



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 12:34 AM UTC

PDB ID : 2KLF / pdb_00002klf
Title : PERE NMR structure of maltodextrin-binding protein
Authors : Madl, T.; Bermel, W.; Zangger, K.
Deposited on : 2009-07-02

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

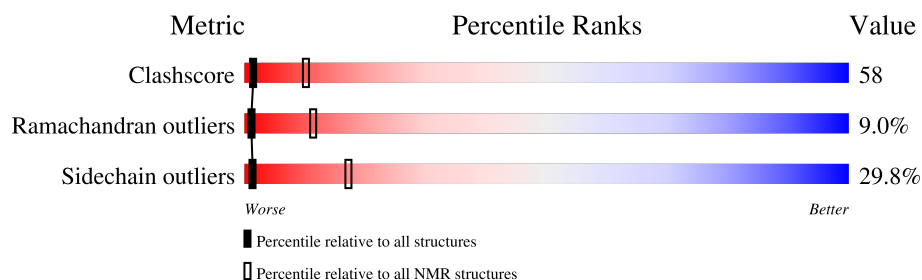
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	370	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:370 (368)	1.88	1

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

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

- Molecule 1 is a protein called Maltose-binding periplasmic protein.

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

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

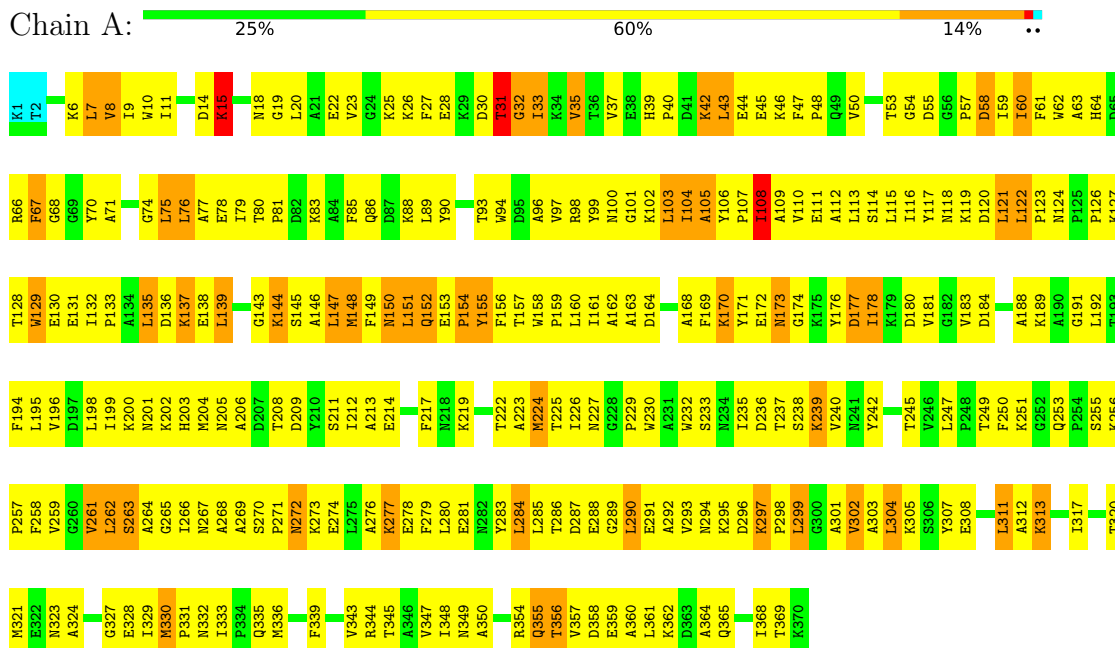
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	engineered mutation	UNP P0AEX9

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: Maltose-binding periplasmic protein

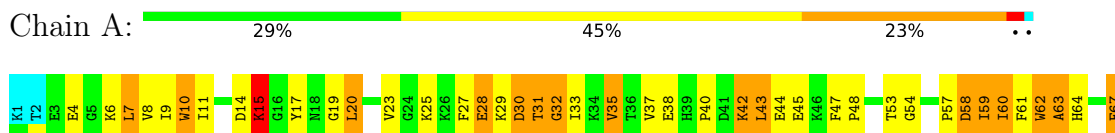


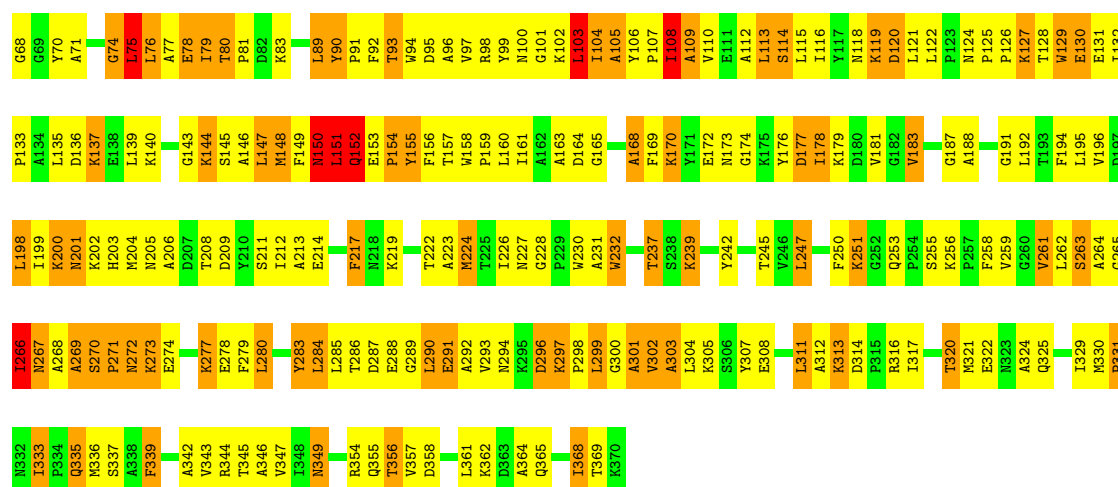
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

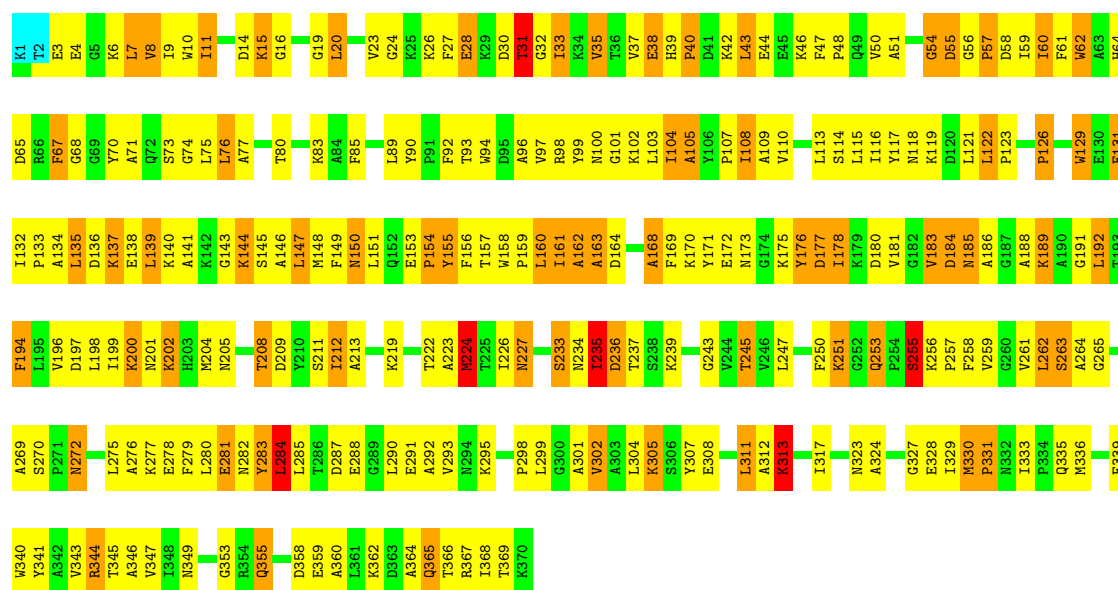




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 32% 46% 19% ..

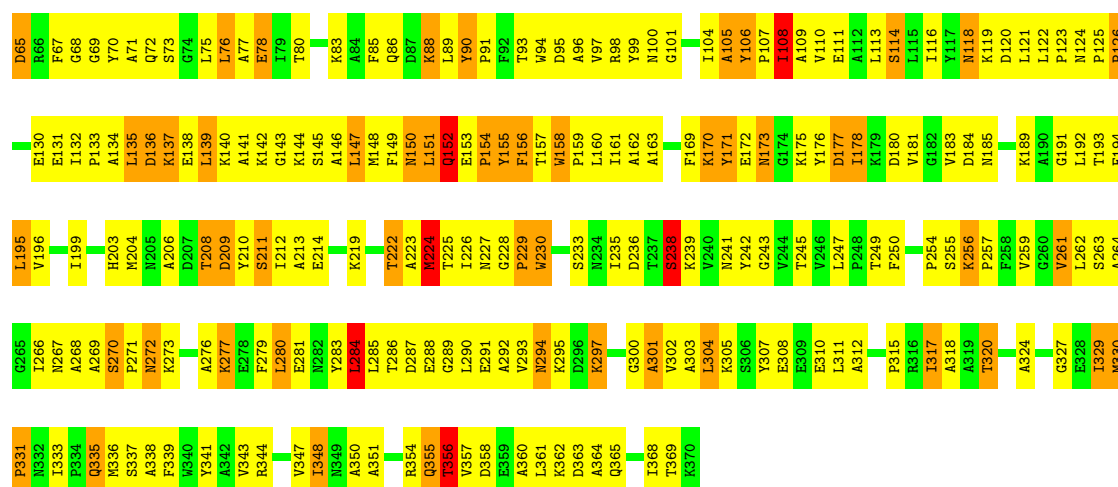


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 28% 53% 16% ..

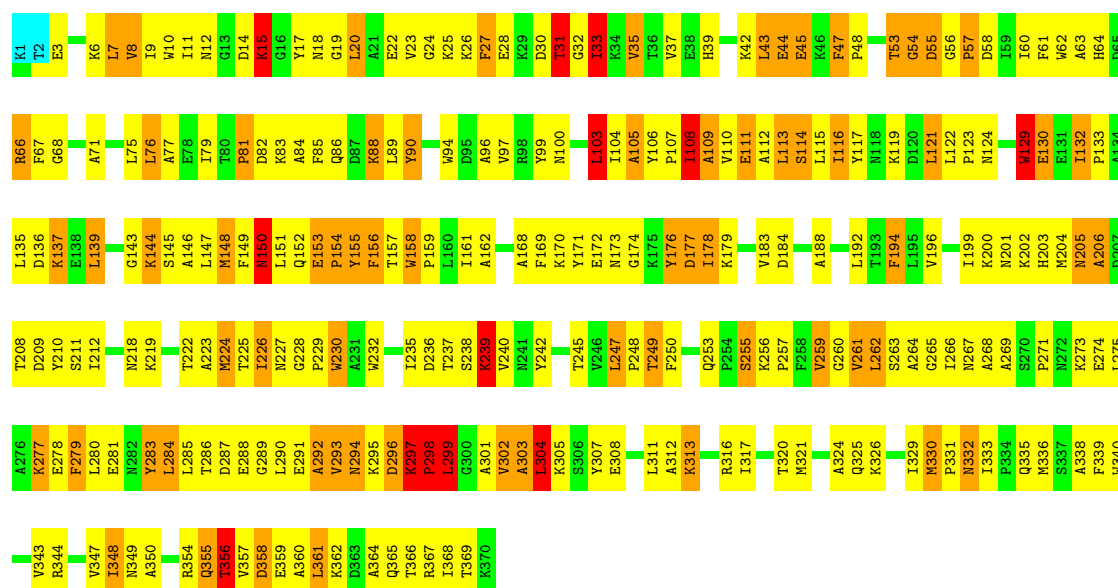




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

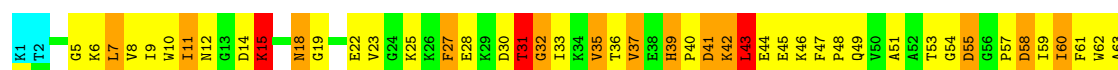
Chain A: 30% 48% 18%

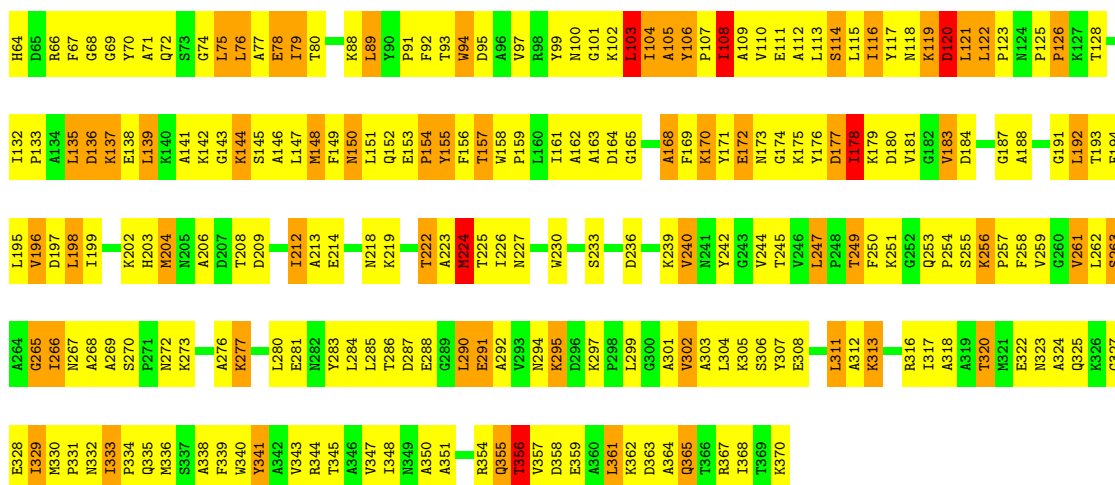


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

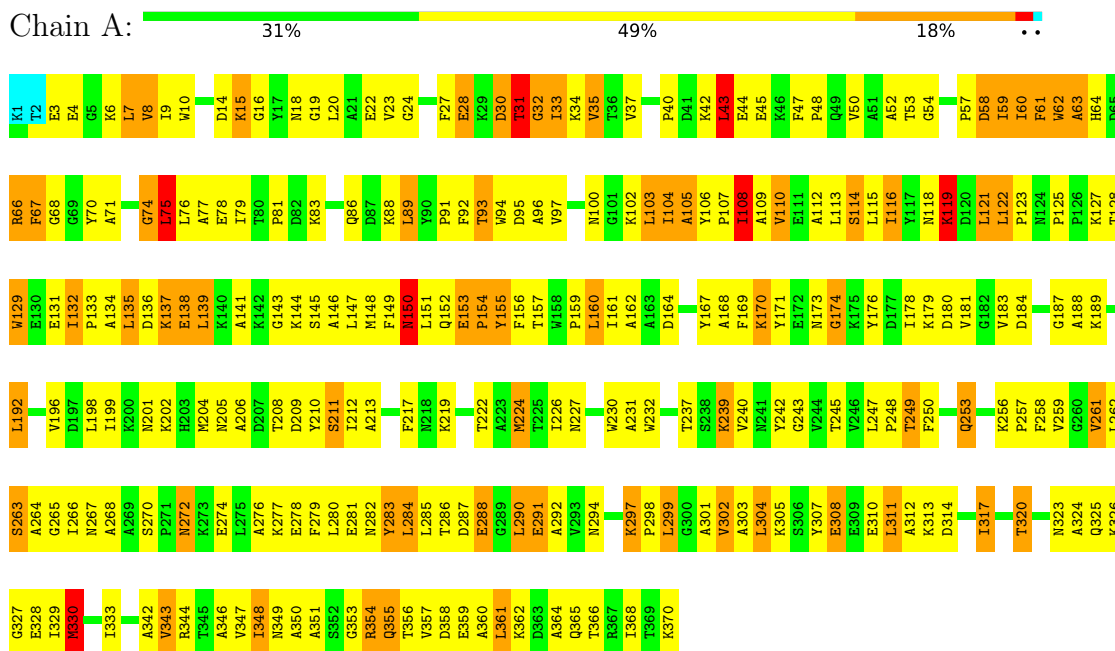
Chain A: 26% 52% 19%





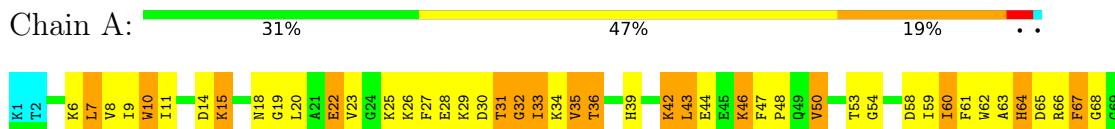
4.2.6 Score per residue for model 6

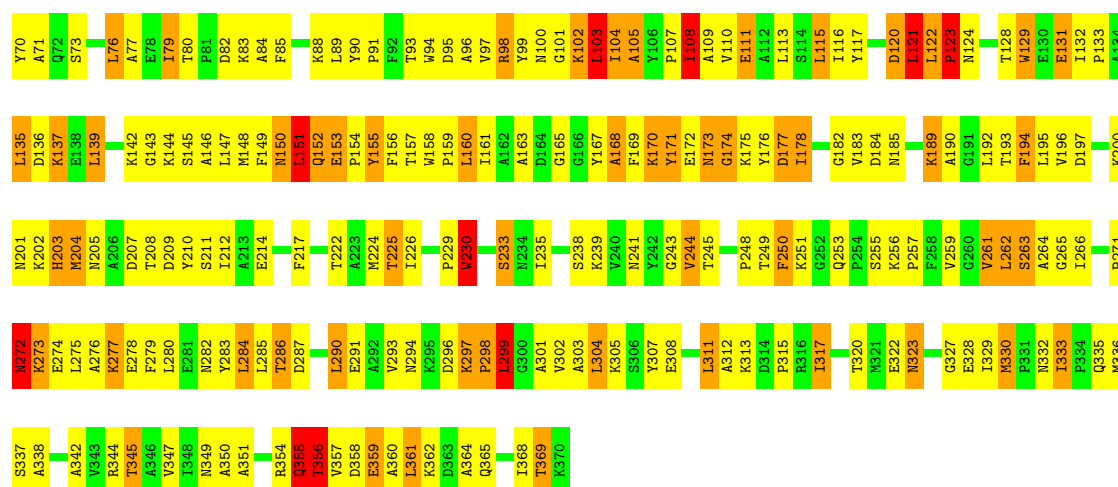
- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

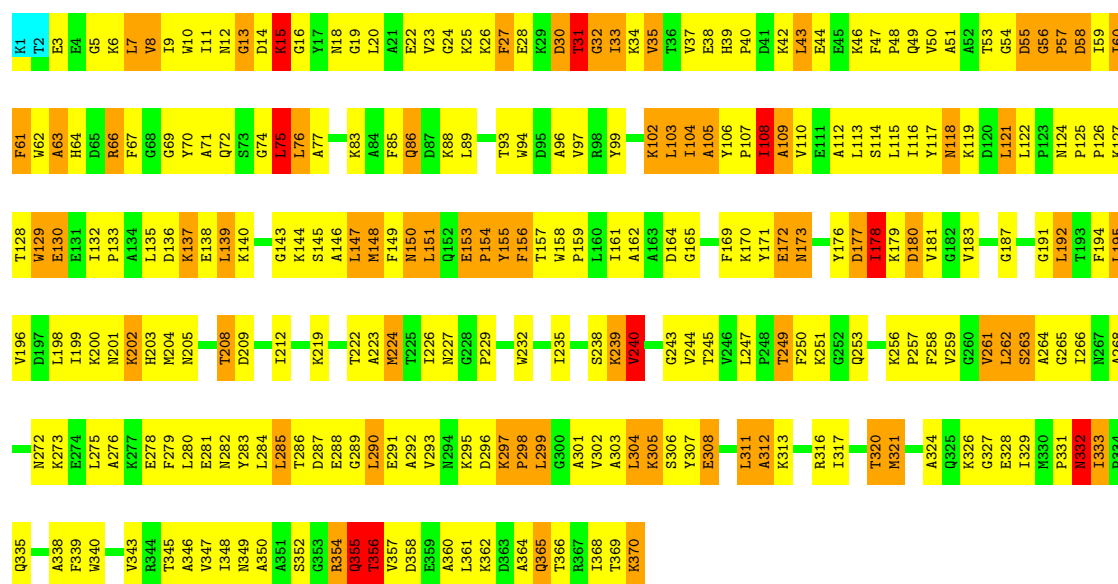




4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

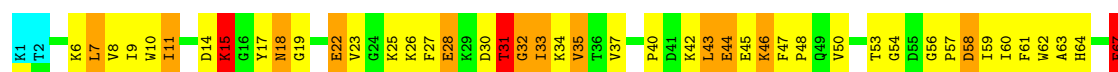
Chain A: 29% 50% 18% ..

