 6      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG21 | 1:A:218:LEU:HD13 | 0.54     | 1.79        | 9      | 2     |
| 1:A:6:LEU:HD22   | 1:A:19:ILE:HG21  | 0.54     | 1.79        | 9      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HB2  | 1:A:138:VAL:CB   | 0.54     | 2.33        | 10     | 1     |
| 1:A:132:GLU:HA   | 1:A:137:THR:HA   | 0.54     | 1.80        | 10     | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.54     | 2.96        | 1      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD23 | 1:A:178:LEU:CD1  | 0.54     | 2.30        | 7      | 3     |
| 1:A:20:TRP:O     | 1:A:23:PHE:CD1   | 0.54     | 2.61        | 4      | 8     |
| 1:A:100:CYS:CA   | 1:A:172:PRO:HG2  | 0.54     | 2.32        | 8      | 4     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.54     | 1.80        | 2      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG21  | 1:A:62:VAL:CA    | 0.54     | 2.32        | 5      | 2     |
| 1:A:136:LYS:HD2  | 1:A:138:VAL:HG22 | 0.54     | 1.77        | 5      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE3    | 1:A:5:HIS:ND1    | 0.54     | 2.18        | 8      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.54     | 2.75        | 9      | 2     |
| 1:A:7:GLN:HG2    | 1:A:46:ALA:O     | 0.54     | 2.03        | 10     | 1     |
| 1:A:107:TRP:O    | 1:A:110:TYR:CE2  | 0.54     | 2.61        | 1      | 5     |
| 1:A:239:MET:SD   | 1:A:242:SER:HB3  | 0.54     | 2.42        | 1      | 2     |
| 1:A:152:LYS:HE2  | 1:A:152:LYS:N    | 0.54     | 2.18        | 7      | 3     |
| 1:A:226:LEU:HA   | 1:A:234:TYR:HE2  | 0.54     | 1.63        | 3      | 2     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:93:ARG:HG3   | 0.54     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:116:GLY:CA   | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.54     | 2.32        | 1      | 1     |
| 1:A:108:ARG:O    | 1:A:111:ASP:HB2  | 0.54     | 2.03        | 2      | 2     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:92:PHE:C     | 0.54     | 2.85        | 6      | 4     |
| 1:A:78:LEU:HD22  | 1:A:81:VAL:CG1   | 0.54     | 2.33        | 6      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD13   | 1:A:46:ALA:HB2   | 0.54     | 1.78        | 7      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CE2   | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.54     | 2.37        | 7      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:61:PHE:HD2   | 0.54     | 1.63        | 10     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:88:PHE:C     | 0.54     | 2.85        | 9      | 6     |
| 1:A:151:LEU:HD12 | 1:A:161:LYS:C    | 0.54     | 2.28        | 1      | 2     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:HD12 | 0.54     | 1.78        | 2      | 2     |
| 1:A:205:TYR:HD2  | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.54     | 2.21        | 2      | 1     |
| 1:A:94:CYS:CB    | 1:A:130:LEU:HD22 | 0.54     | 2.33        | 10     | 2     |
| 1:A:241:LEU:HD23 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.54     | 1.79        | 4      | 1     |
| 1:A:33:GLY:HA2   | 1:A:68:ARG:O     | 0.54     | 2.03        | 10     | 2     |
| 1:A:31:LEU:HD13  | 1:A:36:LEU:HD23  | 0.54     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD1  | 1:A:151:LEU:HD11 | 0.54     | 2.33        | 8      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CG2   | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.54     | 2.24        | 3      | 3     |
| 1:A:97:LEU:HD22  | 1:A:98:LYS:N     | 0.54     | 2.18        | 1      | 3     |
| 1:A:102:GLU:O    | 1:A:105:LYS:HB3  | 0.54     | 2.02        | 1      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:HB2  | 0.54     | 2.03        | 4      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.54     | 1.78        | 6      | 2     |
| 1:A:168:ALA:O    | 1:A:171:LEU:HB2  | 0.54     | 2.02        | 8      | 1     |
| 1:A:178:LEU:HD22 | 1:A:178:LEU:N    | 0.54     | 2.18        | 9      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CD1   | 1:A:20:TRP:C     | 0.53     | 2.87        | 5      | 9     |
| 1:A:151:LEU:HB2  | 1:A:152:LYS:HE2  | 0.53     | 1.78        | 1      | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:CG   | 0.53     | 2.84        | 2      | 3     |
| 1:A:173:VAL:HA   | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.53     | 2.18        | 7      | 2     |
| 1:A:123:LEU:HD12 | 1:A:147:THR:CG2  | 0.53     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD2  | 1:A:181:PHE:CD1  | 0.53     | 2.96        | 9      | 3     |
| 1:A:145:GLU:O    | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.53     | 2.03        | 8      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:HD22 | 0.53     | 1.63        | 10     | 1     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:246:LYS:CD   | 0.53     | 2.86        | 2      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:248:TYR:CZ   | 0.53     | 2.96        | 2      | 1     |
| 1:A:239:MET:HE2  | 1:A:242:SER:CB   | 0.53     | 2.32        | 4      | 3     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:225:GLU:CG   | 0.53     | 2.33        | 9      | 2     |
| 1:A:110:TYR:CD2  | 1:A:126:PHE:HB2  | 0.53     | 2.38        | 6      | 1     |
| 1:A:166:GLU:CG   | 1:A:167:MET:N    | 0.53     | 2.71        | 8      | 1     |
| 1:A:186:MET:O    | 1:A:187:CYS:CB   | 0.53     | 2.56        | 7      | 4     |
| 1:A:61:PHE:CE1   | 1:A:65:TYR:CE2   | 0.53     | 2.97        | 2      | 3     |
| 1:A:107:TRP:CH2  | 1:A:117:PHE:HA   | 0.53     | 2.37        | 9      | 3     |
| 1:A:249:ARG:HD3  | 1:A:252:LEU:HB2  | 0.53     | 1.80        | 2      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD13 | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.53     | 2.34        | 4      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HG     | 1:A:19:ILE:HG21  | 0.53     | 1.79        | 5      | 2     |
| 1:A:126:PHE:HE1  | 1:A:130:LEU:HD21 | 0.53     | 1.63        | 5      | 2     |
| 1:A:136:LYS:HG3  | 1:A:137:THR:H    | 0.53     | 1.64        | 5      | 1     |
| 1:A:212:ASP:O    | 1:A:216:LYS:HD3  | 0.53     | 2.03        | 7      | 1     |
| 1:A:149:LEU:O    | 1:A:153:LEU:HG   | 0.53     | 2.03        | 8      | 1     |
| 1:A:206:ILE:HD12 | 1:A:249:ARG:HD3  | 0.53     | 1.79        | 9      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:131:LEU:CD1  | 0.53     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:218:LEU:O    | 1:A:221:LYS:HB2  | 0.53     | 2.02        | 4      | 2     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:52:LEU:HB2   | 0.53     | 2.19        | 5      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:H    | 0.53     | 1.64        | 5      | 1     |
| 1:A:164:LEU:CD2  | 1:A:178:LEU:HD11 | 0.53     | 2.26        | 6      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:131:LEU:HA   | 0.53     | 1.80        | 7      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD22  | 1:A:39:LEU:O     | 0.53     | 2.03        | 8      | 1     |
| 1:A:91:LEU:C     | 1:A:91:LEU:HD12  | 0.53     | 2.29        | 9      | 2     |
| 1:A:1:MET:O      | 1:A:4:SER:N      | 0.53     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:2:ALA:CA     | 0.53     | 2.34        | 1      | 1     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:O     | 0.53     | 2.25        | 7      | 9     |
| 1:A:114:HIS:N    | 1:A:114:HIS:CD2  | 0.53     | 2.77        | 1      | 5     |
| 1:A:123:LEU:HD22 | 1:A:126:PHE:HD2  | 0.53     | 1.61        | 5      | 2     |
| 1:A:212:ASP:N    | 1:A:235:LYS:HG3  | 0.53     | 2.17        | 3      | 4     |
| 1:A:89:LEU:CA    | 1:A:92:PHE:HB3   | 0.53     | 2.30        | 9      | 4     |
| 1:A:107:TRP:HA   | 1:A:110:TYR:HH   | 0.53     | 1.62        | 3      | 2     |
| 1:A:139:ASP:HB3  | 1:A:142:LYS:HD3  | 0.53     | 1.79        | 3      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HD1   | 1:A:78:LEU:HD12  | 0.53     | 1.60        | 7      | 2     |
| 1:A:10:LEU:C     | 1:A:84:THR:O     | 0.53     | 2.52        | 6      | 4     |
| 1:A:12:THR:OG1   | 1:A:13:ALA:N     | 0.53     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:65:TYR:OH    | 1:A:77:GLU:HG2   | 0.53     | 2.03        | 5      | 2     |
| 1:A:207:ASP:HA   | 1:A:246:LYS:CE   | 0.53     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:105:LYS:O    | 1:A:108:ARG:HD3  | 0.53     | 2.04        | 5      | 3     |
| 1:A:171:LEU:HB2  | 1:A:172:PRO:CD   | 0.53     | 2.32        | 3      | 6     |
| 1:A:20:TRP:CZ3   | 1:A:74:GLY:O     | 0.53     | 2.62        | 7      | 9     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:HG   | 0.53     | 1.78        | 2      | 1     |
| 1:A:246:LYS:HA   | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.53     | 1.79        | 3      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CB    | 1:A:88:PHE:CD1   | 0.53     | 2.92        | 6      | 4     |
| 1:A:188:GLY:HA3  | 1:A:260:ASP:HB2  | 0.53     | 1.80        | 7      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HD2  | 1:A:231:ILE:HG21 | 0.53     | 1.80        | 9      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CE1   | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.53     | 2.96        | 1      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:178:LEU:HD21 | 0.53     | 2.37        | 10     | 2     |
| 1:A:177:PHE:CB   | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.53     | 2.92        | 5      | 4     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:HD22 | 0.53     | 2.03        | 4      | 1     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.53     | 2.04        | 6      | 1     |
| 1:A:57:GLU:HA    | 1:A:60:THR:OG1   | 0.53     | 2.03        | 7      | 1     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:150:MET:HG2  | 0.53     | 2.03        | 7      | 1     |
| 1:A:1:MET:CE     | 1:A:19:ILE:HG23  | 0.53     | 2.34        | 8      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.53     | 2.34        | 8      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:78:LEU:HD11  | 0.53     | 2.39        | 9      | 1     |
| 1:A:96:GLN:CG    | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.53     | 2.33        | 9      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:88:PHE:HE1   | 1:A:146:TYR:CG   | 0.53     | 2.22        | 1      | 1     |
| 1:A:138:VAL:CG2  | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.53     | 2.33        | 2      | 2     |
| 1:A:191:PHE:CD2  | 1:A:253:ALA:HA   | 0.53     | 2.38        | 1      | 1     |
| 1:A:184:ILE:O    | 1:A:185:LYS:C    | 0.53     | 2.51        | 2      | 7     |
| 1:A:88:PHE:CB    | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.53     | 2.33        | 5      | 5     |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:HG2  | 0.53     | 1.80        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:178:LEU:HD22 | 0.53     | 2.38        | 9      | 2     |
| 1:A:105:LYS:O    | 1:A:108:ARG:CD   | 0.53     | 2.57        | 1      | 2     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:THR:N    | 0.53     | 2.42        | 7      | 5     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:31:LEU:HD21  | 0.53     | 2.39        | 2      | 3     |
| 1:A:162:LEU:HD11 | 1:A:166:GLU:CD   | 0.53     | 2.29        | 3      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD22 | 1:A:167:MET:HB2  | 0.53     | 1.81        | 3      | 1     |
| 1:A:239:MET:HA   | 1:A:239:MET:HE2  | 0.53     | 1.79        | 7      | 2     |
| 1:A:31:LEU:HD22  | 1:A:36:LEU:HA    | 0.53     | 1.79        | 8      | 2     |
| 1:A:143:LEU:O    | 1:A:147:THR:OG1  | 0.53     | 2.24        | 5      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HD11 | 1:A:226:LEU:CG   | 0.53     | 2.29        | 5      | 3     |
| 1:A:191:PHE:HE1  | 1:A:249:ARG:CG   | 0.53     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:79:ALA:CB    | 0.53     | 2.92        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:131:LEU:CA   | 0.53     | 2.34        | 7      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HB2  | 0.53     | 1.81        | 7      | 1     |
| 1:A:103:PHE:CE1  | 1:A:104:MET:HG3  | 0.53     | 2.39        | 8      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:79:ALA:HB2   | 0.53     | 2.39        | 1      | 2     |
| 1:A:30:TYR:CD2   | 1:A:74:GLY:CA    | 0.53     | 2.92        | 9      | 7     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:163:GLU:HG2  | 0.53     | 2.38        | 2      | 4     |
| 1:A:176:ASN:OD1  | 1:A:178:LEU:N    | 0.53     | 2.42        | 7      | 1     |
| 1:A:117:PHE:CD1  | 1:A:161:LYS:HE2  | 0.53     | 2.38        | 9      | 1     |
| 1:A:139:ASP:HB2  | 1:A:142:LYS:HD3  | 0.53     | 1.79        | 10     | 1     |
| 1:A:82:LEU:CD1   | 1:A:84:THR:HB    | 0.52     | 2.35        | 9      | 6     |
| 1:A:122:GLU:O    | 1:A:126:PHE:N    | 0.52     | 2.37        | 3      | 9     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:CD2  | 0.52     | 2.34        | 2      | 4     |
| 1:A:236:LYS:HG2  | 1:A:237:ASN:N    | 0.52     | 2.19        | 2      | 2     |
| 1:A:6:LEU:CD2    | 1:A:43:LEU:HD12  | 0.52     | 2.34        | 2      | 1     |
| 1:A:137:THR:O    | 1:A:138:VAL:C    | 0.52     | 2.52        | 5      | 3     |
| 1:A:23:PHE:CE2   | 1:A:39:LEU:HD13  | 0.52     | 2.38        | 3      | 1     |
| 1:A:17:PHE:HD1   | 1:A:20:TRP:HE1   | 0.52     | 1.48        | 4      | 1     |
| 1:A:96:GLN:HG3   | 1:A:172:PRO:CD   | 0.52     | 2.34        | 4      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.52     | 2.17        | 7      | 1     |
| 1:A:253:ALA:O    | 1:A:257:SER:HB2  | 0.52     | 2.04        | 7      | 2     |
| 1:A:88:PHE:HA    | 1:A:138:VAL:CG2  | 0.52     | 2.34        | 8      | 2     |
| 1:A:176:ASN:HD21 | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.52     | 1.63        | 8      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:226:LEU:CD2  | 0.52     | 2.92        | 9      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:N     | 1:A:91:LEU:HD23  | 0.52     | 2.19        | 10     | 1     |
| 1:A:185:LYS:O    | 1:A:185:LYS:HG3  | 0.52     | 2.04        | 10     | 1     |
| 1:A:131:LEU:CB   | 1:A:137:THR:HA   | 0.52     | 2.35        | 1      | 2     |
| 1:A:61:PHE:CE1   | 1:A:65:TYR:CD2   | 0.52     | 2.98        | 2      | 3     |
| 1:A:107:TRP:HB2  | 1:A:167:MET:CE   | 0.52     | 2.34        | 7      | 3     |
| 1:A:239:MET:CE   | 1:A:242:SER:OG   | 0.52     | 2.57        | 2      | 4     |
| 1:A:110:TYR:OH   | 1:A:130:LEU:HG   | 0.52     | 2.04        | 3      | 2     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:252:LEU:HA   | 0.52     | 1.80        | 3      | 1     |
| 1:A:214:LEU:CD1  | 1:A:215:LEU:HD23 | 0.52     | 2.34        | 7      | 1     |
| 1:A:241:LEU:HD12 | 1:A:251:ASP:O    | 0.52     | 2.04        | 8      | 1     |
| 1:A:186:MET:HG2  | 1:A:190:GLU:CB   | 0.52     | 2.34        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:238:ILE:CB   | 0.52     | 2.34        | 10     | 1     |
| 1:A:23:PHE:CG    | 1:A:39:LEU:CB    | 0.52     | 2.91        | 10     | 6     |
| 1:A:61:PHE:CG    | 1:A:81:VAL:CG2   | 0.52     | 2.92        | 1      | 6     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:HD2  | 0.52     | 1.45        | 1      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HD11 | 1:A:252:LEU:HG   | 0.52     | 1.80        | 4      | 2     |
| 1:A:36:LEU:HD13  | 1:A:73:ILE:HG12  | 0.52     | 1.79        | 5      | 3     |
| 1:A:116:GLY:C    | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.52     | 2.28        | 2      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:184:ILE:CG2  | 0.52     | 2.93        | 2      | 2     |
| 1:A:16:PHE:HZ    | 1:A:75:ILE:HA    | 0.52     | 1.64        | 3      | 2     |
| 1:A:166:GLU:OE1  | 1:A:167:MET:N    | 0.52     | 2.42        | 8      | 2     |
| 1:A:184:ILE:HD11 | 1:A:225:GLU:O    | 0.52     | 2.05        | 3      | 2     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.52     | 1.82        | 4      | 1     |
| 1:A:103:PHE:CE1  | 1:A:167:MET:HG2  | 0.52     | 2.40        | 6      | 3     |
| 1:A:247:LEU:CD2  | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.52     | 2.35        | 6      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:256:LEU:HB3  | 0.52     | 2.40        | 9      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HG   | 1:A:249:ARG:NH1  | 0.52     | 2.18        | 9      | 1     |
| 1:A:44:LEU:N     | 1:A:44:LEU:CD1   | 0.52     | 2.72        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:CG   | 1:A:184:ILE:HG21 | 0.52     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:HG2    | 1:A:50:ALA:CB    | 0.52     | 2.34        | 8      | 2     |
| 1:A:185:LYS:CB   | 1:A:258:ALA:HA   | 0.52     | 2.35        | 2      | 3     |
| 1:A:90:LEU:HD12  | 1:A:134:ALA:CB   | 0.52     | 2.34        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CD2  | 1:A:256:LEU:HG   | 0.52     | 2.39        | 5      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:252:LEU:HB2  | 0.52     | 2.39        | 10     | 2     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:142:LYS:CG   | 0.52     | 2.33        | 8      | 3     |
| 1:A:96:GLN:HA    | 1:A:172:PRO:CG   | 0.52     | 2.30        | 3      | 3     |
| 1:A:146:TYR:HA   | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.52     | 1.82        | 1      | 1     |
| 1:A:81:VAL:HG13  | 1:A:82:LEU:N     | 0.52     | 2.20        | 7      | 7     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:134:ALA:CB   | 0.52     | 2.25        | 8      | 3     |
| 1:A:100:CYS:HB3  | 1:A:172:PRO:CB   | 0.52     | 2.34        | 6      | 3     |
| 1:A:178:LEU:H    | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.52     | 2.18        | 9      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:252:LEU:CB   | 0.52     | 2.93        | 10     | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:HA    | 0.52     | 1.82        | 7      | 7     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:54:LEU:HD23  | 0.52     | 1.78        | 1      | 1     |
| 1:A:123:LEU:O    | 1:A:123:LEU:HD13 | 0.52     | 2.05        | 4      | 5     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.52     | 2.39        | 1      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:231:ILE:CG2  | 0.52     | 2.34        | 6      | 3     |
| 1:A:91:LEU:CB    | 1:A:131:LEU:HB3  | 0.52     | 2.20        | 3      | 2     |
| 1:A:104:MET:CG   | 1:A:164:LEU:HD11 | 0.52     | 2.27        | 3      | 1     |
| 1:A:146:TYR:CD1  | 1:A:150:MET:HG3  | 0.52     | 2.40        | 3      | 2     |
| 1:A:150:MET:C    | 1:A:166:GLU:HG3  | 0.52     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HE3  | 1:A:147:THR:CG2  | 0.52     | 2.35        | 5      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:LYS:H    | 0.52     | 1.60        | 7      | 1     |
| 1:A:182:GLN:O    | 1:A:185:LYS:HG2  | 0.52     | 2.04        | 10     | 2     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:131:LEU:HA   | 0.52     | 1.81        | 2      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG22 | 1:A:142:LYS:CG   | 0.52     | 2.35        | 2      | 1     |
| 1:A:39:LEU:CD1   | 1:A:78:LEU:HD21  | 0.52     | 2.35        | 4      | 1     |
| 1:A:208:GLU:O    | 1:A:235:LYS:HG3  | 0.52     | 2.05        | 9      | 5     |
| 1:A:181:PHE:O    | 1:A:184:ILE:HG22 | 0.52     | 2.03        | 10     | 2     |
| 1:A:212:ASP:O    | 1:A:216:LYS:HD2  | 0.52     | 2.05        | 5      | 1     |
| 1:A:73:ILE:HG13  | 1:A:73:ILE:O     | 0.52     | 2.04        | 9      | 1     |
| 1:A:80:HIS:CB    | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.52     | 2.35        | 6      | 4     |
| 1:A:7:GLN:HB2    | 1:A:52:LEU:CD1   | 0.52     | 2.32        | 3      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CE2   | 1:A:65:TYR:CD2   | 0.52     | 2.98        | 4      | 3     |
| 1:A:75:ILE:O     | 1:A:79:ALA:HB3   | 0.52     | 2.04        | 3      | 2     |
| 1:A:147:THR:HG23 | 1:A:148:ASP:N    | 0.52     | 2.19        | 3      | 5     |
| 1:A:76:VAL:HB    | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.52     | 1.82        | 4      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CG   | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.52     | 2.97        | 4      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CZ   | 1:A:218:LEU:CD1  | 0.52     | 2.93        | 7      | 1     |
| 1:A:62:VAL:O     | 1:A:66:GLY:HA3   | 0.52     | 2.04        | 6      | 10    |
| 1:A:79:ALA:HB1   | 1:A:89:LEU:CD2   | 0.52     | 2.35        | 9      | 2     |
| 1:A:151:LEU:HD12 | 1:A:161:LYS:O    | 0.52     | 2.04        | 1      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:247:LEU:C    | 0.52     | 2.88        | 6      | 4     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:248:TYR:CZ   | 0.52     | 2.97        | 2      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:75:ILE:HA    | 0.52     | 2.39        | 3      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HB2   | 1:A:84:THR:OG1   | 0.52     | 2.05        | 3      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HB3  | 1:A:138:VAL:CB   | 0.52     | 2.35        | 7      | 2     |