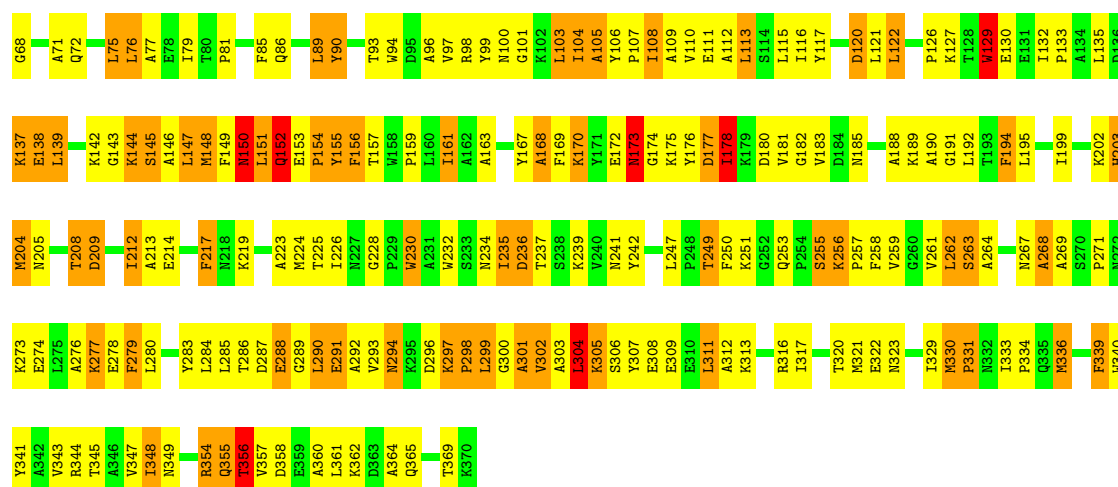


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 33% 44% 20% ..

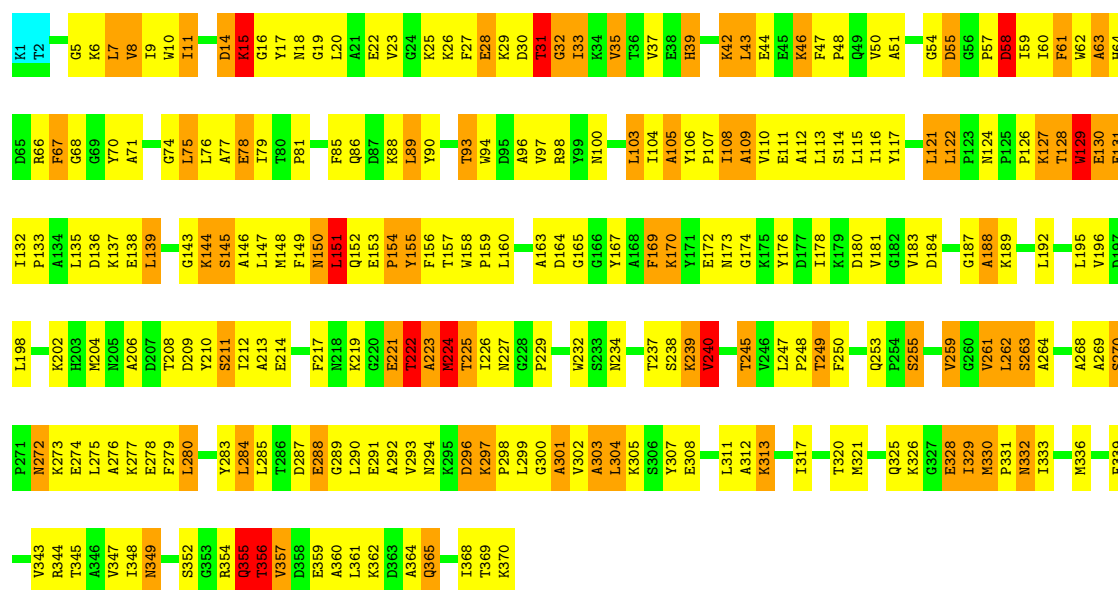




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Maltose-binding periplasmic protein

Chain A: 32% 46% 19%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	
CNS	refinement	

No chemical shift data was provided.

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	0.50±0.01	0±0/2930 (0.0± 0.0%)	0.90±0.02	10±2/3976 (0.2± 0.1%)
All	All	0.50	1/29300 (0.0%)	0.90	98/39760 (0.2%)

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

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

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	31	THR	N-CA	-9.19	1.40	1.46	3	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	355	GLN	N-CA-C	12.96	126.25	110.19	3	7
1	A	265	GLY	CA-C-N	9.63	139.31	121.97	5	1
1	A	265	GLY	C-N-CA	9.63	139.31	121.97	5	1
1	A	162	ALA	N-CA-C	8.93	124.15	112.72	2	1
1	A	122	LEU	CA-C-N	8.41	130.35	119.84	7	1
1	A	122	LEU	C-N-CA	8.41	130.35	119.84	7	1
1	A	266	ILE	N-CA-C	-8.22	92.25	109.34	5	1
1	A	222	THR	N-CA-C	7.79	121.94	109.86	10	1
1	A	221	GLU	CA-C-N	7.64	135.56	122.12	10	1
1	A	221	GLU	C-N-CA	7.64	135.56	122.12	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	356	THR	N-CA-C	-7.63	94.54	110.80	10	1
1	A	266	ILE	O-C-N	-7.51	113.18	122.57	5	1
1	A	35	VAL	N-CA-C	7.03	118.70	108.58	4	9
1	A	155	TYR	N-CA-C	-6.93	103.47	112.68	7	1
1	A	30	ASP	N-CA-C	-6.88	103.89	112.90	3	1
1	A	122	LEU	N-CA-C	6.67	119.98	110.24	7	1
1	A	129	TRP	N-CA-C	-6.66	104.42	112.54	9	8
1	A	33	ILE	N-CA-C	6.56	118.15	108.45	4	7
1	A	31	THR	CA-C-O	6.27	121.58	117.94	3	1
1	A	67	PHE	N-CA-C	-6.17	104.61	111.71	7	4
1	A	120	ASP	N-CA-C	-6.13	105.45	113.12	7	1
1	A	266	ILE	CA-C-O	-6.10	113.16	120.78	5	1
1	A	147	LEU	N-CA-C	6.08	117.14	108.74	8	3
1	A	201	ASN	N-CA-C	5.92	121.16	113.88	4	6
1	A	253	GLN	N-CA-C	5.89	113.52	108.22	10	2
1	A	53	THR	N-CA-C	-5.88	106.07	113.18	7	1
1	A	353	GLY	CA-C-N	-5.87	113.79	122.83	6	2
1	A	353	GLY	C-N-CA	-5.87	113.79	122.83	6	2
1	A	292	ALA	N-CA-C	-5.87	105.01	111.82	4	1
1	A	263	SER	N-CA-C	5.78	118.88	109.06	8	7
1	A	259	VAL	N-CA-C	5.65	115.99	107.80	7	2
1	A	60	ILE	N-CA-C	5.60	115.74	108.35	5	1
1	A	266	ILE	CA-C-N	5.56	132.16	121.54	1	1
1	A	266	ILE	C-N-CA	5.56	132.16	121.54	1	1
1	A	136	ASP	N-CA-C	-5.44	105.43	111.36	5	2
1	A	50	VAL	CA-C-N	5.38	127.75	120.38	7	1
1	A	50	VAL	C-N-CA	5.38	127.75	120.38	7	1
1	A	188	ALA	N-CA-C	-5.35	105.44	111.28	10	1
1	A	295	LYS	N-CA-C	-5.32	105.48	111.28	8	1
1	A	124	ASN	CA-C-N	5.27	125.81	120.38	3	1
1	A	124	ASN	C-N-CA	5.27	125.81	120.38	3	1
1	A	222	THR	O-C-N	5.17	128.44	121.83	10	1
1	A	200	LYS	CA-C-N	-5.11	113.57	122.36	2	4
1	A	200	LYS	C-N-CA	-5.11	113.57	122.36	2	4

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

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

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2861	2836	2833	332±27
All	All	28610	28360	28330	3318

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 58.

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

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ALA:N	1:A:267:ASN:O	0.96	1.98	1	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD11	0.95	1.37	4	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG23	0.95	1.35	4	1
1:A:48:PRO:HA	1:A:75:LEU:HD13	0.95	1.38	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:266:ILE:HD11	0.95	1.60	5	1
1:A:172:GLU:O	1:A:174:GLY:N	0.93	2.01	10	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.92	1.94	6	9
1:A:75:LEU:HD12	1:A:268:ALA:HB3	0.92	1.42	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:HG23	0.92	1.39	6	2
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:HB2	0.92	2.00	10	2
1:A:163:ALA:HB2	1:A:256:LYS:HB2	0.92	1.41	2	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:206:ALA:HB1	0.91	1.41	3	3
1:A:122:LEU:HD12	1:A:223:ALA:HB2	0.91	1.41	5	1
1:A:116:ILE:HG23	1:A:225:THR:HG23	0.89	1.44	7	1
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:HG22	0.89	1.66	5	5
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HD22	0.89	2.03	5	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HD13	0.89	1.45	9	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:N	0.88	1.83	6	7
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG21	0.88	1.68	2	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:OG1	0.88	1.90	1	6
1:A:10:TRP:CE2	1:A:43:LEU:HD13	0.88	2.04	5	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:104:ILE:HG21	0.88	1.99	5	2
1:A:110:VAL:CG1	1:A:302:VAL:HG11	0.88	1.96	2	1
1:A:343:VAL:HG13	1:A:347:VAL:HG21	0.87	1.46	3	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:O	0.87	1.93	7	1
1:A:50:VAL:O	1:A:54:GLY:N	0.87	2.07	9	4
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HD3	0.87	1.68	4	8
1:A:171:TYR:HA	1:A:175:LYS:O	0.86	1.70	2	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:62:TRP:CZ3	0.86	2.05	10	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:244:VAL:HG22	0.86	1.48	7	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:O	0.85	1.71	10	7
1:A:151:LEU:HD13	1:A:208:THR:OG1	0.85	1.70	9	1
1:A:181:VAL:HG21	1:A:368:ILE:CD1	0.85	2.01	10	2
1:A:33:ILE:HD11	1:A:275:LEU:HD21	0.85	1.45	10	2
1:A:303:ALA:HB3	1:A:307:TYR:CD2	0.85	2.06	1	2
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CZ	0.85	2.06	6	2
1:A:20:LEU:O	1:A:35:VAL:HG21	0.85	1.71	2	2
1:A:178:ILE:HD11	1:A:369:THR:HB	0.85	1.48	8	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:HD12	0.85	1.48	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:76:LEU:HD11	0.84	2.08	1	1
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:CG	0.84	2.03	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:CG1	1:A:37:VAL:HG12	0.84	2.02	6	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:VAL:HG13	0.84	1.46	1	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:9:ILE:HD11	0.83	1.48	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD1	0.83	2.02	4	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG11	0.83	2.03	8	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:264:ALA:O	0.83	1.73	9	2
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:CG	0.83	2.04	4	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.82	1.50	6	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:347:VAL:HG21	0.82	1.50	6	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:HA	0.82	1.49	6	3
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG3	0.82	1.70	3	10
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.82	1.74	2	4
1:A:343:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HD21	0.82	1.49	9	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:76:LEU:HD21	0.82	2.08	1	1
1:A:119:LYS:O	1:A:122:LEU:HD23	0.82	1.75	6	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:244:VAL:HG22	0.82	2.04	7	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:HB2	0.81	1.52	1	3
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:C	0.81	1.99	1	3
1:A:290:LEU:HD22	1:A:307:TYR:CD2	0.81	2.11	4	2
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.81	1.75	1	5
1:A:43:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HD11	0.81	1.52	10	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:O	0.81	1.76	5	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:CD1	0.81	2.02	4	3
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:CB	0.81	1.88	7	5
1:A:290:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HD23	0.81	1.51	10	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:CD1	0.81	2.06	1	2
1:A:7:LEU:CB	1:A:35:VAL:HG12	0.81	2.06	9	2
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:N	0.81	1.90	6	4
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HD12	0.80	2.04	4	3
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HD2	0.80	1.74	7	10
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.80	1.77	8	7
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:CG	0.80	2.29	5	10
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:C	0.80	2.23	10	2
1:A:346:ALA:HB1	1:A:357:VAL:CG2	0.80	2.05	1	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HG23	0.80	1.77	7	5
1:A:307:TYR:CE1	1:A:311:LEU:HD12	0.80	2.11	2	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:35:VAL:HG22	0.80	2.07	6	4
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:HB2	0.79	1.77	7	10
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:HG3	0.79	1.51	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD2	0.79	2.05	2	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:37:VAL:HG11	0.79	2.07	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD23	1:A:117:TYR:OH	0.79	1.78	4	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CG1	0.79	2.08	4	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD12	0.79	2.02	7	7
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.79	1.78	8	7
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG21	0.79	1.54	3	1
1:A:290:LEU:HD22	1:A:307:TYR:CG	0.78	2.12	4	2
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HD23	0.78	1.77	5	2
1:A:148:MET:HB3	1:A:222:THR:HG21	0.78	1.54	2	2
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG21	0.78	1.53	10	1
1:A:196:VAL:HG21	1:A:355:GLN:OE1	0.78	1.77	6	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:97:VAL:HG12	0.78	1.55	7	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:224:MET:HE1	0.78	2.14	4	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:267:ASN:O	0.78	2.32	1	1
1:A:132:ILE:CD1	1:A:198:LEU:HD22	0.78	2.08	6	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:75:LEU:HD12	0.78	2.14	9	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:HD13	0.78	2.08	2	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:303:ALA:HB1	0.78	2.09	5	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:285:LEU:HD21	0.78	2.14	9	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:20:LEU:HD22	0.77	1.55	8	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.77	1.79	1	1
1:A:152:GLN:NE2	1:A:348:ILE:HD11	0.77	1.94	3	2
1:A:139:LEU:CB	1:A:144:LYS:O	0.77	2.33	5	1
1:A:311:LEU:CD1	1:A:317:ILE:HG21	0.77	2.09	10	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:O	0.77	1.80	5	1
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:HG13	0.77	1.78	7	1
1:A:156:PHE:C	1:A:159:PRO:HD2	0.77	2.04	8	10
1:A:170:LYS:C	1:A:176:TYR:HA	0.77	2.03	6	4
1:A:346:ALA:CB	1:A:357:VAL:HG23	0.77	2.07	1	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD1	0.77	2.15	7	1
1:A:114:SER:O	1:A:226:ILE:HD12	0.77	1.80	1	1
1:A:193:THR:O	1:A:196:VAL:HG12	0.77	1.80	5	2
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG21	0.77	2.08	4	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:285:LEU:HD11	0.76	2.15	8	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CD2	0.76	2.16	1	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:226:ILE:HG22	0.76	1.56	6	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:HG22	0.76	1.57	4	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:CB	0.76	2.10	5	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CE1	0.76	2.16	10	2
1:A:343:VAL:HG12	1:A:361:LEU:CD2	0.76	2.11	9	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:261:VAL:HG11	0.76	1.58	1	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG23	0.76	1.81	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:C	0.76	2.06	9	7
1:A:355:GLN:HG2	1:A:357:VAL:HG23	0.76	1.58	3	1
1:A:93:THR:HG21	1:A:302:VAL:HG21	0.75	1.56	1	2
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:O	0.75	1.79	5	5
1:A:113:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HD21	0.75	2.10	2	2
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HD12	0.75	1.56	10	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:HB2	0.75	1.57	1	6
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB3	0.75	1.81	2	2
1:A:230:TRP:CZ3	1:A:231:ALA:HB2	0.75	2.16	1	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:324:ALA:HA	0.75	1.59	2	2
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:HB1	0.75	1.57	5	2
1:A:312:ALA:HA	1:A:317:ILE:HD11	0.75	1.56	9	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:139:LEU:HD11	0.75	1.56	10	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB2	0.75	1.82	7	3
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD11	0.75	1.59	4	1
1:A:39:HIS:HA	1:A:43:LEU:HD12	0.75	1.59	4	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:161:ILE:CD1	0.75	2.11	9	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:247:LEU:HD11	0.75	1.55	10	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:HD12	0.75	1.58	1	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CE3	0.75	2.16	6	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CZ	0.75	2.17	8	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:CG1	0.75	2.10	6	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	0.74	1.58	2	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD13	0.74	2.11	9	2
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:O	0.74	2.06	1	1
1:A:148:MET:O	1:A:225:THR:HG22	0.74	1.80	9	3
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:HG22	0.74	1.57	3	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HD23	0.74	1.57	5	1
1:A:110:VAL:HG12	1:A:301:ALA:HB3	0.74	1.58	6	1
1:A:184:ASP:CG	1:A:361:LEU:HD13	0.74	2.08	7	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:HB2	0.74	1.81	10	4
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HD12	0.74	1.82	1	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD22	0.74	1.82	5	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CB	0.74	2.11	6	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD12	0.74	1.83	7	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.74	1.82	7	2
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:HB3	0.74	1.60	3	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:117:TYR:N	0.74	1.97	4	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:266:ILE:HD13	0.74	1.59	5	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:270:SER:O	0.74	1.83	6	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:361:LEU:HD13	0.74	1.83	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HD12	0.74	1.82	7	2
1:A:223:ALA:O	1:A:224:MET:HB2	0.74	1.83	10	4
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG12	0.74	1.58	9	2
1:A:158:TRP:CE3	1:A:161:ILE:HD11	0.74	2.18	2	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG22	0.73	2.12	1	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD23	0.73	2.06	2	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.73	2.14	10	1
1:A:184:ASP:HB2	1:A:361:LEU:HD23	0.73	1.61	4	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:O	0.73	1.83	5	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CG	0.73	2.12	9	4
1:A:178:ILE:HD13	1:A:179:LYS:N	0.73	1.98	8	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:206:ALA:CA	0.73	2.14	5	3
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:CG2	0.73	2.13	4	1
1:A:338:ALA:HB3	1:A:368:ILE:CD1	0.73	2.13	8	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HB	0.73	1.84	8	5
1:A:301:ALA:CB	1:A:311:LEU:HD13	0.73	2.10	2	2
1:A:307:TYR:CZ	1:A:311:LEU:HD12	0.73	2.18	8	3
1:A:148:MET:HB2	1:A:222:THR:HG21	0.73	1.60	8	5
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.73	1.60	5	1
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PRO:HG2	0.73	1.82	5	4
1:A:262:LEU:CD1	1:A:299:LEU:HD13	0.73	2.14	4	1
1:A:148:MET:N	1:A:222:THR:HG21	0.73	1.98	4	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD22	0.73	1.57	8	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:CD1	0.73	2.13	2	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB2	0.73	1.84	5	9
1:A:132:ILE:HD11	1:A:198:LEU:HD22	0.72	1.59	6	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:HG13	0.72	2.18	8	1
1:A:60:ILE:O	1:A:264:ALA:HA	0.72	1.85	1	2
1:A:122:LEU:HD12	1:A:223:ALA:CB	0.72	2.13	5	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:HB3	0.72	1.59	1	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG22	0.72	1.61	3	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HA	0.72	1.60	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG13	0.72	1.61	10	2
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:HG3	0.72	1.62	3	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG2	0.72	1.85	1	9
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG11	0.72	1.61	3	1
1:A:312:ALA:HA	1:A:317:ILE:HD12	0.72	1.60	6	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CZ2	0.72	2.19	9	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD12	0.72	1.85	10	6
1:A:110:VAL:HG22	1:A:302:VAL:CG2	0.72	2.13	4	1
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:O	0.71	1.84	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG12	0.71	2.14	5	1
1:A:108:ILE:O	1:A:302:VAL:HG13	0.71	1.84	7	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:O	0.71	1.85	8	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:280:LEU:HD11	0.71	2.20	9	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:33:ILE:HD12	0.71	1.61	2	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:O	0.71	1.85	3	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:CD	0.71	2.14	1	1
1:A:88:LYS:HG3	1:A:304:LEU:HD21	0.71	1.62	3	1
1:A:124:ASN:O	1:A:135:LEU:HD11	0.71	1.85	7	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG23	0.71	1.62	7	1
1:A:331:PRO:CG	1:A:336:MET:HE3	0.71	2.15	3	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:HD12	0.71	1.85	7	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:43:LEU:HD13	0.71	2.20	5	1
1:A:121:LEU:C	1:A:122:LEU:HD22	0.71	2.10	5	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:133:PRO:HD3	0.71	1.63	8	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD2	0.71	2.21	1	1
1:A:170:LYS:O	1:A:175:LYS:O	0.71	2.08	2	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HD11	0.71	2.15	9	2
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:CG1	0.71	2.15	3	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:CB	0.71	2.39	7	9
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HD12	0.71	1.84	4	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HB1	0.71	1.63	5	1
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG13	0.71	1.61	8	3
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG21	0.70	1.61	5	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.70	2.17	3	3
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:CG2	0.70	2.16	4	1
1:A:330:MET:HE2	1:A:331:PRO:HD2	0.70	1.63	4	1
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:HB3	0.70	1.86	8	7
1:A:106:TYR:CD2	1:A:264:ALA:HB3	0.70	2.22	3	1
1:A:235:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CE1	0.70	2.21	4	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:CD1	0.70	2.16	9	1
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:HB2	0.70	1.86	10	5
1:A:181:VAL:HG21	1:A:368:ILE:HD11	0.70	1.63	10	2
1:A:290:LEU:CD2	1:A:302:VAL:HG11	0.70	2.17	5	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HB	0.70	1.63	8	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HG23	0.70	1.85	6	3
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:CG	0.70	2.21	5	3
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CB	0.70	2.17	7	7
1:A:71:ALA:HB2	1:A:104:ILE:HG21	0.70	1.63	5	3
1:A:76:LEU:CG	1:A:104:ILE:HD11	0.70	2.16	7	1
1:A:154:PRO:HA	1:A:157:THR:OG1	0.70	1.87	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD22	1:A:117:TYR:CE1	0.70	2.20	10	1
1:A:155:TYR:C	1:A:159:PRO:CD	0.70	2.65	3	9
1:A:338:ALA:HB3	1:A:368:ILE:HD11	0.69	1.62	8	1
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:HB3	0.69	1.87	7	5
1:A:88:LYS:HB3	1:A:304:LEU:HD11	0.69	1.64	3	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:CG2	0.69	2.17	3	1
1:A:297:LYS:H	1:A:298:PRO:HD2	0.69	1.47	4	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:81:PRO:HD3	0.69	1.63	6	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.69	2.17	7	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:HA	0.69	1.63	7	3
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CZ3	0.69	2.22	5	2
1:A:61:PHE:HB2	1:A:264:ALA:HB2	0.69	1.64	1	1
1:A:146:ALA:C	1:A:147:LEU:HD12	0.69	2.11	7	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:285:LEU:HD21	0.69	2.22	9	2
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:HG12	0.69	2.23	6	2
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HG22	0.69	1.64	1	1
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:PRO:HG2	0.69	1.64	9	10
1:A:226:ILE:HD11	1:A:247:LEU:HD12	0.69	1.65	1	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD22	0.69	2.13	2	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:C	0.69	2.33	8	3
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:HG23	0.69	2.16	4	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:317:ILE:HG21	0.69	1.87	4	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:104:ILE:O	0.69	1.86	8	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:61:PHE:CD1	0.69	2.22	9	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HA	0.69	1.64	10	1
1:A:110:VAL:HG12	1:A:301:ALA:CB	0.69	2.17	6	1
1:A:55:ASP:C	1:A:269:ALA:HB1	0.69	2.13	4	1
1:A:230:TRP:CE3	1:A:231:ALA:HB2	0.68	2.22	1	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG23	0.68	1.64	7	2
1:A:296:ASP:O	1:A:298:PRO:HD3	0.68	1.88	7	2
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG23	0.68	1.87	9	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:360:ALA:HB2	0.68	1.88	10	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:268:ALA:HB3	0.68	2.14	8	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:347:VAL:CG2	0.68	2.18	6	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:235:ILE:HD11	0.68	2.18	8	1
1:A:40:PRO:HG3	1:A:43:LEU:HD13	0.68	1.63	2	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:HB	0.68	1.65	7	1
1:A:361:LEU:O	1:A:364:ALA:HB3	0.68	1.88	1	2
1:A:97:VAL:CG1	1:A:105:ALA:HB3	0.68	2.18	3	2
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:CB	0.68	2.17	1	1
1:A:48:PRO:O	1:A:51:ALA:HB3	0.68	1.88	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:PRO:O	1:A:163:ALA:HB3	0.68	1.89	2	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD22	0.68	2.19	4	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:261:VAL:HG11	0.68	2.19	5	1
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG12	0.68	1.66	5	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HA	0.68	1.66	9	4
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:HA	0.68	1.63	5	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:CD	0.68	2.13	7	1
1:A:85:PHE:CZ	1:A:285:LEU:HD11	0.68	2.22	8	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:62:TRP:CE3	0.68	2.24	9	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:94:TRP:CZ2	0.68	2.23	10	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HD12	0.68	1.89	5	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:369:THR:CB	0.68	2.19	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD21	0.67	2.18	9	2
1:A:217:PHE:CB	1:A:235:ILE:HD11	0.67	2.19	7	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD21	0.67	1.65	2	3
1:A:126:PRO:CD	1:A:135:LEU:HD13	0.67	2.19	5	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HG23	0.67	1.89	5	1
1:A:167:TYR:O	1:A:169:PHE:N	0.67	2.27	6	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:139:LEU:CD1	0.67	2.19	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:HA	0.67	1.89	3	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	0.67	1.66	3	4
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HD12	0.67	1.88	6	2
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:CD2	0.67	2.18	10	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HG13	0.67	2.19	1	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:HB2	0.67	1.66	3	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:97:VAL:HG12	0.67	2.19	7	3
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HG21	0.67	1.89	8	2
1:A:12:ASN:O	1:A:14:ASP:N	0.67	2.28	8	1
1:A:317:ILE:HG22	1:A:321:MET:HE2	0.67	1.66	1	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:266:ILE:O	0.67	1.89	7	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.67	1.90	1	2
1:A:355:GLN:HB3	1:A:360:ALA:HB2	0.67	1.66	2	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HG21	0.67	1.89	6	2
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:HD21	0.67	1.67	5	2
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HD12	0.67	1.90	9	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:HB2	0.67	1.66	10	4
1:A:302:VAL:HG13	1:A:317:ILE:CG2	0.67	2.19	4	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CD2	0.67	2.25	6	1
1:A:61:PHE:CG	1:A:264:ALA:HB2	0.67	2.24	10	2
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD22	0.67	1.90	10	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:CG2	0.67	2.43	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD13	0.67	2.19	6	1
1:A:116:ILE:HG23	1:A:243:GLY:O	0.67	1.90	8	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:35:VAL:HG21	0.66	2.19	1	1
1:A:311:LEU:O	1:A:311:LEU:HD23	0.66	1.90	4	2
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:CG1	0.66	2.42	7	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CD1	0.66	2.25	1	1
1:A:76:LEU:C	1:A:104:ILE:HD11	0.66	2.15	4	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HD13	0.66	1.67	7	6
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.66	1.90	4	4
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:HG23	0.66	2.19	4	2
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:HB3	0.66	2.20	6	4
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG22	0.66	1.90	7	2
1:A:113:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.66	2.21	6	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HB2	0.66	2.19	1	2
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CB	0.66	2.72	5	9
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HD2	0.66	1.87	7	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:HG3	0.66	1.68	8	1
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:CB	0.66	2.44	8	9
1:A:20:LEU:HD22	1:A:37:VAL:CG1	0.66	2.21	2	1
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:CG2	0.66	2.21	4	2
1:A:23:VAL:HG23	1:A:283:TYR:CE2	0.66	2.24	9	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD2	0.66	2.25	9	1
1:A:259:VAL:CB	1:A:329:ILE:HG22	0.66	2.21	4	1
1:A:297:LYS:H	1:A:298:PRO:CD	0.66	2.03	4	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:CG	0.66	2.20	5	1
1:A:317:ILE:HD12	1:A:318:ALA:N	0.66	2.05	5	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:HD12	0.66	1.91	6	1
1:A:258:PHE:HB2	1:A:330:MET:HE1	0.66	1.67	9	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD11	0.65	2.26	1	1
1:A:108:ILE:N	1:A:262:LEU:O	0.65	2.29	7	10
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.65	1.91	10	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB3	0.65	1.68	6	4
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HG22	0.65	1.67	4	2
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD23	0.65	1.92	10	2
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG23	0.65	1.67	6	2
1:A:227:ASN:CB	1:A:235:ILE:HD12	0.65	2.20	8	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:104:ILE:HG12	0.65	1.67	3	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:336:MET:HE1	0.65	2.26	4	2
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HD12	0.65	2.26	7	2
1:A:106:TYR:CE1	1:A:264:ALA:HB3	0.65	2.26	1	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:HB3	0.65	2.21	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.65	2.45	7	9
1:A:60:ILE:HD12	1:A:265:GLY:O	0.65	1.92	7	2
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:CG2	0.65	2.21	2	2
1:A:285:LEU:HD12	1:A:304:LEU:HD13	0.65	1.67	2	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:145:SER:HA	0.65	1.67	5	1
1:A:281:GLU:HA	1:A:285:LEU:HD23	0.65	1.67	2	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:75:LEU:HD13	0.65	1.66	3	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HD13	0.65	1.69	9	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.65	1.92	4	10
1:A:181:VAL:HG11	1:A:368:ILE:HD12	0.65	1.68	2	1
1:A:189:LYS:HE3	1:A:361:LEU:HD21	0.65	1.69	6	1
1:A:297:LYS:HZ1	1:A:301:ALA:HB3	0.65	1.50	10	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HB2	0.65	1.67	3	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:CB	0.65	2.22	5	2
1:A:47:PHE:CD2	1:A:60:ILE:HD13	0.65	2.26	6	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:103:LEU:CD2	0.65	2.22	6	1
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:HG13	0.65	1.91	8	2
1:A:122:LEU:O	1:A:223:ALA:HB1	0.65	1.91	4	1
1:A:183:VAL:HG11	1:A:368:ILE:HD11	0.65	1.69	6	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:256:LYS:CB	0.64	2.19	2	1
1:A:104:ILE:HG12	1:A:104:ILE:O	0.64	1.90	3	1
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:HG23	0.64	1.91	6	2
1:A:113:LEU:HD21	1:A:257:PRO:HA	0.64	1.69	9	1
1:A:104:ILE:O	1:A:105:ALA:HB2	0.64	1.90	10	10
1:A:342:ALA:HB1	1:A:361:LEU:HD22	0.64	1.68	1	1
1:A:297:LYS:HE3	1:A:299:LEU:HD12	0.64	1.67	5	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG13	0.64	1.91	5	1
1:A:183:VAL:HG12	1:A:339:PHE:CE1	0.64	2.27	8	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:CD1	0.64	2.23	10	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HD13	0.64	1.70	2	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:CB	0.64	2.10	3	1
1:A:95:ASP:O	1:A:329:ILE:HD11	0.64	1.91	5	1
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:CG	0.64	2.00	7	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CB	0.64	2.23	5	4
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.64	2.45	5	7
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HD13	0.64	1.92	7	2
1:A:343:VAL:HA	1:A:361:LEU:HD21	0.64	1.69	8	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:361:LEU:HD11	0.64	1.67	10	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:329:ILE:HG22	0.64	2.23	4	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CD2	0.64	2.27	8	2
1:A:117:TYR:CD1	1:A:122:LEU:HD21	0.64	2.27	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HD12	1:A:312:ALA:N	0.64	2.07	10	1
1:A:266:ILE:HG23	1:A:271:PRO:CD	0.64	2.22	3	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:NE1	0.64	2.07	1	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.64	1.92	3	1
1:A:343:VAL:CG2	1:A:347:VAL:HG21	0.64	2.23	4	2
1:A:126:PRO:HD2	1:A:146:ALA:HB1	0.64	1.70	5	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CE2	0.63	2.28	6	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:103:LEU:O	0.63	1.93	8	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:HD13	0.63	2.28	4	2
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD11	0.63	1.67	7	2
1:A:67:PHE:CD2	1:A:76:LEU:HD11	0.63	2.27	8	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:62:TRP:CZ3	0.63	2.28	6	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HG	0.63	1.93	4	2
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CE2	0.63	2.28	6	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:HB3	0.63	2.29	9	2
1:A:156:PHE:C	1:A:156:PHE:CD1	0.63	2.76	9	1
1:A:169:PHE:CE2	1:A:336:MET:HE1	0.63	2.28	9	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:227:ASN:OD1	0.63	1.94	10	1
1:A:303:ALA:HB3	1:A:307:TYR:CE2	0.63	2.28	1	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:104:ILE:HG23	0.63	2.29	3	2
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HG22	0.63	1.69	4	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:59:ILE:HD11	0.63	1.71	5	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG23	0.63	1.93	7	2
1:A:301:ALA:HB2	1:A:311:LEU:CD1	0.63	2.15	2	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HG3	0.63	1.69	9	4
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG13	0.63	1.93	8	1
1:A:335:GLN:HB3	1:A:368:ILE:HG23	0.63	1.71	8	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:317:ILE:HG21	0.63	1.69	4	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:267:ASN:HA	0.63	1.71	5	1
1:A:307:TYR:CD2	1:A:311:LEU:HD23	0.63	2.29	10	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.63	1.94	3	4
1:A:9:ILE:CG1	1:A:59:ILE:HD12	0.63	2.24	2	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:156:PHE:CD1	0.63	2.29	3	2
1:A:110:VAL:O	1:A:320:THR:HG21	0.63	1.93	7	1
1:A:148:MET:CB	1:A:222:THR:HG21	0.62	2.23	2	5
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.62	1.94	8	8
1:A:186:ALA:O	1:A:189:LYS:HG3	0.62	1.94	2	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:CB	0.62	2.46	3	1
1:A:70:TYR:O	1:A:75:LEU:HG	0.62	1.93	3	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CA	0.62	2.23	10	5
1:A:113:LEU:HD11	1:A:247:LEU:CD1	0.62	2.24	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:ILE:O	1:A:267:ASN:O	0.62	2.17	1	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:224:MET:HE1	0.62	2.30	8	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:265:GLY:O	0.62	1.93	1	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:HB2	0.62	1.94	4	7
1:A:9:ILE:HB	1:A:37:VAL:HG12	0.62	1.70	3	5
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG13	0.62	1.71	4	1
1:A:199:ILE:HG23	1:A:205:ASN:O	0.62	1.93	2	2
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG23	0.62	1.94	2	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HB	0.62	2.25	9	4
1:A:75:LEU:CD1	1:A:268:ALA:HB3	0.62	2.23	5	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:CG2	0.62	2.21	7	1
1:A:259:VAL:HG13	1:A:328:GLU:O	0.62	1.94	10	1
1:A:247:LEU:HD22	1:A:255:SER:OG	0.62	1.94	3	2
1:A:9:ILE:HG12	1:A:37:VAL:HG12	0.62	1.72	6	1
1:A:75:LEU:HD23	1:A:268:ALA:CB	0.62	2.17	8	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:133:PRO:CD	0.62	2.25	8	1
1:A:297:LYS:NZ	1:A:301:ALA:HB3	0.62	2.09	10	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:HG21	0.62	1.72	7	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:43:LEU:HD12	0.62	1.54	8	1
1:A:75:LEU:O	1:A:268:ALA:HB2	0.62	1.93	1	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:123:PRO:HD2	0.62	1.72	4	2
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:CB	0.62	2.24	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:CD	0.61	2.24	4	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:116:ILE:N	0.61	2.10	8	2
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG22	0.61	1.71	2	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.61	1.95	3	2
1:A:317:ILE:HD13	1:A:317:ILE:C	0.61	2.20	6	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CB	0.61	2.24	9	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD13	0.61	1.96	10	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG23	0.61	1.73	1	2
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:CB	0.61	2.49	2	2
1:A:93:THR:CG2	1:A:302:VAL:HG22	0.61	2.24	8	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:206:ALA:HB1	0.61	2.26	10	1
1:A:356:THR:O	1:A:357:VAL:C	0.61	2.39	10	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:CB	0.61	2.47	6	9
1:A:57:PRO:HD2	1:A:269:ALA:HB3	0.61	1.72	4	1
1:A:304:LEU:HD23	1:A:307:TYR:HB2	0.61	1.73	5	1
1:A:190:ALA:HB1	1:A:251:LYS:HE3	0.61	1.73	9	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:248:PRO:HD3	0.61	1.71	10	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:104:ILE:O	0.61	2.48	1	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:206:ALA:CB	0.61	2.22	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:CD1	0.61	2.49	7	3
1:A:9:ILE:O	1:A:37:VAL:HA	0.61	1.96	3	4
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:HB2	0.61	1.96	5	3
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:CB	0.61	2.25	3	1
1:A:335:GLN:OE1	1:A:368:ILE:HG23	0.61	1.95	3	1
1:A:343:VAL:HG13	1:A:347:VAL:CG2	0.61	2.24	3	1
1:A:259:VAL:O	1:A:330:MET:HE2	0.61	1.95	5	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:311:LEU:CD1	0.61	2.26	9	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD23	0.61	2.25	10	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:HG13	0.61	1.96	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:324:ALA:HB1	0.61	1.72	6	1