| 1:A:232:SER:O    | 1:A:236:LYS:HG3  | 0.52     | 2.05        | 7      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HB3  | 1:A:166:GLU:HB3  | 0.52     | 1.81        | 8      | 1     |
| 1:A:243:ASP:HB2  | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.52     | 2.40        | 8      | 1     |
| 1:A:30:TYR:OH    | 1:A:169:ARG:HA   | 0.52     | 2.05        | 4      | 4     |
| 1:A:36:LEU:HD23  | 1:A:65:TYR:CB    | 0.52     | 2.30        | 1      | 2     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:249:ARG:HA   | 0.52     | 2.34        | 1      | 2     |
| 1:A:117:PHE:HB2  | 1:A:161:LYS:CE   | 0.52     | 2.35        | 9      | 2     |
| 1:A:218:LEU:CB   | 1:A:226:LEU:HD22 | 0.52     | 2.35        | 4      | 2     |
| 1:A:222:ASN:HB3  | 1:A:225:GLU:HG3  | 0.52     | 1.82        | 2      | 1     |
| 1:A:94:CYS:SG    | 1:A:130:LEU:HD23 | 0.52     | 2.44        | 3      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD21 | 1:A:146:TYR:CE2  | 0.52     | 2.38        | 10     | 2     |
| 1:A:162:LEU:CD1  | 1:A:166:GLU:OE2  | 0.52     | 2.53        | 3      | 2     |
| 1:A:142:LYS:HD2  | 1:A:142:LYS:H    | 0.52     | 1.64        | 5      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD11 | 1:A:256:LEU:HD22 | 0.52     | 1.82        | 5      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:165:THR:CB   | 0.52     | 2.93        | 8      | 1     |
| 1:A:104:MET:HB3  | 1:A:241:LEU:CD1  | 0.52     | 2.34        | 9      | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG1  | 1:A:255:ILE:HG13 | 0.52     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:247:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:CG   | 0.51     | 2.35        | 1      | 1     |
| 1:A:76:VAL:CG2   | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.51     | 2.72        | 4      | 1     |
| 1:A:104:MET:CE   | 1:A:240:ALA:HB3  | 0.51     | 2.35        | 6      | 2     |
| 1:A:179:LEU:C    | 1:A:179:LEU:CD2  | 0.51     | 2.83        | 7      | 2     |
| 1:A:44:LEU:HD11  | 1:A:62:VAL:HG11  | 0.51     | 1.82        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:OE1   | 1:A:170:LEU:HD21 | 0.51     | 2.05        | 8      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CD1  | 1:A:249:ARG:HB3  | 0.51     | 2.40        | 9      | 2     |
| 1:A:104:MET:CG   | 1:A:164:LEU:HD21 | 0.51     | 2.35        | 9      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:206:ILE:HD12 | 0.51     | 2.41        | 1      | 1     |
| 1:A:205:TYR:OH   | 1:A:246:LYS:CB   | 0.51     | 2.59        | 8      | 5     |
| 1:A:212:ASP:N    | 1:A:235:LYS:HB2  | 0.51     | 2.20        | 1      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HG   | 1:A:234:TYR:CB   | 0.51     | 2.35        | 1      | 1     |
| 1:A:168:ALA:C    | 1:A:171:LEU:HD12 | 0.51     | 2.30        | 2      | 3     |
| 1:A:210:GLU:O    | 1:A:213:ALA:HB3  | 0.51     | 2.05        | 2      | 6     |
| 1:A:7:GLN:CB     | 1:A:52:LEU:HD12  | 0.51     | 2.34        | 6      | 2     |
| 1:A:146:TYR:CZ   | 1:A:150:MET:HE3  | 0.51     | 2.40        | 3      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:HA   | 0.51     | 1.81        | 3      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CD2   | 1:A:81:VAL:HG21  | 0.51     | 2.40        | 5      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:131:LEU:CB   | 0.51     | 2.34        | 7      | 1     |
| 1:A:195:PHE:HE1  | 1:A:204:GLY:O    | 0.51     | 1.88        | 7      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HB2  | 1:A:166:GLU:HB3  | 0.51     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:247:LEU:HG   | 0.51     | 1.82        | 8      | 1     |
| 1:A:171:LEU:CD1  | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.51     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG1  | 1:A:225:GLU:HG3  | 0.51     | 2.35        | 8      | 4     |
| 1:A:100:CYS:CB   | 1:A:172:PRO:HG2  | 0.51     | 2.34        | 6      | 2     |
| 1:A:118:ILE:HG22 | 1:A:119:GLU:H    | 0.51     | 1.65        | 3      | 3     |
| 1:A:239:MET:HE1  | 1:A:245:GLY:CA   | 0.51     | 2.34        | 5      | 1     |
| 1:A:97:LEU:HD12  | 1:A:97:LEU:C     | 0.51     | 2.30        | 8      | 3     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:226:LEU:HG   | 0.51     | 1.82        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.51     | 2.98        | 2      | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.51     | 2.89        | 4      | 2     |
| 1:A:248:TYR:N    | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.51     | 2.78        | 3      | 1     |
| 1:A:114:HIS:CD2  | 1:A:243:ASP:HB2  | 0.51     | 2.40        | 6      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CZ    | 1:A:92:PHE:CE1   | 0.51     | 2.99        | 7      | 1     |
| 1:A:149:LEU:HD23 | 1:A:153:LEU:HD11 | 0.51     | 1.81        | 8      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CD1   | 1:A:81:VAL:HG21  | 0.51     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:131:LEU:HD22 | 0.51     | 1.81        | 10     | 1     |
| 1:A:2:ALA:HB1    | 1:A:6:LEU:HD22   | 0.51     | 1.81        | 1      | 1     |
| 1:A:39:LEU:O     | 1:A:42:GLU:N     | 0.51     | 2.42        | 7      | 5     |
| 1:A:50:ALA:O     | 1:A:52:LEU:HD22  | 0.51     | 2.05        | 9      | 1     |
| 1:A:85:GLU:O     | 1:A:89:LEU:HG    | 0.51     | 2.06        | 1      | 1     |
| 1:A:110:TYR:C    | 1:A:112:THR:H    | 0.51     | 2.13        | 5      | 3     |
| 1:A:91:LEU:HD23  | 1:A:134:ALA:CB   | 0.51     | 2.35        | 2      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:CB   | 0.51     | 2.34        | 3      | 2     |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:181:PHE:CD2  | 0.51     | 2.41        | 7      | 3     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:239:MET:N    | 0.51     | 2.21        | 9      | 4     |
| 1:A:31:LEU:HD12  | 1:A:36:LEU:CA    | 0.51     | 2.35        | 3      | 1     |
| 1:A:55:SER:O     | 1:A:58:MET:N     | 0.51     | 2.44        | 8      | 6     |
| 1:A:118:ILE:HG13 | 1:A:123:LEU:HD23 | 0.51     | 1.83        | 6      | 3     |
| 1:A:39:LEU:HD13  | 1:A:78:LEU:HD21  | 0.51     | 1.82        | 4      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:96:GLN:OE1   | 0.51     | 2.06        | 4      | 1     |
| 1:A:228:ILE:O    | 1:A:228:ILE:HG13 | 0.51     | 2.04        | 7      | 4     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:255:ILE:CG1  | 0.51     | 2.94        | 5      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HA   | 1:A:147:THR:HG1  | 0.51     | 1.64        | 6      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:143:LEU:CD1  | 0.51     | 2.30        | 7      | 2     |
| 1:A:166:GLU:HA   | 1:A:169:ARG:HD2  | 0.51     | 1.82        | 10     | 1     |
| 1:A:2:ALA:CA     | 1:A:19:ILE:HG23  | 0.51     | 2.36        | 1      | 5     |
| 1:A:30:TYR:CE2   | 1:A:74:GLY:CA    | 0.51     | 2.94        | 9      | 4     |
| 1:A:237:ASN:O    | 1:A:240:ALA:N    | 0.51     | 2.43        | 1      | 9     |
| 1:A:75:ILE:O     | 1:A:79:ALA:CB    | 0.51     | 2.59        | 5      | 6     |
| 1:A:123:LEU:C    | 1:A:123:LEU:HD13 | 0.51     | 2.30        | 2      | 2     |
| 1:A:251:ASP:C    | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.51     | 2.30        | 2      | 2     |
| 1:A:154:PHE:CB   | 1:A:166:GLU:HA   | 0.51     | 2.36        | 3      | 1     |
| 1:A:198:TYR:CB   | 1:A:206:ILE:HD12 | 0.51     | 2.35        | 10     | 3     |
| 1:A:241:LEU:HB3  | 1:A:251:ASP:CG   | 0.51     | 2.31        | 3      | 1     |
| 1:A:93:ARG:HA    | 1:A:96:GLN:HE22  | 0.51     | 1.66        | 4      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CD2   | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.51     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:154:PHE:O    | 1:A:154:PHE:CD1  | 0.51     | 2.64        | 7      | 4     |
| 1:A:12:THR:O     | 1:A:16:PHE:CB    | 0.51     | 2.58        | 8      | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD22  | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.51     | 1.82        | 8      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:172:PRO:O    | 1:A:176:ASN:HB3  | 0.51     | 2.05        | 9      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CB    | 1:A:88:PHE:HB2   | 0.51     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:176:ASN:HB3  | 1:A:178:LEU:HG   | 0.51     | 1.83        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.51     | 2.93        | 1      | 6     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:256:LEU:HB3  | 0.51     | 2.41        | 1      | 2     |
| 1:A:243:ASP:O    | 1:A:246:LYS:O    | 0.51     | 2.29        | 1      | 2     |
| 1:A:43:LEU:HD11  | 1:A:58:MET:CE    | 0.51     | 2.36        | 10     | 4     |
| 1:A:6:LEU:CD2    | 1:A:19:ILE:HG21  | 0.51     | 2.36        | 4      | 1     |
| 1:A:118:ILE:HD13 | 1:A:118:ILE:N    | 0.51     | 2.20        | 7      | 2     |
| 1:A:76:VAL:HA    | 1:A:92:PHE:CE2   | 0.51     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD21 | 1:A:180:LYS:CE   | 0.51     | 2.36        | 7      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HG   | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.51     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:249:ARG:HA   | 1:A:252:LEU:HD23 | 0.51     | 1.83        | 10     | 1     |
| 1:A:79:ALA:O     | 1:A:82:LEU:HD12  | 0.51     | 2.06        | 7      | 4     |
| 1:A:149:LEU:CD2  | 1:A:153:LEU:HD12 | 0.51     | 2.36        | 2      | 1     |
| 1:A:165:THR:O    | 1:A:169:ARG:HD2  | 0.51     | 2.06        | 2      | 2     |
| 1:A:231:ILE:O    | 1:A:232:SER:C    | 0.51     | 2.54        | 4      | 8     |
| 1:A:110:TYR:CD2  | 1:A:126:PHE:CB   | 0.51     | 2.94        | 6      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CD2  | 1:A:118:ILE:HD11 | 0.51     | 2.41        | 7      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.51     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:232:SER:O    | 1:A:235:LYS:HG3  | 0.51     | 2.06        | 7      | 1     |
| 1:A:5:HIS:H      | 1:A:5:HIS:CD2    | 0.51     | 2.24        | 10     | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD22   | 1:A:43:LEU:CD1   | 0.51     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:184:ILE:CG2  | 0.51     | 2.94        | 10     | 1     |
| 1:A:57:GLU:O     | 1:A:61:PHE:CB    | 0.50     | 2.58        | 4      | 5     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:HB2  | 0.50     | 2.41        | 1      | 3     |
| 1:A:126:PHE:CZ   | 1:A:167:MET:CE   | 0.50     | 2.94        | 1      | 3     |
| 1:A:14:SER:CB    | 1:A:149:LEU:HB2  | 0.50     | 2.36        | 8      | 5     |
| 1:A:85:GLU:OE1   | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.50     | 2.05        | 2      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CH2  | 1:A:163:GLU:C    | 0.50     | 2.89        | 5      | 4     |
| 1:A:249:ARG:CD   | 1:A:249:ARG:O    | 0.50     | 2.59        | 6      | 2     |
| 1:A:16:PHE:CE1   | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.50     | 2.42        | 8      | 1     |
| 1:A:75:ILE:CG1   | 1:A:170:LEU:HG   | 0.50     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:85:GLU:CB    | 1:A:88:PHE:HB3   | 0.50     | 2.35        | 8      | 3     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:249:ARG:HG3  | 0.50     | 2.42        | 1      | 2     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:228:ILE:HD13 | 0.50     | 2.46        | 2      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HB3  | 1:A:231:ILE:HD13 | 0.50     | 1.82        | 3      | 1     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:HE2  | 0.50     | 1.60        | 8      | 3     |
| 1:A:107:TRP:NE1  | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.50     | 2.22        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD13 | 1:A:247:LEU:HD23 | 0.50     | 1.83        | 5      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:170:LEU:HD13 | 0.50     | 2.42        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:1:MET:CE     | 1:A:19:ILE:HG12  | 0.50     | 2.27        | 8      | 2     |
| 1:A:184:ILE:HD12 | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.50     | 1.81        | 10     | 1     |
| 1:A:10:LEU:O     | 1:A:10:LEU:CG    | 0.50     | 2.59        | 3      | 8     |
| 1:A:12:THR:HB    | 1:A:145:GLU:CG   | 0.50     | 2.37        | 4      | 2     |
| 1:A:110:TYR:OH   | 1:A:126:PHE:CE1  | 0.50     | 2.58        | 1      | 2     |
| 1:A:94:CYS:CB    | 1:A:130:LEU:HD11 | 0.50     | 2.35        | 2      | 1     |
| 1:A:85:GLU:O     | 1:A:89:LEU:HB2   | 0.50     | 2.06        | 4      | 2     |
| 1:A:235:LYS:CE   | 1:A:239:MET:HG3  | 0.50     | 2.36        | 10     | 3     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:HG23  | 0.50     | 2.06        | 7      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:HA   | 0.50     | 1.83        | 7      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD13 | 1:A:215:LEU:CA   | 0.50     | 2.35        | 9      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:226:LEU:CG   | 0.50     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:O     | 1:A:94:CYS:HB3   | 0.50     | 2.06        | 9      | 2     |
| 1:A:249:ARG:CD   | 1:A:253:ALA:HB2  | 0.50     | 2.37        | 1      | 1     |
| 1:A:39:LEU:CD1   | 1:A:40:ILE:N     | 0.50     | 2.71        | 8      | 4     |
| 1:A:154:PHE:CG   | 1:A:154:PHE:O    | 0.50     | 2.64        | 3      | 1     |
| 1:A:227:ASP:O    | 1:A:231:ILE:CB   | 0.50     | 2.59        | 3      | 2     |
| 1:A:238:ILE:HD13 | 1:A:255:ILE:HG21 | 0.50     | 1.83        | 4      | 2     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:254:LEU:HD13 | 0.50     | 2.06        | 5      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HG3  | 1:A:249:ARG:HH11 | 0.50     | 1.66        | 8      | 1     |
| 1:A:101:GLU:HG2  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.50     | 2.21        | 10     | 2     |
| 1:A:176:ASN:OD1  | 1:A:176:ASN:O    | 0.50     | 2.28        | 9      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.50     | 2.42        | 3      | 3     |
| 1:A:56:PRO:HA    | 1:A:59:LYS:CG    | 0.50     | 2.37        | 2      | 6     |
| 1:A:112:THR:C    | 1:A:114:HIS:N    | 0.50     | 2.70        | 7      | 5     |
| 1:A:173:VAL:CG1  | 1:A:179:LEU:HB3  | 0.50     | 2.36        | 2      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HG12  | 1:A:169:ARG:HG3  | 0.50     | 1.83        | 4      | 1     |
| 1:A:171:LEU:CD2  | 1:A:176:ASN:OD1  | 0.50     | 2.60        | 4      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG13  | 1:A:92:PHE:CD1   | 0.50     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:246:LYS:CE   | 0.50     | 2.95        | 5      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:234:TYR:C    | 0.50     | 2.31        | 9      | 2     |
| 1:A:249:ARG:HD2  | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.50     | 2.35        | 9      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:253:ALA:CA   | 0.50     | 2.92        | 10     | 1     |
| 1:A:78:LEU:HG    | 1:A:81:VAL:CG1   | 0.50     | 2.37        | 1      | 1     |
| 1:A:146:TYR:CE1  | 1:A:150:MET:SD   | 0.50     | 3.05        | 3      | 2     |
| 1:A:195:PHE:HA   | 1:A:198:TYR:HD2  | 0.50     | 1.66        | 1      | 3     |
| 1:A:205:TYR:HE1  | 1:A:247:LEU:C    | 0.50     | 2.15        | 6      | 4     |
| 1:A:242:SER:OG   | 1:A:247:LEU:HA   | 0.50     | 2.06        | 1      | 1     |
| 1:A:11:ILE:H     | 1:A:11:ILE:CD1   | 0.50     | 2.04        | 2      | 2     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:170:LEU:HD22 | 0.50     | 2.42        | 2      | 1     |
| 1:A:182:GLN:HA   | 1:A:185:LYS:HE3  | 0.50     | 1.82        | 2      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:188:GLY:O    | 1:A:192:ASN:HB2  | 0.50     | 2.07        | 6      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HZ3  | 1:A:162:LEU:CD1  | 0.50     | 2.19        | 9      | 3     |
| 1:A:186:MET:HB3  | 1:A:190:GLU:CB   | 0.50     | 2.36        | 7      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:137:THR:CA   | 0.50     | 2.33        | 9      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CD2   | 1:A:21:LEU:HD13  | 0.50     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:32:GLU:HB2   | 1:A:35:GLU:CG    | 0.50     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG23  | 1:A:44:LEU:HD11  | 0.50     | 1.83        | 10     | 1     |
| 1:A:124:LYS:HD2  | 1:A:147:THR:OG1  | 0.50     | 2.06        | 6      | 2     |
| 1:A:184:ILE:HG12 | 1:A:226:LEU:CD1  | 0.50     | 2.37        | 3      | 2     |
| 1:A:231:ILE:O    | 1:A:234:TYR:HB2  | 0.50     | 2.07        | 3      | 2     |
| 1:A:95:GLN:HG2   | 1:A:103:PHE:CE1  | 0.50     | 2.41        | 4      | 1     |
| 1:A:87:ASN:HB3   | 1:A:136:LYS:HE3  | 0.50     | 1.84        | 6      | 1     |
| 1:A:13:ALA:O     | 1:A:17:PHE:CB    | 0.50     | 2.59        | 7      | 1     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.50     | 2.46        | 7      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HA   | 1:A:221:LYS:HD3  | 0.50     | 1.84        | 7      | 1     |
| 1:A:34:LYS:O     | 1:A:37:GLN:N     | 0.50     | 2.44        | 7      | 9     |
| 1:A:146:TYR:CE1  | 1:A:150:MET:HE1  | 0.50     | 2.42        | 1      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:CD1  | 0.50     | 2.37        | 6      | 6     |
| 1:A:254:LEU:HD12 | 1:A:254:LEU:C    | 0.50     | 2.31        | 1      | 1     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:149:LEU:CD1  | 0.50     | 2.59        | 2      | 5     |
| 1:A:107:TRP:CH2  | 1:A:162:LEU:O    | 0.50     | 2.65        | 3      | 4     |
| 1:A:181:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:CG2  | 0.50     | 2.95        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.50     | 2.35        | 6      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:234:TYR:HA   | 0.50     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:87:ASN:HB2   | 1:A:142:LYS:CE   | 0.50     | 2.37        | 9      | 1     |
| 1:A:94:CYS:CB    | 1:A:133:LYS:HZ1  | 0.50     | 2.20        | 9      | 1     |
| 1:A:214:LEU:CD1  | 1:A:215:LEU:N    | 0.50     | 2.70        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HZ    | 1:A:75:ILE:HG22  | 0.50     | 1.65        | 1      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CD1   | 1:A:21:LEU:N     | 0.50     | 2.80        | 5      | 10    |
| 1:A:206:ILE:HG12 | 1:A:210:GLU:CB   | 0.50     | 2.36        | 1      | 2     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:CB    | 0.50     | 2.60        | 3      | 8     |
| 1:A:179:LEU:CD1  | 1:A:180:LYS:HD2  | 0.50     | 2.36        | 7      | 2     |
| 1:A:5:HIS:N      | 1:A:5:HIS:CD2    | 0.50     | 2.80        | 3      | 1     |
| 1:A:212:ASP:HA   | 1:A:215:LEU:CG   | 0.50     | 2.37        | 10     | 2     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:255:ILE:O    | 0.50     | 2.65        | 10     | 2     |
| 1:A:151:LEU:HD21 | 1:A:160:GLY:O    | 0.50     | 2.06        | 10     | 2     |
| 1:A:128:LYS:CA   | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.50     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:207:ASP:CA   | 1:A:246:LYS:CE   | 0.50     | 2.90        | 7      | 1     |
| 1:A:249:ARG:NH1  | 1:A:256:LEU:HD11 | 0.50     | 2.20        | 7      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE1  | 1:A:237:ASN:CG   | 0.50     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:239:MET:N    | 0.50     | 2.75        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:211:LEU:CG   | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.49     | 2.36        | 7      | 2     |
| 1:A:247:LEU:HD22 | 1:A:248:TYR:H    | 0.49     | 1.67        | 1      | 2     |
| 1:A:120:THR:O    | 1:A:124:LYS:CD   | 0.49     | 2.60        | 8      | 2     |
| 1:A:123:LEU:HD23 | 1:A:162:LEU:CB   | 0.49     | 2.36        | 6      | 3     |
| 1:A:254:LEU:HD12 | 1:A:255:ILE:H    | 0.49     | 1.65        | 6      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD21 | 1:A:180:LYS:HE2  | 0.49     | 1.83        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB2   | 1:A:133:LYS:HE2  | 0.49     | 1.84        | 8      | 1     |
| 1:A:94:CYS:HB3   | 1:A:95:GLN:NE2   | 0.49     | 2.22        | 8      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CD1  | 1:A:130:LEU:HG   | 0.49     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG12 | 1:A:225:GLU:CG   | 0.49     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:231:ILE:CG1  | 1:A:234:TYR:HD2  | 0.49     | 2.12        | 10     | 1     |
| 1:A:94:CYS:O     | 1:A:97:LEU:CD1   | 0.49     | 2.57        | 3      | 3     |