1:A:121:LEU:O	1:A:223:ALA:CB	0.61	2.49	9	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:H	0.61	2.03	9	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:226:ILE:CD1	0.61	2.26	10	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD12	0.61	2.26	1	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HD12	0.61	1.73	1	2
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD22	0.61	1.96	1	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:CB	0.61	2.49	1	9
1:A:229:PRO:O	1:A:230:TRP:HB3	0.61	1.95	3	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:C	0.61	2.20	5	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:HD22	0.61	1.96	5	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	0.61	1.71	9	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:N	0.61	2.10	10	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:43:LEU:HD12	0.61	1.72	9	2
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:HB2	0.61	1.71	7	2
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:CB	0.61	2.25	6	3
1:A:110:VAL:HG13	1:A:320:THR:HG22	0.61	1.72	6	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:HD1	0.61	1.54	7	1
1:A:108:ILE:CB	1:A:262:LEU:O	0.60	2.49	2	1
1:A:320:THR:O	1:A:324:ALA:HB2	0.60	1.95	3	3
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:CA	0.60	2.25	5	1
1:A:189:LYS:CE	1:A:361:LEU:HD21	0.60	2.26	6	1
1:A:144:LYS:HB2	1:A:221:GLU:O	0.60	1.95	10	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.60	1.74	8	8
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:HD11	0.60	1.73	3	3
1:A:148:MET:SD	1:A:222:THR:HG21	0.60	2.36	5	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:226:ILE:CG2	0.60	2.25	6	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG23	0.60	1.96	2	3
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:CB	0.60	2.49	9	8
1:A:8:VAL:H	1:A:58:ASP:HB2	0.60	1.55	4	5
1:A:110:VAL:HG21	1:A:324:ALA:CB	0.60	2.25	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TRP:CH2	1:A:67:PHE:CE1	0.60	2.88	7	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:224:MET:HB2	0.60	1.73	9	1
1:A:129:TRP:CE2	1:A:224:MET:HE1	0.60	2.31	10	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:261:VAL:CG1	0.60	2.25	1	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.60	1.74	1	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:HG21	0.60	2.26	3	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CB	0.60	2.26	10	2
1:A:103:LEU:HD23	1:A:103:LEU:O	0.60	1.96	9	1
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD12	0.60	1.96	8	2
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CD2	0.60	2.32	6	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:CB	0.60	2.27	9	3
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:O	0.60	1.96	4	7
1:A:85:PHE:CE1	1:A:285:LEU:HD21	0.60	2.30	4	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:347:VAL:HG21	0.60	1.72	4	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CZ2	0.60	2.32	7	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:ASP:OD2	0.60	1.95	10	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD21	0.60	1.71	10	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HB	0.60	1.73	2	4
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:CB	0.60	2.50	3	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:129:TRP:CH2	0.60	2.31	4	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:HB3	0.60	1.73	5	3
1:A:152:GLN:CD	1:A:348:ILE:HD11	0.60	2.21	3	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	0.60	1.97	8	2
1:A:79:ILE:HD12	1:A:105:ALA:HA	0.60	1.73	4	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.60	1.55	9	9
1:A:67:PHE:HZ	1:A:104:ILE:HG23	0.60	1.56	3	2
1:A:8:VAL:C	1:A:9:ILE:HD12	0.60	2.22	4	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:CB	0.59	2.50	5	7
1:A:171:TYR:CA	1:A:175:LYS:O	0.59	2.50	2	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:CG1	0.59	2.85	5	1
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CZ	0.59	2.31	6	1
1:A:132:ILE:CG1	1:A:147:LEU:HD21	0.59	2.27	1	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:99:TYR:CE1	0.59	2.31	2	1
1:A:50:VAL:O	1:A:54:GLY:CA	0.59	2.50	9	1
1:A:226:ILE:HD11	1:A:247:LEU:CD1	0.59	2.27	1	1
1:A:199:ILE:O	1:A:204:MET:HA	0.59	1.97	6	4
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HB2	0.59	1.73	9	1
1:A:357:VAL:CG2	1:A:361:LEU:HD12	0.59	2.28	9	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:HD11	0.59	1.74	5	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD12	0.59	1.74	6	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HB3	0.59	2.27	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ASP:OD2	1:A:59:ILE:HD12	0.59	1.97	6	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:OE1	0.59	1.98	7	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:149:PHE:CE2	0.59	2.33	4	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:HA	0.59	1.72	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:HB3	0.59	1.72	9	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:269:ALA:HB2	0.59	2.28	5	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:HG22	0.59	1.97	10	1
1:A:280:LEU:HD11	1:A:284:LEU:HD22	0.59	1.74	1	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:235:ILE:N	0.59	2.12	2	1
1:A:93:THR:HG21	1:A:303:ALA:HA	0.59	1.73	6	1
1:A:116:ILE:HG23	1:A:225:THR:CG2	0.59	2.23	7	1
1:A:311:LEU:HD12	1:A:311:LEU:C	0.59	2.23	10	1
1:A:138:GLU:O	1:A:141:ALA:HB3	0.59	1.98	5	4
1:A:304:LEU:O	1:A:307:TYR:N	0.59	2.36	10	4
1:A:235:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.59	2.32	4	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:HD22	0.59	2.27	8	1
1:A:161:ILE:CA	1:A:191:GLY:HA3	0.58	2.28	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.58	1.98	3	5
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:HD13	0.58	2.33	4	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HG	0.58	1.73	5	1
1:A:132:ILE:HD13	1:A:198:LEU:HD11	0.58	1.73	1	1
1:A:361:LEU:O	1:A:361:LEU:HD13	0.58	1.98	1	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:HB2	0.58	1.74	2	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:HD11	0.58	1.74	5	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:HG3	0.58	1.74	6	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:261:VAL:HG11	0.58	1.73	8	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG12	0.58	1.98	2	2
1:A:23:VAL:HG13	1:A:283:TYR:CE2	0.58	2.33	6	3
1:A:76:LEU:CB	1:A:104:ILE:HD11	0.58	2.27	7	2
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:CG1	0.58	2.28	9	2
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:CB	0.58	2.28	9	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:HD13	0.58	1.75	1	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG22	0.58	1.98	2	3
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG13	0.58	1.97	10	6
1:A:7:LEU:HG	1:A:59:ILE:HD11	0.58	1.73	9	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:CB	0.58	2.51	1	5
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HG	0.58	1.74	1	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG22	0.58	2.34	2	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	0.58	1.75	7	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:HZ	0.58	1.56	8	1
1:A:298:PRO:O	1:A:299:LEU:HD23	0.58	1.99	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:347:VAL:O	1:A:351:ALA:HB2	0.58	1.99	3	4
1:A:230:TRP:CZ3	1:A:262:LEU:HD11	0.58	2.33	5	1
1:A:217:PHE:HB3	1:A:235:ILE:HD11	0.58	1.73	7	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CD1	0.58	2.34	8	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CB	0.58	2.29	8	1
1:A:12:ASN:HA	1:A:43:LEU:HD13	0.58	1.76	4	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HD13	0.58	1.98	7	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD12	0.58	2.13	4	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG23	0.58	2.29	7	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:HG11	0.58	2.28	8	1
1:A:132:ILE:HG12	1:A:147:LEU:HD21	0.58	1.76	1	1
1:A:159:PRO:O	1:A:163:ALA:CB	0.58	2.52	2	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HG3	0.58	1.76	5	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HG	0.58	1.99	5	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:HD13	0.57	2.14	2	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:CG1	0.57	2.22	8	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD21	0.57	1.75	9	1
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD12	0.57	2.14	10	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:CB	0.57	2.51	5	8
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:CB	0.57	2.52	5	7
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:H	0.57	1.59	2	1
1:A:61:PHE:O	1:A:62:TRP:HE3	0.57	1.82	3	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HG	0.57	1.76	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG2	0.57	2.28	7	1
1:A:267:ASN:O	1:A:269:ALA:N	0.57	2.35	9	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:129:TRP:CH2	0.57	2.34	4	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:O	0.57	1.99	7	4
1:A:231:ALA:HB3	1:A:232:TRP:CE3	0.57	2.35	6	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:N	0.57	2.15	7	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:212:ILE:HG22	0.57	1.75	9	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG12	0.57	1.76	5	5
1:A:94:TRP:HB3	1:A:103:LEU:HD11	0.57	1.76	10	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:223:ALA:HB1	0.57	2.14	2	1
1:A:88:LYS:CG	1:A:304:LEU:HD21	0.57	2.29	3	1
1:A:271:PRO:O	1:A:276:ALA:HB3	0.57	1.98	9	2
1:A:355:GLN:O	1:A:356:THR:HG23	0.57	1.99	8	5
1:A:49:GLN:O	1:A:53:THR:HG23	0.57	1.98	5	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HB2	0.57	1.76	5	3
1:A:330:MET:HE1	1:A:336:MET:HE3	0.57	1.77	7	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HD12	0.57	1.76	1	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:255:SER:OG	0.57	2.00	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:TRP:CZ2	1:A:147:LEU:HD22	0.57	2.34	2	2
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:C	0.57	2.25	1	1
1:A:147:LEU:O	1:A:148:MET:HE2	0.57	2.00	3	1
1:A:184:ASP:CA	1:A:361:LEU:HD22	0.57	2.29	7	1
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:CB	0.57	2.52	1	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:CD	0.57	2.68	4	1
1:A:284:LEU:O	1:A:284:LEU:HD23	0.57	1.99	9	1
1:A:114:SER:C	1:A:226:ILE:HD12	0.57	2.24	1	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB2	0.57	2.00	4	7
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.57	2.30	9	3
1:A:230:TRP:CH2	1:A:262:LEU:HD11	0.57	2.35	5	1
1:A:176:TYR:CE1	1:A:331:PRO:HG2	0.57	2.35	10	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:335:GLN:HB3	0.57	1.74	2	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.57	2.00	9	1
1:A:223:ALA:O	1:A:224:MET:CB	0.56	2.51	10	4
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:HB3	0.56	1.77	4	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HD13	0.56	1.75	10	1
1:A:96:ALA:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.56	2.30	1	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:208:THR:HB	0.56	1.76	1	1
1:A:294:ASN:HB2	1:A:307:TYR:CE1	0.56	2.36	1	1
1:A:299:LEU:HD11	1:A:314:ASP:CG	0.56	2.25	1	1
1:A:159:PRO:HG3	1:A:256:LYS:O	0.56	2.00	2	4
1:A:160:LEU:HD12	1:A:161:ILE:HG23	0.56	1.75	2	1
1:A:136:ASP:HA	1:A:139:LEU:HD11	0.56	1.73	5	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:302:VAL:HG22	0.56	1.75	8	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:261:VAL:CG1	0.56	2.29	8	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:HB1	0.56	1.78	9	1
1:A:57:PRO:O	1:A:58:ASP:HB2	0.56	1.99	3	2
1:A:139:LEU:CB	1:A:145:SER:HA	0.56	2.30	5	1
1:A:222:THR:O	1:A:223:ALA:HB2	0.56	1.99	10	1
1:A:199:ILE:CD1	1:A:206:ALA:HB2	0.56	2.30	1	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD23	0.56	2.25	10	3
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:HG23	0.56	2.35	4	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:146:ALA:HB3	0.56	2.00	4	2
1:A:161:ILE:HD12	1:A:162:ALA:N	0.56	2.15	4	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:103:LEU:HD23	0.56	1.76	6	1
1:A:189:LYS:O	1:A:193:THR:HG23	0.56	2.00	7	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:257:PRO:CB	0.56	2.30	4	1
1:A:330:MET:HE1	1:A:336:MET:HG2	0.56	1.77	4	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD21	0.56	2.35	1	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:264:ALA:HB3	0.56	2.35	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:CG2	0.56	2.53	6	2
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:N	0.56	2.16	6	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:94:TRP:CZ3	0.56	2.89	1	2
1:A:4:GLU:CG	1:A:275:LEU:HD12	0.56	2.31	2	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:161:ILE:C	0.56	2.26	4	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:324:ALA:HA	0.56	1.77	6	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.56	2.31	9	3
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CG	0.56	2.36	9	2
1:A:195:LEU:CD1	1:A:199:ILE:HD11	0.56	2.30	3	1
1:A:280:LEU:HD21	1:A:284:LEU:HD22	0.56	1.77	4	1
1:A:301:ALA:HA	1:A:311:LEU:HD13	0.56	1.78	5	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:58:ASP:HB2	0.56	1.78	7	1
1:A:290:LEU:HD22	1:A:304:LEU:CD2	0.56	2.26	10	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:283:TYR:CE1	0.55	2.36	2	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.55	1.76	2	1
1:A:355:GLN:CB	1:A:360:ALA:HB2	0.55	2.30	2	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG22	0.55	1.76	6	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:CB	0.55	2.84	9	1
1:A:127:LYS:HD2	1:A:128:THR:HG23	0.55	1.76	10	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:OG1	0.55	2.24	1	2
1:A:346:ALA:HA	1:A:349:ASN:HB2	0.55	1.78	2	2
1:A:55:ASP:O	1:A:269:ALA:HB1	0.55	2.01	2	1
1:A:181:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG3	0.55	1.78	2	2
1:A:257:PRO:HD2	1:A:327:GLY:HA2	0.55	1.78	2	3
1:A:70:TYR:HB3	1:A:75:LEU:HD21	0.55	1.77	3	1
1:A:79:ILE:O	1:A:81:PRO:HD3	0.55	2.01	4	4
1:A:108:ILE:CG1	1:A:262:LEU:O	0.55	2.54	2	1
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:HB2	0.55	2.32	8	3
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:HB	0.55	2.01	3	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:265:GLY:O	0.55	2.02	5	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.55	2.69	7	2
1:A:343:VAL:HG22	1:A:361:LEU:CD2	0.55	2.30	8	1
1:A:77:ALA:N	1:A:268:ALA:HA	0.55	2.17	1	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:C	0.55	2.26	6	7
1:A:335:GLN:CB	1:A:368:ILE:HG23	0.55	2.31	8	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.55	1.79	10	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CG1	0.55	2.31	5	8
1:A:104:ILE:O	1:A:105:ALA:CB	0.55	2.54	10	10
1:A:279:PHE:CD1	1:A:279:PHE:C	0.55	2.85	9	4
1:A:115:LEU:HD13	1:A:248:PRO:HD3	0.55	1.79	4	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:CG	0.55	2.32	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LEU:HG	1:A:104:ILE:HD11	0.55	1.77	7	1
1:A:127:LYS:CE	1:A:128:THR:HG23	0.55	2.31	1	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:76:LEU:HD22	0.55	2.36	2	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:223:ALA:HA	0.55	1.78	5	1
1:A:183:VAL:HG11	1:A:368:ILE:CD1	0.55	2.31	6	1
1:A:226:ILE:HG21	1:A:247:LEU:CD1	0.55	2.32	6	1
1:A:209:ASP:OD1	1:A:212:ILE:HD12	0.55	2.02	10	1
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG13	0.55	2.01	10	3
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CD1	0.55	2.54	5	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:O	0.55	2.24	10	1
1:A:194:PHE:CD1	1:A:194:PHE:C	0.55	2.85	9	8
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:CG2	0.55	2.90	3	1
1:A:331:PRO:HG3	1:A:336:MET:HE3	0.55	1.77	3	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:HD22	0.55	1.78	4	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:244:VAL:HG22	0.55	1.78	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG22	0.55	2.02	8	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:C	0.55	2.84	9	1
1:A:355:GLN:C	1:A:360:ALA:HB2	0.55	2.27	10	1
1:A:28:GLU:O	1:A:31:THR:C	0.55	2.50	3	1
1:A:43:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CD1	0.55	2.32	3	1
1:A:114:SER:O	1:A:227:ASN:N	0.55	2.39	3	3
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:CG1	0.55	2.31	4	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HG12	0.55	1.77	5	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:HZ2	0.55	1.61	7	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:154:PRO:O	1:A:155:TYR:C	0.55	2.50	9	8
1:A:290:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HB3	0.55	1.79	1	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG23	0.55	2.32	3	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG23	0.55	2.02	3	2
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HD12	0.55	1.77	9	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG22	0.54	2.17	5	1
1:A:78:GLU:CG	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.29	10	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:206:ALA:HB1	0.54	1.77	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:298:PRO:HD3	0.54	1.77	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:CB	0.54	2.31	7	1
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:CB	0.54	2.42	10	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HB	0.54	2.02	4	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:35:VAL:HG21	0.54	1.78	1	1
1:A:312:ALA:O	1:A:313:LYS:C	0.54	2.50	4	7
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ASP:CB	0.54	2.54	8	5
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:CB	0.54	2.55	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:HD21	1:A:303:ALA:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HB	0.54	1.79	9	2
1:A:23:VAL:HG13	1:A:283:TYR:CZ	0.54	2.38	1	2
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:N	0.54	2.17	4	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.54	2.17	7	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:CD2	0.54	2.32	10	1
1:A:329:ILE:O	1:A:330:MET:C	0.54	2.51	2	4
1:A:9:ILE:HG13	1:A:59:ILE:HD12	0.54	1.80	9	2
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:CG2	0.54	2.52	2	1
1:A:161:ILE:HG21	1:A:192:LEU:HD12	0.54	1.80	5	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG22	0.54	2.21	7	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:H	0.54	1.63	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HA	0.54	1.79	1	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:302:VAL:O	0.54	2.03	9	2
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:CG	0.54	2.33	3	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:149:PHE:CE2	0.54	2.38	3	1
1:A:330:MET:HE1	1:A:336:MET:SD	0.54	2.42	4	1
1:A:53:THR:HG23	1:A:53:THR:O	0.54	2.02	8	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:159:PRO:CG	0.54	2.33	10	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB2	0.54	2.03	1	3
1:A:77:ALA:HB3	1:A:267:ASN:O	0.54	2.03	1	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:HG21	0.54	1.80	2	2
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:HB2	0.54	1.79	6	2
1:A:205:ASN:O	1:A:206:ALA:HB3	0.54	2.02	4	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:HB2	0.54	2.02	5	2
1:A:76:LEU:CD1	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.32	1	1
1:A:76:LEU:C	1:A:268:ALA:HA	0.54	2.28	1	1
1:A:132:ILE:CD1	1:A:147:LEU:HD21	0.54	2.31	1	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:262:LEU:O	0.54	2.02	7	2
1:A:76:LEU:CG	1:A:104:ILE:HD12	0.54	2.32	5	1
1:A:160:LEU:CD1	1:A:161:ILE:HG23	0.53	2.33	2	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:324:ALA:CA	0.53	2.32	2	1
1:A:60:ILE:O	1:A:265:GLY:N	0.53	2.38	4	2
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG12	0.53	2.01	7	2
1:A:90:TYR:HB2	1:A:94:TRP:CZ3	0.53	2.38	3	2
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:N	0.53	2.17	2	1
1:A:7:LEU:HG	1:A:9:ILE:HD11	0.53	1.80	3	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:CD2	0.53	2.31	5	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:HG3	0.53	2.03	6	2
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CZ	0.53	2.38	8	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:75:LEU:HD12	0.53	2.37	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD22	0.53	2.38	9	1
1:A:227:ASN:HB3	1:A:235:ILE:HD12	0.53	1.81	8	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:279:PHE:CD1	0.53	2.96	10	2
1:A:64:HIS:CD2	1:A:67:PHE:CD1	0.53	2.96	9	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:CA	0.53	2.86	10	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:59:ILE:O	0.53	2.03	1	1
1:A:57:PRO:O	1:A:58:ASP:CB	0.53	2.56	3	3
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD2	0.53	2.19	8	4
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.53	2.04	3	1
1:A:249:THR:O	1:A:250:PHE:CG	0.53	2.61	3	7
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HB2	0.53	2.39	5	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD13	0.53	1.80	5	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:CG	0.53	2.33	6	1
1:A:77:ALA:C	1:A:104:ILE:HD11	0.53	2.29	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:CD	0.53	2.85	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:O	0.53	2.03	9	1
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CZ	0.53	2.97	9	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:43:LEU:HD11	0.53	2.34	2	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:97:VAL:O	0.53	2.04	4	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:259:VAL:CG1	0.53	2.33	6	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:223:ALA:HB1	0.53	2.34	9	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:CA	0.53	2.33	9	1
1:A:228:GLY:O	1:A:230:TRP:N	0.53	2.41	3	2
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB3	0.53	1.78	2	1
1:A:43:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HD11	0.53	1.81	3	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:145:SER:HA	0.53	2.34	5	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:N	0.53	2.18	7	1
1:A:48:PRO:HA	1:A:75:LEU:HD11	0.53	1.80	9	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:CB	0.53	2.34	9	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:HB2	0.53	1.79	1	1
1:A:312:ALA:O	1:A:318:ALA:HB2	0.53	2.03	3	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:CG2	0.53	2.33	4	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CD1	0.53	2.56	6	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CG	0.53	2.57	6	1
1:A:177:ASP:C	1:A:178:ILE:HG22	0.53	2.28	8	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HD12	0.53	2.03	1	1
1:A:191:GLY:O	1:A:194:PHE:CD2	0.53	2.62	9	5
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:CD	0.53	2.34	2	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:HB2	0.53	2.04	3	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB3	0.53	2.04	5	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HD2	0.53	2.04	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:269:ALA:O	1:A:270:SER:CB	0.53	2.57	3	2
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:CA	0.53	2.33	5	1
1:A:169:PHE:CD2	1:A:181:VAL:HG12	0.53	2.39	6	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.53	2.04	10	2
1:A:70:TYR:HA	1:A:74:GLY:HA3	0.53	1.81	1	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:HD3	0.53	1.78	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CG	0.53	2.30	2	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:97:VAL:O	0.53	2.04	2	2
1:A:85:PHE:HE1	1:A:285:LEU:HD21	0.53	1.63	4	1
1:A:129:TRP:HH2	1:A:224:MET:HE1	0.53	1.62	4	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CE1	0.53	2.38	6	1
1:A:56:GLY:O	1:A:57:PRO:O	0.53	2.27	8	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:CG2	0.52	2.34	3	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:321:MET:HE1	0.52	2.40	4	1
1:A:11:ILE:N	1:A:11:ILE:HD12	0.52	2.19	5	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:N	0.52	2.42	7	3
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD12	0.52	2.39	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CD2	0.52	2.39	7	1
1:A:181:VAL:HG11	1:A:339:PHE:CE1	0.52	2.38	9	1
1:A:271:PRO:O	1:A:272:ASN:C	0.52	2.52	1	2
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:61:PHE:O	0.52	2.62	2	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:C	0.52	2.28	4	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:11:ILE:HD11	0.52	1.82	5	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:261:VAL:HG21	0.52	2.34	5	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:CZ	0.52	2.97	7	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:CG	0.52	2.58	7	2
1:A:64:HIS:CG	1:A:97:VAL:HG13	0.52	2.39	8	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB2	0.52	2.04	4	3
1:A:96:ALA:HB3	1:A:261:VAL:HG11	0.52	1.81	1	1
1:A:168:ALA:HA	1:A:183:VAL:HG13	0.52	1.82	1	1
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:HB3	0.52	2.03	1	1
1:A:122:LEU:C	1:A:122:LEU:HD12	0.52	2.29	2	2
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:HB3	0.52	2.04	3	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:HB	0.52	2.33	6	4
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.52	2.03	8	1
1:A:99:TYR:O	1:A:101:GLY:N	0.52	2.43	2	6
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:CB	0.52	2.57	10	5
1:A:162:ALA:O	1:A:164:ASP:N	0.52	2.42	2	1
1:A:229:PRO:O	1:A:230:TRP:CB	0.52	2.57	3	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:259:VAL:O	0.52	2.02	3	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:303:ALA:HB1	0.52	1.80	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:HD23	1:A:247:LEU:HD11	0.52	1.80	5	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.52	2.39	5	2
1:A:136:ASP:CA	1:A:139:LEU:HG	0.52	2.34	5	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD23	0.52	2.39	7	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:317:ILE:N	0.52	2.18	7	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HG12	0.52	1.81	8	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:HB3	0.52	1.80	2	2
1:A:106:TYR:O	1:A:264:ALA:N	0.52	2.42	6	4
1:A:47:PHE:CD1	1:A:47:PHE:C	0.52	2.87	4	2
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.52	2.38	5	1
1:A:40:PRO:O	1:A:41:ASP:CB	0.52	2.56	5	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:C	0.52	2.29	8	1
1:A:97:VAL:HB	1:A:105:ALA:HB3	0.52	1.80	10	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG23	0.52	1.82	10	1
1:A:149:PHE:C	1:A:150:ASN:O	0.52	2.51	9	3
1:A:314:ASP:HB2	1:A:317:ILE:HG22	0.52	1.80	6	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HA	0.52	2.04	1	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:HD22	0.52	1.81	2	1
1:A:149:PHE:O	1:A:150:ASN:C	0.52	2.53	10	7
1:A:304:LEU:O	1:A:305:LYS:C	0.52	2.53	10	3
1:A:39:HIS:CG	1:A:39:HIS:O	0.52	2.62	4	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:CB	0.52	2.34	5	2
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.52	2.32	6	1
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:HD12	0.52	2.30	2	1
1:A:79:ILE:HD11	1:A:105:ALA:N	0.52	2.20	5	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:247:LEU:HD11	0.52	2.35	5	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:C	0.52	2.52	9	1
1:A:64:HIS:O	1:A:68:GLY:N	0.52	2.43	3	7
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:CB	0.52	2.92	2	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CE2	0.52	2.39	3	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:198:LEU:CD2	0.52	2.35	6	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:H	0.52	1.65	9	1
1:A:348:ILE:O	1:A:352:SER:N	0.52	2.43	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:44:GLU:N	0.52	2.43	3	5
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HB	0.52	2.05	1	5
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:HG23	0.52	2.35	3	1
1:A:57:PRO:CD	1:A:269:ALA:HB3	0.52	2.35	4	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:CD	0.52	2.35	4	2
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:HD13	0.52	2.05	5	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HD21	0.52	2.05	5	1
1:A:335:GLN:HG3	1:A:368:ILE:HG23	0.52	1.81	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ALA:HA	1:A:329:ILE:HD12	0.52	1.81	7	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:47:PHE:CD1	0.52	2.98	8	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CD1	0.51	2.35	7	6
1:A:163:ALA:O	1:A:253:GLN:CB	0.51	2.58	7	3
1:A:302:VAL:O	1:A:303:ALA:HB2	0.51	2.05	10	2
1:A:178:ILE:O	1:A:181:VAL:HG13	0.51	2.05	3	1
1:A:105:ALA:CB	1:A:264:ALA:O	0.51	2.58	4	2
1:A:359:GLU:HA	1:A:362:LYS:HG2	0.51	1.81	5	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:327:GLY:HA3	0.51	1.82	6	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:CB	0.51	2.88	9	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD12	0.51	2.35	9	1
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD23	0.51	2.05	1	2
1:A:161:ILE:HG22	1:A:188:ALA:HA	0.51	1.82	1	2
1:A:10:TRP:HD1	1:A:60:ILE:HG22	0.51	1.65	2	1
1:A:343:VAL:CG1	1:A:347:VAL:HG21	0.51	2.29	3	1
1:A:63:ALA:HA	1:A:261:VAL:O	0.51	2.05	4	4
1:A:27:PHE:CZ	1:A:283:TYR:CD1	0.51	2.98	6	1
1:A:155:TYR:O	1:A:258:PHE:CD1	0.51	2.63	6	1
1:A:284:LEU:HD13	1:A:284:LEU:O	0.51	2.05	10	1
1:A:209:ASP:OD2	1:A:212:ILE:HD12	0.51	2.05	2	3
1:A:47:PHE:CG	1:A:60:ILE:HD12	0.51	2.41	3	1
1:A:147:LEU:C	1:A:222:THR:HG21	0.51	2.31	4	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HB	0.51	1.82	6	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:CA	0.51	2.58	6	1
1:A:170:LYS:CB	1:A:180:ASP:O	0.51	2.58	6	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:43:LEU:HD21	0.51	1.81	1	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.51	2.35	1	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:339:PHE:CZ	0.51	2.40	1	1
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:CB	0.51	2.58	6	3
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD3	0.51	2.20	4	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:294:ASN:N	0.51	2.20	4	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:146:ALA:N	0.51	2.20	5	1
1:A:298:PRO:O	1:A:299:LEU:CB	0.51	2.58	6	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:CB	0.51	2.35	7	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CE2	0.51	2.41	9	1
1:A:77:ALA:CA	1:A:267:ASN:O	0.51	2.59	1	1
1:A:330:MET:O	1:A:331:PRO:O	0.51	2.29	1	1
1:A:48:PRO:CB	1:A:75:LEU:HD12	0.51	2.35	2	1
1:A:330:MET:HE3	1:A:336:MET:CE	0.51	2.36	2	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:N	0.51	2.44	3	1
1:A:64:HIS:N	1:A:261:VAL:O	0.51	2.43	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:PHE:CD1	1:A:217:PHE:C	0.51	2.88	6	1
1:A:85:PHE:O	1:A:89:LEU:HD12	0.51	2.05	9	2
1:A:127:LYS:HE2	1:A:128:THR:HG23	0.51	1.82	1	1
1:A:69:GLY:O	1:A:70:TYR:C	0.51	2.53	5	2
1:A:262:LEU:HD12	1:A:299:LEU:HD13	0.51	1.82	4	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:206:ALA:HB1	0.51	2.34	10	2
1:A:70:TYR:O	1:A:74:GLY:N	0.51	2.43	6	2
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:HA2	0.51	2.36	5	3
1:A:132:ILE:CG1	1:A:133:PRO:HD3	0.51	2.36	6	2
1:A:297:LYS:HG2	1:A:299:LEU:HD21	0.51	1.83	8	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HD12	0.51	1.81	10	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:HG22	0.51	1.82	1	2
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:CB	0.51	2.58	3	4
1:A:158:TRP:CH2	1:A:343:VAL:HG22	0.51	2.41	2	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:HD2	0.51	2.18	4	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CE1	0.51	2.39	6	1
1:A:368:ILE:HD12	1:A:369:THR:HG23	0.51	1.82	7	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:226:ILE:HG22	0.51	1.83	10	1
1:A:5:GLY:HA2	1:A:32:GLY:O	0.51	2.06	10	2
1:A:27:PHE:CZ	1:A:283:TYR:CE1	0.51	2.98	5	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:CA	0.51	2.34	7	1
1:A:108:ILE:HA	1:A:303:ALA:HB2	0.51	1.82	10	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:91:PRO:HD3	0.51	2.40	3	1
1:A:67:PHE:HA	1:A:76:LEU:HD22	0.51	1.83	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:266:ILE:CD1	0.51	2.49	5	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:CB	0.51	2.36	6	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CD	0.51	2.36	6	2
1:A:249:THR:C	1:A:250:PHE:CD1	0.51	2.88	7	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:232:TRP:CZ2	0.51	2.99	8	1
1:A:339:PHE:CE1	1:A:343:VAL:CG2	0.51	2.94	8	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.51	2.05	9	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:N	0.51	2.68	9	1
1:A:93:THR:CG2	1:A:302:VAL:HG11	0.50	2.36	1	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:147:LEU:HD21	0.50	1.83	1	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:262:LEU:C	0.50	2.31	2	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CE3	0.50	2.56	3	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:CB	0.50	2.59	9	3