| 1:A:259:GLY:O    | 1:A:261:ASN:ND2  | 0.49     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HA    | 1:A:54:LEU:CD1   | 0.49     | 2.37        | 3      | 1     |
| 1:A:118:ILE:HG13 | 1:A:123:LEU:CD2  | 0.49     | 2.37        | 3      | 5     |
| 1:A:43:LEU:CD1   | 1:A:58:MET:HE2   | 0.49     | 2.36        | 4      | 1     |
| 1:A:119:GLU:CB   | 1:A:122:GLU:HB2  | 0.49     | 2.37        | 4      | 2     |
| 1:A:140:ASP:HA   | 1:A:143:LEU:CD2  | 0.49     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.49     | 2.21        | 10     | 1     |
| 1:A:47:ARG:HD3   | 1:A:52:LEU:O     | 0.49     | 2.07        | 1      | 1     |
| 1:A:120:THR:O    | 1:A:124:LYS:HB2  | 0.49     | 2.06        | 8      | 3     |
| 1:A:211:LEU:CD2  | 1:A:239:MET:N    | 0.49     | 2.76        | 1      | 2     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:142:LYS:CE   | 0.49     | 2.37        | 3      | 1     |
| 1:A:94:CYS:C     | 1:A:97:LEU:HD12  | 0.49     | 2.32        | 3      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HA   | 1:A:110:TYR:CE1  | 0.49     | 2.41        | 3      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HD23 | 1:A:160:GLY:C    | 0.49     | 2.33        | 3      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HD3   | 1:A:54:LEU:HD12  | 0.49     | 1.82        | 5      | 2     |
| 1:A:61:PHE:CD2   | 1:A:81:VAL:CG2   | 0.49     | 2.95        | 5      | 1     |
| 1:A:100:CYS:HB2  | 1:A:176:ASN:HB3  | 0.49     | 1.82        | 7      | 2     |
| 1:A:130:LEU:HA   | 1:A:133:LYS:CE   | 0.49     | 2.37        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:O     | 1:A:92:PHE:HB2   | 0.49     | 2.08        | 6      | 3     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:131:LEU:HA   | 0.49     | 2.36        | 6      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:170:LEU:CD1  | 0.49     | 2.37        | 8      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE2  | 1:A:255:ILE:CG1  | 0.49     | 2.20        | 6      | 3     |
| 1:A:242:SER:OG   | 1:A:247:LEU:CA   | 0.49     | 2.60        | 1      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.49     | 2.38        | 2      | 1     |
| 1:A:65:TYR:C     | 1:A:67:GLN:H     | 0.49     | 2.15        | 5      | 7     |
| 1:A:47:ARG:CG    | 1:A:52:LEU:O     | 0.49     | 2.58        | 9      | 4     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:47:ARG:NH1   | 0.49     | 2.45        | 5      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD12 | 1:A:180:LYS:N    | 0.49     | 2.22        | 5      | 1     |
| 1:A:111:ASP:OD2  | 1:A:118:ILE:HD13 | 0.49     | 2.07        | 6      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:131:LEU:N    | 0.49     | 2.21        | 7      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:205:TYR:O    | 0.49     | 2.66        | 7      | 1     |
| 1:A:171:LEU:C    | 1:A:171:LEU:HD12 | 0.49     | 2.32        | 9      | 1     |
| 1:A:75:ILE:CB    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.49     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:131:LEU:CD1  | 0.49     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:114:HIS:HB3  | 1:A:251:ASP:OD1  | 0.49     | 2.06        | 3      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CD2  | 1:A:126:PHE:CG   | 0.49     | 3.00        | 4      | 2     |
| 1:A:154:PHE:O    | 1:A:154:PHE:HD1  | 0.49     | 1.89        | 6      | 2     |
| 1:A:95:GLN:HG2   | 1:A:167:MET:CG   | 0.49     | 2.37        | 5      | 1     |
| 1:A:85:GLU:HB3   | 1:A:88:PHE:CB    | 0.49     | 2.27        | 9      | 2     |
| 1:A:208:GLU:HA   | 1:A:239:MET:HE3  | 0.49     | 1.84        | 1      | 2     |
| 1:A:76:VAL:CB    | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.49     | 2.75        | 4      | 1     |
| 1:A:94:CYS:SG    | 1:A:130:LEU:HD22 | 0.49     | 2.47        | 4      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.49     | 2.36        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:CB   | 0.49     | 2.19        | 6      | 1     |
| 1:A:59:LYS:O     | 1:A:63:ASP:HB2   | 0.49     | 2.07        | 7      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CE3  | 1:A:118:ILE:HD11 | 0.49     | 2.42        | 9      | 2     |
| 1:A:118:ILE:HG22 | 1:A:123:LEU:N    | 0.49     | 2.23        | 7      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HG22  | 1:A:15:GLN:CD    | 0.49     | 2.33        | 9      | 1     |
| 1:A:15:GLN:O     | 1:A:19:ILE:HD12  | 0.49     | 2.08        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:O    | 1:A:231:ILE:HD13 | 0.49     | 2.07        | 10     | 1     |
| 1:A:242:SER:CB   | 1:A:247:LEU:HG   | 0.49     | 2.37        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:HG2    | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.49     | 1.84        | 9      | 2     |
| 1:A:75:ILE:O     | 1:A:79:ALA:N     | 0.49     | 2.37        | 9      | 5     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.49     | 1.83        | 5      | 2     |
| 1:A:131:LEU:CD1  | 1:A:138:VAL:HG22 | 0.49     | 2.37        | 1      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CD1  | 1:A:107:TRP:C    | 0.49     | 2.90        | 5      | 3     |
| 1:A:36:LEU:CD2   | 1:A:65:TYR:HB3   | 0.49     | 2.38        | 4      | 3     |
| 1:A:93:ARG:HB2   | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.49     | 2.23        | 3      | 1     |
| 1:A:198:TYR:HB3  | 1:A:210:GLU:CG   | 0.49     | 2.38        | 3      | 1     |
| 1:A:80:HIS:CE1   | 1:A:86:GLU:HG3   | 0.49     | 2.43        | 4      | 1     |
| 1:A:217:ASP:O    | 1:A:221:LYS:HG3  | 0.49     | 2.06        | 4      | 1     |
| 1:A:233:THR:O    | 1:A:236:LYS:HB2  | 0.49     | 2.08        | 10     | 4     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:N    | 0.49     | 2.22        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:195:PHE:CD1  | 0.49     | 3.01        | 5      | 1     |
| 1:A:5:HIS:CG     | 1:A:19:ILE:HD11  | 0.49     | 2.43        | 6      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CD1   | 1:A:65:TYR:HB2   | 0.49     | 2.36        | 8      | 2     |
| 1:A:208:GLU:HA   | 1:A:211:LEU:HD13 | 0.49     | 1.85        | 1      | 1     |
| 1:A:211:LEU:O    | 1:A:215:LEU:CD2  | 0.49     | 2.61        | 1      | 3     |
| 1:A:5:HIS:CD2    | 1:A:5:HIS:N      | 0.49     | 2.81        | 10     | 2     |
| 1:A:29:GLY:C     | 1:A:30:TYR:CD1   | 0.49     | 2.91        | 8      | 6     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:36:LEU:HD21  | 1:A:65:TYR:CB    | 0.49     | 2.34        | 3      | 3     |
| 1:A:222:ASN:O    | 1:A:226:LEU:N    | 0.49     | 2.45        | 2      | 3     |
| 1:A:36:LEU:HD12  | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.49     | 2.38        | 5      | 2     |
| 1:A:112:THR:C    | 1:A:114:HIS:H    | 0.49     | 2.16        | 6      | 2     |
| 1:A:214:LEU:HG   | 1:A:249:ARG:NH2  | 0.49     | 2.22        | 7      | 1     |
| 1:A:36:LEU:O     | 1:A:39:LEU:HG    | 0.49     | 2.08        | 9      | 2     |
| 1:A:185:LYS:HB3  | 1:A:258:ALA:N    | 0.49     | 2.23        | 2      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HE2   | 1:A:75:ILE:HG13  | 0.49     | 1.68        | 3      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CD2   | 1:A:79:ALA:HB2   | 0.49     | 2.42        | 3      | 2     |
| 1:A:138:VAL:HG12 | 1:A:143:LEU:N    | 0.49     | 2.23        | 7      | 1     |
| 1:A:246:LYS:NZ   | 1:A:246:LYS:CB   | 0.49     | 2.75        | 7      | 1     |
| 1:A:52:LEU:N     | 1:A:52:LEU:HD22  | 0.49     | 2.23        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE2  | 1:A:238:ILE:HG12 | 0.49     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HG22  | 1:A:15:GLN:HB3   | 0.49     | 1.83        | 10     | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:238:ILE:CG2  | 0.49     | 2.38        | 10     | 1     |
| 1:A:176:ASN:OD1  | 1:A:179:LEU:HD12 | 0.49     | 2.08        | 1      | 1     |
| 1:A:207:ASP:N    | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.49     | 2.22        | 8      | 5     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:CG2   | 0.49     | 2.59        | 3      | 3     |
| 1:A:180:LYS:HE2  | 1:A:225:GLU:O    | 0.49     | 2.08        | 4      | 1     |
| 1:A:41:GLN:HA    | 1:A:44:LEU:HD12  | 0.49     | 1.84        | 5      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD13   | 1:A:43:LEU:HA    | 0.49     | 1.85        | 10     | 2     |
| 1:A:59:LYS:CA    | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.49     | 2.38        | 7      | 2     |
| 1:A:80:HIS:ND1   | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.49     | 2.22        | 7      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD11  | 1:A:58:MET:HE1   | 0.49     | 1.85        | 10     | 1     |
| 1:A:93:ARG:HA    | 1:A:95:GLN:OE1   | 0.49     | 2.08        | 10     | 1     |
| 1:A:208:GLU:O    | 1:A:235:LYS:CG   | 0.48     | 2.61        | 1      | 3     |
| 1:A:23:PHE:CD1   | 1:A:39:LEU:CB    | 0.48     | 2.96        | 7      | 2     |
| 1:A:208:GLU:CB   | 1:A:239:MET:SD   | 0.48     | 3.01        | 2      | 1     |
| 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:LEU:HD13 | 0.48     | 1.83        | 2      | 1     |
| 1:A:23:PHE:HD1   | 1:A:31:LEU:HD21  | 0.48     | 1.66        | 4      | 1     |
| 1:A:89:LEU:HD23  | 1:A:92:PHE:CD1   | 0.48     | 2.42        | 4      | 1     |
| 1:A:176:ASN:HB2  | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.48     | 2.38        | 5      | 1     |
| 1:A:188:GLY:HA2  | 1:A:191:PHE:HD2  | 0.48     | 1.68        | 7      | 3     |
| 1:A:104:MET:HE2  | 1:A:237:ASN:CG   | 0.48     | 2.33        | 7      | 1     |
| 1:A:146:TYR:HA   | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.48     | 2.38        | 7      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HB3  | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.48     | 2.23        | 8      | 1     |
| 1:A:252:LEU:HD22 | 1:A:252:LEU:H    | 0.48     | 1.68        | 10     | 1     |
| 1:A:147:THR:CG2  | 1:A:148:ASP:N    | 0.48     | 2.76        | 2      | 7     |
| 1:A:242:SER:HA   | 1:A:251:ASP:OD2  | 0.48     | 2.08        | 1      | 1     |
| 1:A:231:ILE:HG12 | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.48     | 2.42        | 3      | 1     |
| 1:A:188:GLY:O    | 1:A:191:PHE:CD2  | 0.48     | 2.61        | 10     | 5     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:191:PHE:CD1  | 1:A:253:ALA:CB   | 0.48     | 2.95        | 4      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HA   | 1:A:142:LYS:HD3  | 0.48     | 1.83        | 5      | 1     |
| 1:A:104:MET:HB2  | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.48     | 1.84        | 6      | 1     |
| 1:A:58:MET:CG    | 1:A:81:VAL:O     | 0.48     | 2.61        | 7      | 1     |
| 1:A:185:LYS:HB2  | 1:A:258:ALA:CB   | 0.48     | 2.38        | 8      | 2     |
| 1:A:138:VAL:CG1  | 1:A:138:VAL:O    | 0.48     | 2.61        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:238:ILE:HB   | 0.48     | 1.83        | 10     | 2     |
| 1:A:106:THR:HG22 | 1:A:130:LEU:HG   | 0.48     | 1.84        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:CD     | 1:A:47:ARG:HE    | 0.48     | 2.16        | 1      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CE1  | 1:A:130:LEU:HD11 | 0.48     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:126:PHE:O    | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.48     | 2.08        | 3      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HH2  | 1:A:162:LEU:O    | 0.48     | 1.91        | 4      | 1     |
| 1:A:150:MET:HA   | 1:A:166:GLU:OE2  | 0.48     | 2.07        | 5      | 1     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:OG1   | 0.48     | 2.31        | 6      | 2     |
| 1:A:208:GLU:HB2  | 1:A:235:LYS:HE3  | 0.48     | 1.84        | 6      | 2     |
| 1:A:39:LEU:HD22  | 1:A:40:ILE:N     | 0.48     | 2.24        | 8      | 1     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:CD1  | 0.48     | 2.95        | 10     | 1     |
| 1:A:95:GLN:CB    | 1:A:171:LEU:HA   | 0.48     | 2.36        | 1      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HB2  | 1:A:172:PRO:HD3  | 0.48     | 1.85        | 1      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CH2   | 1:A:30:TYR:HA    | 0.48     | 2.44        | 5      | 4     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.48     | 2.06        | 2      | 1     |
| 1:A:58:MET:HE1   | 1:A:83:PRO:HD3   | 0.48     | 1.85        | 3      | 1     |
| 1:A:241:LEU:HD23 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.48     | 1.84        | 3      | 1     |
| 1:A:30:TYR:CB    | 1:A:72:LYS:HG2   | 0.48     | 2.38        | 4      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE3  | 1:A:256:LEU:HD12 | 0.48     | 1.85        | 5      | 1     |
| 1:A:237:ASN:OD1  | 1:A:237:ASN:C    | 0.48     | 2.57        | 6      | 1     |
| 1:A:60:THR:O     | 1:A:64:GLN:HB2   | 0.48     | 2.08        | 7      | 1     |
| 1:A:214:LEU:C    | 1:A:214:LEU:CD2  | 0.48     | 2.83        | 7      | 2     |
| 1:A:94:CYS:HA    | 1:A:97:LEU:HB3   | 0.48     | 1.84        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.48     | 2.39        | 1      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG21  | 1:A:62:VAL:HG23  | 0.48     | 1.85        | 2      | 2     |
| 1:A:206:ILE:HG23 | 1:A:210:GLU:HB2  | 0.48     | 1.84        | 4      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CD2  | 1:A:163:GLU:HB3  | 0.48     | 2.40        | 5      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HD3  | 1:A:253:ALA:HB2  | 0.48     | 1.83        | 5      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD21 | 1:A:180:LYS:HD2  | 0.48     | 1.85        | 10     | 2     |
| 1:A:143:LEU:C    | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.48     | 2.34        | 9      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:253:ALA:CA   | 0.48     | 2.85        | 5      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HB    | 1:A:170:LEU:HB2  | 0.48     | 1.83        | 2      | 1     |
| 1:A:194:ALA:HB1  | 1:A:198:TYR:HD2  | 0.48     | 1.64        | 2      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CB    | 1:A:153:LEU:HD11 | 0.48     | 2.39        | 3      | 1     |
| 1:A:136:LYS:O    | 1:A:137:THR:HB   | 0.48     | 2.08        | 5      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:CG   | 0.48     | 2.96        | 5      | 1     |
| 1:A:205:TYR:HB3  | 1:A:246:LYS:HZ3  | 0.48     | 1.69        | 5      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HD11  | 1:A:39:LEU:CG    | 0.48     | 2.38        | 8      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HB2  | 1:A:254:LEU:HB2  | 0.48     | 1.84        | 8      | 1     |
| 1:A:163:GLU:HG3  | 1:A:254:LEU:CB   | 0.48     | 2.39        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.48     | 2.95        | 9      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB2  | 1:A:226:LEU:CG   | 0.48     | 2.25        | 9      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HA   | 1:A:252:LEU:HG   | 0.48     | 1.86        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:75:ILE:CG2   | 0.48     | 2.97        | 1      | 2     |
| 1:A:34:LYS:C     | 1:A:36:LEU:N     | 0.48     | 2.69        | 6      | 9     |
| 1:A:150:MET:O    | 1:A:162:LEU:CD2  | 0.48     | 2.61        | 1      | 4     |
| 1:A:184:ILE:CG1  | 1:A:225:GLU:HB2  | 0.48     | 2.38        | 4      | 2     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:253:ALA:HB1  | 0.48     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:58:MET:HE3   | 1:A:82:LEU:HB3   | 0.48     | 1.84        | 7      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:HB2  | 0.48     | 2.43        | 7      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HD2  | 1:A:231:ILE:CG2  | 0.48     | 2.38        | 9      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:146:TYR:HD2  | 0.48     | 1.68        | 10     | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD11  | 1:A:73:ILE:CD1   | 0.48     | 2.39        | 10     | 3     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:HB    | 0.48     | 2.09        | 9      | 8     |
| 1:A:93:ARG:O     | 1:A:96:GLN:N     | 0.48     | 2.47        | 4      | 6     |
| 1:A:228:ILE:O    | 1:A:228:ILE:HG22 | 0.48     | 2.07        | 5      | 2     |
| 1:A:79:ALA:HA    | 1:A:82:LEU:HD11  | 0.48     | 1.85        | 3      | 1     |
| 1:A:89:LEU:C     | 1:A:93:ARG:HD3   | 0.48     | 2.34        | 3      | 1     |
| 1:A:191:PHE:O    | 1:A:195:PHE:HD1  | 0.48     | 1.92        | 3      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:170:LEU:CD2  | 0.48     | 2.96        | 5      | 1     |
| 1:A:133:LYS:HE3  | 1:A:133:LYS:C    | 0.48     | 2.34        | 6      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:249:ARG:CD   | 0.48     | 2.93        | 10     | 2     |
| 1:A:31:LEU:HD13  | 1:A:36:LEU:CD2   | 0.48     | 2.39        | 8      | 1     |
| 1:A:219:CYS:CA   | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.48     | 2.39        | 9      | 1     |
| 1:A:247:LEU:CG   | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.48     | 2.88        | 9      | 1     |
| 1:A:46:ALA:O     | 1:A:50:ALA:CB    | 0.48     | 2.62        | 7      | 3     |
| 1:A:208:GLU:CB   | 1:A:239:MET:HG2  | 0.48     | 2.39        | 1      | 1     |
| 1:A:78:LEU:HD13  | 1:A:82:LEU:HD23  | 0.48     | 1.85        | 6      | 2     |
| 1:A:61:PHE:HE2   | 1:A:77:GLU:HG3   | 0.48     | 1.68        | 4      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HB    | 1:A:170:LEU:CD2  | 0.48     | 2.38        | 4      | 1     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.48     | 2.38        | 4      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CD1   | 1:A:65:TYR:HB2   | 0.48     | 2.44        | 5      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:170:LEU:HG   | 0.48     | 2.44        | 5      | 1     |
| 1:A:130:LEU:HA   | 1:A:133:LYS:HE2  | 0.48     | 1.85        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:HG3    | 1:A:46:ALA:O     | 0.48     | 2.09        | 9      | 1     |
| 1:A:65:TYR:C     | 1:A:67:GLN:N     | 0.48     | 2.72        | 5      | 8     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:163:GLU:HG2  | 0.48     | 2.44        | 5      | 4     |
| 1:A:253:ALA:O    | 1:A:257:SER:CB   | 0.48     | 2.62        | 6      | 4     |
| 1:A:123:LEU:HD22 | 1:A:126:PHE:CD1  | 0.48     | 2.43        | 10     | 2     |
| 1:A:211:LEU:CD2  | 1:A:238:ILE:HB   | 0.48     | 2.36        | 5      | 1     |
| 1:A:136:LYS:O    | 1:A:137:THR:OG1  | 0.48     | 2.32        | 9      | 1     |
| 1:A:101:GLU:HG2  | 1:A:237:ASN:HD21 | 0.48     | 1.68        | 10     | 1     |
| 1:A:44:LEU:CD2   | 1:A:54:LEU:CD2   | 0.47     | 2.89        | 1      | 1     |
| 1:A:143:LEU:C    | 1:A:143:LEU:CD1  | 0.47     | 2.86        | 5      | 5     |
| 1:A:16:PHE:HE1   | 1:A:78:LEU:HD12  | 0.47     | 1.67        | 2      | 4     |
| 1:A:17:PHE:CD2   | 1:A:153:LEU:CD2  | 0.47     | 2.96        | 2      | 1     |
| 1:A:30:TYR:HD2   | 1:A:73:ILE:C     | 0.47     | 2.17        | 10     | 8     |
| 1:A:36:LEU:HG    | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.47     | 2.39        | 4      | 1     |
| 1:A:93:ARG:HA    | 1:A:96:GLN:HG2   | 0.47     | 1.86        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:CG   | 0.47     | 3.02        | 6      | 2     |
| 1:A:123:LEU:HD13 | 1:A:123:LEU:O    | 0.47     | 2.09        | 6      | 1     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:HG13 | 0.47     | 1.85        | 6      | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB2   | 1:A:88:PHE:HZ    | 0.47     | 1.68        | 9      | 2     |
| 1:A:117:PHE:O    | 1:A:161:LYS:HD3  | 0.47     | 2.08        | 7      | 1     |
| 1:A:85:GLU:OE1   | 1:A:142:LYS:HA   | 0.47     | 2.08        | 9      | 1     |
| 1:A:197:LEU:O    | 1:A:197:LEU:HD13 | 0.47     | 2.07        | 10     | 1     |
| 1:A:117:PHE:CA   | 1:A:162:LEU:O    | 0.47     | 2.62        | 7      | 5     |
| 1:A:171:LEU:CB   | 1:A:172:PRO:CD   | 0.47     | 2.92        | 1      | 5     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:177:PHE:N    | 0.47     | 2.80        | 1      | 2     |
| 1:A:237:ASN:O    | 1:A:240:ALA:HB3  | 0.47     | 2.09        | 7      | 2     |
| 1:A:5:HIS:O      | 1:A:11:ILE:HD12  | 0.47     | 2.09        | 2      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:CD2  | 0.47     | 2.62        | 4      | 4     |
| 1:A:148:ASP:O    | 1:A:152:LYS:N    | 0.47     | 2.43        | 10     | 3     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:246:LYS:CE   | 0.47     | 2.97        | 7      | 2     |
| 1:A:243:ASP:HB3  | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.47     | 2.44        | 5      | 4     |
| 1:A:251:ASP:O    | 1:A:254:LEU:CG   | 0.47     | 2.62        | 2      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HD12 | 1:A:138:VAL:CB   | 0.47     | 2.38        | 3      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:HD21 | 0.47     | 2.10        | 4      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CD1  | 1:A:138:VAL:HB   | 0.47     | 2.39        | 8      | 2     |