1:A:297:LYS:CG	1:A:299:LEU:HD21	0.50	2.36	8	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:331:PRO:CG	0.50	2.94	1	1
1:A:342:ALA:C	1:A:361:LEU:HD23	0.50	2.31	1	1
1:A:339:PHE:CD2	1:A:368:ILE:HD13	0.50	2.42	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:HB3	0.50	1.82	5	1
1:A:330:MET:CE	1:A:336:MET:HE3	0.50	2.36	7	1
1:A:169:PHE:HB2	1:A:176:TYR:HB3	0.50	1.82	7	3
1:A:110:VAL:HG22	1:A:259:VAL:HG13	0.50	1.81	6	1
1:A:47:PHE:CG	1:A:60:ILE:HG12	0.50	2.42	1	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CD1	0.50	2.41	1	1
1:A:33:ILE:HD13	1:A:34:LYS:N	0.50	2.21	3	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CZ2	0.50	2.42	6	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:311:LEU:HD11	0.50	1.83	9	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HB2	0.50	2.07	10	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HA	0.50	1.83	1	2
1:A:75:LEU:CA	1:A:268:ALA:HB2	0.50	2.37	1	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:94:TRP:CZ2	0.50	3.00	2	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB2	0.50	2.06	6	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:279:PHE:CE2	0.50	2.99	7	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD13	0.50	1.83	3	1
1:A:280:LEU:O	1:A:284:LEU:CB	0.50	2.59	4	3
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CE1	0.50	2.99	4	1
1:A:262:LEU:N	1:A:262:LEU:HD22	0.50	2.22	5	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:TRP:CD1	0.50	2.41	1	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:302:VAL:CG1	0.50	2.01	2	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD22	0.50	1.82	5	2
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:N	0.50	2.43	5	6
1:A:195:LEU:HD12	1:A:199:ILE:HD11	0.50	1.83	3	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:HG12	0.50	2.37	7	2
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD3	0.50	1.82	6	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:76:LEU:CD1	0.50	2.94	9	2
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:CG1	0.50	2.90	8	1
1:A:105:ALA:HB2	1:A:265:GLY:CA	0.50	2.37	8	1
1:A:261:VAL:O	1:A:261:VAL:HG22	0.50	2.06	10	1
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:CB	0.50	2.59	5	4
1:A:235:ILE:HG21	1:A:238:SER:CB	0.50	2.37	3	1
1:A:330:MET:HE1	1:A:336:MET:CG	0.50	2.36	4	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:207:ASP:HA	0.50	1.84	7	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:176:TYR:CD2	0.50	2.41	10	1
1:A:151:LEU:CB	1:A:208:THR:O	0.50	2.60	8	6
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:OG1	0.50	2.30	10	6
1:A:96:ALA:HB1	1:A:261:VAL:HB	0.50	1.83	2	1
1:A:48:PRO:CG	1:A:75:LEU:HD22	0.50	2.36	3	1
1:A:76:LEU:O	1:A:104:ILE:HD11	0.50	2.07	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:226:ILE:HG13	0.50	1.84	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CZ	0.50	2.42	6	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CE2	0.50	2.42	6	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:HD2	0.49	2.06	9	5
1:A:131:GLU:HB3	1:A:135:LEU:HD12	0.49	1.83	1	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:67:PHE:HB3	0.49	1.83	9	2
1:A:235:ILE:O	1:A:237:THR:N	0.49	2.44	2	2
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:CB	0.49	2.60	5	6
1:A:7:LEU:HD13	1:A:33:ILE:CG2	0.49	2.37	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.49	2.36	8	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB2	0.49	1.83	9	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:HB3	0.49	1.85	5	4
1:A:280:LEU:HD13	1:A:280:LEU:O	0.49	2.07	1	1
1:A:181:VAL:HG23	1:A:181:VAL:O	0.49	2.07	2	2
1:A:24:GLY:CA	1:A:33:ILE:HG21	0.49	2.37	4	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:CD1	0.49	2.95	4	2
1:A:111:GLU:O	1:A:324:ALA:HB2	0.49	2.08	5	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.49	2.80	8	3
1:A:117:TYR:CZ	1:A:243:GLY:HA3	0.49	2.42	8	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:329:ILE:HA	0.49	2.38	10	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:O	0.49	2.08	1	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HB	0.49	2.43	3	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.49	2.41	5	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE1	0.49	3.00	8	2
1:A:47:PHE:CE2	1:A:60:ILE:CG2	0.49	2.95	5	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:O	0.49	2.06	6	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:235:ILE:HD11	0.49	1.82	8	1
1:A:170:LYS:CE	1:A:172:GLU:CG	0.49	2.90	8	1
1:A:280:LEU:CD1	1:A:284:LEU:HD22	0.49	2.37	1	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CD2	0.49	2.43	2	1
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CG	0.49	2.95	9	5
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:HD22	0.49	2.32	5	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:CG	0.49	2.96	6	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:105:ALA:O	0.49	2.07	9	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:CG2	0.49	2.96	2	1
1:A:7:LEU:N	1:A:33:ILE:HD11	0.49	2.23	3	1
1:A:170:LYS:N	1:A:180:ASP:O	0.49	2.45	6	2
1:A:7:LEU:CD1	1:A:35:VAL:HG22	0.49	2.38	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:266:ILE:HD12	0.49	1.84	4	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:106:TYR:CZ	0.49	2.42	4	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:280:LEU:C	0.49	2.33	4	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:254:PRO:O	0.49	2.07	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:OG1	0.49	2.30	6	2
1:A:106:TYR:OH	1:A:280:LEU:HD13	0.49	2.07	5	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:63:ALA:O	0.49	2.65	6	2
1:A:155:TYR:C	1:A:258:PHE:CE1	0.49	2.90	6	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:C	0.49	2.33	8	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.49	2.32	8	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:104:ILE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HB3	0.49	2.38	9	2
1:A:27:PHE:CG	1:A:279:PHE:CE2	0.49	3.00	7	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:C	0.49	2.33	8	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:CD	0.49	2.75	9	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:60:ILE:HG12	0.49	2.42	1	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:256:LYS:N	0.49	2.76	2	1
1:A:307:TYR:OH	1:A:311:LEU:HD12	0.49	2.06	2	2
1:A:330:MET:HE3	1:A:336:MET:HE1	0.49	1.84	2	1
1:A:123:PRO:O	1:A:125:PRO:HD3	0.49	2.08	3	3
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:CG	0.49	2.38	3	1
1:A:23:VAL:CG2	1:A:283:TYR:CD2	0.49	2.95	5	1
1:A:39:HIS:CB	1:A:40:PRO:CD	0.49	2.91	5	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CG	0.49	2.91	5	1
1:A:279:PHE:CD1	1:A:280:LEU:N	0.49	2.81	10	2
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.49	1.83	3	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:CD1	0.49	2.96	6	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:CG2	0.49	2.58	8	1
1:A:307:TYR:CE2	1:A:311:LEU:HD12	0.49	2.43	8	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HG13	0.49	1.85	1	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:11:ILE:N	0.49	2.23	2	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:11:ILE:HG13	0.49	1.85	3	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:279:PHE:CE2	0.49	2.43	8	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD23	0.49	2.08	10	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:297:LYS:HD2	0.48	1.83	1	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:CB	0.48	2.60	5	4
1:A:116:ILE:HD13	1:A:116:ILE:C	0.48	2.32	4	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CG2	0.48	2.95	4	1
1:A:171:TYR:CD2	1:A:176:TYR:CE1	0.48	3.01	4	1
1:A:340:TRP:CD1	1:A:341:TYR:N	0.48	2.81	5	1
1:A:169:PHE:HA	1:A:181:VAL:HA	0.48	1.84	6	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:CB	0.48	2.61	5	3
1:A:199:ILE:HD12	1:A:206:ALA:HB2	0.48	1.84	1	1
1:A:333:ILE:HD13	1:A:335:GLN:HB2	0.48	1.83	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:PRO:CA	1:A:75:LEU:HD13	0.48	2.26	5	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:279:PHE:CD2	0.48	3.00	8	1
1:A:42:LYS:O	1:A:43:LEU:C	0.48	2.56	9	7
1:A:10:TRP:HB2	1:A:43:LEU:HD11	0.48	1.85	2	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB3	0.48	2.07	3	1
1:A:217:PHE:CD2	1:A:222:THR:HG21	0.48	2.43	10	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:CA	0.48	2.38	1	2
1:A:57:PRO:CD	1:A:269:ALA:CB	0.48	2.91	4	1
1:A:184:ASP:CB	1:A:361:LEU:HB2	0.48	2.38	4	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:156:PHE:CE1	0.48	2.43	5	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD13	0.48	1.84	6	1
1:A:7:LEU:O	1:A:35:VAL:HA	0.48	2.09	1	3
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG12	0.48	2.08	1	2
1:A:10:TRP:CD1	1:A:60:ILE:HA	0.48	2.44	2	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:149:PHE:HE2	0.48	1.69	3	1
1:A:330:MET:N	1:A:331:PRO:HD2	0.48	2.24	5	1
1:A:230:TRP:CD1	1:A:230:TRP:C	0.48	2.92	6	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:O	0.48	2.08	7	2
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:N	0.48	2.22	7	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:CB	0.48	2.91	8	1
1:A:347:VAL:CG2	1:A:361:LEU:HD11	0.48	2.38	9	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:HB3	0.48	2.38	2	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:76:LEU:HD13	0.48	2.44	2	1
1:A:48:PRO:HB3	1:A:75:LEU:HD23	0.48	1.86	4	1
1:A:279:PHE:CG	1:A:280:LEU:N	0.48	2.82	4	3
1:A:47:PHE:CE1	1:A:267:ASN:ND2	0.48	2.81	5	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:CD2	0.48	2.62	5	1
1:A:237:THR:HG23	1:A:237:THR:O	0.48	2.08	6	1
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:67:PHE:CD1	0.48	3.01	7	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:47:PHE:CG	0.48	3.01	8	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD23	0.48	2.08	8	1
1:A:94:TRP:N	1:A:94:TRP:CE3	0.48	2.82	1	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HB2	0.48	2.36	1	1
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:HB2	0.48	2.09	4	2
1:A:231:ALA:CB	1:A:232:TRP:CE3	0.48	2.97	6	1
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:CG2	0.48	2.61	7	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:35:VAL:CG2	0.48	2.39	1	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:279:PHE:CE1	0.48	2.97	2	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:198:LEU:CD1	0.48	2.39	8	1
1:A:176:TYR:CD1	1:A:176:TYR:C	0.48	2.90	8	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.48	2.09	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:HG22	1:A:107:PRO:CG	0.48	2.39	10	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:139:LEU:HG	0.48	1.85	10	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:O	0.48	2.08	10	1
1:A:62:TRP:O	1:A:63:ALA:C	0.48	2.57	8	5
1:A:85:PHE:CE2	1:A:94:TRP:CH2	0.48	3.02	10	2
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD2	0.48	2.09	6	2
1:A:178:ILE:HG22	1:A:335:GLN:HG2	0.48	1.85	5	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HD12	0.48	2.44	9	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:60:ILE:CD1	0.48	2.35	10	1
1:A:330:MET:HE2	1:A:336:MET:HE1	0.48	1.86	10	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:307:TYR:HB2	0.48	1.85	1	1
1:A:168:ALA:CA	1:A:183:VAL:HG22	0.48	2.39	2	1
1:A:69:GLY:O	1:A:73:SER:CB	0.48	2.61	3	1
1:A:194:PHE:CD1	1:A:195:LEU:N	0.48	2.82	5	3
1:A:338:ALA:HB1	1:A:368:ILE:HD11	0.48	1.85	5	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.48	2.77	4	1
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:O	0.48	2.62	4	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:H	0.48	1.69	10	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:311:LEU:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB3	0.48	2.08	6	1
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:HB3	0.48	2.09	10	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:262:LEU:O	0.47	2.09	2	1
1:A:259:VAL:HG13	1:A:327:GLY:HA3	0.47	1.85	3	1
1:A:10:TRP:N	1:A:10:TRP:CD1	0.47	2.82	8	2
1:A:114:SER:C	1:A:226:ILE:CD1	0.47	2.88	1	1
1:A:156:PHE:CA	1:A:159:PRO:HG2	0.47	2.39	4	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:67:PHE:CE1	0.47	2.43	4	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:248:PRO:HD3	0.47	1.85	4	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:CD1	0.47	2.38	5	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.39	7	1
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:CA	0.47	2.39	8	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:OG	0.47	2.09	9	2
1:A:113:LEU:HD22	1:A:159:PRO:HG2	0.47	1.85	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:99:TYR:CD1	0.47	2.97	2	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:50:VAL:HG11	0.47	2.44	3	1
1:A:65:ASP:HB3	1:A:330:MET:CG	0.47	2.38	3	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD2	0.47	1.85	4	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HB3	0.47	1.87	9	2
1:A:290:LEU:HD12	1:A:307:TYR:CG	0.47	2.44	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:VAL:O	1:A:58:ASP:HB2	0.47	2.09	7	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:147:LEU:HD21	0.47	1.85	9	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG22	0.47	2.40	1	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.47	1.85	1	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:N	0.47	2.72	1	2
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:67:PHE:HB2	0.47	2.45	2	1
1:A:176:TYR:O	1:A:178:ILE:N	0.47	2.48	2	1
1:A:159:PRO:O	1:A:162:ALA:HB3	0.47	2.08	8	5
1:A:7:LEU:HD22	1:A:9:ILE:CD1	0.47	2.32	4	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:124:ASN:CG	0.47	2.93	10	2
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:CG1	0.47	2.62	6	2
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:HB3	0.47	1.86	4	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:283:TYR:CD2	0.47	2.44	5	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:67:PHE:CE1	0.47	3.03	7	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:O	0.47	2.31	9	2
1:A:97:VAL:CB	1:A:105:ALA:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:109:ALA:HA	1:A:301:ALA:HA	0.47	1.85	10	2
1:A:283:TYR:O	1:A:284:LEU:C	0.47	2.56	3	7
1:A:10:TRP:CD1	1:A:60:ILE:HG22	0.47	2.43	2	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HB	0.47	1.85	4	4
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.47	2.09	3	3
1:A:249:THR:O	1:A:250:PHE:CD2	0.47	2.67	10	3
1:A:293:VAL:C	1:A:298:PRO:HD3	0.47	2.34	4	1
1:A:125:PRO:HG3	1:A:224:MET:HE3	0.47	1.86	8	1
1:A:357:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD12	0.47	1.86	8	2
1:A:342:ALA:HB1	1:A:361:LEU:CD2	0.47	2.39	1	1
1:A:38:GLU:C	1:A:40:PRO:HD3	0.47	2.35	2	2
1:A:199:ILE:O	1:A:204:MET:N	0.47	2.47	5	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:106:TYR:OH	0.47	2.08	6	1
1:A:107:PRO:HB2	1:A:261:VAL:HG12	0.47	1.86	7	1
1:A:169:PHE:N	1:A:169:PHE:CD1	0.47	2.83	1	1
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:HD12	0.47	2.24	1	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:302:VAL:O	0.47	2.09	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:O	0.47	2.09	2	1
1:A:158:TRP:CZ3	1:A:161:ILE:HD11	0.47	2.45	2	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:250:PHE:CE2	0.47	2.45	2	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:ALA:N	0.47	2.25	3	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:91:PRO:CD	0.47	2.97	3	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:105:ALA:HB3	0.47	1.85	3	1
1:A:249:THR:C	1:A:250:PHE:CG	0.47	2.92	7	3
1:A:247:LEU:HD23	1:A:255:SER:OG	0.47	2.10	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:VAL:HB	1:A:329:ILE:HG22	0.47	1.84	4	1
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:HB	0.47	2.10	5	1
1:A:99:TYR:N	1:A:102:LYS:O	0.47	2.38	8	1
1:A:176:TYR:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.47	2.44	9	1
1:A:164:ASP:HB2	1:A:187:GLY:CA	0.47	2.40	10	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:265:GLY:O	0.47	2.63	8	2
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:263:SER:O	0.47	2.68	2	1
1:A:295:LYS:O	1:A:296:ASP:CB	0.47	2.62	4	1
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ASP:HB2	0.47	2.10	5	2
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CE2	0.47	2.83	7	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:320:THR:OG1	0.47	2.10	9	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:222:THR:O	1:A:223:ALA:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:CB	0.47	2.63	9	5
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:PRO:HG3	0.47	1.85	3	1
1:A:293:VAL:HA	1:A:297:LYS:HB2	0.47	1.85	4	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:HD12	0.47	1.87	5	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:CB	0.47	2.63	4	3
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:HG22	0.47	2.10	1	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:37:VAL:HG11	0.47	1.87	3	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.93	3	2
1:A:111:GLU:HB2	1:A:260:GLY:HA3	0.47	1.87	4	1
1:A:356:THR:O	1:A:359:GLU:N	0.47	2.48	4	1
1:A:59:ILE:HG13	1:A:266:ILE:HA	0.47	1.87	7	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:HG23	0.47	2.44	7	1
1:A:176:TYR:CE1	1:A:177:ASP:O	0.47	2.68	7	2
1:A:148:MET:HG3	1:A:222:THR:HG21	0.47	1.85	8	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB2	0.46	1.86	2	1
1:A:37:VAL:HG23	1:A:37:VAL:O	0.46	2.10	6	2
1:A:47:PHE:O	1:A:50:VAL:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:N	0.46	2.25	9	2
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:HB3	0.46	2.09	4	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:347:VAL:CG2	0.46	2.40	4	1
1:A:356:THR:O	1:A:360:ALA:N	0.46	2.48	4	2
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG12	0.46	2.10	5	2
1:A:190:ALA:O	1:A:193:THR:OG1	0.46	2.33	7	1
1:A:66:ARG:HB3	1:A:70:TYR:CZ	0.46	2.44	8	1
1:A:86:GLN:O	1:A:94:TRP:CD1	0.46	2.68	10	2
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HB3	0.46	1.86	8	1
1:A:27:PHE:HB2	1:A:33:ILE:CB	0.46	2.40	10	2
1:A:7:LEU:HD13	1:A:35:VAL:HG22	0.46	1.86	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TRP:CD1	1:A:63:ALA:N	0.46	2.83	1	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:261:VAL:HB	0.46	2.40	1	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HB2	0.46	2.10	1	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:233:SER:CB	0.46	2.98	2	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG13	0.46	1.87	3	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:94:TRP:CD1	0.46	2.45	3	1
1:A:262:LEU:HG	1:A:299:LEU:HD22	0.46	1.87	4	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:10:TRP:C	0.46	2.93	5	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:188:ALA:HA	0.46	1.86	9	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:CE2	0.46	2.98	1	1
1:A:294:ASN:HA	1:A:297:LYS:HB2	0.46	1.87	3	3
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CE1	0.46	2.98	2	2
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB2	0.46	2.43	10	3
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HG22	0.46	2.44	4	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:VAL:HG12	0.46	2.39	6	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CD1	0.46	2.98	9	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:CG2	0.46	2.98	1	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:361:LEU:C	0.46	2.35	1	1
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:HD22	0.46	2.24	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:61:PHE:CD1	0.46	2.99	3	2
1:A:75:LEU:O	1:A:75:LEU:CD1	0.46	2.61	3	1
1:A:126:PRO:HD2	1:A:146:ALA:CB	0.46	2.37	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CB	0.46	2.38	5	1
1:A:131:GLU:C	1:A:133:PRO:HD2	0.46	2.35	7	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:324:ALA:CB	0.46	2.40	8	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.46	1.83	9	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD11	0.46	2.46	9	1
1:A:161:ILE:O	1:A:188:ALA:HA	0.46	2.11	9	1
1:A:55:ASP:O	1:A:269:ALA:HB2	0.46	2.10	10	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:C	0.46	2.36	1	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:62:TRP:C	0.46	2.93	1	2
1:A:232:TRP:CD1	1:A:232:TRP:N	0.46	2.84	1	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG13	0.46	1.87	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:CB	0.46	2.64	6	2
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG12	0.46	2.10	10	2
1:A:290:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:147:LEU:HD22	0.46	2.46	10	2
1:A:307:TYR:O	1:A:307:TYR:CD1	0.46	2.69	2	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:35:VAL:HG11	0.46	1.88	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG12	0.46	2.11	4	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:CB	0.46	2.98	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:CD1	0.46	2.99	7	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:263:SER:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:280:LEU:HD21	0.46	2.45	8	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:336:MET:N	0.46	2.25	10	1
1:A:155:TYR:C	1:A:159:PRO:HD3	0.46	2.33	3	3
1:A:280:LEU:HD22	1:A:284:LEU:HD13	0.46	1.87	1	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:C	0.46	2.35	4	2
1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CD1	0.46	2.84	5	1
1:A:168:ALA:O	1:A:183:VAL:CG1	0.46	2.63	5	1
1:A:194:PHE:CE2	1:A:250:PHE:CD1	0.46	3.04	5	1
1:A:48:PRO:HG3	1:A:70:TYR:CZ	0.46	2.45	10	2
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:70:TYR:CD2	0.46	3.03	7	2
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG1	0.46	2.41	7	1
1:A:152:GLN:OE1	1:A:348:ILE:HD11	0.46	2.11	9	1
1:A:129:TRP:CZ2	1:A:147:LEU:CD2	0.46	2.99	8	2
1:A:209:ASP:O	1:A:213:ALA:CB	0.46	2.64	2	4
1:A:333:ILE:HG22	1:A:334:PRO:HD2	0.46	1.88	5	1
1:A:77:ALA:O	1:A:79:ILE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:94:TRP:CE3	0.46	2.95	6	1
1:A:8:VAL:N	1:A:58:ASP:CG	0.46	2.72	7	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:75:LEU:HD22	0.46	1.86	8	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:226:ILE:O	0.46	2.69	8	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:CG2	0.46	2.64	10	1
1:A:108:ILE:HG23	1:A:303:ALA:HB2	0.46	1.87	1	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:232:TRP:CD1	0.46	2.46	1	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:CG1	0.46	2.91	5	1
1:A:335:GLN:CG	1:A:368:ILE:CG2	0.46	2.94	5	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CB	0.46	2.41	6	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:232:TRP:CZ2	0.46	2.99	6	1
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:CB	0.46	2.40	8	1
1:A:62:TRP:CG	1:A:63:ALA:N	0.46	2.84	8	1
1:A:155:TYR:CZ	1:A:340:TRP:CH2	0.46	3.04	8	1
1:A:339:PHE:CE2	1:A:368:ILE:CD1	0.46	2.99	10	1
1:A:45:GLU:C	1:A:48:PRO:HD2	0.46	2.35	6	4
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:CB	0.46	2.63	1	3
1:A:155:TYR:CD1	1:A:155:TYR:N	0.46	2.84	2	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:CD2	0.46	2.94	4	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:CD	0.46	2.64	4	6
1:A:301:ALA:O	1:A:317:ILE:HG13	0.46	2.10	4	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.46	2.39	5	1
1:A:76:LEU:N	1:A:268:ALA:HB2	0.46	2.25	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:CD1	1:A:156:PHE:CD1	0.46	2.99	5	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.46	2.10	5	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CG1	0.46	2.41	6	1
1:A:317:ILE:C	1:A:317:ILE:CD1	0.46	2.89	6	1
1:A:361:LEU:N	1:A:361:LEU:CD1	0.46	2.79	6	1
1:A:161:ILE:CB	1:A:191:GLY:HA3	0.45	2.40	2	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:66:ARG:CB	0.45	2.98	4	1
1:A:293:VAL:O	1:A:298:PRO:CD	0.45	2.64	4	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:CG	0.45	2.64	4	4
1:A:239:LYS:O	1:A:240:VAL:CB	0.45	2.64	5	1
1:A:194:PHE:CE1	1:A:250:PHE:CZ	0.45	3.04	9	1
1:A:155:TYR:CB	1:A:230:TRP:CZ2	0.45	3.00	1	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HB3	0.45	2.11	1	5
1:A:67:PHE:CD1	1:A:71:ALA:HB3	0.45	2.46	3	1
1:A:357:VAL:HG13	1:A:361:LEU:HD12	0.45	1.87	3	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:106:TYR:CZ	0.45	3.00	4	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:75:LEU:CD2	0.45	2.41	5	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HD13	0.45	2.11	5	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:271:PRO:C	1:A:272:ASN:CG	0.45	2.84	7	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:CB	0.45	2.64	8	1
1:A:331:PRO:O	1:A:332:ASN:CB	0.45	2.65	10	2
1:A:339:PHE:CD1	1:A:343:VAL:CG2	0.45	3.00	8	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HD12	0.45	1.87	10	1
1:A:259:VAL:HG22	1:A:324:ALA:O	0.45	2.12	1	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:92:PHE:CE2	0.45	3.05	2	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:96:ALA:O	0.45	2.69	7	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:156:PHE:CE1	0.45	2.46	4	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.45	2.11	5	2
1:A:61:PHE:CZ	1:A:264:ALA:CB	0.45	2.99	7	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:192:LEU:N	0.45	2.25	8	1
1:A:23:VAL:CG2	1:A:283:TYR:CE2	0.45	2.98	9	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:230:TRP:CH2	0.45	3.00	9	1
1:A:28:GLU:CG	1:A:33:ILE:O	0.45	2.65	3	3
1:A:230:TRP:CE3	1:A:231:ALA:CB	0.45	2.98	1	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:267:ASN:CG	0.45	2.95	3	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:PRO:HG3	0.45	1.88	3	1
1:A:148:MET:N	1:A:224:MET:O	0.45	2.48	3	1
1:A:159:PRO:CB	1:A:256:LYS:O	0.45	2.64	5	4
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:HB3	0.45	2.11	4	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:156:PHE:CD1	0.45	2.46	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:ALA:HB3	1:A:232:TRP:CZ3	0.45	2.46	6	1
1:A:230:TRP:CD1	1:A:230:TRP:N	0.45	2.85	7	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:364:ALA:CB	0.45	2.42	7	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:232:TRP:CZ2	0.45	3.05	8	1
1:A:178:ILE:HG12	1:A:369:THR:HG22	0.45	1.88	8	1
1:A:90:TYR:O	1:A:94:TRP:CD1	0.45	2.70	10	2
1:A:122:LEU:CB	1:A:223:ALA:O	0.45	2.65	9	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:C	0.45	2.60	1	2
1:A:55:ASP:HA	1:A:269:ALA:HB1	0.45	1.88	2	1
1:A:170:LYS:CB	1:A:180:ASP:CB	0.45	2.94	5	3
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:CA	0.45	2.65	3	1
1:A:33:ILE:HD13	1:A:33:ILE:C	0.45	2.36	3	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.45	2.26	7	3
1:A:160:LEU:CD2	1:A:250:PHE:CE2	0.45	2.98	6	1
1:A:189:LYS:HG2	1:A:357:VAL:HG23	0.45	1.88	6	1
1:A:226:ILE:HG21	1:A:247:LEU:HD11	0.45	1.88	6	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG12	0.45	2.46	8	1
1:A:170:LYS:N	1:A:176:TYR:HB2	0.45	2.27	8	1
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:CD1	0.45	2.69	8	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:CD2	0.45	2.99	9	1
1:A:259:VAL:HG21	1:A:329:ILE:HA	0.45	1.86	10	1
1:A:10:TRP:O	1:A:10:TRP:CG	0.45	2.66	2	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:302:VAL:HB	0.45	1.88	2	1
1:A:343:VAL:CG2	1:A:347:VAL:CG2	0.45	2.94	4	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:261:VAL:HG21	0.45	1.89	5	1
1:A:148:MET:CG	1:A:222:THR:HG21	0.45	2.41	5	2
1:A:183:VAL:CG2	1:A:184:ASP:N	0.45	2.78	5	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:C	0.45	2.36	6	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:325:GLN:CG	0.45	2.99	6	1
1:A:169:PHE:CD2	1:A:181:VAL:CG1	0.45	2.99	6	1
1:A:345:THR:O	1:A:348:ILE:N	0.45	2.50	8	1
1:A:346:ALA:O	1:A:349:ASN:HB2	0.45	2.12	8	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:60:ILE:CD1	0.45	2.99	9	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:108:ILE:HG22	0.45	2.46	9	1
1:A:122:LEU:HB2	1:A:223:ALA:O	0.45	2.11	9	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:94:TRP:CD1	0.45	2.47	10	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:360:ALA:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:67:PHE:HZ	0.45	1.71	1	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:CG1	0.45	2.94	9	3
1:A:67:PHE:CD1	1:A:71:ALA:CB	0.45	3.00	3	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:CG1	0.45	2.65	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:CD1	0.45	2.35	4	1
1:A:348:ILE:CG2	1:A:349:ASN:N	0.45	2.80	6	3
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:CD1	0.45	2.65	5	1
1:A:192:LEU:HD11	1:A:347:VAL:HG11	0.45	1.87	5	1
1:A:268:ALA:O	1:A:269:ALA:C	0.45	2.59	5	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:C	0.45	2.60	7	1
1:A:170:LYS:HD3	1:A:180:ASP:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:352:SER:C	1:A:354:ARG:N	0.45	2.73	8	1
1:A:28:GLU:CB	1:A:33:ILE:O	0.45	2.65	3	4
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB3	0.45	2.11	5	2
1:A:30:ASP:C	1:A:31:THR:OG1	0.45	2.60	6	7
1:A:27:PHE:O	1:A:31:THR:OG1	0.45	2.35	3	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:104:ILE:O	0.45	2.70	3	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:250:PHE:CE2	0.45	3.04	7	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:244:VAL:HG12	0.45	1.89	8	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:O	0.45	2.65	8	1
1:A:275:LEU:O	1:A:279:PHE:HB2	0.45	2.12	8	1
1:A:114:SER:O	1:A:227:ASN:O	0.45	2.35	2	2
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.45	2.47	1	1
1:A:293:VAL:O	1:A:296:ASP:N	0.45	2.50	10	3
1:A:9:ILE:HG21	1:A:61:PHE:CE1	0.45	2.46	2	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:CG2	0.45	2.99	4	1
1:A:184:ASP:HB3	1:A:361:LEU:HG	0.45	1.89	4	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:CG2	0.45	2.65	5	1
1:A:121:LEU:C	1:A:123:PRO:HD3	0.45	2.36	6	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:232:TRP:CZ3	0.45	2.99	6	1
1:A:17:TYR:CD1	1:A:18:ASN:N	0.45	2.85	9	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:304:LEU:HA	0.45	1.89	9	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:CG1	0.45	2.65	2	1
1:A:96:ALA:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.45	2.95	7	3
1:A:362:LYS:O	1:A:365:GLN:CG	0.45	2.65	8	2
1:A:17:TYR:CZ	1:A:37:VAL:CG2	0.45	3.00	4	1
1:A:355:GLN:OE1	1:A:357:VAL:HG23	0.45	2.12	4	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:324:ALA:CB	0.45	2.95	5	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:208:THR:N	0.45	2.27	7	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:CG1	0.45	2.99	8	1
1:A:333:ILE:HB	1:A:334:PRO:HD2	0.45	1.88	9	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:TRP:CD1	0.44	3.00	1	1
1:A:121:LEU:O	1:A:122:LEU:HG	0.44	2.12	1	1
1:A:357:VAL:HG13	1:A:358:ASP:N	0.44	2.27	9	3
1:A:73:SER:HB3	1:A:75:LEU:HD23	0.44	1.89	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LEU:HD21	1:A:265:GLY:HA3	0.44	1.89	2	1
1:A:235:ILE:N	1:A:235:ILE:CD1	0.44	2.80	2	1
1:A:280:LEU:O	1:A:280:LEU:HD23	0.44	2.12	4	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:N	0.44	2.26	9	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:228:GLY:HA2	0.44	1.89	9	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:HB2	0.44	2.12	9	1
1:A:229:PRO:O	1:A:230:TRP:C	0.44	2.60	4	1
1:A:61:PHE:CG	1:A:263:SER:O	0.44	2.70	5	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HG	0.44	2.43	5	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG22	0.44	1.88	6	1
1:A:117:TYR:CE2	1:A:243:GLY:HA3	0.44	2.48	8	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:CB	0.44	2.95	9	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:230:TRP:CZ2	0.44	3.00	9	1
1:A:62:TRP:CZ2	1:A:67:PHE:HA	0.44	2.48	10	1
1:A:176:TYR:CD1	1:A:177:ASP:N	0.44	2.85	1	1
1:A:203:HIS:O	1:A:205:ASN:N	0.44	2.50	9	2
1:A:158:TRP:CH2	1:A:343:VAL:CG2	0.44	3.01	2	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:CB	0.44	2.92	3	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:275:LEU:HD21	0.44	2.42	4	2
1:A:51:ALA:CB	1:A:75:LEU:HD11	0.44	2.42	5	1
1:A:113:LEU:HD11	1:A:156:PHE:CG	0.44	2.47	5	1
1:A:168:ALA:CA	1:A:183:VAL:HG12	0.44	2.39	5	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:108:ILE:HB	0.44	2.48	1	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CE1	0.44	2.47	9	2
1:A:250:PHE:O	1:A:253:GLN:N	0.44	2.50	1	1
1:A:323:ASN:O	1:A:327:GLY:N	0.44	2.51	6	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:HG23	0.44	1.88	3	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:HG13	0.44	2.42	4	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:HG2	0.44	2.48	6	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.44	2.12	6	1
1:A:94:TRP:O	1:A:98:ARG:HB2	0.44	2.12	7	1
1:A:154:PRO:CB	1:A:340:TRP:CZ2	0.44	3.00	8	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:CB	0.44	2.66	9	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:48:PRO:HD3	0.44	2.42	1	3
1:A:115:LEU:HD12	1:A:226:ILE:CG2	0.44	2.43	2	1
1:A:131:GLU:O	1:A:134:ALA:N	0.44	2.51	2	3
1:A:28:GLU:O	1:A:32:GLY:HA2	0.44	2.12	3	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HB	0.44	2.13	5	3