| 1:A:16:PHE:O     | 1:A:20:TRP:HB3   | 0.47     | 2.09        | 9      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HD2  | 1:A:166:GLU:HB2  | 0.47     | 1.67        | 9      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HG   | 1:A:178:LEU:CD1  | 0.47     | 2.39        | 10     | 1     |
| 1:A:97:LEU:C     | 1:A:97:LEU:CD2   | 0.47     | 2.87        | 6      | 2     |
| 1:A:235:LYS:HE2  | 1:A:236:LYS:CA   | 0.47     | 2.38        | 4      | 2     |
| 1:A:218:LEU:CA   | 1:A:221:LYS:HG2  | 0.47     | 2.39        | 2      | 1     |
| 1:A:25:ALA:HB3   | 1:A:35:GLU:CD    | 0.47     | 2.33        | 3      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CD1  | 1:A:126:PHE:CB   | 0.47     | 2.97        | 10     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:214:LEU:HD23 | 1:A:214:LEU:C    | 0.47     | 2.34        | 5      | 3     |
| 1:A:20:TRP:CE3   | 1:A:78:LEU:CB    | 0.47     | 2.97        | 4      | 2     |
| 1:A:154:PHE:CZ   | 1:A:163:GLU:CB   | 0.47     | 2.93        | 6      | 5     |
| 1:A:44:LEU:CD2   | 1:A:62:VAL:HG11  | 0.47     | 2.30        | 4      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:HD2  | 0.47     | 2.45        | 4      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:246:LYS:CD   | 0.47     | 2.92        | 4      | 2     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:47:ARG:HA    | 0.47     | 2.24        | 5      | 1     |
| 1:A:6:LEU:CD1    | 1:A:43:LEU:HA    | 0.47     | 2.39        | 6      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:CE1  | 0.47     | 3.02        | 9      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CD1  | 1:A:206:ILE:C    | 0.47     | 2.93        | 10     | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE2  | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.47     | 2.98        | 1      | 1     |
| 1:A:146:TYR:HE1  | 1:A:150:MET:HE3  | 0.47     | 1.68        | 2      | 1     |
| 1:A:6:LEU:O      | 1:A:83:PRO:HD2   | 0.47     | 2.09        | 3      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:255:ILE:CG1  | 0.47     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:80:HIS:CG    | 1:A:89:LEU:HD13  | 0.47     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:237:ASN:CB   | 0.47     | 2.97        | 10     | 3     |
| 1:A:177:PHE:HB2  | 1:A:181:PHE:HB2  | 0.47     | 1.86        | 6      | 2     |
| 1:A:254:LEU:CD1  | 1:A:255:ILE:HD12 | 0.47     | 2.39        | 6      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CG1   | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.47     | 2.40        | 7      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HZ    | 1:A:75:ILE:HG23  | 0.47     | 1.63        | 9      | 1     |
| 1:A:111:ASP:OD2  | 1:A:117:PHE:N    | 0.47     | 2.47        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HB3   | 1:A:84:THR:OG1   | 0.47     | 2.08        | 1      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CE1   | 1:A:92:PHE:CD2   | 0.47     | 3.02        | 1      | 1     |
| 1:A:151:LEU:N    | 1:A:151:LEU:CD1  | 0.47     | 2.78        | 1      | 1     |
| 1:A:65:TYR:CE1   | 1:A:73:ILE:CG2   | 0.47     | 2.98        | 3      | 2     |
| 1:A:200:GLN:HG2  | 1:A:210:GLU:OE1  | 0.47     | 2.09        | 2      | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.47     | 2.92        | 2      | 2     |
| 1:A:228:ILE:CA   | 1:A:231:ILE:HB   | 0.47     | 2.39        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD21  | 1:A:136:LYS:HD2  | 0.47     | 1.87        | 4      | 1     |
| 1:A:212:ASP:HB2  | 1:A:235:LYS:HG3  | 0.47     | 1.86        | 5      | 3     |
| 1:A:241:LEU:CD2  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.47     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:10:LEU:CG    | 1:A:10:LEU:O     | 0.47     | 2.62        | 5      | 1     |
| 1:A:208:GLU:CB   | 1:A:239:MET:HG3  | 0.47     | 2.40        | 6      | 1     |
| 1:A:44:LEU:CG    | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.47     | 2.40        | 3      | 3     |
| 1:A:127:LEU:CD2  | 1:A:147:THR:CB   | 0.47     | 2.92        | 4      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.47     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:250:THR:N    | 0.47     | 2.83        | 2      | 3     |
| 1:A:225:GLU:C    | 1:A:226:LEU:HG   | 0.47     | 2.35        | 4      | 2     |
| 1:A:55:SER:O     | 1:A:59:LYS:HG2   | 0.47     | 2.10        | 3      | 1     |
| 1:A:133:LYS:C    | 1:A:135:ASN:H    | 0.47     | 2.18        | 4      | 4     |
| 1:A:191:PHE:CD2  | 1:A:257:SER:HB3  | 0.47     | 2.45        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:30:TYR:CZ    | 1:A:173:VAL:HG11 | 0.47     | 2.44        | 4      | 1     |
| 1:A:180:LYS:HE3  | 1:A:225:GLU:HA   | 0.47     | 1.84        | 4      | 1     |
| 1:A:206:ILE:O    | 1:A:247:LEU:O    | 0.47     | 2.32        | 4      | 4     |
| 1:A:136:LYS:O    | 1:A:137:THR:CB   | 0.47     | 2.61        | 5      | 2     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:247:LEU:O    | 0.47     | 2.67        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:HE22   | 1:A:46:ALA:CB    | 0.47     | 2.23        | 6      | 1     |
| 1:A:104:MET:HE1  | 1:A:237:ASN:O    | 0.47     | 2.09        | 6      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD12 | 1:A:180:LYS:HD2  | 0.47     | 1.85        | 6      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HG    | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.47     | 2.40        | 7      | 1     |
| 1:A:198:TYR:CE2  | 1:A:214:LEU:HD23 | 0.47     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:169:ARG:HB2  | 0.47     | 2.09        | 8      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG22 | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.47     | 1.85        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE1   | 1:A:79:ALA:N     | 0.47     | 2.83        | 10     | 1     |
| 1:A:102:GLU:HA   | 1:A:105:LYS:HD2  | 0.47     | 1.86        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:231:ILE:HG23 | 0.47     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:232:SER:O    | 1:A:235:LYS:CG   | 0.47     | 2.63        | 10     | 1     |
| 1:A:26:ASP:O     | 1:A:28:SER:N     | 0.47     | 2.47        | 5      | 10    |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.47     | 1.86        | 1      | 2     |
| 1:A:23:PHE:HE1   | 1:A:31:LEU:HD21  | 0.47     | 1.69        | 2      | 1     |
| 1:A:123:LEU:O    | 1:A:126:PHE:N    | 0.47     | 2.48        | 7      | 3     |
| 1:A:104:MET:CB   | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.47     | 2.39        | 3      | 1     |
| 1:A:7:GLN:CD     | 1:A:47:ARG:NE    | 0.47     | 2.72        | 4      | 1     |
| 1:A:31:LEU:CD1   | 1:A:73:ILE:HD11  | 0.47     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:10:LEU:O     | 1:A:10:LEU:CD2   | 0.47     | 2.63        | 7      | 2     |
| 1:A:212:ASP:HA   | 1:A:235:LYS:HB3  | 0.47     | 1.87        | 7      | 2     |
| 1:A:100:CYS:SG   | 1:A:101:GLU:HG3  | 0.47     | 2.49        | 9      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG22  | 1:A:92:PHE:CZ    | 0.47     | 2.45        | 10     | 1     |
| 1:A:106:THR:HG21 | 1:A:130:LEU:CD2  | 0.47     | 2.39        | 10     | 1     |
| 1:A:195:PHE:CD2  | 1:A:249:ARG:HB2  | 0.47     | 2.44        | 6      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.47     | 2.44        | 1      | 1     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:C     | 0.47     | 2.58        | 6      | 6     |
| 1:A:138:VAL:O    | 1:A:138:VAL:CG1  | 0.47     | 2.63        | 2      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CZ    | 1:A:65:TYR:CD2   | 0.47     | 3.03        | 3      | 3     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.47     | 2.40        | 3      | 2     |
| 1:A:131:LEU:O    | 1:A:134:ALA:HB3  | 0.47     | 2.09        | 3      | 1     |
| 1:A:207:ASP:HB2  | 1:A:246:LYS:NZ   | 0.47     | 2.25        | 3      | 1     |
| 1:A:170:LEU:HD23 | 1:A:170:LEU:O    | 0.47     | 2.10        | 4      | 1     |
| 1:A:236:LYS:O    | 1:A:239:MET:HB2  | 0.47     | 2.10        | 4      | 3     |
| 1:A:127:LEU:CD2  | 1:A:127:LEU:C    | 0.47     | 2.88        | 5      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD11  | 1:A:78:LEU:CD2   | 0.47     | 2.38        | 6      | 1     |
| 1:A:181:PHE:HE2  | 1:A:256:LEU:HB3  | 0.47     | 1.69        | 9      | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:33:GLY:HA3   | 1:A:69:ASP:C     | 0.47     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:43:LEU:CD2   | 1:A:58:MET:HB3   | 0.47     | 2.39        | 8      | 2     |
| 1:A:117:PHE:O    | 1:A:161:LYS:HE2  | 0.47     | 2.10        | 2      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CB   | 1:A:248:TYR:HA   | 0.47     | 2.39        | 2      | 1     |
| 1:A:210:GLU:O    | 1:A:213:ALA:N    | 0.47     | 2.48        | 2      | 2     |
| 1:A:108:ARG:HG2  | 1:A:114:HIS:CE1  | 0.47     | 2.45        | 3      | 1     |
| 1:A:154:PHE:HD1  | 1:A:165:THR:HB   | 0.47     | 1.67        | 3      | 1     |
| 1:A:180:LYS:C    | 1:A:184:ILE:HD12 | 0.47     | 2.35        | 3      | 1     |
| 1:A:93:ARG:HA    | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.47     | 2.24        | 4      | 1     |
| 1:A:20:TRP:O     | 1:A:23:PHE:CE1   | 0.47     | 2.68        | 5      | 2     |
| 1:A:61:PHE:CZ    | 1:A:78:LEU:CD2   | 0.47     | 2.97        | 5      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG22 | 1:A:252:LEU:HG   | 0.47     | 1.85        | 6      | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:235:LYS:N    | 0.47     | 2.78        | 7      | 3     |
| 1:A:47:ARG:C     | 1:A:52:LEU:O     | 0.46     | 2.59        | 9      | 9     |
| 1:A:78:LEU:HG    | 1:A:81:VAL:HG11  | 0.46     | 1.86        | 9      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:206:ILE:HB   | 0.46     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HB2   | 1:A:73:ILE:HG13  | 0.46     | 1.87        | 8      | 3     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:252:LEU:HD12 | 0.46     | 1.87        | 2      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:257:SER:HB3  | 0.46     | 2.45        | 3      | 1     |
| 1:A:90:LEU:O     | 1:A:90:LEU:HD13  | 0.46     | 2.10        | 5      | 1     |
| 1:A:178:LEU:N    | 1:A:178:LEU:HD23 | 0.46     | 2.25        | 7      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:19:ILE:HG23  | 0.46     | 1.86        | 8      | 1     |
| 1:A:100:CYS:N    | 1:A:172:PRO:HG2  | 0.46     | 2.25        | 8      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CE3  | 1:A:167:MET:SD   | 0.46     | 3.08        | 8      | 1     |
| 1:A:143:LEU:O    | 1:A:147:THR:HB   | 0.46     | 2.10        | 8      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD11   | 1:A:82:LEU:HB3   | 0.46     | 1.87        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.46     | 1.87        | 1      | 1     |
| 1:A:78:LEU:O     | 1:A:82:LEU:HD23  | 0.46     | 2.09        | 2      | 1     |
| 1:A:150:MET:O    | 1:A:162:LEU:HD23 | 0.46     | 2.11        | 2      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CG2   | 1:A:62:VAL:CB    | 0.46     | 2.94        | 10     | 2     |
| 1:A:85:GLU:CD    | 1:A:88:PHE:HB3   | 0.46     | 2.35        | 5      | 2     |
| 1:A:78:LEU:HA    | 1:A:81:VAL:HG12  | 0.46     | 1.87        | 10     | 2     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:HB2  | 0.46     | 1.87        | 10     | 2     |
| 1:A:118:ILE:N    | 1:A:118:ILE:HD13 | 0.46     | 2.25        | 9      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CD1   | 1:A:75:ILE:CD1   | 0.46     | 2.97        | 10     | 1     |
| 1:A:191:PHE:CZ   | 1:A:253:ALA:HA   | 0.46     | 2.41        | 5      | 2     |
| 1:A:211:LEU:CD2  | 1:A:235:LYS:O    | 0.46     | 2.63        | 1      | 2     |
| 1:A:134:ALA:O    | 1:A:135:ASN:HB2  | 0.46     | 2.09        | 4      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HE1  | 1:A:241:LEU:CD1  | 0.46     | 2.23        | 5      | 1     |
| 1:A:100:CYS:HB2  | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.46     | 2.26        | 6      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:138:VAL:HB   | 0.46     | 1.85        | 7      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:7:GLN:O      | 1:A:8:SER:HB3    | 0.46     | 2.10        | 8      | 1     |
| 1:A:184:ILE:C    | 1:A:185:LYS:HG2  | 0.46     | 2.35        | 8      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CE1   | 1:A:20:TRP:NE1   | 0.46     | 2.84        | 10     | 1     |
| 1:A:61:PHE:CD1   | 1:A:81:VAL:CG2   | 0.46     | 2.99        | 10     | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:178:LEU:HD12 | 0.46     | 1.88        | 10     | 1     |
| 1:A:59:LYS:HA    | 1:A:62:VAL:CG1   | 0.46     | 2.41        | 6      | 2     |
| 1:A:108:ARG:HA   | 1:A:111:ASP:HB2  | 0.46     | 1.88        | 2      | 2     |
| 1:A:131:LEU:CD2  | 1:A:138:VAL:O    | 0.46     | 2.63        | 2      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CD1   | 1:A:20:TRP:NE1   | 0.46     | 2.83        | 10     | 3     |
| 1:A:191:PHE:C    | 1:A:191:PHE:HD1  | 0.46     | 2.16        | 3      | 1     |
| 1:A:249:ARG:C    | 1:A:251:ASP:N    | 0.46     | 2.73        | 4      | 7     |
| 1:A:61:PHE:CD1   | 1:A:65:TYR:CD2   | 0.46     | 3.04        | 5      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CA   | 1:A:249:ARG:HD2  | 0.46     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:151:LEU:N    | 1:A:151:LEU:HD12 | 0.46     | 2.26        | 8      | 1     |
| 1:A:187:CYS:C    | 1:A:189:LYS:H    | 0.46     | 2.19        | 8      | 2     |
| 1:A:254:LEU:H    | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.46     | 2.14        | 8      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:CG   | 0.46     | 2.99        | 6      | 2     |
| 1:A:234:TYR:O    | 1:A:238:ILE:CG1  | 0.46     | 2.62        | 1      | 1     |
| 1:A:74:GLY:HA3   | 1:A:169:ARG:O    | 0.46     | 2.11        | 2      | 2     |
| 1:A:104:MET:HB3  | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.46     | 1.88        | 2      | 3     |
| 1:A:141:THR:O    | 1:A:145:GLU:CG   | 0.46     | 2.63        | 2      | 6     |
| 1:A:89:LEU:O     | 1:A:92:PHE:HB3   | 0.46     | 2.11        | 4      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HB2  | 1:A:138:VAL:HG11 | 0.46     | 1.87        | 4      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HH22  | 1:A:83:PRO:HG2   | 0.46     | 1.70        | 5      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.46     | 2.39        | 6      | 1     |
| 1:A:118:ILE:HB   | 1:A:123:LEU:CD2  | 0.46     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CD1  | 1:A:249:ARG:CB   | 0.46     | 2.99        | 7      | 1     |
| 1:A:198:TYR:O    | 1:A:200:GLN:HG2  | 0.46     | 2.10        | 7      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HB3    | 1:A:46:ALA:CB    | 0.46     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:14:SER:O     | 1:A:18:GLU:N     | 0.46     | 2.49        | 9      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:170:LEU:HB3  | 0.46     | 2.46        | 10     | 1     |
| 1:A:212:ASP:C    | 1:A:215:LEU:HG   | 0.46     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:127:LEU:C    | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.46     | 2.35        | 3      | 2     |
| 1:A:105:LYS:O    | 1:A:108:ARG:NE   | 0.46     | 2.48        | 10     | 2     |
| 1:A:123:LEU:HD13 | 1:A:123:LEU:C    | 0.46     | 2.36        | 4      | 2     |
| 1:A:194:ALA:CB   | 1:A:249:ARG:NH2  | 0.46     | 2.79        | 9      | 2     |
| 1:A:44:LEU:CD1   | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.46     | 2.40        | 6      | 2     |
| 1:A:103:PHE:CZ   | 1:A:104:MET:HG2  | 0.46     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:145:GLU:HA   | 1:A:145:GLU:OE1  | 0.46     | 2.11        | 6      | 3     |
| 1:A:41:GLN:HA    | 1:A:44:LEU:CD1   | 0.46     | 2.40        | 7      | 1     |
| 1:A:179:LEU:HD21 | 1:A:180:LYS:CD   | 0.46     | 2.41        | 7      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:100:CYS:O    | 1:A:103:PHE:HD1  | 0.46     | 1.90        | 8      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HH21 | 1:A:256:LEU:CD2  | 0.46     | 2.23        | 8      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:255:ILE:CG2  | 0.46     | 2.98        | 9      | 1     |
| 1:A:186:MET:HE3  | 1:A:256:LEU:HB2  | 0.46     | 1.86        | 9      | 1     |
| 1:A:78:LEU:O     | 1:A:82:LEU:HG    | 0.46     | 2.09        | 10     | 1     |
| 1:A:33:GLY:CA    | 1:A:68:ARG:O     | 0.46     | 2.64        | 10     | 4     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:CB   | 0.46     | 2.99        | 1      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CD1  | 1:A:132:GLU:N    | 0.46     | 2.75        | 2      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CB   | 1:A:181:PHE:HD2  | 0.46     | 2.23        | 6      | 3     |
| 1:A:181:PHE:HA   | 1:A:184:ILE:CG1  | 0.46     | 2.40        | 2      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG21 | 1:A:252:LEU:CB   | 0.46     | 2.40        | 3      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:HG2  | 0.46     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:54:LEU:CD2   | 1:A:59:LYS:HA    | 0.46     | 2.36        | 8      | 3     |
| 1:A:151:LEU:CD2  | 1:A:160:GLY:O    | 0.46     | 2.64        | 6      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:CB   | 0.46     | 2.98        | 7      | 2     |
| 1:A:198:TYR:HE2  | 1:A:214:LEU:HD23 | 0.46     | 1.70        | 7      | 1     |
| 1:A:93:ARG:O     | 1:A:94:CYS:C     | 0.46     | 2.59        | 8      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:CD1   | 0.46     | 2.46        | 4      | 4     |
| 1:A:114:HIS:O    | 1:A:250:THR:HB   | 0.46     | 2.11        | 1      | 1     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:N    | 0.46     | 2.48        | 1      | 1     |
| 1:A:236:LYS:O    | 1:A:239:MET:CB   | 0.46     | 2.63        | 5      | 4     |
| 1:A:256:LEU:HD22 | 1:A:256:LEU:H    | 0.46     | 1.70        | 2      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CE3   | 1:A:31:LEU:HD12  | 0.46     | 2.45        | 4      | 1     |
| 1:A:88:PHE:HB2   | 1:A:142:LYS:C    | 0.46     | 2.36        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD1   | 1:A:146:TYR:HE2  | 0.46     | 2.22        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:CG    | 1:A:171:LEU:CD2  | 0.46     | 2.94        | 8      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HA   | 1:A:110:TYR:CE2  | 0.46     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:30:TYR:CD2   | 1:A:73:ILE:C     | 0.46     | 2.94        | 9      | 1     |
| 1:A:31:LEU:CG    | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.46     | 2.34        | 10     | 1     |
| 1:A:27:GLY:C     | 1:A:29:GLY:N     | 0.46     | 2.74        | 1      | 10    |
| 1:A:31:LEU:HD12  | 1:A:36:LEU:HD12  | 0.46     | 1.86        | 1      | 1     |
| 1:A:113:ASP:C    | 1:A:114:HIS:CG   | 0.46     | 2.94        | 1      | 3     |
| 1:A:211:LEU:O    | 1:A:215:LEU:HD22 | 0.46     | 2.11        | 1      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.46     | 2.40        | 2      | 1     |
| 1:A:20:TRP:HB2   | 1:A:78:LEU:HG    | 0.46     | 1.88        | 3      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE2  | 1:A:255:ILE:CG1  | 0.46     | 2.99        | 3      | 1     |
| 1:A:187:CYS:O    | 1:A:191:PHE:N    | 0.46     | 2.47        | 4      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:HD22 | 0.46     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:255:ILE:HD13 | 0.46     | 2.36        | 4      | 1     |
| 1:A:10:LEU:O     | 1:A:10:LEU:HG    | 0.46     | 2.10        | 5      | 2     |
| 1:A:126:PHE:CE1  | 1:A:167:MET:HE1  | 0.46     | 2.45        | 5      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:136:LYS:C    | 1:A:137:THR:HG22 | 0.46     | 2.36        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HD1  | 1:A:178:LEU:HD22 | 0.46     | 1.65        | 5      | 1     |
| 1:A:239:MET:HE3  | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.46     | 1.88        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CG   | 1:A:181:PHE:CD2  | 0.46     | 3.04        | 6      | 1     |
| 1:A:235:LYS:HG3  | 1:A:236:LYS:N    | 0.46     | 2.24        | 7      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HG13  | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.46     | 1.87        | 8      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HG   | 1:A:147:THR:HB   | 0.46     | 1.87        | 8      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CA   | 1:A:137:THR:HA   | 0.46     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:170:LEU:HB3  | 0.46     | 2.46        | 9      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HA    | 1:A:103:PHE:CD2  | 0.46     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CG1   | 1:A:61:PHE:HD2   | 0.46     | 2.24        | 10     | 1     |
| 1:A:130:LEU:C    | 1:A:130:LEU:HD13 | 0.46     | 2.36        | 2      | 1     |
| 1:A:141:THR:HA   | 1:A:145:GLU:OE2  | 0.46     | 2.11        | 2      | 1     |
| 1:A:242:SER:CA   | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.46     | 2.41        | 3      | 2     |
| 1:A:76:VAL:HG11  | 1:A:96:GLN:OE1   | 0.46     | 2.11        | 3      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CD1  | 1:A:195:PHE:CE1  | 0.46     | 3.04        | 3      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CB   | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.46     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:39:LEU:CD1   | 1:A:43:LEU:HD13  | 0.46     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:243:ASP:CB   | 1:A:248:TYR:CE1  | 0.46     | 2.99        | 8      | 2     |
| 1:A:23:PHE:O     | 1:A:35:GLU:HB3   | 0.46     | 2.10        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE1   | 1:A:79:ALA:HA    | 0.45     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:30:TYR:CB    | 1:A:72:LYS:HD2   | 0.45     | 2.39        | 10     | 3     |
| 1:A:100:CYS:O    | 1:A:103:PHE:CD2  | 0.45     | 2.69        | 3      | 5     |
| 1:A:177:PHE:CD2  | 1:A:181:PHE:HD2  | 0.45     | 2.28        | 1      | 1     |
| 1:A:76:VAL:CG1   | 1:A:77:GLU:N     | 0.45     | 2.80        | 2      | 4     |
| 1:A:116:GLY:HA2  | 1:A:250:THR:O    | 0.45     | 2.11        | 3      | 1     |
| 1:A:117:PHE:CB   | 1:A:161:LYS:HE2  | 0.45     | 2.40        | 3      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:218:LEU:HD13 | 0.45     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG1  | 1:A:226:LEU:HG   | 0.45     | 2.41        | 10     | 2     |
| 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.45     | 2.46        | 4      | 1     |
| 1:A:212:ASP:OD1  | 1:A:216:LYS:HE3  | 0.45     | 2.11        | 5      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD13   | 1:A:46:ALA:CB    | 0.45     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:176:ASN:OD1  | 1:A:178:LEU:HG   | 0.45     | 2.10        | 8      | 1     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:150:MET:HB2  | 0.45     | 2.11        | 9      | 1     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:170:LEU:HG   | 0.45     | 2.11        | 9      | 1     |
| 1:A:259:GLY:C    | 1:A:261:ASN:N    | 0.45     | 2.74        | 6      | 5     |
| 1:A:104:MET:CE   | 1:A:237:ASN:OD1  | 0.45     | 2.64        | 9      | 2     |
| 1:A:243:ASP:HB3  | 1:A:248:TYR:CD1  | 0.45     | 2.46        | 5      | 2     |
| 1:A:11:ILE:HG22  | 1:A:15:GLN:CB    | 0.45     | 2.41        | 3      | 1     |
| 1:A:139:ASP:HB2  | 1:A:142:LYS:CE   | 0.45     | 2.41        | 3      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:CG    | 0.45     | 2.99        | 8      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:187:CYS:HA   | 1:A:258:ALA:HB3  | 0.45     | 1.88        | 8      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CZ2   | 1:A:75:ILE:HD12  | 0.45     | 2.46        | 9      | 1     |
| 1:A:106:THR:CG2  | 1:A:130:LEU:HG   | 0.45     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:168:ALA:CB   | 1:A:178:LEU:HD13 | 0.45     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:214:LEU:CD1  | 0.45     | 3.00        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:7:GLN:CA     | 0.45     | 2.64        | 1      | 1     |
| 1:A:47:ARG:CA    | 1:A:52:LEU:O     | 0.45     | 2.64        | 10     | 9     |
| 1:A:102:GLU:O    | 1:A:105:LYS:CB   | 0.45     | 2.65        | 7      | 2     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:HD2   | 0.45     | 1.72        | 2      | 1     |
| 1:A:138:VAL:O    | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.45     | 2.11        | 2      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG12 | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.45     | 1.88        | 2      | 4     |
| 1:A:176:ASN:ND2  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.45     | 2.64        | 2      | 1     |
| 1:A:14:SER:HA    | 1:A:153:LEU:CD1  | 0.45     | 2.41        | 3      | 1     |
| 1:A:139:ASP:O    | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.45     | 2.10        | 10     | 2     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:N     | 0.45     | 2.48        | 4      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:89:LEU:N     | 0.45     | 2.84        | 8      | 3     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.45     | 2.41        | 5      | 1     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:164:LEU:CD2  | 0.45     | 3.04        | 9      | 2     |
| 1:A:173:VAL:O    | 1:A:179:LEU:HD23 | 0.45     | 2.11        | 5      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.45     | 2.87        | 6      | 1     |
| 1:A:31:LEU:HG    | 1:A:39:LEU:HD13  | 0.45     | 1.88        | 6      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:235:LYS:N    | 0.45     | 2.26        | 7      | 1     |
| 1:A:16:PHE:HZ    | 1:A:78:LEU:HB3   | 0.45     | 1.70        | 8      | 1     |
| 1:A:96:GLN:HG3   | 1:A:172:PRO:HG3  | 0.45     | 1.87        | 8      | 1     |
| 1:A:90:LEU:HD23  | 1:A:133:LYS:NZ   | 0.45     | 2.26        | 2      | 1     |
| 1:A:11:ILE:N     | 1:A:84:THR:HA    | 0.45     | 2.27        | 4      | 3     |
| 1:A:116:GLY:CA   | 1:A:250:THR:O    | 0.45     | 2.64        | 8      | 2     |
| 1:A:59:LYS:C     | 1:A:62:VAL:HG12  | 0.45     | 2.33        | 5      | 2     |
| 1:A:95:GLN:N     | 1:A:95:GLN:CD    | 0.45     | 2.74        | 6      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CE1   | 1:A:77:GLU:O     | 0.45     | 2.70        | 8      | 1     |
| 1:A:104:MET:SD   | 1:A:241:LEU:CD1  | 0.45     | 3.03        | 8      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HG2  | 1:A:252:LEU:HD11 | 0.45     | 1.88        | 8      | 1     |
| 1:A:173:VAL:O    | 1:A:179:LEU:HG   | 0.45     | 2.11        | 10     | 1     |
| 1:A:205:TYR:CE2  | 1:A:246:LYS:CD   | 0.45     | 2.97        | 5      | 5     |
| 1:A:184:ILE:CG2  | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.45     | 2.41        | 2      | 1     |
| 1:A:149:LEU:C    | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.45     | 2.79        | 4      | 2     |
| 1:A:206:ILE:HG23 | 1:A:210:GLU:CB   | 0.45     | 2.41        | 4      | 1     |
| 1:A:94:CYS:O     | 1:A:97:LEU:CD2   | 0.45     | 2.63        | 5      | 2     |
| 1:A:97:LEU:C     | 1:A:97:LEU:HD12  | 0.45     | 2.37        | 5      | 2     |
| 1:A:151:LEU:CB   | 1:A:152:LYS:CE   | 0.45     | 2.95        | 5      | 1     |
| 1:A:151:LEU:CG   | 1:A:160:GLY:O    | 0.45     | 2.65        | 6      | 2     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:CB    | 1:A:134:ALA:HB2  | 0.45     | 2.29        | 8      | 1     |
| 1:A:166:GLU:CG   | 1:A:167:MET:H    | 0.45     | 2.24        | 8      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD22 | 1:A:255:ILE:H    | 0.45     | 1.68        | 9      | 2     |
| 1:A:137:THR:O    | 1:A:139:ASP:N    | 0.45     | 2.49        | 9      | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD1  | 1:A:235:LYS:HB3  | 0.45     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:242:SER:OG   | 1:A:243:ASP:N    | 0.45     | 2.50        | 1      | 2     |
| 1:A:250:THR:O    | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.45     | 2.12        | 4      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CZ   | 1:A:218:LEU:HG   | 0.45     | 2.47        | 6      | 1     |
| 1:A:212:ASP:OD2  | 1:A:232:SER:HA   | 0.45     | 2.11        | 6      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:CG1   | 0.45     | 2.42        | 7      | 2     |
| 1:A:125:ASN:ND2  | 1:A:128:LYS:HD3  | 0.45     | 2.27        | 7      | 1     |
| 1:A:11:ILE:CD1   | 1:A:82:LEU:HD13  | 0.45     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HG22  | 1:A:15:GLN:NE2   | 0.45     | 2.27        | 9      | 1     |
| 1:A:30:TYR:CD2   | 1:A:74:GLY:N     | 0.45     | 2.85        | 9      | 1     |
| 1:A:88:PHE:N     | 1:A:88:PHE:CD1   | 0.45     | 2.82        | 10     | 1     |
| 1:A:148:ASP:O    | 1:A:152:LYS:HB2  | 0.45     | 2.12        | 2      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CE2   | 1:A:75:ILE:HG13  | 0.45     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:97:LEU:CD1   | 1:A:98:LYS:HG2   | 0.45     | 2.41        | 3      | 1     |
| 1:A:75:ILE:HB    | 1:A:170:LEU:CG   | 0.45     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:1:MET:CA     | 0.45     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:252:LEU:HG   | 0.45     | 1.89        | 5      | 1     |
| 1:A:35:GLU:O     | 1:A:39:LEU:CB    | 0.45     | 2.64        | 6      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:162:LEU:CB   | 0.45     | 2.94        | 10     | 2     |
| 1:A:117:PHE:CB   | 1:A:162:LEU:O    | 0.45     | 2.65        | 7      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HD2  | 1:A:124:LYS:N    | 0.45     | 2.26        | 8      | 1     |
| 1:A:139:ASP:H    | 1:A:142:LYS:HE2  | 0.45     | 1.70        | 8      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD23 | 1:A:239:MET:CG   | 0.45     | 2.40        | 9      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD12  | 1:A:40:ILE:N     | 0.45     | 2.27        | 9      | 3     |
| 1:A:237:ASN:O    | 1:A:238:ILE:C    | 0.45     | 2.60        | 6      | 4     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:65:TYR:CB    | 0.45     | 2.42        | 6      | 4     |
| 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:131:LEU:HD11 | 0.45     | 1.88        | 3      | 1     |
| 1:A:23:PHE:HE1   | 1:A:31:LEU:HD11  | 0.45     | 1.70        | 4      | 1     |
| 1:A:101:GLU:HB3  | 1:A:237:ASN:HB2  | 0.45     | 1.89        | 6      | 1     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:HB3  | 0.45     | 1.89        | 6      | 1     |
| 1:A:246:LYS:HZ3  | 1:A:247:LEU:N    | 0.45     | 2.08        | 7      | 1     |
| 1:A:108:ARG:HB2  | 1:A:241:LEU:HD22 | 0.45     | 1.86        | 8      | 1     |
| 1:A:127:LEU:CB   | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.45     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:100:CYS:O    | 1:A:103:PHE:HD2  | 0.45     | 1.95        | 10     | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE1  | 1:A:214:LEU:HD12 | 0.45     | 2.47        | 10     | 1     |
| 1:A:10:LEU:CD1   | 1:A:85:GLU:CD    | 0.45     | 2.89        | 1      | 2     |
| 1:A:91:LEU:CD1   | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.45     | 2.41        | 1      | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:184:ILE:HB   | 0.45     | 2.47        | 4      | 1     |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:252:LEU:CD1  | 0.45     | 2.94        | 4      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD13 | 1:A:126:PHE:HB3  | 0.45     | 1.87        | 5      | 1     |
| 1:A:33:GLY:O     | 1:A:36:LEU:CB    | 0.45     | 2.65        | 6      | 2     |
| 1:A:105:LYS:HG2  | 1:A:240:ALA:HB1  | 0.45     | 1.89        | 6      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HG2   | 1:A:54:LEU:CD1   | 0.45     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HA   | 1:A:231:ILE:HG21 | 0.45     | 1.88        | 8      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CG   | 1:A:162:LEU:HG   | 0.45     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:89:LEU:HD23  | 1:A:92:PHE:CD2   | 0.45     | 2.47        | 5      | 2     |
| 1:A:210:GLU:HA   | 1:A:213:ALA:HB3  | 0.45     | 1.89        | 10     | 6     |
| 1:A:173:VAL:CB   | 1:A:179:LEU:HB3  | 0.45     | 2.42        | 10     | 2     |
| 1:A:92:PHE:CD2   | 1:A:146:TYR:CG   | 0.45     | 3.05        | 3      | 1     |
| 1:A:116:GLY:O    | 1:A:117:PHE:CD1  | 0.45     | 2.70        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG12 | 1:A:226:LEU:HG   | 0.45     | 1.89        | 3      | 1     |
| 1:A:164:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.45     | 1.87        | 5      | 1     |
| 1:A:112:THR:O    | 1:A:113:ASP:CB   | 0.45     | 2.65        | 6      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CA   | 1:A:126:PHE:HB3  | 0.45     | 2.42        | 6      | 2     |
| 1:A:75:ILE:HG13  | 1:A:170:LEU:CG   | 0.45     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:92:PHE:HD2   | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.45     | 1.67        | 10     | 1     |
| 1:A:26:ASP:C     | 1:A:28:SER:N     | 0.44     | 2.75        | 5      | 9     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:CG   | 0.44     | 3.00        | 1      | 1     |
| 1:A:94:CYS:SG    | 1:A:130:LEU:HD11 | 0.44     | 2.52        | 2      | 2     |
| 1:A:154:PHE:CD1  | 1:A:166:GLU:N    | 0.44     | 2.85        | 3      | 1     |
| 1:A:110:TYR:C    | 1:A:112:THR:N    | 0.44     | 2.75        | 5      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:147:THR:HG23 | 0.44     | 1.88        | 5      | 1     |
| 1:A:95:GLN:O     | 1:A:99:SER:O     | 0.44     | 2.35        | 6      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD2  | 1:A:181:PHE:CG   | 0.44     | 3.06        | 6      | 1     |
| 1:A:254:LEU:CD1  | 1:A:255:ILE:N    | 0.44     | 2.80        | 6      | 1     |
| 1:A:207:ASP:OD2  | 1:A:209:ASN:HB2  | 0.44     | 2.12        | 7      | 1     |
| 1:A:107:TRP:HZ3  | 1:A:162:LEU:HD12 | 0.44     | 1.71        | 9      | 1     |
| 1:A:126:PHE:HD1  | 1:A:126:PHE:O    | 0.44     | 1.94        | 9      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD22   | 1:A:43:LEU:HD12  | 0.44     | 1.88        | 10     | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:75:ILE:O     | 0.44     | 2.70        | 7      | 3     |
| 1:A:62:VAL:O     | 1:A:66:GLY:N     | 0.44     | 2.49        | 8      | 2     |
| 1:A:215:LEU:O    | 1:A:218:LEU:N    | 0.44     | 2.50        | 2      | 5     |
| 1:A:40:ILE:CG2   | 1:A:62:VAL:HG23  | 0.44     | 2.43        | 2      | 2     |
| 1:A:92:PHE:CD1   | 1:A:146:TYR:OH   | 0.44     | 2.70        | 2      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:162:LEU:CB   | 0.44     | 2.42        | 7      | 3     |
| 1:A:139:ASP:HB3  | 1:A:142:LYS:CD   | 0.44     | 2.42        | 3      | 1     |
| 1:A:241:LEU:HD21 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.44     | 1.89        | 3      | 1     |
| 1:A:219:CYS:CB   | 1:A:231:ILE:HG13 | 0.44     | 2.39        | 4      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:40:ILE:HG21  | 1:A:62:VAL:CB    | 0.44     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:CA    | 0.44     | 2.41        | 6      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HA    | 1:A:43:LEU:CD2   | 0.44     | 2.43        | 6      | 1     |
| 1:A:97:LEU:CD1   | 1:A:98:LYS:HB2   | 0.44     | 2.43        | 10     | 2     |
| 1:A:150:MET:HA   | 1:A:166:GLU:HG3  | 0.44     | 1.88        | 7      | 1     |
| 1:A:5:HIS:ND1    | 1:A:5:HIS:N      | 0.44     | 2.66        | 8      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:39:LEU:HG    | 0.44     | 2.47        | 8      | 1     |
| 1:A:198:TYR:HD2  | 1:A:249:ARG:HH12 | 0.44     | 1.53        | 8      | 1     |
| 1:A:133:LYS:C    | 1:A:133:LYS:HD2  | 0.44     | 2.38        | 9      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:237:ASN:CG   | 0.44     | 2.95        | 9      | 1     |
| 1:A:44:LEU:HD21  | 1:A:62:VAL:HG21  | 0.44     | 1.88        | 10     | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:238:ILE:HG21 | 0.44     | 1.89        | 10     | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD11  | 1:A:58:MET:HE2   | 0.44     | 1.88        | 1      | 1     |
| 1:A:85:GLU:HB3   | 1:A:89:LEU:HG    | 0.44     | 1.86        | 3      | 1     |
| 1:A:178:LEU:O    | 1:A:182:GLN:N    | 0.44     | 2.50        | 8      | 2     |
| 1:A:89:LEU:O     | 1:A:93:ARG:CD    | 0.44     | 2.65        | 9      | 2     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.44     | 1.90        | 4      | 1     |
| 1:A:152:LYS:N    | 1:A:152:LYS:CE   | 0.44     | 2.81        | 4      | 2     |
| 1:A:76:VAL:CA    | 1:A:92:PHE:CE1   | 0.44     | 3.00        | 5      | 1     |
| 1:A:138:VAL:O    | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.44     | 2.12        | 6      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:176:ASN:OD1  | 0.44     | 2.13        | 6      | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB2   | 1:A:72:LYS:HD3   | 0.44     | 1.89        | 8      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HG12  | 1:A:62:VAL:CB    | 0.44     | 2.42        | 8      | 1     |
| 1:A:104:MET:HG2  | 1:A:164:LEU:HD11 | 0.44     | 1.89        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:171:LEU:CB   | 0.44     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:226:LEU:CD2  | 0.44     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD2  | 1:A:235:LYS:HB3  | 0.44     | 2.41        | 10     | 1     |
| 1:A:14:SER:HA    | 1:A:153:LEU:HD11 | 0.44     | 1.89        | 3      | 1     |
| 1:A:151:LEU:CB   | 1:A:152:LYS:HE3  | 0.44     | 2.43        | 3      | 2     |
| 1:A:118:ILE:HB   | 1:A:123:LEU:HB2  | 0.44     | 1.89        | 7      | 2     |
| 1:A:247:LEU:CD2  | 1:A:251:ASP:HB2  | 0.44     | 2.37        | 4      | 1     |
| 1:A:75:ILE:HD12  | 1:A:75:ILE:N     | 0.44     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:111:ASP:HB2  | 1:A:118:ILE:CD1  | 0.44     | 2.43        | 6      | 1     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:THR:HG21 | 0.44     | 2.13        | 6      | 1     |
| 1:A:41:GLN:O     | 1:A:45:GLN:HB2   | 0.44     | 2.12        | 7      | 1     |
| 1:A:119:GLU:O    | 1:A:123:LEU:CB   | 0.44     | 2.66        | 7      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:235:LYS:CA   | 0.44     | 2.43        | 7      | 1     |
| 1:A:216:LYS:O    | 1:A:217:ASP:C    | 0.44     | 2.61        | 7      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:138:VAL:CG1  | 0.44     | 2.38        | 8      | 1     |
| 1:A:163:GLU:CG   | 1:A:164:LEU:N    | 0.44     | 2.81        | 9      | 1     |
| 1:A:182:GLN:HG3  | 1:A:183:GLY:N    | 0.44     | 2.27        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.44     | 3.00        | 10     | 3     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.44     | 2.48        | 2      | 1     |
| 1:A:176:ASN:O    | 1:A:179:LEU:CD1  | 0.44     | 2.63        | 2      | 2     |
| 1:A:257:SER:C    | 1:A:259:GLY:N    | 0.44     | 2.76        | 3      | 4     |
| 1:A:146:TYR:CE1  | 1:A:150:MET:CE   | 0.44     | 3.00        | 3      | 1     |
| 1:A:173:VAL:HG12 | 1:A:179:LEU:CB   | 0.44     | 2.42        | 10     | 2     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:163:GLU:CG   | 0.44     | 3.01        | 5      | 2     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:178:LEU:HD13 | 0.44     | 2.48        | 5      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:HG   | 0.44     | 1.90        | 5      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CD    | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.44     | 2.37        | 7      | 2     |
| 1:A:125:ASN:O    | 1:A:128:LYS:N    | 0.44     | 2.51        | 8      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HA   | 1:A:225:GLU:OE2  | 0.44     | 2.13        | 8      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HB3  | 0.44     | 2.48        | 9      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD1   | 1:A:131:LEU:HD12 | 0.44     | 2.43        | 1      | 1     |
| 1:A:124:LYS:O    | 1:A:127:LEU:CG   | 0.44     | 2.66        | 4      | 2     |
| 1:A:149:LEU:CA   | 1:A:153:LEU:HD13 | 0.44     | 2.43        | 1      | 1     |
| 1:A:149:LEU:CB   | 1:A:153:LEU:HD13 | 0.44     | 2.43        | 1      | 1     |
| 1:A:206:ILE:HG22 | 1:A:247:LEU:HD12 | 0.44     | 1.89        | 1      | 1     |
| 1:A:222:ASN:CB   | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.44     | 2.42        | 2      | 1     |
| 1:A:176:ASN:CG   | 1:A:176:ASN:O    | 0.44     | 2.61        | 3      | 2     |
| 1:A:182:GLN:O    | 1:A:185:LYS:HB3  | 0.44     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:7:GLN:CD     | 1:A:47:ARG:CD    | 0.44     | 2.90        | 4      | 2     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:CB   | 0.44     | 2.43        | 4      | 2     |
| 1:A:17:PHE:HZ    | 1:A:169:ARG:NH2  | 0.44     | 2.10        | 5      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HD13 | 1:A:218:LEU:HD22 | 0.44     | 1.88        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:256:LEU:HD21 | 0.44     | 2.47        | 5      | 1     |
| 1:A:186:MET:O    | 1:A:187:CYS:HB3  | 0.44     | 2.12        | 7      | 1     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:CD2   | 0.44     | 2.66        | 10     | 1     |
| 1:A:138:VAL:CG2  | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.44     | 2.42        | 10     | 1     |
| 1:A:167:MET:O    | 1:A:171:LEU:CB   | 0.44     | 2.61        | 3      | 4     |
| 1:A:6:LEU:CD1    | 1:A:82:LEU:HB2   | 0.44     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:11:ILE:N     | 1:A:11:ILE:CD1   | 0.44     | 2.75        | 2      | 1     |
| 1:A:92:PHE:HD1   | 1:A:170:LEU:HD22 | 0.44     | 1.73        | 2      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG2  | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.44     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:81:VAL:CG1   | 1:A:82:LEU:N     | 0.44     | 2.80        | 9      | 5     |
| 1:A:30:TYR:OH    | 1:A:173:VAL:CG1  | 0.44     | 2.66        | 4      | 1     |
| 1:A:116:GLY:CA   | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.44     | 2.43        | 4      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:146:TYR:CE2  | 0.44     | 2.48        | 4      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CD2  | 1:A:256:LEU:CD1  | 0.44     | 3.01        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD22 | 1:A:247:LEU:CG   | 0.44     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:249:ARG:C    | 1:A:249:ARG:HD2  | 0.44     | 2.38        | 5      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:92:PHE:O     | 1:A:95:GLN:OE1   | 0.44     | 2.36        | 6      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:131:LEU:N    | 0.44     | 2.28        | 9      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.44     | 1.87        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:O    | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.44     | 2.66        | 10     | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD23  | 1:A:65:TYR:O     | 0.44     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:151:LEU:O    | 1:A:155:ASP:N    | 0.44     | 2.50        | 3      | 1     |
| 1:A:242:SER:N    | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.44     | 2.27        | 3      | 1     |
| 1:A:117:PHE:CD1  | 1:A:117:PHE:N    | 0.44     | 2.86        | 8      | 3     |
| 1:A:15:GLN:O     | 1:A:16:PHE:C     | 0.44     | 2.60        | 10     | 2     |
| 1:A:154:PHE:HE2  | 1:A:164:LEU:N    | 0.44     | 2.11        | 5      | 2     |
| 1:A:186:MET:HE2  | 1:A:218:LEU:CD2  | 0.44     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE2  | 1:A:256:LEU:CG   | 0.44     | 3.00        | 5      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD22   | 1:A:58:MET:HE1   | 0.44     | 1.90        | 6      | 1     |
| 1:A:146:TYR:CD1  | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.44     | 2.47        | 7      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HG   | 1:A:162:LEU:CG   | 0.44     | 2.43        | 8      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CD2  | 1:A:166:GLU:CB   | 0.44     | 3.01        | 8      | 1     |
| 1:A:59:LYS:HA    | 1:A:62:VAL:HG22  | 0.44     | 1.89        | 9      | 1     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:CG   | 0.44     | 2.43        | 9      | 1     |
| 1:A:219:CYS:N    | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.44     | 2.81        | 10     | 1     |
| 1:A:6:LEU:HB3    | 1:A:46:ALA:HB1   | 0.44     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HA   | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.44     | 1.90        | 3      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HB2  | 1:A:152:LYS:HE3  | 0.44     | 1.88        | 3      | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB2   | 1:A:92:PHE:HE2   | 0.44     | 1.72        | 4      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:249:ARG:CB   | 0.44     | 3.01        | 7      | 3     |
| 1:A:88:PHE:CE1   | 1:A:92:PHE:HD2   | 0.44     | 2.31        | 5      | 1     |
| 1:A:130:LEU:HD22 | 1:A:133:LYS:NZ   | 0.44     | 2.28        | 5      | 1     |
| 1:A:171:LEU:C    | 1:A:171:LEU:HD22 | 0.44     | 2.37        | 6      | 1     |
| 1:A:103:PHE:CZ   | 1:A:171:LEU:HD23 | 0.44     | 2.48        | 9      | 1     |
| 1:A:186:MET:CG   | 1:A:190:GLU:HB3  | 0.44     | 2.42        | 9      | 1     |
| 1:A:226:LEU:CD2  | 1:A:234:TYR:CD2  | 0.44     | 3.01        | 9      | 1     |
| 1:A:138:VAL:CG2  | 1:A:139:ASP:N    | 0.44     | 2.81        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.44     | 2.48        | 10     | 1     |
| 1:A:116:GLY:C    | 1:A:117:PHE:CD1  | 0.43     | 2.97        | 10     | 4     |
| 1:A:168:ALA:HB2  | 1:A:178:LEU:CD1  | 0.43     | 2.42        | 3      | 2     |
| 1:A:91:LEU:O     | 1:A:130:LEU:HD11 | 0.43     | 2.12        | 2      | 1     |
| 1:A:1:MET:C      | 1:A:1:MET:CE     | 0.43     | 2.91        | 3      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HG     | 1:A:19:ILE:CG2   | 0.43     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CH2   | 1:A:74:GLY:O     | 0.43     | 2.71        | 4      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CG1   | 1:A:62:VAL:HA    | 0.43     | 2.43        | 7      | 2     |
| 1:A:171:LEU:CD2  | 1:A:172:PRO:HD2  | 0.43     | 2.38        | 7      | 1     |
| 1:A:6:LEU:C      | 1:A:8:SER:N      | 0.43     | 2.76        | 8      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:31:LEU:CD1   | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.43     | 2.42        | 8      | 1     |
| 1:A:161:LYS:CD   | 1:A:161:LYS:C    | 0.43     | 2.90        | 8      | 1     |
| 1:A:168:ALA:HA   | 1:A:171:LEU:CB   | 0.43     | 2.43        | 8      | 1     |
| 1:A:252:LEU:N    | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.43     | 2.65        | 9      | 1     |
| 1:A:5:HIS:HB2    | 1:A:19:ILE:CD1   | 0.43     | 2.43        | 10     | 1     |
| 1:A:61:PHE:CB    | 1:A:81:VAL:HG21  | 0.43     | 2.43        | 10     | 1     |
| 1:A:133:LYS:HE3  | 1:A:134:ALA:HB2  | 0.43     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:HB2  | 0.43     | 2.47        | 1      | 1     |
| 1:A:208:GLU:N    | 1:A:239:MET:HE3  | 0.43     | 2.28        | 1      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CD1   | 1:A:153:LEU:CD2  | 0.43     | 3.01        | 3      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:146:TYR:CD1  | 0.43     | 3.05        | 3      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CZ   | 1:A:218:LEU:HD13 | 0.43     | 2.48        | 3      | 1     |
| 1:A:218:LEU:C    | 1:A:226:LEU:HD13 | 0.43     | 2.38        | 3      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CZ    | 1:A:78:LEU:HD23  | 0.43     | 2.48        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CE1  | 1:A:178:LEU:CD1  | 0.43     | 3.00        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:249:ARG:CD   | 0.43     | 3.01        | 5      | 1     |
| 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:231:ILE:HG23 | 0.43     | 1.88        | 6      | 1     |
| 1:A:56:PRO:O     | 1:A:60:THR:CG2   | 0.43     | 2.65        | 7      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CA    | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.43     | 2.44        | 7      | 1     |
| 1:A:25:ALA:HB3   | 1:A:35:GLU:HG2   | 0.43     | 1.90        | 8      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD2  | 1:A:184:ILE:HG21 | 0.43     | 2.48        | 10     | 1     |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:84:THR:CA    | 0.43     | 2.66        | 8      | 5     |
| 1:A:88:PHE:CA    | 1:A:142:LYS:HD2  | 0.43     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG23 | 1:A:138:VAL:O    | 0.43     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:238:ILE:O    | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.43     | 2.66        | 3      | 2     |
| 1:A:96:GLN:HG3   | 1:A:172:PRO:N    | 0.43     | 2.29        | 4      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CD2  | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.43     | 2.42        | 4      | 1     |
| 1:A:85:GLU:HB3   | 1:A:88:PHE:CD1   | 0.43     | 2.49        | 6      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HG   | 1:A:147:THR:OG1  | 0.43     | 2.14        | 7      | 2     |
| 1:A:166:GLU:O    | 1:A:169:ARG:N    | 0.43     | 2.51        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CB   | 1:A:234:TYR:HE1  | 0.43     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:46:ALA:CB    | 0.43     | 2.62        | 6      | 1     |
| 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:124:LYS:HE2  | 0.43     | 1.89        | 6      | 1     |
| 1:A:165:THR:CA   | 1:A:168:ALA:HB3  | 0.43     | 2.33        | 8      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD21 | 1:A:255:ILE:HD12 | 0.43     | 1.88        | 9      | 1     |
| 1:A:166:GLU:OE1  | 1:A:170:LEU:CD1  | 0.43     | 2.65        | 10     | 1     |
| 1:A:238:ILE:CG2  | 1:A:252:LEU:HB3  | 0.43     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:88:PHE:HA    | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.43     | 1.90        | 5      | 2     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:HB2  | 0.43     | 1.90        | 1      | 2     |
| 1:A:39:LEU:C     | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.43     | 2.90        | 2      | 2     |
| 1:A:231:ILE:HA   | 1:A:234:TYR:CD1  | 0.43     | 2.48        | 4      | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:214:LEU:HD23 | 1:A:215:LEU:CA   | 0.43     | 2.44        | 5      | 1     |
| 1:A:113:ASP:O    | 1:A:114:HIS:CB   | 0.43     | 2.65        | 6      | 1     |
| 1:A:176:ASN:OD1  | 1:A:178:LEU:HD23 | 0.43     | 2.13        | 6      | 1     |
| 1:A:186:MET:CB   | 1:A:190:GLU:HB3  | 0.43     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:228:ILE:CA   | 1:A:231:ILE:CG1  | 0.43     | 2.92        | 9      | 2     |
| 1:A:93:ARG:O     | 1:A:95:GLN:N     | 0.43     | 2.52        | 8      | 1     |
| 1:A:238:ILE:HG12 | 1:A:255:ILE:CG2  | 0.43     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:249:ARG:HD2  | 1:A:253:ALA:HB2  | 0.43     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:75:ILE:HG22  | 1:A:170:LEU:CD1  | 0.43     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HG2  | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.43     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:LEU:CD1  | 0.43     | 2.44        | 2      | 1     |
| 1:A:60:THR:O     | 1:A:63:ASP:N     | 0.43     | 2.52        | 3      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HD11 | 1:A:252:LEU:CG   | 0.43     | 2.42        | 4      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CD2  | 1:A:246:LYS:HE2  | 0.43     | 2.49        | 5      | 1     |
| 1:A:238:ILE:O    | 1:A:241:LEU:HB2  | 0.43     | 2.13        | 5      | 1     |
| 1:A:55:SER:C     | 1:A:59:LYS:HD3   | 0.43     | 2.38        | 8      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:130:LEU:HB2  | 0.43     | 1.89        | 1      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HD11 | 1:A:162:LEU:HB2  | 0.43     | 1.90        | 4      | 1     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.43     | 2.98        | 8      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CG   | 1:A:166:GLU:HB3  | 0.43     | 2.48        | 8      | 1     |
| 1:A:205:TYR:C    | 1:A:246:LYS:HZ1  | 0.43     | 2.22        | 1      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD21  | 1:A:58:MET:HB3   | 0.43     | 1.89        | 2      | 2     |
| 1:A:138:VAL:CG1  | 1:A:143:LEU:N    | 0.43     | 2.81        | 8      | 3     |
| 1:A:241:LEU:HD22 | 1:A:241:LEU:H    | 0.43     | 1.72        | 2      | 1     |
| 1:A:104:MET:CG   | 1:A:241:LEU:HD11 | 0.43     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:143:LEU:CD1  | 1:A:144:ALA:N    | 0.43     | 2.77        | 5      | 2     |
| 1:A:181:PHE:HD2  | 1:A:255:ILE:O    | 0.43     | 1.96        | 5      | 1     |
| 1:A:40:ILE:CD1   | 1:A:65:TYR:CB    | 0.43     | 2.97        | 7      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CG   | 1:A:249:ARG:CB   | 0.43     | 3.01        | 7      | 1     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.43     | 2.53        | 8      | 1     |
| 1:A:94:CYS:HB2   | 1:A:133:LYS:HZ1  | 0.43     | 1.72        | 9      | 1     |
| 1:A:89:LEU:O     | 1:A:92:PHE:N     | 0.43     | 2.52        | 10     | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:226:LEU:HD23 | 0.43     | 1.91        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:C    | 1:A:123:LEU:CD1  | 0.43     | 2.92        | 2      | 3     |
| 1:A:123:LEU:HB3  | 1:A:151:LEU:HD11 | 0.43     | 1.91        | 2      | 1     |
| 1:A:161:LYS:HZ3  | 1:A:163:GLU:HB2  | 0.43     | 1.74        | 3      | 1     |
| 1:A:211:LEU:CD1  | 1:A:238:ILE:HD12 | 0.43     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:223:LYS:CE   | 1:A:228:ILE:H    | 0.43     | 2.26        | 4      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB2  | 1:A:226:LEU:HD12 | 0.43     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB2  | 1:A:247:LEU:HA   | 0.43     | 1.90        | 7      | 1     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:50:ALA:HB1   | 0.43     | 2.14        | 8      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:88:PHE:HD1   | 1:A:89:LEU:HG    | 0.43     | 1.72        | 9      | 1     |
| 1:A:242:SER:HB3  | 1:A:247:LEU:HG   | 0.43     | 1.89        | 10     | 1     |
| 1:A:126:PHE:CD1  | 1:A:130:LEU:CD2  | 0.43     | 3.02        | 5      | 2     |
| 1:A:247:LEU:CG   | 1:A:252:LEU:HG   | 0.43     | 2.42        | 1      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD12 | 1:A:151:LEU:CD1  | 0.43     | 2.44        | 7      | 2     |
| 1:A:239:MET:CE   | 1:A:242:SER:CB   | 0.43     | 2.97        | 2      | 1     |
| 1:A:93:ARG:HB2   | 1:A:96:GLN:CG    | 0.43     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:129:ASP:O    | 1:A:133:LYS:HE3  | 0.43     | 2.13        | 3      | 1     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:47:ARG:CD    | 0.43     | 2.82        | 4      | 1     |
| 1:A:61:PHE:O     | 1:A:65:TYR:N     | 0.43     | 2.51        | 5      | 1     |
| 1:A:186:MET:HG3  | 1:A:218:LEU:HD21 | 0.43     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:85:GLU:OE2   | 1:A:142:LYS:HA   | 0.43     | 2.14        | 6      | 1     |
| 1:A:171:LEU:CD1  | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.43     | 2.82        | 7      | 1     |
| 1:A:117:PHE:HB3  | 1:A:162:LEU:O    | 0.43     | 2.14        | 9      | 1     |
| 1:A:16:PHE:CD1   | 1:A:78:LEU:HD23  | 0.43     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:247:LEU:C    | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.43     | 2.89        | 1      | 1     |
| 1:A:85:GLU:O     | 1:A:89:LEU:N     | 0.43     | 2.44        | 2      | 2     |
| 1:A:153:LEU:HB2  | 1:A:166:GLU:OE2  | 0.43     | 2.14        | 2      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HD11 | 1:A:225:GLU:HB2  | 0.43     | 1.91        | 2      | 1     |
| 1:A:151:LEU:CD1  | 1:A:162:LEU:HB2  | 0.43     | 2.44        | 4      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HD3  | 1:A:216:LYS:C    | 0.43     | 2.39        | 4      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:147:THR:CB   | 0.43     | 2.29        | 6      | 1     |
| 1:A:7:GLN:CD     | 1:A:47:ARG:HD2   | 0.43     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:255:ILE:HG23 | 0.43     | 2.49        | 8      | 1     |
| 1:A:44:LEU:CA    | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.42     | 2.44        | 1      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB3   | 1:A:103:PHE:CZ   | 0.42     | 2.49        | 1      | 2     |
| 1:A:176:ASN:O    | 1:A:176:ASN:OD1  | 0.42     | 2.37        | 1      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HG   | 1:A:252:LEU:HG   | 0.42     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:252:LEU:O    | 1:A:255:ILE:N    | 0.42     | 2.52        | 2      | 2     |
| 1:A:127:LEU:HB2  | 1:A:131:LEU:HD22 | 0.42     | 1.90        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD22  | 1:A:130:LEU:C    | 0.42     | 2.39        | 5      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD21 | 1:A:218:LEU:HD12 | 0.42     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CZ   | 1:A:237:ASN:CG   | 0.42     | 2.97        | 6      | 1     |
| 1:A:44:LEU:CD1   | 1:A:54:LEU:HD21  | 0.42     | 2.35        | 10     | 1     |
| 1:A:85:GLU:CG    | 1:A:88:PHE:HB2   | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:13:ALA:HB2   | 1:A:88:PHE:CE2   | 0.42     | 2.48        | 1      | 1     |
| 1:A:247:LEU:CD1  | 1:A:248:TYR:C    | 0.42     | 2.92        | 1      | 1     |
| 1:A:114:HIS:ND1  | 1:A:114:HIS:N    | 0.42     | 2.66        | 3      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG23 | 1:A:143:LEU:CD2  | 0.42     | 2.37        | 3      | 1     |
| 1:A:260:ASP:O    | 1:A:261:ASN:CG   | 0.42     | 2.62        | 3      | 1     |
| 1:A:195:PHE:O    | 1:A:199:ASP:N    | 0.42     | 2.52        | 5      | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:206:ILE:HG23 | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.42     | 1.88        | 5      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:126:PHE:CE2  | 0.42     | 3.02        | 6      | 1     |
| 1:A:163:GLU:CD   | 1:A:254:LEU:HB3  | 0.42     | 2.39        | 6      | 1     |
| 1:A:214:LEU:C    | 1:A:214:LEU:HD13 | 0.42     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:249:ARG:HH22 | 1:A:256:LEU:HD21 | 0.42     | 1.74        | 7      | 1     |
| 1:A:195:PHE:O    | 1:A:199:ASP:OD2  | 0.42     | 2.37        | 9      | 1     |
| 1:A:228:ILE:HA   | 1:A:231:ILE:HG12 | 0.42     | 1.86        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HG   | 1:A:247:LEU:HD22 | 0.42     | 1.89        | 10     | 1     |
| 1:A:219:CYS:H    | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.42     | 2.27        | 10     | 1     |
| 1:A:249:ARG:HA   | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:47:ARG:HG2   | 0.42     | 2.30        | 1      | 1     |
| 1:A:65:TYR:CD1   | 1:A:68:ARG:HD3   | 0.42     | 2.49        | 1      | 2     |
| 1:A:91:LEU:CD2   | 1:A:134:ALA:HB2  | 0.42     | 2.44        | 1      | 1     |
| 1:A:95:GLN:CD    | 1:A:170:LEU:CD2  | 0.42     | 2.90        | 2      | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD22  | 1:A:68:ARG:CB    | 0.42     | 2.44        | 3      | 2     |
| 1:A:180:LYS:CE   | 1:A:225:GLU:O    | 0.42     | 2.67        | 4      | 1     |
| 1:A:198:TYR:HB2  | 1:A:206:ILE:CD1  | 0.42     | 2.44        | 9      | 2     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:54:LEU:HD21  | 0.42     | 1.82        | 5      | 1     |
| 1:A:218:LEU:HB3  | 1:A:226:LEU:CG   | 0.42     | 2.44        | 6      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD21 | 1:A:256:LEU:HD22 | 0.42     | 1.92        | 8      | 1     |
| 1:A:226:LEU:HA   | 1:A:234:TYR:CZ   | 0.42     | 2.48        | 8      | 1     |
| 1:A:94:CYS:O     | 1:A:97:LEU:HG    | 0.42     | 2.15        | 10     | 1     |
| 1:A:173:VAL:CA   | 1:A:179:LEU:HB3  | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:1:MET:HE2    | 1:A:2:ALA:HA     | 0.42     | 1.91        | 1      | 1     |
| 1:A:111:ASP:O    | 1:A:113:ASP:N    | 0.42     | 2.53        | 2      | 1     |
| 1:A:142:LYS:CD   | 1:A:142:LYS:H    | 0.42     | 2.26        | 2      | 2     |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:92:PHE:H     | 0.42     | 1.67        | 3      | 1     |
| 1:A:101:GLU:HB3  | 1:A:237:ASN:OD1  | 0.42     | 2.14        | 3      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:255:ILE:HG22 | 0.42     | 2.49        | 3      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CD1  | 1:A:131:LEU:N    | 0.42     | 2.83        | 4      | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD21  | 1:A:78:LEU:HD21  | 0.42     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:62:VAL:O     | 1:A:66:GLY:CA    | 0.42     | 2.67        | 6      | 2     |
| 1:A:95:GLN:HB3   | 1:A:103:PHE:CD2  | 0.42     | 2.49        | 7      | 1     |
| 1:A:117:PHE:C    | 1:A:161:LYS:HD3  | 0.42     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD12 | 1:A:215:LEU:HD23 | 0.42     | 1.89        | 7      | 2     |
| 1:A:227:ASP:N    | 1:A:234:TYR:HE2  | 0.42     | 2.11        | 7      | 1     |
| 1:A:8:SER:O      | 1:A:9:SER:HB2    | 0.42     | 2.14        | 8      | 1     |
| 1:A:215:LEU:CD2  | 1:A:235:LYS:CA   | 0.42     | 2.97        | 10     | 1     |
| 1:A:101:GLU:OE2  | 1:A:233:THR:HG23 | 0.42     | 2.15        | 2      | 1     |
| 1:A:141:THR:O    | 1:A:145:GLU:CB   | 0.42     | 2.66        | 2      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG13 | 1:A:225:GLU:CB   | 0.42     | 2.42        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:94:CYS:HB3   | 1:A:130:LEU:CD2  | 0.42     | 2.45        | 4      | 1     |
| 1:A:177:PHE:HD2  | 1:A:181:PHE:CE1  | 0.42     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:167:MET:HA   | 1:A:170:LEU:HD21 | 0.42     | 1.92        | 6      | 1     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:HG2  | 0.42     | 1.91        | 7      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:170:LEU:HD11 | 0.42     | 1.91        | 8      | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:162:LEU:HG   | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:124:LYS:CA   | 1:A:147:THR:OG1  | 0.42     | 2.65        | 10     | 1     |
| 1:A:205:TYR:CB   | 1:A:247:LEU:O    | 0.42     | 2.67        | 10     | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:79:ALA:CA    | 0.42     | 3.02        | 1      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:CE1   | 0.42     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CG    | 1:A:81:VAL:HG23  | 0.42     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:108:ARG:HG2  | 1:A:114:HIS:CD2  | 0.42     | 2.49        | 1      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HG    | 1:A:58:MET:HG2   | 0.42     | 1.91        | 3      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CB    | 1:A:142:LYS:HD2  | 0.42     | 2.44        | 3      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CB    | 1:A:134:ALA:CB   | 0.42     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:241:LEU:CD1  | 1:A:241:LEU:N    | 0.42     | 2.83        | 3      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD23 | 1:A:143:LEU:CB   | 0.42     | 2.44        | 4      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HE3  | 1:A:147:THR:HG22 | 0.42     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:7:GLN:NE2    | 1:A:7:GLN:N      | 0.42     | 2.68        | 6      | 1     |
| 1:A:114:HIS:CG   | 1:A:114:HIS:O    | 0.42     | 2.71        | 6      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD23 | 1:A:162:LEU:HB3  | 0.42     | 1.90        | 6      | 1     |
| 1:A:187:CYS:HA   | 1:A:258:ALA:CB   | 0.42     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:187:CYS:O    | 1:A:188:GLY:C    | 0.42     | 2.62        | 7      | 1     |
| 1:A:12:THR:O     | 1:A:16:PHE:HB2   | 0.42     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:100:CYS:HB3  | 1:A:172:PRO:CD   | 0.42     | 2.44        | 8      | 1     |
| 1:A:184:ILE:O    | 1:A:185:LYS:O    | 0.42     | 2.38        | 8      | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:N    | 0.42     | 2.18        | 9      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HA   | 1:A:219:CYS:SG   | 0.42     | 2.55        | 2      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HG21  | 1:A:96:GLN:HG2   | 0.42     | 1.90        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:HG23 | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.42     | 1.91        | 3      | 2     |
| 1:A:193:LYS:O    | 1:A:196:GLU:HB2  | 0.42     | 2.15        | 4      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HD3  | 1:A:217:ASP:N    | 0.42     | 2.29        | 4      | 1     |
| 1:A:2:ALA:O      | 1:A:6:LEU:CB     | 0.42     | 2.68        | 5      | 1     |
| 1:A:120:THR:HA   | 1:A:160:GLY:O    | 0.42     | 2.14        | 6      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ    | 1:A:170:LEU:HD13 | 0.42     | 2.49        | 7      | 1     |
| 1:A:43:LEU:HD21  | 1:A:81:VAL:HG22  | 0.42     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:90:LEU:HD12  | 1:A:133:LYS:HZ1  | 0.42     | 1.75        | 1      | 1     |
| 1:A:76:VAL:N     | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.42     | 2.30        | 2      | 1     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:246:LYS:NZ   | 0.42     | 2.87        | 2      | 1     |
| 1:A:131:LEU:CG   | 1:A:138:VAL:HG12 | 0.42     | 2.45        | 3      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:253:ALA:HB1  | 0.42     | 2.49        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:170:LEU:N    | 1:A:170:LEU:HD12 | 0.42     | 2.28        | 5      | 1     |
| 1:A:163:GLU:CG   | 1:A:254:LEU:HB3  | 0.42     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HD11  | 1:A:82:LEU:HB2   | 0.42     | 1.90        | 8      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE3    | 1:A:1:MET:O      | 0.42     | 2.14        | 9      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CE1   | 1:A:75:ILE:HD11  | 0.42     | 2.49        | 10     | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB3   | 1:A:72:LYS:HG3   | 0.42     | 1.92        | 10     | 1     |
| 1:A:44:LEU:HA    | 1:A:54:LEU:HD22  | 0.42     | 1.90        | 1      | 1     |
| 1:A:84:THR:CG2   | 1:A:89:LEU:HD11  | 0.42     | 2.40        | 2      | 1     |
| 1:A:257:SER:O    | 1:A:259:GLY:N    | 0.42     | 2.52        | 2      | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD21 | 1:A:162:LEU:CD1  | 0.42     | 2.45        | 3      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:143:LEU:O    | 0.42     | 2.15        | 3      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE1  | 1:A:218:LEU:CD1  | 0.42     | 3.03        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CD1  | 1:A:226:LEU:CD2  | 0.42     | 2.97        | 3      | 2     |
| 1:A:195:PHE:CE2  | 1:A:249:ARG:C    | 0.42     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:206:ILE:O    | 1:A:247:LEU:CA   | 0.42     | 2.68        | 4      | 1     |
| 1:A:1:MET:CA     | 1:A:1:MET:CE     | 0.42     | 2.97        | 5      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HE22  | 1:A:170:LEU:HD11 | 0.42     | 1.75        | 7      | 1     |
| 1:A:216:LYS:HA   | 1:A:231:ILE:CD1  | 0.42     | 2.44        | 7      | 1     |
| 1:A:104:MET:CE   | 1:A:237:ASN:O    | 0.42     | 2.68        | 8      | 1     |
| 1:A:151:LEU:HD23 | 1:A:160:GLY:O    | 0.42     | 2.14        | 8      | 1     |
| 1:A:187:CYS:O    | 1:A:189:LYS:N    | 0.42     | 2.52        | 8      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD21 | 1:A:252:LEU:CD2  | 0.42     | 2.44        | 8      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:146:TYR:CG   | 0.42     | 2.46        | 9      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HD11 | 1:A:238:ILE:CB   | 0.42     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:227:ASP:HB3  | 1:A:229:ASN:ND2  | 0.42     | 2.29        | 10     | 1     |
| 1:A:235:LYS:C    | 1:A:235:LYS:HE2  | 0.42     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:245:GLY:C    | 1:A:246:LYS:HE3  | 0.42     | 2.39        | 10     | 1     |
| 1:A:164:LEU:CD1  | 1:A:254:LEU:HD13 | 0.42     | 2.42        | 1      | 1     |
| 1:A:6:LEU:CG     | 1:A:43:LEU:HD12  | 0.42     | 2.45        | 2      | 1     |
| 1:A:82:LEU:HD11  | 1:A:84:THR:OG1   | 0.42     | 2.15        | 2      | 1     |
| 1:A:95:GLN:CG    | 1:A:170:LEU:HD23 | 0.42     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HG    | 1:A:134:ALA:CB   | 0.42     | 2.44        | 4      | 1     |
| 1:A:1:MET:SD     | 1:A:22:HIS:CD2   | 0.42     | 3.13        | 6      | 1     |
| 1:A:171:LEU:CD2  | 1:A:176:ASN:ND2  | 0.42     | 2.83        | 7      | 1     |
| 1:A:108:ARG:HB3  | 1:A:241:LEU:CD2  | 0.42     | 2.44        | 8      | 1     |
| 1:A:91:LEU:O     | 1:A:94:CYS:CB    | 0.42     | 2.67        | 9      | 1     |
| 1:A:128:LYS:O    | 1:A:131:LEU:CD2  | 0.42     | 2.67        | 9      | 1     |
| 1:A:191:PHE:O    | 1:A:194:ALA:HB3  | 0.42     | 2.15        | 9      | 1     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:THR:CB   | 0.41     | 2.68        | 1      | 2     |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:91:LEU:C     | 0.41     | 2.39        | 3      | 3     |
| 1:A:94:CYS:CB    | 1:A:130:LEU:HD21 | 0.41     | 2.45        | 2      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:238:ILE:HG23 | 1:A:252:LEU:CG   | 0.41     | 2.45        | 2      | 1     |
| 1:A:20:TRP:CH2   | 1:A:73:ILE:O     | 0.41     | 2.73        | 3      | 1     |
| 1:A:132:GLU:HA   | 1:A:136:LYS:O    | 0.41     | 2.15        | 3      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HB    | 1:A:96:GLN:NE2   | 0.41     | 2.29        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD12  | 1:A:91:LEU:N     | 0.41     | 2.25        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11  | 1:A:138:VAL:CG1  | 0.41     | 2.38        | 5      | 1     |
| 1:A:247:LEU:HB2  | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.41     | 1.90        | 5      | 1     |
| 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:172:PRO:CD   | 0.41     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:208:GLU:HB3  | 1:A:239:MET:HG3  | 0.41     | 1.91        | 6      | 2     |
| 1:A:44:LEU:HD23  | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.41     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:58:MET:HG2   | 1:A:81:VAL:O     | 0.41     | 2.15        | 7      | 1     |
| 1:A:32:GLU:CD    | 1:A:72:LYS:HG3   | 0.41     | 2.40        | 8      | 1     |
| 1:A:138:VAL:CA   | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.41     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:252:LEU:O    | 1:A:255:ILE:CB   | 0.41     | 2.65        | 8      | 2     |
| 1:A:3:GLU:OE2    | 1:A:49:LYS:HB2   | 0.41     | 2.15        | 9      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CB    | 1:A:153:LEU:HD21 | 0.41     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:76:VAL:HA    | 1:A:92:PHE:CZ    | 0.41     | 2.49        | 10     | 1     |
| 1:A:84:THR:O     | 1:A:85:GLU:HG3   | 0.41     | 2.15        | 10     | 1     |
| 1:A:173:VAL:HB   | 1:A:179:LEU:CB   | 0.41     | 2.45        | 10     | 1     |
| 1:A:7:GLN:OE1    | 1:A:7:GLN:HA     | 0.41     | 2.16        | 4      | 2     |
| 1:A:254:LEU:C    | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.41     | 2.93        | 1      | 1     |
| 1:A:257:SER:C    | 1:A:259:GLY:H    | 0.41     | 2.22        | 2      | 1     |
| 1:A:30:TYR:HB2   | 1:A:32:GLU:OE2   | 0.41     | 2.15        | 3      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CE1   | 1:A:170:LEU:HA   | 0.41     | 2.49        | 5      | 1     |
| 1:A:181:PHE:O    | 1:A:184:ILE:CG2  | 0.41     | 2.68        | 5      | 1     |
| 1:A:24:ASP:CB    | 1:A:31:LEU:HD22  | 0.41     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:235:LYS:HE3  | 1:A:239:MET:CG   | 0.41     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HA   | 1:A:142:LYS:HG3  | 0.41     | 1.92        | 8      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:255:ILE:CG2  | 0.41     | 3.03        | 8      | 1     |
| 1:A:60:THR:C     | 1:A:62:VAL:N     | 0.41     | 2.75        | 3      | 2     |
| 1:A:104:MET:HE2  | 1:A:104:MET:HB3  | 0.41     | 1.77        | 1      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CD1  | 1:A:184:ILE:CG2  | 0.41     | 3.03        | 1      | 1     |
| 1:A:206:ILE:C    | 1:A:246:LYS:HZ1  | 0.41     | 2.23        | 2      | 1     |
| 1:A:2:ALA:HB1    | 1:A:6:LEU:HG     | 0.41     | 1.92        | 3      | 2     |
| 1:A:181:PHE:N    | 1:A:184:ILE:HD12 | 0.41     | 2.30        | 3      | 1     |
| 1:A:4:SER:O      | 1:A:8:SER:CB     | 0.41     | 2.62        | 5      | 1     |
| 1:A:252:LEU:CD2  | 1:A:252:LEU:N    | 0.41     | 2.83        | 7      | 1     |
| 1:A:219:CYS:CB   | 1:A:228:ILE:HD13 | 0.41     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:111:ASP:OD2  | 1:A:116:GLY:N    | 0.41     | 2.52        | 9      | 1     |
| 1:A:215:LEU:C    | 1:A:231:ILE:HD13 | 0.41     | 2.40        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:CB    | 1:A:130:LEU:HB3  | 0.41     | 2.44        | 1      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:92:PHE:CE2   | 1:A:146:TYR:CE1  | 0.41     | 3.08        | 2      | 1     |
| 1:A:10:LEU:HD22  | 1:A:88:PHE:CE1   | 0.41     | 2.50        | 3      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CG    | 1:A:153:LEU:HD11 | 0.41     | 2.50        | 3      | 1     |
| 1:A:54:LEU:CD1   | 1:A:58:MET:HB3   | 0.41     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:242:SER:CB   | 1:A:247:LEU:HB2  | 0.41     | 2.45        | 4      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HG    | 1:A:138:VAL:HG21 | 0.41     | 1.91        | 7      | 1     |
| 1:A:6:LEU:CD1    | 1:A:82:LEU:HB3   | 0.41     | 2.46        | 9      | 1     |
| 1:A:178:LEU:CD2  | 1:A:178:LEU:N    | 0.41     | 2.83        | 9      | 1     |
| 1:A:143:LEU:HG   | 1:A:144:ALA:N    | 0.41     | 2.30        | 10     | 1     |
| 1:A:191:PHE:CD2  | 1:A:192:ASN:N    | 0.41     | 2.88        | 10     | 1     |
| 1:A:79:ALA:CB    | 1:A:92:PHE:CZ    | 0.41     | 3.03        | 1      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB3   | 1:A:130:LEU:CB   | 0.41     | 2.42        | 1      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CZ2  | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.41     | 2.51        | 1      | 1     |
| 1:A:150:MET:HE3  | 1:A:167:MET:HG2  | 0.41     | 1.92        | 1      | 1     |
| 1:A:181:PHE:CA   | 1:A:184:ILE:HB   | 0.41     | 2.44        | 1      | 1     |
| 1:A:75:ILE:N     | 1:A:169:ARG:O    | 0.41     | 2.52        | 2      | 1     |
| 1:A:95:GLN:NE2   | 1:A:167:MET:SD   | 0.41     | 2.93        | 2      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:147:THR:HB   | 0.41     | 1.89        | 3      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:CB   | 0.41     | 2.69        | 4      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CG    | 1:A:88:PHE:HB3   | 0.41     | 2.45        | 5      | 1     |
| 1:A:161:LYS:HZ2  | 1:A:163:GLU:CB   | 0.41     | 2.24        | 5      | 1     |
| 1:A:152:LYS:CE   | 1:A:152:LYS:N    | 0.41     | 2.82        | 6      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CE2  | 1:A:167:MET:HE2  | 0.41     | 2.51        | 9      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HD11 | 1:A:146:TYR:CD2  | 0.41     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:219:CYS:HB2  | 1:A:223:LYS:CE   | 0.41     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:95:GLN:OE1   | 1:A:167:MET:HG3  | 0.41     | 2.15        | 2      | 1     |
| 1:A:105:LYS:HG3  | 1:A:108:ARG:HH11 | 0.41     | 1.75        | 2      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD1   | 1:A:88:PHE:N     | 0.41     | 2.88        | 3      | 1     |
| 1:A:207:ASP:CB   | 1:A:246:LYS:CE   | 0.41     | 2.98        | 3      | 1     |
| 1:A:126:PHE:HZ   | 1:A:167:MET:CE   | 0.41     | 2.28        | 4      | 1     |
| 1:A:146:TYR:O    | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.41     | 2.16        | 4      | 1     |
| 1:A:164:LEU:O    | 1:A:168:ALA:CB   | 0.41     | 2.69        | 4      | 1     |
| 1:A:178:LEU:N    | 1:A:178:LEU:CD2  | 0.41     | 2.83        | 4      | 1     |
| 1:A:24:ASP:OD2   | 1:A:31:LEU:HD22  | 0.41     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:110:TYR:CE1  | 1:A:126:PHE:CZ   | 0.41     | 3.09        | 5      | 1     |
| 1:A:1:MET:SD     | 1:A:22:HIS:CG    | 0.41     | 3.13        | 6      | 1     |
| 1:A:165:THR:O    | 1:A:169:ARG:NE   | 0.41     | 2.54        | 6      | 1     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:228:ILE:N    | 0.41     | 2.94        | 7      | 1     |
| 1:A:130:LEU:HA   | 1:A:133:LYS:CG   | 0.41     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:249:ARG:O    | 1:A:249:ARG:HD3  | 0.41     | 2.15        | 8      | 1     |
| 1:A:45:GLN:HB3   | 1:A:49:LYS:HE3   | 0.41     | 1.92        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:91:LEU:N     | 1:A:91:LEU:CD2   | 0.41     | 2.84        | 10     | 1     |
| 1:A:205:TYR:CE1  | 1:A:206:ILE:C    | 0.41     | 2.99        | 10     | 1     |
| 1:A:215:LEU:CB   | 1:A:231:ILE:CG1  | 0.41     | 2.97        | 10     | 1     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:228:ILE:HD12 | 0.41     | 2.56        | 10     | 1     |
| 1:A:85:GLU:O     | 1:A:89:LEU:CB    | 0.41     | 2.68        | 2      | 2     |
| 1:A:60:THR:O     | 1:A:61:PHE:C     | 0.41     | 2.63        | 4      | 2     |
| 1:A:211:LEU:CD2  | 1:A:238:ILE:HD12 | 0.41     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:126:PHE:CD1  | 1:A:130:LEU:HD21 | 0.41     | 2.51        | 5      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:178:LEU:N    | 0.41     | 2.89        | 5      | 1     |
| 1:A:104:MET:HE3  | 1:A:241:LEU:HG   | 0.41     | 1.91        | 8      | 1     |
| 1:A:228:ILE:HD13 | 1:A:231:ILE:HD11 | 0.41     | 1.92        | 8      | 1     |
| 1:A:17:PHE:CE2   | 1:A:21:LEU:CD1   | 0.41     | 3.04        | 10     | 1     |
| 1:A:54:LEU:CD1   | 1:A:58:MET:CB    | 0.41     | 2.99        | 10     | 1     |
| 1:A:88:PHE:CD2   | 1:A:142:LYS:HB3  | 0.41     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:103:PHE:CE2  | 1:A:171:LEU:CD2  | 0.41     | 3.02        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:CD2  | 1:A:162:LEU:CG   | 0.41     | 2.98        | 10     | 1     |
| 1:A:126:PHE:HZ   | 1:A:167:MET:SD   | 0.41     | 2.38        | 10     | 1     |
| 1:A:177:PHE:HE2  | 1:A:255:ILE:HG23 | 0.41     | 1.73        | 10     | 1     |
| 1:A:214:LEU:CD1  | 1:A:215:LEU:HD22 | 0.41     | 2.46        | 1      | 1     |
| 1:A:12:THR:CG2   | 1:A:145:GLU:HG3  | 0.41     | 2.46        | 2      | 1     |
| 1:A:219:CYS:SG   | 1:A:228:ILE:CD1  | 0.41     | 3.09        | 2      | 1     |
| 1:A:91:LEU:CD1   | 1:A:131:LEU:HD13 | 0.41     | 2.33        | 3      | 1     |
| 1:A:198:TYR:HB3  | 1:A:206:ILE:HD11 | 0.41     | 1.93        | 5      | 1     |
| 1:A:206:ILE:CG1  | 1:A:210:GLU:CB   | 0.41     | 2.98        | 8      | 2     |
| 1:A:38:ASN:O     | 1:A:41:GLN:HB3   | 0.41     | 2.15        | 7      | 2     |
| 1:A:39:LEU:HD23  | 1:A:40:ILE:CA    | 0.41     | 2.44        | 6      | 1     |
| 1:A:154:PHE:CE2  | 1:A:164:LEU:N    | 0.41     | 2.89        | 6      | 1     |
| 1:A:186:MET:SD   | 1:A:218:LEU:HD21 | 0.41     | 2.56        | 7      | 1     |
| 1:A:188:GLY:HA3  | 1:A:260:ASP:CB   | 0.41     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:6:LEU:HD21   | 1:A:43:LEU:CD1   | 0.41     | 2.45        | 8      | 1     |
| 1:A:54:LEU:O     | 1:A:59:LYS:CD    | 0.41     | 2.69        | 8      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HB3  | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.41     | 1.93        | 8      | 1     |
| 1:A:231:ILE:C    | 1:A:234:TYR:H    | 0.41     | 2.21        | 10     | 1     |
| 1:A:138:VAL:CG2  | 1:A:138:VAL:O    | 0.41     | 2.69        | 1      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CZ   | 1:A:206:ILE:HG21 | 0.41     | 2.51        | 1      | 1     |
| 1:A:214:LEU:HD12 | 1:A:238:ILE:CD1  | 0.41     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:242:SER:OG   | 1:A:246:LYS:C    | 0.41     | 2.64        | 1      | 1     |
| 1:A:17:PHE:HD1   | 1:A:20:TRP:NE1   | 0.41     | 2.14        | 4      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CE2   | 1:A:77:GLU:HG3   | 0.41     | 2.49        | 4      | 1     |
| 1:A:85:GLU:CD    | 1:A:88:PHE:CB    | 0.41     | 2.93        | 4      | 1     |
| 1:A:133:LYS:C    | 1:A:135:ASN:N    | 0.41     | 2.79        | 4      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:104:MET:HE3 | 1:A:241:LEU:HD23 | 0.41     | 1.91        | 5      | 1     |
| 1:A:123:LEU:O   | 1:A:127:LEU:CD1  | 0.41     | 2.69        | 5      | 1     |
| 1:A:140:ASP:O   | 1:A:144:ALA:HB3  | 0.41     | 2.15        | 5      | 1     |
| 1:A:242:SER:CB  | 1:A:247:LEU:HA   | 0.41     | 2.45        | 5      | 1     |
| 1:A:92:PHE:CZ   | 1:A:170:LEU:CB   | 0.41     | 3.03        | 6      | 1     |
| 1:A:118:ILE:CG1 | 1:A:126:PHE:CD2  | 0.41     | 3.02        | 6      | 1     |
| 1:A:208:GLU:CB  | 1:A:239:MET:CG   | 0.41     | 2.99        | 6      | 1     |
| 1:A:218:LEU:O   | 1:A:222:ASN:N    | 0.41     | 2.54        | 6      | 1     |
| 1:A:33:GLY:O    | 1:A:36:LEU:HB2   | 0.41     | 2.16        | 7      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD11 | 1:A:131:LEU:N    | 0.41     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:117:PHE:CD1 | 1:A:161:LYS:CD   | 0.41     | 3.04        | 7      | 1     |
| 1:A:139:ASP:CB  | 1:A:142:LYS:HE2  | 0.41     | 2.45        | 7      | 1     |
| 1:A:153:LEU:CB  | 1:A:166:GLU:OE2  | 0.41     | 2.69        | 7      | 1     |
| 1:A:227:ASP:N   | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.41     | 2.89        | 8      | 2     |
| 1:A:23:PHE:O    | 1:A:25:ALA:N     | 0.41     | 2.50        | 8      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CZ2 | 1:A:117:PHE:HA   | 0.41     | 2.51        | 9      | 1     |
| 1:A:207:ASP:CB  | 1:A:246:LYS:HG2  | 0.41     | 2.43        | 9      | 1     |
| 1:A:226:LEU:CD1 | 1:A:234:TYR:CE2  | 0.41     | 3.01        | 9      | 1     |
| 1:A:168:ALA:CA  | 1:A:171:LEU:HB2  | 0.41     | 2.45        | 10     | 1     |
| 1:A:150:MET:HB3 | 1:A:151:LEU:HD13 | 0.41     | 1.93        | 1      | 1     |
| 1:A:151:LEU:O   | 1:A:155:ASP:CA   | 0.41     | 2.69        | 1      | 1     |
| 1:A:237:ASN:O   | 1:A:240:ALA:CB   | 0.41     | 2.69        | 1      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG2 | 1:A:218:LEU:CD1  | 0.41     | 2.99        | 2      | 1     |