1:A:120:ASP:OD2	1:A:240:VAL:HG13	0.44	2.13	5	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CG	0.44	2.65	5	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:94:TRP:CE2	0.44	2.48	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	0.44	1.90	9	1
1:A:111:GLU:HA	1:A:320:THR:CG2	0.44	2.43	10	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CG	0.44	2.43	1	1
1:A:342:ALA:CB	1:A:361:LEU:HD22	0.44	2.42	1	1
1:A:33:ILE:HD13	1:A:34:LYS:C	0.44	2.38	3	1
1:A:88:LYS:CB	1:A:304:LEU:HD11	0.44	2.39	3	1
1:A:53:THR:O	1:A:55:ASP:N	0.44	2.51	4	1
1:A:293:VAL:CA	1:A:298:PRO:HD3	0.44	2.43	4	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HD23	0.44	1.87	7	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:339:PHE:CZ	0.44	3.01	1	1
1:A:10:TRP:O	1:A:11:ILE:HG13	0.44	2.13	2	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:HB2	0.44	2.47	2	1
1:A:117:TYR:CE2	1:A:245:THR:HG23	0.44	2.47	2	1
1:A:355:GLN:HB3	1:A:360:ALA:CB	0.44	2.40	2	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HB3	0.44	1.88	3	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:N	0.44	2.27	4	1
1:A:205:ASN:O	1:A:206:ALA:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CD2	0.44	2.65	5	1
1:A:265:GLY:C	1:A:266:ILE:O	0.44	2.54	5	1
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:HB2	0.44	2.12	9	2
1:A:112:ALA:N	1:A:320:THR:HG22	0.44	2.27	8	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:235:ILE:HD12	0.44	1.88	8	1
1:A:352:SER:C	1:A:354:ARG:H	0.44	2.21	8	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:94:TRP:HZ2	0.44	1.67	10	1
1:A:93:THR:CB	1:A:94:TRP:CZ3	0.44	3.01	1	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:HB2	0.44	2.47	2	1
1:A:178:ILE:HD13	1:A:335:GLN:CB	0.44	2.43	2	1
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.44	2.86	4	5
1:A:79:ILE:CG2	1:A:106:TYR:CE1	0.44	3.01	4	1
1:A:283:TYR:C	1:A:285:LEU:N	0.44	2.76	5	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:76:LEU:CD2	0.44	3.01	7	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:104:ILE:CD1	0.44	2.43	7	1
1:A:257:PRO:O	1:A:327:GLY:HA2	0.44	2.13	7	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:N	0.44	2.51	7	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CB	0.44	2.41	9	1
1:A:225:THR:HG21	1:A:236:ASP:OD1	0.44	2.12	9	1
1:A:117:TYR:CG	1:A:124:ASN:OD1	0.44	2.71	10	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HG22	0.44	1.90	1	1
1:A:4:GLU:HG3	1:A:275:LEU:HD12	0.44	1.89	2	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:PHE:N	0.44	2.48	2	2
1:A:159:PRO:HB3	1:A:256:LYS:O	0.44	2.13	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:PHE:CZ	1:A:104:ILE:O	0.44	2.71	3	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:91:PRO:CD	0.44	2.95	3	1
1:A:294:ASN:CB	1:A:307:TYR:CE2	0.44	3.01	3	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:304:LEU:HA	0.44	1.89	4	1
1:A:59:ILE:C	1:A:60:ILE:CG2	0.44	2.91	5	1
1:A:340:TRP:CD1	1:A:340:TRP:C	0.44	2.96	5	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HA	0.44	2.13	6	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:67:PHE:HB2	0.44	1.90	7	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA3	0.44	2.48	7	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:CD1	0.44	2.99	7	1
1:A:70:TYR:HB2	1:A:76:LEU:HD12	0.44	1.90	8	1
1:A:86:GLN:HG2	1:A:94:TRP:CD1	0.44	2.48	8	1
1:A:298:PRO:C	1:A:299:LEU:HD23	0.44	2.38	8	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:105:ALA:HB3	0.44	1.88	9	1
1:A:294:ASN:O	1:A:297:LYS:CG	0.44	2.66	10	1
1:A:178:ILE:CG1	1:A:369:THR:HA	0.43	2.43	1	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:59:ILE:HD12	0.43	1.90	2	1
1:A:92:PHE:CD1	1:A:93:THR:N	0.43	2.85	2	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB3	0.43	2.12	2	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:61:PHE:CG	0.43	2.48	3	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:123:PRO:O	0.43	2.13	3	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:58:ASP:HB2	0.43	1.88	4	1
1:A:8:VAL:N	1:A:58:ASP:HB2	0.43	2.28	10	2
1:A:290:LEU:HB3	1:A:307:TYR:CD1	0.43	2.48	4	1
1:A:170:LYS:N	1:A:176:TYR:HB3	0.43	2.28	5	1
1:A:257:PRO:O	1:A:327:GLY:CA	0.43	2.66	5	2
1:A:113:LEU:HD21	1:A:153:GLU:OE1	0.43	2.12	7	1
1:A:115:LEU:C	1:A:116:ILE:HD12	0.43	2.37	8	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:GLU:CG	0.43	2.66	9	1
1:A:178:ILE:O	1:A:369:THR:HG22	0.43	2.12	9	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:304:LEU:HD13	0.43	1.89	9	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HB	0.43	1.89	10	1
1:A:170:LYS:O	1:A:176:TYR:CB	0.43	2.65	3	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:176:TYR:CD2	0.43	3.06	3	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:324:ALA:HB2	0.43	1.89	4	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:N	0.43	2.52	5	3
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HB	0.43	2.13	6	2
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:CG	0.43	2.38	6	1
1:A:182:GLY:O	1:A:185:ASN:ND2	0.43	2.50	7	2
1:A:33:ILE:O	1:A:33:ILE:HG22	0.43	2.13	9	1
1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:HD22	0.43	2.38	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:O	1:A:229:PRO:CD	0.43	2.66	10	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:CG1	0.43	2.66	10	1
1:A:17:TYR:CZ	1:A:37:VAL:HG21	0.43	2.48	4	1
1:A:274:GLU:O	1:A:278:GLU:CB	0.43	2.66	9	3
1:A:356:THR:HB	1:A:359:GLU:CB	0.43	2.43	7	2
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HB	0.43	1.91	5	3
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:CG2	0.43	2.81	5	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:243:GLY:O	0.43	2.14	6	2
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:O	0.43	2.71	1	1
1:A:133:PRO:O	1:A:137:LYS:CG	0.43	2.67	2	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:267:ASN:CG	0.43	2.96	3	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:N	0.43	2.85	3	1
1:A:126:PRO:HD3	1:A:135:LEU:HD12	0.43	1.90	3	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:43:LEU:CB	0.43	2.97	8	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:CD2	0.43	2.43	8	1
1:A:169:PHE:CB	1:A:176:TYR:CD1	0.43	3.01	8	1
1:A:176:TYR:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.43	2.48	1	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:CG1	0.43	3.01	2	1
1:A:77:ALA:C	1:A:104:ILE:HG13	0.43	2.39	2	1
1:A:276:ALA:HB1	1:A:280:LEU:HD13	0.43	1.90	2	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:317:ILE:HD11	0.43	2.44	3	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:CG2	0.43	2.66	3	1
1:A:61:PHE:CZ	1:A:108:ILE:HD11	0.43	2.48	5	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CD1	0.43	2.49	8	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:321:MET:HA	0.43	1.88	8	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:43:LEU:CA	0.43	2.44	9	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:CG1	0.43	2.44	1	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CD1	0.43	2.97	1	1
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HB2	0.43	1.88	1	1
1:A:178:ILE:HD11	1:A:368:ILE:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.43	2.48	1	1
1:A:132:ILE:O	1:A:133:PRO:C	0.43	2.62	6	5
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CZ3	0.43	2.60	3	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HD23	0.43	2.14	3	1
1:A:249:THR:C	1:A:250:PHE:CD2	0.43	2.97	10	4
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:N	0.43	2.52	9	4
1:A:240:VAL:O	1:A:242:TYR:CD2	0.43	2.72	4	1
1:A:178:ILE:O	1:A:181:VAL:CG2	0.43	2.67	8	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CG	0.43	2.48	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:347:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD11	0.43	1.90	9	1
1:A:357:VAL:HG23	1:A:361:LEU:HD12	0.43	1.91	9	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:96:ALA:O	0.43	2.71	10	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:62:TRP:CZ2	0.43	3.02	2	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:104:ILE:HD13	0.43	2.42	2	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:HA3	0.43	1.90	2	1
1:A:161:ILE:HB	1:A:191:GLY:HA3	0.43	1.91	2	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CB	0.43	2.43	2	1
1:A:239:LYS:O	1:A:242:TYR:CZ	0.43	2.71	4	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:311:LEU:HD22	0.43	2.43	4	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:CB	0.43	2.43	5	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:CD1	0.43	2.82	7	1
1:A:11:ILE:N	1:A:11:ILE:CD1	0.43	2.80	10	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:208:THR:HB	0.43	1.90	1	1
1:A:181:VAL:HG11	1:A:339:PHE:CZ	0.43	2.48	1	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:188:ALA:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:304:LEU:HD22	0.43	1.88	2	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG13	0.43	1.91	4	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:HA2	0.43	2.48	6	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:HA3	0.43	2.49	7	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:76:LEU:HD21	0.43	2.48	8	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:CA	0.43	2.44	8	1
1:A:27:PHE:HB2	1:A:33:ILE:HB	0.43	1.89	10	2
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:CB	0.43	2.95	1	2
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:CB	0.43	2.66	2	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG21	0.43	1.91	2	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ASP:HB2	0.43	2.14	4	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:ILE:HG12	0.43	2.13	5	1
1:A:226:ILE:HD12	1:A:226:ILE:N	0.43	2.28	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HD12	0.43	1.91	7	1
1:A:105:ALA:CB	1:A:265:GLY:CA	0.43	2.96	8	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:60:ILE:HG21	0.43	2.48	9	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:365:GLN:CG	0.43	2.97	5	2
1:A:9:ILE:HD13	1:A:35:VAL:HG13	0.43	1.89	4	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:HG	0.43	2.14	4	1
1:A:184:ASP:HB2	1:A:361:LEU:CD2	0.43	2.39	4	1
1:A:361:LEU:O	1:A:362:LYS:C	0.43	2.59	4	1
1:A:61:PHE:HA	1:A:264:ALA:HA	0.43	1.91	6	2
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:ALA:HB3	0.43	2.14	7	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CE2	0.43	2.49	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ALA:C	1:A:304:LEU:O	0.43	2.59	7	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:HG2	0.43	2.14	9	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:N	0.42	2.50	2	3
1:A:58:ASP:C	1:A:59:ILE:CG1	0.42	2.91	9	2
1:A:156:PHE:HB3	1:A:226:ILE:HD12	0.42	1.91	2	1
1:A:181:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HB2	0.42	1.90	3	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:238:SER:HB3	0.42	1.90	3	1
1:A:293:VAL:CG1	1:A:294:ASN:N	0.42	2.82	4	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:302:VAL:HG11	0.42	1.87	5	1
1:A:366:THR:O	1:A:370:LYS:N	0.42	2.50	8	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CB	0.42	2.44	9	1
1:A:93:THR:HB	1:A:94:TRP:CE3	0.42	2.49	1	1
1:A:110:VAL:O	1:A:320:THR:CG2	0.42	2.67	1	2
1:A:160:LEU:CB	1:A:250:PHE:CE2	0.42	3.02	2	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:76:LEU:HD21	0.42	1.91	4	1
1:A:112:ALA:O	1:A:228:GLY:HA3	0.42	2.14	4	1
1:A:317:ILE:CD1	1:A:318:ALA:N	0.42	2.81	5	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:150:ASN:O	0.42	2.73	6	1
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:CB	0.42	2.64	7	2
1:A:169:PHE:CZ	1:A:336:MET:HE2	0.42	2.49	7	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:188:ALA:HA	0.42	2.44	9	1
1:A:283:TYR:O	1:A:285:LEU:N	0.42	2.52	3	2
1:A:94:TRP:CZ3	1:A:107:PRO:HD3	0.42	2.49	4	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:CD1	0.42	2.63	4	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:191:GLY:HA2	1:A:194:PHE:CE2	0.42	2.49	5	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:CB	0.42	2.97	6	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:256:LYS:HB2	0.42	2.44	6	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:207:ASP:HA	0.42	2.43	7	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:250:PHE:CD1	0.42	2.50	7	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:285:LEU:CD2	0.42	2.99	9	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:94:TRP:CZ2	0.42	2.99	9	1
1:A:146:ALA:HB3	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.91	9	1
1:A:232:TRP:O	1:A:234:ASN:N	0.42	2.52	9	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:336:MET:H	0.42	1.73	10	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:NE2	0.42	2.87	1	1
1:A:155:TYR:HA	1:A:258:PHE:CD1	0.42	2.49	1	1
1:A:65:ASP:HB2	1:A:330:MET:HE1	0.42	1.92	2	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:35:VAL:CG2	0.42	2.97	3	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:94:TRP:N	0.42	2.86	3	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:CG1	0.42	3.02	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:PRO:CG	1:A:135:LEU:HD13	0.42	2.44	5	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:198:LEU:HD21	0.42	2.41	5	1
1:A:262:LEU:N	1:A:262:LEU:CD2	0.42	2.82	5	1
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:CD2	0.42	2.72	6	2
1:A:59:ILE:HG13	1:A:265:GLY:O	0.42	2.15	7	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.42	1.91	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:CG1	0.42	2.97	8	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:329:ILE:O	1:A:331:PRO:CD	0.42	2.68	10	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.42	2.30	1	1
1:A:349:ASN:OD1	1:A:356:THR:N	0.42	2.53	1	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CG	0.42	2.42	3	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG13	0.42	2.42	4	1
1:A:369:THR:O	1:A:369:THR:OG1	0.42	2.38	4	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:CB	0.42	2.97	5	1
1:A:257:PRO:O	1:A:328:GLU:N	0.42	2.50	6	1
1:A:12:ASN:O	1:A:13:GLY:C	0.42	2.62	8	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HB	0.42	2.14	9	1
1:A:176:TYR:OH	1:A:333:ILE:HG12	0.42	2.14	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:45:GLU:N	0.42	2.53	4	3
1:A:62:TRP:CE3	1:A:263:SER:O	0.42	2.72	2	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:147:LEU:HD23	0.42	2.45	4	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:58:ASP:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:65:ASP:O	1:A:332:ASN:CG	0.42	2.63	7	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:229:PRO:HG3	0.42	1.90	7	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:CD	0.42	2.83	7	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:303:ALA:CB	0.42	2.98	7	1
1:A:16:GLY:HA2	1:A:296:ASP:HA	0.42	1.91	8	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:339:PHE:CE2	0.42	2.49	9	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:320:THR:O	0.42	2.13	10	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG13	0.42	1.92	4	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:330:MET:N	1:A:331:PRO:CD	0.42	2.83	5	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD1	0.42	2.15	6	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:361:LEU:HG	0.42	1.91	6	1
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.49	7	1
1:A:167:TYR:O	1:A:168:ALA:C	0.42	2.62	9	2
1:A:302:VAL:HA	1:A:311:LEU:HD21	0.42	1.92	10	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.42	2.45	1	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB3	0.42	2.15	1	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:320:THR:CG2	0.42	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:163:ALA:CB	1:A:256:LYS:CB	0.42	2.95	2	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.50	3	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:279:PHE:CB	0.42	3.02	4	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:76:LEU:HD11	0.42	2.42	5	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:265:GLY:O	0.42	2.14	6	1
1:A:99:TYR:O	1:A:102:LYS:N	0.42	2.53	7	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.83	7	1
1:A:154:PRO:O	1:A:158:TRP:CG	0.42	2.73	7	1
1:A:107:PRO:HA	1:A:263:SER:CA	0.42	2.45	9	1
1:A:176:TYR:O	1:A:177:ASP:HB2	0.42	2.15	9	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:CD	0.42	2.45	1	1
1:A:226:ILE:CD1	1:A:247:LEU:CD1	0.42	2.98	1	1
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:HB3	0.42	2.44	9	2
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TRP:CZ2	0.42	2.50	2	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:C	0.42	2.98	3	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.42	2.13	9	2
1:A:147:LEU:HD13	1:A:149:PHE:HE2	0.42	1.72	4	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:CB	0.42	2.45	10	2
1:A:192:LEU:HD11	1:A:347:VAL:CG1	0.42	2.45	5	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:CG	0.42	3.03	6	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:226:ILE:HG12	0.42	2.49	7	1
1:A:160:LEU:HD12	1:A:250:PHE:CZ	0.42	2.50	7	1
1:A:44:GLU:HG2	1:A:70:TYR:CE1	0.42	2.50	8	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:CG	0.42	2.72	8	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:250:PHE:CD2	0.42	3.03	10	1
1:A:330:MET:HE2	1:A:336:MET:CE	0.42	2.45	10	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:58:ASP:OD2	0.42	2.73	1	1
1:A:108:ILE:HA	1:A:302:VAL:O	0.42	2.15	1	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HB2	0.42	1.91	3	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CB	0.42	2.41	3	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:HG21	0.42	2.50	4	1
1:A:99:TYR:HH	1:A:332:ASN:CG	0.42	2.22	4	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:CD2	0.42	2.45	4	1
1:A:127:LYS:O	1:A:128:THR:C	0.42	2.62	6	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:CG	0.42	2.68	8	1
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:CD1	0.42	2.83	10	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:ASP:CG	0.42	2.40	10	1
1:A:167:TYR:O	1:A:183:VAL:CA	0.42	2.68	10	1
1:A:339:PHE:CE2	1:A:368:ILE:HD12	0.42	2.50	10	1
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:CB	0.41	2.45	1	2
1:A:124:ASN:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.41	1.92	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:283:TYR:O	1:A:286:THR:N	0.41	2.53	9	2
1:A:68:GLY:O	1:A:71:ALA:N	0.41	2.53	2	2
1:A:183:VAL:O	1:A:185:ASN:N	0.41	2.48	2	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:62:TRP:HZ3	0.41	1.75	3	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:357:VAL:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:293:VAL:HG12	1:A:307:TYR:OH	0.41	2.14	4	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG23	0.41	2.45	4	1
1:A:148:MET:HB2	1:A:222:THR:CG2	0.41	2.41	5	1
1:A:259:VAL:HG11	1:A:329:ILE:HA	0.41	1.91	5	1
1:A:342:ALA:CB	1:A:368:ILE:HG22	0.41	2.45	6	1
1:A:355:GLN:OE1	1:A:355:GLN:O	0.41	2.38	6	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLN:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:39:HIS:O	1:A:39:HIS:CD2	0.41	2.73	8	2
1:A:44:GLU:CG	1:A:70:TYR:OH	0.41	2.67	8	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:HA2	0.41	1.92	8	1
1:A:131:GLU:CD	1:A:135:LEU:HD23	0.41	2.40	10	1
1:A:158:TRP:HB2	1:A:159:PRO:HD3	0.41	1.90	10	1
1:A:349:ASN:C	1:A:355:GLN:HB3	0.41	2.39	10	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:122:LEU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:150:ASN:O	1:A:208:THR:HG22	0.41	2.14	3	1
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:89:LEU:HD21	0.41	1.92	6	1
1:A:155:TYR:HB3	1:A:258:PHE:CD1	0.41	2.50	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:ND2	0.41	2.30	6	1
1:A:282:ASN:O	1:A:286:THR:CG2	0.41	2.68	7	1
1:A:18:ASN:O	1:A:22:GLU:CG	0.41	2.68	8	1
1:A:59:ILE:HD12	1:A:264:ALA:HB1	0.41	1.89	10	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:4:GLU:HG2	1:A:275:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:117:TYR:CD2	1:A:243:GLY:O	0.41	2.73	2	1
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:347:VAL:HG13	0.41	1.90	3	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:106:TYR:CE1	0.41	2.51	4	1
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HB2	0.41	2.14	4	1
1:A:350:ALA:CB	1:A:355:GLN:HA	0.41	2.45	4	1
1:A:126:PRO:CA	1:A:135:LEU:HD13	0.41	2.45	5	1
1:A:311:LEU:CD2	1:A:317:ILE:HG21	0.41	2.38	5	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:267:ASN:CG	0.41	2.98	6	1
1:A:111:GLU:CB	1:A:229:PRO:CG	0.41	2.98	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:ILE:HG22	1:A:204:MET:HA	0.41	1.91	9	1
1:A:117:TYR:CD2	1:A:245:THR:OG1	0.41	2.68	10	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:60:ILE:HG12	0.41	2.50	1	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:223:ALA:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:317:ILE:N	1:A:317:ILE:HD13	0.41	2.30	1	1
1:A:136:ASP:O	1:A:137:LYS:C	0.41	2.63	3	2
1:A:156:PHE:HE2	1:A:227:ASN:HA	0.41	1.74	3	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:CG2	0.41	2.68	3	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:58:ASP:HB3	0.41	1.92	5	1
1:A:51:ALA:O	1:A:55:ASP:CG	0.41	2.63	5	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HD12	0.41	1.90	5	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:117:TYR:CE2	0.41	3.03	5	1
1:A:147:LEU:C	1:A:222:THR:CG2	0.41	2.93	6	1
1:A:77:ALA:O	1:A:79:ILE:HD13	0.41	2.16	7	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:324:ALA:CB	0.41	2.98	8	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:147:LEU:CD2	0.41	2.46	9	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:CD2	0.41	3.04	1	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:331:PRO:HG2	0.41	2.49	1	2
1:A:342:ALA:CB	1:A:361:LEU:CD2	0.41	2.98	1	1
1:A:340:TRP:O	1:A:344:ARG:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:266:ILE:CG2	1:A:271:PRO:CD	0.41	2.97	3	1
1:A:293:VAL:HG22	1:A:297:LYS:HB3	0.41	1.92	4	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CG2	0.41	2.69	6	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:CD1	0.41	2.82	7	1
1:A:96:ALA:CA	1:A:329:ILE:HD12	0.41	2.45	7	1
1:A:149:PHE:CG	1:A:226:ILE:CG1	0.41	3.04	7	1
1:A:154:PRO:CB	1:A:158:TRP:CD1	0.41	3.03	7	1
1:A:271:PRO:O	1:A:272:ASN:CB	0.41	2.69	7	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:CA	0.41	2.45	10	1
1:A:356:THR:N	1:A:360:ALA:HB2	0.41	2.30	10	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HG23	0.41	2.50	1	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:331:PRO:HG2	0.41	2.50	1	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:HA	0.41	2.50	2	1
1:A:158:TRP:CE3	1:A:158:TRP:HA	0.41	2.51	2	1
1:A:183:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HB3	0.41	1.91	3	1
1:A:242:TYR:O	1:A:242:TYR:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:275:LEU:CD2	0.41	2.45	4	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:67:PHE:CZ	0.41	2.50	4	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:192:LEU:CA	0.41	2.45	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:O	0.41	2.74	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:GLU:O	1:A:157:THR:HG22	0.41	2.14	5	1
1:A:129:TRP:HB2	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.51	6	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:CD1	0.41	2.69	7	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:67:PHE:CE1	0.41	3.03	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:107:PRO:CG	0.41	2.68	8	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:299:LEU:HD12	0.41	2.45	8	1
1:A:144:LYS:CB	1:A:221:GLU:O	0.41	2.66	10	1
1:A:183:VAL:HG13	1:A:184:ASP:N	0.41	2.31	10	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:91:PRO:HD2	0.41	2.51	1	1
1:A:48:PRO:CB	1:A:75:LEU:CD1	0.41	2.98	2	1
1:A:96:ALA:C	1:A:261:VAL:HG11	0.41	2.41	2	1
1:A:160:LEU:HB2	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.51	2	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HD11	0.41	1.93	2	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:58:ASP:CG	0.41	2.41	3	1
1:A:259:VAL:CG1	1:A:324:ALA:HA	0.41	2.45	3	1
1:A:132:ILE:HD12	1:A:133:PRO:HD3	0.41	1.93	4	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:HB3	0.41	2.46	5	1
1:A:58:ASP:CG	1:A:59:ILE:HD12	0.41	2.39	6	1
1:A:155:TYR:HB3	1:A:258:PHE:CG	0.41	2.51	6	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:C	0.41	2.99	7	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:279:PHE:CZ	0.41	3.02	8	1
1:A:154:PRO:HB2	1:A:340:TRP:CZ2	0.41	2.51	8	1
1:A:170:LYS:CD	1:A:180:ASP:CB	0.41	2.98	8	1
1:A:176:TYR:CD2	1:A:331:PRO:HG3	0.41	2.51	8	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:103:LEU:CD1	0.41	2.45	9	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:230:TRP:CH2	0.41	2.51	9	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG13	0.41	1.88	10	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CE2	0.41	2.51	1	1
1:A:94:TRP:N	1:A:94:TRP:CD2	0.41	2.89	1	1
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:CG1	0.41	2.94	3	2
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:ALA:H	0.41	1.75	3	1
1:A:114:SER:N	1:A:227:ASN:O	0.41	2.53	4	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB3	0.41	2.15	4	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:58:ASP:CB	0.41	2.99	5	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:75:LEU:CD1	0.41	2.98	5	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:325:GLN:OE1	0.41	2.74	5	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:247:LEU:HD21	0.41	2.46	5	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:156:PHE:HB2	0.41	2.45	5	1
1:A:338:ALA:CB	1:A:368:ILE:CD1	0.41	2.98	5	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:259:VAL:CG1	0.41	2.99	6	1
1:A:113:LEU:O	1:A:323:ASN:ND2	0.41	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:283:TYR:OH	1:A:293:VAL:CG2	0.41	2.69	7	1
1:A:286:THR:N	1:A:307:TYR:OH	0.41	2.54	7	1
1:A:5:GLY:CA	1:A:32:GLY:O	0.41	2.69	8	1
1:A:281:GLU:HA	1:A:285:LEU:HB2	0.41	1.93	8	1
1:A:293:VAL:O	1:A:297:LYS:N	0.41	2.41	10	1
1:A:121:LEU:C	1:A:122:LEU:HG	0.41	2.40	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:11:ILE:HD11	0.41	1.92	2	1
1:A:62:TRP:O	1:A:62:TRP:HE3	0.41	1.99	2	1
1:A:67:PHE:HE1	1:A:76:LEU:HD22	0.41	1.72	2	1
1:A:72:GLN:OE1	1:A:99:TYR:CZ	0.41	2.74	3	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:TRP:CD2	0.41	2.74	3	1
1:A:247:LEU:CB	1:A:255:SER:OG	0.41	2.69	3	1
1:A:297:LYS:HD2	1:A:301:ALA:HB2	0.41	1.93	3	1
1:A:24:GLY:C	1:A:33:ILE:HG21	0.41	2.41	4	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:303:ALA:C	0.41	2.40	4	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:303:ALA:O	0.41	2.69	4	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:307:TYR:CD2	0.41	2.95	4	1
1:A:362:LYS:CG	1:A:363:ASP:N	0.41	2.84	5	1
1:A:47:PHE:HE2	1:A:76:LEU:HD23	0.41	1.72	7	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:229:PRO:CG	0.41	2.99	7	1
1:A:298:PRO:C	1:A:299:LEU:HD12	0.41	2.41	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:CG2	0.41	2.46	8	1
1:A:69:GLY:N	1:A:332:ASN:OD1	0.41	2.54	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:222:THR:O	0.41	2.16	8	1
1:A:229:PRO:HG3	1:A:320:THR:HG21	0.41	1.92	8	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:304:LEU:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:153:GLU:OE1	1:A:232:TRP:CZ2	0.41	2.73	9	1
1:A:291:GLU:OE2	1:A:307:TYR:CZ	0.41	2.74	9	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:61:PHE:HB2	0.41	1.92	10	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:38:GLU:HB3	0.41	2.51	1	1
1:A:48:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE1	0.41	2.50	1	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG13	0.41	1.91	1	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:CA	0.41	2.46	2	1
1:A:62:TRP:CZ3	1:A:66:ARG:HB2	0.41	2.51	4	1
1:A:112:ALA:O	1:A:228:GLY:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:238:SER:O	1:A:242:TYR:CE1	0.41	2.74	4	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLU:HG3	0.41	1.91	6	1
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:CG1	0.41	2.68	6	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CH2	0.41	2.51	6	1
1:A:171:TYR:CZ	1:A:174:GLY:C	0.41	2.99	6	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:O	0.41	2.16	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:307:TYR:OH	1:A:311:LEU:CD1	0.41	2.69	8	1
1:A:312:ALA:CA	1:A:317:ILE:HD11	0.41	2.40	9	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:159:PRO:CG	0.41	2.99	10	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:250:PHE:HB2	0.41	2.46	10	1
1:A:348:ILE:O	1:A:352:SER:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:64:HIS:O	1:A:64:HIS:ND1	0.40	2.54	1	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:226:ILE:HG13	0.40	1.92	1	1
1:A:181:VAL:HG23	1:A:365:GLN:CG	0.40	2.45	2	1
1:A:275:LEU:HD23	1:A:275:LEU:C	0.40	2.40	2	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HB2	0.40	2.16	2	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HB2	0.40	2.47	3	1
1:A:156:PHE:CE1	1:A:226:ILE:HG22	0.40	2.51	4	1
1:A:71:ALA:CA	1:A:76:LEU:HB2	0.40	2.46	5	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:CB	0.40	2.46	5	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:N	0.40	2.54	5	1
1:A:350:ALA:HB1	1:A:355:GLN:HB2	0.40	1.93	5	1
1:A:11:ILE:O	1:A:39:HIS:HA	0.40	2.16	7	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:HG12	0.40	1.92	7	1
1:A:113:LEU:HB2	1:A:156:PHE:CE1	0.40	2.51	8	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:117:TYR:C	0.40	2.98	7	2
1:A:44:GLU:HB3	1:A:62:TRP:CZ2	0.40	2.51	3	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:248:PRO:CD	0.40	2.46	4	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:CD	0.40	2.47	5	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:CB	0.40	2.70	5	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:O	0.40	2.69	5	1
1:A:112:ALA:N	1:A:320:THR:CG2	0.40	2.84	5	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:266:ILE:HA	0.40	1.92	6	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:HB2	0.40	2.16	7	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:CG1	0.40	2.45	7	1
1:A:53:THR:O	1:A:53:THR:CG2	0.40	2.69	8	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD11	0.40	1.87	9	1
1:A:237:THR:HG22	1:A:237:THR:O	0.40	2.15	9	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:369:THR:HG23	0.40	1.91	10	1
1:A:70:TYR:HB3	1:A:76:LEU:HD12	0.40	1.92	2	1
1:A:163:ALA:O	1:A:253:GLN:OE1	0.40	2.39	2	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:226:ILE:HD12	0.40	2.51	3	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:HB2	0.40	2.51	4	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:192:LEU:N	0.40	2.31	4	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:N	0.40	2.53	5	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:354:ARG:HG2	0.40	1.93	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HD23	1:A:311:LEU:O	0.40	2.17	7	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CD1	0.40	3.05	8	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:62:TRP:CZ3	0.40	2.74	8	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:CG	0.40	2.43	8	1
1:A:27:PHE:CZ	1:A:279:PHE:CD1	0.40	3.09	9	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:280:LEU:CD1	0.40	2.99	9	1
1:A:153:GLU:OE1	1:A:232:TRP:CH2	0.40	2.75	9	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:60:ILE:CG2	0.40	3.00	1	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:320:THR:HG22	0.40	1.94	1	1
1:A:255:SER:O	1:A:257:PRO:HD3	0.40	2.16	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.40	2.46	3	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG13	0.40	2.16	3	1
1:A:155:TYR:CD1	1:A:258:PHE:CB	0.40	3.04	5	1
1:A:291:GLU:CG	1:A:307:TYR:OH	0.40	2.69	5	1
1:A:7:LEU:HD11	1:A:279:PHE:CE1	0.40	2.52	6	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.40	2.45	6	1
1:A:257:PRO:HB2	1:A:327:GLY:CA	0.40	2.47	6	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:CD2	0.40	3.00	8	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:187:GLY:HA3	0.40	2.47	10	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	1	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:284:LEU:HD13	0.40	2.46	1	1
1:A:9:ILE:HG12	1:A:59:ILE:CD1	0.40	2.46	2	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:243:GLY:O	0.40	2.17	3	1
1:A:86:GLN:HA	1:A:94:TRP:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:12:ASN:HA	1:A:40:PRO:CG	0.40	2.46	5	1
1:A:97:VAL:O	1:A:103:LEU:CG	0.40	2.69	5	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:302:VAL:CG1	0.40	2.45	5	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:325:GLN:HG2	0.40	2.51	6	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:104:ILE:CG2	0.40	2.47	7	1
1:A:303:ALA:O	1:A:308:GLU:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:178:ILE:C	1:A:178:ILE:CD1	0.40	2.93	8	1
1:A:111:GLU:HG2	1:A:230:TRP:CZ2	0.40	2.51	9	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	367/370 (99%)	280±4 (76±1%)	53±6 (15±2%)	33±5 (9±1%)	1	11
All	All	3670/3700 (99%)	2805 (76%)	534 (15%)	331 (9%)	1	11

All 89 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	LYS	10
1	A	105	ALA	10
1	A	108	ILE	10
1	A	143	GLY	10
1	A	150	ASN	10
1	A	178	ILE	10
1	A	31	THR	9
1	A	32	GLY	9
1	A	154	PRO	9
1	A	155	TYR	9
1	A	43	LEU	8
1	A	177	ASP	8
1	A	356	THR	8
1	A	100	ASN	7
1	A	126	PRO	7
1	A	168	ALA	7
1	A	224	MET	7
1	A	298	PRO	7
1	A	58	ASP	6
1	A	173	ASN	6
1	A	55	ASP	6
1	A	304	LEU	6
1	A	152	GLN	5
1	A	165	GLY	5
1	A	272	ASN	5
1	A	54	GLY	4
1	A	63	ALA	4
1	A	74	GLY	4
1	A	103	LEU	4
1	A	109	ALA	4
1	A	151	LEU	4
1	A	301	ALA	4
1	A	331	PRO	4
1	A	57	PRO	4
1	A	202	LYS	4
1	A	230	TRP	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	174	GLY	4
1	A	240	VAL	4
1	A	75	LEU	3
1	A	78	GLU	3
1	A	120	ASP	3
1	A	239	LYS	3
1	A	270	SER	3
1	A	303	ALA	3
1	A	236	ASP	3
1	A	284	LEU	3
1	A	302	VAL	3
1	A	121	LEU	3
1	A	299	LEU	3
1	A	332	ASN	3
1	A	204	MET	2
1	A	251	LYS	2
1	A	271	PRO	2
1	A	313	LYS	2
1	A	56	GLY	2
1	A	123	PRO	2
1	A	235	ILE	2
1	A	315	PRO	2
1	A	233	SER	2
1	A	248	PRO	2
1	A	79	ILE	1
1	A	237	THR	1
1	A	267	ASN	1
1	A	269	ALA	1
1	A	40	PRO	1
1	A	163	ALA	1
1	A	184	ASP	1
1	A	234	ASN	1
1	A	255	SER	1
1	A	53	THR	1
1	A	229	PRO	1
1	A	238	SER	1
1	A	335	GLN	1
1	A	81	PRO	1
1	A	206	ALA	1
1	A	296	ASP	1
1	A	297	LYS	1
1	A	41	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	294	ASN	1
1	A	329	ILE	1
1	A	119	LYS	1
1	A	330	MET	1
1	A	13	GLY	1
1	A	305	LYS	1
1	A	312	ALA	1
1	A	104	ILE	1
1	A	268	ALA	1
1	A	223	ALA	1
1	A	355	GLN	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	295/297 (99%)	207±7 (70±2%)	88±7 (30±2%)	1	17
All	All	2950/2970 (99%)	2071 (70%)	879 (30%)	1	17