| 1:A:180:LYS:O   | 1:A:184:ILE:CG1  | 0.41     | 2.69        | 3      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CD1 | 1:A:226:LEU:CG   | 0.41     | 2.99        | 3      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HD12 | 1:A:84:THR:OG1   | 0.41     | 2.15        | 4      | 1     |
| 1:A:195:PHE:CZ  | 1:A:250:THR:N    | 0.41     | 2.89        | 4      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HH11 | 1:A:58:MET:HE1   | 0.41     | 1.75        | 5      | 1     |
| 1:A:47:ARG:CD   | 1:A:54:LEU:HD12  | 0.41     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:54:LEU:CB   | 1:A:59:LYS:HD2   | 0.41     | 2.38        | 5      | 1     |
| 1:A:184:ILE:CG2 | 1:A:185:LYS:N    | 0.41     | 2.83        | 5      | 1     |
| 1:A:194:ALA:O   | 1:A:198:TYR:N    | 0.41     | 2.53        | 5      | 1     |
| 1:A:214:LEU:CD2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 0.41     | 2.46        | 5      | 1     |
| 1:A:145:GLU:O   | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.41     | 2.67        | 7      | 1     |
| 1:A:37:GLN:C    | 1:A:40:ILE:HG22  | 0.41     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:61:PHE:CD1  | 1:A:81:VAL:HB    | 0.41     | 2.51        | 8      | 1     |
| 1:A:247:LEU:CD1 | 1:A:252:LEU:HD21 | 0.41     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:17:PHE:HA   | 1:A:20:TRP:CD1   | 0.41     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:91:LEU:HB3  | 1:A:131:LEU:HB3  | 0.41     | 1.92        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:CE2 | 1:A:255:ILE:O    | 0.41     | 2.73        | 10     | 1     |
| 1:A:242:SER:CB  | 1:A:247:LEU:CD1  | 0.41     | 2.99        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:138:VAL:CG1  | 1:A:143:LEU:HB3  | 0.40     | 2.47        | 2      | 1     |
| 1:A:163:GLU:CG   | 1:A:164:LEU:H    | 0.40     | 2.29        | 9      | 2     |
| 1:A:43:LEU:CD2   | 1:A:58:MET:CG    | 0.40     | 2.95        | 3      | 1     |
| 1:A:164:LEU:CG   | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.40     | 2.46        | 3      | 1     |
| 1:A:166:GLU:OE1  | 1:A:167:MET:CA   | 0.40     | 2.69        | 3      | 1     |
| 1:A:36:LEU:HD21  | 1:A:65:TYR:CD1   | 0.40     | 2.50        | 4      | 1     |
| 1:A:138:VAL:HG13 | 1:A:143:LEU:CD2  | 0.40     | 2.46        | 4      | 1     |
| 1:A:40:ILE:O     | 1:A:44:LEU:CD1   | 0.40     | 2.69        | 5      | 1     |
| 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:HD13 | 0.40     | 1.94        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CG   | 1:A:192:ASN:N    | 0.40     | 2.88        | 6      | 1     |
| 1:A:58:MET:CE    | 1:A:82:LEU:HA    | 0.40     | 2.44        | 7      | 1     |
| 1:A:59:LYS:HA    | 1:A:62:VAL:CG2   | 0.40     | 2.47        | 7      | 1     |
| 1:A:12:THR:HG21  | 1:A:145:GLU:CD   | 0.40     | 2.41        | 8      | 1     |
| 1:A:95:GLN:HB2   | 1:A:103:PHE:CE2  | 0.40     | 2.51        | 9      | 1     |
| 1:A:180:LYS:O    | 1:A:225:GLU:HB2  | 0.40     | 2.16        | 9      | 1     |
| 1:A:13:ALA:CB    | 1:A:149:LEU:CD2  | 0.40     | 2.98        | 10     | 1     |
| 1:A:136:LYS:HE3  | 1:A:142:LYS:CE   | 0.40     | 2.46        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:CG   | 1:A:184:ILE:CG2  | 0.40     | 3.04        | 10     | 1     |
| 1:A:181:PHE:HE1  | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.40     | 1.74        | 10     | 1     |
| 1:A:10:LEU:CD1   | 1:A:85:GLU:CG    | 0.40     | 3.00        | 1      | 1     |
| 1:A:80:HIS:CE1   | 1:A:86:GLU:HA    | 0.40     | 2.52        | 3      | 1     |
| 1:A:111:ASP:O    | 1:A:114:HIS:N    | 0.40     | 2.54        | 3      | 1     |
| 1:A:192:ASN:O    | 1:A:195:PHE:HB2  | 0.40     | 2.16        | 3      | 1     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:127:LEU:H    | 0.40     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:192:ASN:O    | 1:A:196:GLU:HB2  | 0.40     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HA    | 1:A:43:LEU:HD21  | 0.40     | 1.93        | 6      | 1     |
| 1:A:111:ASP:CB   | 1:A:118:ILE:HD13 | 0.40     | 2.47        | 6      | 1     |
| 1:A:127:LEU:O    | 1:A:131:LEU:N    | 0.40     | 2.54        | 6      | 1     |
| 1:A:150:MET:HA   | 1:A:166:GLU:OE1  | 0.40     | 2.16        | 6      | 1     |
| 1:A:143:LEU:O    | 1:A:146:TYR:HB3  | 0.40     | 2.17        | 7      | 1     |
| 1:A:9:SER:O      | 1:A:83:PRO:O     | 0.40     | 2.39        | 8      | 1     |
| 1:A:166:GLU:CD   | 1:A:167:MET:N    | 0.40     | 2.80        | 8      | 1     |
| 1:A:11:ILE:CG2   | 1:A:15:GLN:CB    | 0.40     | 3.00        | 9      | 1     |
| 1:A:214:LEU:C    | 1:A:214:LEU:CD1  | 0.40     | 2.93        | 9      | 1     |
| 1:A:40:ILE:HD11  | 1:A:61:PHE:CE2   | 0.40     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:123:LEU:HD21 | 1:A:126:PHE:CZ   | 0.40     | 2.50        | 10     | 1     |
| 1:A:16:PHE:CZ    | 1:A:79:ALA:HA    | 0.40     | 2.51        | 1      | 1     |
| 1:A:20:TRP:HB3   | 1:A:78:LEU:CD2   | 0.40     | 2.41        | 1      | 1     |
| 1:A:47:ARG:HD3   | 1:A:53:GLU:O     | 0.40     | 2.15        | 1      | 1     |
| 1:A:65:TYR:CE1   | 1:A:73:ILE:HG21  | 0.40     | 2.51        | 2      | 1     |
| 1:A:11:ILE:HG22  | 1:A:15:GLN:HB2   | 0.40     | 1.92        | 3      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:215:LEU:O    | 1:A:231:ILE:HD12 | 0.40     | 2.17        | 3      | 1     |
| 1:A:76:VAL:CG2   | 1:A:93:ARG:HB3   | 0.40     | 2.47        | 4      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:LYS:HG2  | 0.40     | 1.92        | 4      | 1     |
| 1:A:205:TYR:OH   | 1:A:246:LYS:C    | 0.40     | 2.64        | 4      | 1     |
| 1:A:107:TRP:CZ3  | 1:A:163:GLU:O    | 0.40     | 2.74        | 5      | 1     |
| 1:A:138:VAL:CG1  | 1:A:142:LYS:CG   | 0.40     | 3.00        | 6      | 1     |
| 1:A:91:LEU:HD13  | 1:A:130:LEU:HD12 | 0.40     | 1.93        | 8      | 1     |
| 1:A:104:MET:CG   | 1:A:241:LEU:HD21 | 0.40     | 2.46        | 8      | 1     |
| 1:A:150:MET:HG2  | 1:A:166:GLU:OE1  | 0.40     | 2.17        | 8      | 1     |
| 1:A:121:GLU:CA   | 1:A:124:LYS:HD2  | 0.40     | 2.44        | 9      | 1     |
| 1:A:1:MET:HE1    | 1:A:22:HIS:HB2   | 0.40     | 1.93        | 10     | 1     |
| 1:A:1:MET:C      | 1:A:3:GLU:N      | 0.40     | 2.76        | 10     | 1     |
| 1:A:5:HIS:HB2    | 1:A:19:ILE:CG1   | 0.40     | 2.46        | 10     | 1     |
| 1:A:23:PHE:CE1   | 1:A:31:LEU:HG    | 0.40     | 2.51        | 10     | 1     |
| 1:A:140:ASP:HA   | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.40     | 1.93        | 10     | 1     |
| 1:A:232:SER:O    | 1:A:235:LYS:HD3  | 0.40     | 2.16        | 1      | 1     |
| 1:A:166:GLU:C    | 1:A:166:GLU:OE1  | 0.40     | 2.65        | 2      | 1     |
| 1:A:127:LEU:HG   | 1:A:128:LYS:N    | 0.40     | 2.32        | 3      | 1     |
| 1:A:47:ARG:CG    | 1:A:54:LEU:CA    | 0.40     | 2.96        | 7      | 1     |
| 1:A:121:GLU:O    | 1:A:124:LYS:CD   | 0.40     | 2.70        | 7      | 1     |
| 1:A:23:PHE:CZ    | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.40     | 2.51        | 8      | 1     |
| 1:A:88:PHE:O     | 1:A:92:PHE:CB    | 0.40     | 2.70        | 8      | 1     |
| 1:A:126:PHE:O    | 1:A:126:PHE:HD1  | 0.40     | 1.99        | 8      | 1     |
| 1:A:152:LYS:HE2  | 1:A:152:LYS:CA   | 0.40     | 2.47        | 8      | 1     |
| 1:A:82:LEU:HD13  | 1:A:84:THR:HB    | 0.40     | 1.94        | 9      | 1     |
| 1:A:131:LEU:HG   | 1:A:138:VAL:N    | 0.40     | 2.30        | 1      | 1     |
| 1:A:177:PHE:CD1  | 1:A:237:ASN:ND2  | 0.40     | 2.90        | 1      | 1     |
| 1:A:116:GLY:C    | 1:A:117:PHE:CG   | 0.40     | 2.99        | 2      | 1     |
| 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:GLU:N    | 0.40     | 2.31        | 2      | 1     |
| 1:A:191:PHE:O    | 1:A:195:PHE:CD1  | 0.40     | 2.75        | 3      | 1     |
| 1:A:241:LEU:HB3  | 1:A:251:ASP:OD1  | 0.40     | 2.17        | 3      | 1     |
| 1:A:124:LYS:CA   | 1:A:147:THR:HG21 | 0.40     | 2.35        | 5      | 1     |
| 1:A:191:PHE:CE1  | 1:A:195:PHE:CG   | 0.40     | 3.09        | 5      | 1     |
| 1:A:211:LEU:HB2  | 1:A:247:LEU:CD2  | 0.40     | 2.35        | 5      | 1     |
| 1:A:88:PHE:CB    | 1:A:142:LYS:HB2  | 0.40     | 2.47        | 6      | 1     |
| 1:A:127:LEU:CD1  | 1:A:143:LEU:HA   | 0.40     | 2.44        | 6      | 1     |
| 1:A:118:ILE:C    | 1:A:161:LYS:HG2  | 0.40     | 2.40        | 7      | 1     |
| 1:A:124:LYS:HD3  | 1:A:125:ASN:N    | 0.40     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:165:THR:O    | 1:A:169:ARG:CG   | 0.40     | 2.69        | 7      | 1     |
| 1:A:166:GLU:C    | 1:A:169:ARG:HG2  | 0.40     | 2.42        | 7      | 1     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:231:ILE:C    | 0.40     | 2.64        | 8      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1        | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|---------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|               |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:168:ALA:C | 1:A:171:LEU:HB2 | 0.40     | 2.41        | 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     | 255/263 (97%)   | 222±1 (87±0%) | 23±3 (9±1%) | 10±2 (4±1%) | 4           | 30 |
| All | All   | 2550/2630 (97%) | 2220 (87%)    | 230 (9%)    | 100 (4%)    | 4           | 30 |

All 25 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     | 185 | LYS  | 10             |
| 1   | A     | 187 | CYS  | 10             |
| 1   | A     | 27  | GLY  | 9              |
| 1   | A     | 138 | VAL  | 8              |
| 1   | A     | 111 | ASP  | 7              |
| 1   | A     | 208 | GLU  | 6              |
| 1   | A     | 9   | SER  | 6              |
| 1   | A     | 85  | GLU  | 6              |
| 1   | A     | 137 | THR  | 5              |
| 1   | A     | 139 | ASP  | 4              |
| 1   | A     | 114 | HIS  | 4              |
| 1   | A     | 28  | SER  | 3              |
| 1   | A     | 112 | THR  | 3              |
| 1   | A     | 222 | ASN  | 3              |
| 1   | A     | 172 | PRO  | 2              |
| 1   | A     | 258 | ALA  | 2              |
| 1   | A     | 134 | ALA  | 2              |
| 1   | A     | 186 | MET  | 2              |
| 1   | A     | 155 | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 136 | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 119 | GLU  | 1              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 8   | SER  | 1              |
| 1   | A     | 94  | CYS  | 1              |
| 1   | A     | 32  | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 118 | ILE  | 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     | 227/232 (98%)   | 129±6 (57±2%) | 98±6 (43±2%) | 0           | 3 |
| All | All   | 2270/2320 (98%) | 1291 (57%)    | 979 (43%)    | 0           | 3 |

All 199 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     | 1   | MET  | 10             |
| 1   | A     | 11  | ILE  | 10             |
| 1   | A     | 20  | TRP  | 10             |
| 1   | A     | 39  | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 44  | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 84  | THR  | 10             |
| 1   | A     | 98  | LYS  | 10             |
| 1   | A     | 107 | TRP  | 10             |
| 1   | A     | 108 | ARG  | 10             |
| 1   | A     | 110 | TYR  | 10             |
| 1   | A     | 126 | PHE  | 10             |
| 1   | A     | 149 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 152 | LYS  | 10             |
| 1   | A     | 161 | LYS  | 10             |
| 1   | A     | 162 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 171 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 197 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 214 | LEU  | 10             |
| 1   | A     | 233 | THR  | 10             |
| 1   | A     | 235 | LYS  | 10             |
| 1   | A     | 246 | LYS  | 10             |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 36  | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 78  | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 82  | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 93  | ARG  | 9              |
| 1   | A     | 117 | PHE  | 9              |
| 1   | A     | 124 | LYS  | 9              |
| 1   | A     | 136 | LYS  | 9              |
| 1   | A     | 142 | LYS  | 9              |
| 1   | A     | 180 | LYS  | 9              |
| 1   | A     | 239 | MET  | 9              |
| 1   | A     | 250 | THR  | 9              |
| 1   | A     | 255 | ILE  | 9              |
| 1   | A     | 59  | LYS  | 9              |
| 1   | A     | 215 | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 254 | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 16  | PHE  | 8              |
| 1   | A     | 90  | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 220 | GLU  | 8              |
| 1   | A     | 225 | GLU  | 8              |
| 1   | A     | 256 | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 67  | GLN  | 8              |
| 1   | A     | 164 | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 191 | PHE  | 8              |
| 1   | A     | 247 | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 252 | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 40  | ILE  | 7              |
| 1   | A     | 64  | GLN  | 7              |
| 1   | A     | 104 | MET  | 7              |
| 1   | A     | 167 | MET  | 7              |
| 1   | A     | 181 | PHE  | 7              |
| 1   | A     | 201 | ASP  | 7              |
| 1   | A     | 223 | LYS  | 7              |
| 1   | A     | 5   | HIS  | 7              |
| 1   | A     | 109 | LYS  | 7              |
| 1   | A     | 131 | LEU  | 7              |
| 1   | A     | 122 | GLU  | 7              |
| 1   | A     | 31  | LEU  | 6              |
| 1   | A     | 68  | ARG  | 6              |
| 1   | A     | 88  | PHE  | 6              |
| 1   | A     | 99  | SER  | 6              |
| 1   | A     | 119 | GLU  | 6              |
| 1   | A     | 173 | VAL  | 6              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 189 | LYS  | 6              |
| 1   | A     | 200 | GLN  | 6              |
| 1   | A     | 210 | GLU  | 6              |
| 1   | A     | 211 | LEU  | 6              |
| 1   | A     | 231 | ILE  | 6              |
| 1   | A     | 260 | ASP  | 6              |
| 1   | A     | 12  | THR  | 6              |
| 1   | A     | 45  | GLN  | 6              |
| 1   | A     | 47  | ARG  | 6              |
| 1   | A     | 143 | LEU  | 6              |
| 1   | A     | 242 | SER  | 6              |
| 1   | A     | 226 | LEU  | 6              |
| 1   | A     | 6   | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 10  | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 21  | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 26  | ASP  | 5              |
| 1   | A     | 48  | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 77  | GLU  | 5              |
| 1   | A     | 95  | GLN  | 5              |
| 1   | A     | 97  | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 123 | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 133 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 135 | ASN  | 5              |
| 1   | A     | 138 | VAL  | 5              |
| 1   | A     | 179 | LEU  | 5              |
| 1   | A     | 208 | GLU  | 5              |
| 1   | A     | 232 | SER  | 5              |
| 1   | A     | 118 | ILE  | 5              |
| 1   | A     | 128 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 221 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 192 | ASN  | 5              |
| 1   | A     | 228 | ILE  | 5              |
| 1   | A     | 249 | ARG  | 5              |
| 1   | A     | 216 | LYS  | 5              |
| 1   | A     | 9   | SER  | 4              |
| 1   | A     | 15  | GLN  | 4              |
| 1   | A     | 28  | SER  | 4              |
| 1   | A     | 34  | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 96  | GLN  | 4              |
| 1   | A     | 102 | GLU  | 4              |
| 1   | A     | 120 | THR  | 4              |
| 1   | A     | 137 | THR  | 4              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 151 | LEU  | 4              |
| 1   | A     | 174 | GLN  | 4              |
| 1   | A     | 206 | ILE  | 4              |
| 1   | A     | 217 | ASP  | 4              |
| 1   | A     | 205 | TYR  | 4              |
| 1   | A     | 38  | ASN  | 4              |
| 1   | A     | 129 | ASP  | 4              |
| 1   | A     | 130 | LEU  | 4              |
| 1   | A     | 165 | THR  | 4              |
| 1   | A     | 166 | GLU  | 4              |
| 1   | A     | 170 | LEU  | 4              |
| 1   | A     | 185 | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 105 | LYS  | 4              |
| 1   | A     | 127 | LEU  | 4              |
| 1   | A     | 184 | ILE  | 4              |
| 1   | A     | 35  | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 49  | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 57  | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 91  | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 114 | HIS  | 3              |
| 1   | A     | 150 | MET  | 3              |
| 1   | A     | 178 | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 195 | PHE  | 3              |
| 1   | A     | 230 | ASN  | 3              |
| 1   | A     | 238 | ILE  | 3              |
| 1   | A     | 169 | ARG  | 3              |
| 1   | A     | 176 | ASN  | 3              |
| 1   | A     | 80  | HIS  | 3              |
| 1   | A     | 115 | SER  | 3              |
| 1   | A     | 140 | ASP  | 3              |
| 1   | A     | 153 | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 190 | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 42  | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 94  | CYS  | 3              |
| 1   | A     | 113 | ASP  | 3              |
| 1   | A     | 132 | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 177 | PHE  | 3              |
| 1   | A     | 186 | MET  | 3              |
| 1   | A     | 193 | LYS  | 3              |
| 1   | A     | 43  | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 196 | GLU  | 3              |
| 1   | A     | 139 | ASP  | 3              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 55  | SER  | 3              |
| 1   | A     | 14  | SER  | 3              |
| 1   | A     | 4   | SER  | 2              |
| 1   | A     | 32  | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 53  | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 58  | MET  | 2              |
| 1   | A     | 148 | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 175 | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 218 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 236 | LYS  | 2              |
| 1   | A     | 3   | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 8   | SER  | 2              |
| 1   | A     | 62  | VAL  | 2              |
| 1   | A     | 85  | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 121 | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 154 | PHE  | 2              |
| 1   | A     | 219 | CYS  | 2              |
| 1   | A     | 222 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 227 | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 7   | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 125 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 182 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 187 | CYS  | 2              |
| 1   | A     | 209 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 203 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 243 | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 70  | ASP  | 2              |
| 1   | A     | 86  | GLU  | 2              |
| 1   | A     | 112 | THR  | 2              |
| 1   | A     | 103 | PHE  | 2              |
| 1   | A     | 224 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 229 | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 63  | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 251 | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 87  | ASN  | 1              |
| 1   | A     | 111 | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 145 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 147 | THR  | 1              |
| 1   | A     | 241 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 75  | ILE  | 1              |
| 1   | A     | 141 | THR  | 1              |
| 1   | A     | 89  | LEU  | 1              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 72  | LYS  | 1              |
| 1   | A     | 76  | VAL  | 1              |
| 1   | A     | 155 | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 101 | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 52  | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 199 | ASP  | 1              |
| 1   | A     | 257 | SER  | 1              |
| 1   | A     | 18  | GLU  | 1              |
| 1   | A     | 92  | PHE  | 1              |
| 1   | A     | 237 | ASN  | 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