All 242 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	6	LYS	10
1	A	7	LEU	9
1	A	103	LEU	9
1	A	137	LYS	9
1	A	219	LYS	9
1	A	239	LYS	9
1	A	245	THR	9
1	A	305	LYS	9
1	A	139	LEU	9
1	A	76	LEU	8
1	A	261	VAL	8
1	A	297	LYS	8
1	A	121	LEU	8
1	A	356	THR	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	LYS	7
1	A	25	LYS	7
1	A	42	LYS	7
1	A	83	LYS	7
1	A	89	LEU	7
1	A	108	ILE	7
1	A	114	SER	7
1	A	119	LYS	7
1	A	170	LYS	7
1	A	202	LYS	7
1	A	284	LEU	7
1	A	299	LEU	7
1	A	311	LEU	7
1	A	26	LYS	7
1	A	31	THR	7
1	A	330	MET	7
1	A	88	LYS	7
1	A	75	LEU	6
1	A	98	ARG	6
1	A	102	LYS	6
1	A	104	ILE	6
1	A	144	LYS	6
1	A	195	LEU	6
1	A	209	ASP	6
1	A	277	LYS	6
1	A	290	LEU	6
1	A	333	ILE	6
1	A	262	LEU	6
1	A	313	LYS	6
1	A	365	GLN	6
1	A	203	HIS	6
1	A	249	THR	6
1	A	28	GLU	5
1	A	60	ILE	5
1	A	80	THR	5
1	A	90	TYR	5
1	A	130	GLU	5
1	A	148	MET	5
1	A	151	LEU	5
1	A	152	GLN	5
1	A	211	SER	5
1	A	251	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	280	LEU	5
1	A	320	THR	5
1	A	344	ARG	5
1	A	8	VAL	5
1	A	43	LEU	5
1	A	122	LEU	5
1	A	135	LEU	5
1	A	189	LYS	5
1	A	192	LEU	5
1	A	212	ILE	5
1	A	224	MET	5
1	A	253	GLN	5
1	A	255	SER	5
1	A	328	GLU	5
1	A	355	GLN	5
1	A	214	GLU	5
1	A	66	ARG	5
1	A	20	LEU	4
1	A	29	LYS	4
1	A	53	THR	4
1	A	93	THR	4
1	A	127	LYS	4
1	A	140	LYS	4
1	A	150	ASN	4
1	A	179	LYS	4
1	A	256	LYS	4
1	A	283	TYR	4
1	A	291	GLU	4
1	A	308	GLU	4
1	A	322	GLU	4
1	A	3	GLU	4
1	A	11	ILE	4
1	A	116	ILE	4
1	A	194	PHE	4
1	A	208	THR	4
1	A	359	GLU	4
1	A	120	ASP	4
1	A	142	LYS	4
1	A	156	PHE	4
1	A	171	TYR	4
1	A	175	LYS	4
1	A	204	MET	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	238	SER	4
1	A	348	ILE	4
1	A	153	GLU	4
1	A	326	LYS	4
1	A	361	LEU	4
1	A	46	LYS	4
1	A	128	THR	4
1	A	370	LYS	4
1	A	34	LYS	4
1	A	138	GLU	4
1	A	4	GLU	3
1	A	10	TRP	3
1	A	17	TYR	3
1	A	30	ASP	3
1	A	62	TRP	3
1	A	67	PHE	3
1	A	113	LEU	3
1	A	158	TRP	3
1	A	183	VAL	3
1	A	198	LEU	3
1	A	200	LYS	3
1	A	232	TRP	3
1	A	237	THR	3
1	A	247	LEU	3
1	A	273	LYS	3
1	A	274	GLU	3
1	A	302	VAL	3
1	A	336	MET	3
1	A	337	SER	3
1	A	339	PHE	3
1	A	39	HIS	3
1	A	131	GLU	3
1	A	160	LEU	3
1	A	197	ASP	3
1	A	233	SER	3
1	A	236	ASP	3
1	A	270	SER	3
1	A	295	LYS	3
1	A	367	ARG	3
1	A	44	GLU	3
1	A	78	GLU	3
1	A	86	GLN	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	111	GLU	3
1	A	118	ASN	3
1	A	222	THR	3
1	A	241	ASN	3
1	A	294	ASN	3
1	A	304	LEU	3
1	A	317	ILE	3
1	A	27	PHE	3
1	A	129	TRP	3
1	A	205	ASN	3
1	A	263	SER	3
1	A	72	GLN	3
1	A	178	ILE	3
1	A	306	SER	3
1	A	61	PHE	3
1	A	173	ASN	3
1	A	288	GLU	3
1	A	354	ARG	3
1	A	321	MET	3
1	A	59	ILE	2
1	A	115	LEU	2
1	A	147	LEU	2
1	A	217	PHE	2
1	A	278	GLU	2
1	A	296	ASP	2
1	A	349	ASN	2
1	A	161	ILE	2
1	A	176	TYR	2
1	A	185	ASN	2
1	A	258	PHE	2
1	A	33	ILE	2
1	A	106	TYR	2
1	A	310	GLU	2
1	A	329	ILE	2
1	A	341	TYR	2
1	A	45	GLU	2
1	A	100	ASN	2
1	A	132	ILE	2
1	A	218	ASN	2
1	A	279	PHE	2
1	A	325	GLN	2
1	A	340	TRP	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	18	ASN	2
1	A	36	THR	2
1	A	79	ILE	2
1	A	172	GLU	2
1	A	316	ARG	2
1	A	332	ASN	2
1	A	345	THR	2
1	A	22	GLU	2
1	A	225	THR	2
1	A	272	ASN	2
1	A	285	LEU	2
1	A	240	VAL	2
1	A	58	ASP	2
1	A	145	SER	2
1	A	201	ASN	1
1	A	266	ILE	1
1	A	335	GLN	1
1	A	368	ILE	1
1	A	38	GLU	1
1	A	227	ASN	1
1	A	235	ILE	1
1	A	281	GLU	1
1	A	366	THR	1
1	A	65	ASP	1
1	A	85	PHE	1
1	A	184	ASP	1
1	A	363	ASP	1
1	A	47	PHE	1
1	A	82	ASP	1
1	A	226	ILE	1
1	A	267	ASN	1
1	A	293	VAL	1
1	A	298	PRO	1
1	A	358	ASP	1
1	A	37	VAL	1
1	A	94	TRP	1
1	A	157	THR	1
1	A	196	VAL	1
1	A	110	VAL	1
1	A	343	VAL	1
1	A	9	ILE	1
1	A	64	HIS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	SER	1
1	A	123	PRO	1
1	A	230	TRP	1
1	A	244	VAL	1
1	A	250	PHE	1
1	A	275	LEU	1
1	A	286	THR	1
1	A	323	ASN	1
1	A	369	THR	1
1	A	49	GLN	1
1	A	180	ASP	1
1	A	309	GLU	1
1	A	14	ASP	1
1	A	169	PHE	1
1	A	234	ASN	1
1	A	259	VAL	1
1	A	357	VAL	1
1	A	362	LYS	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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided