



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 03:18 PM UTC

PDB ID : 2RO1 / pdb_00002ro1
Title : NMR Solution Structures of Human KAP1 PHD finger-bromodomain
Authors : Zeng, L.; Yap, K.L.; Ivanov, A.V.; Wang, X.; Mujtaba, S.; Plotnikova, O.;
Rauscher, F.J.
Deposited on : 2008-03-04

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

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

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

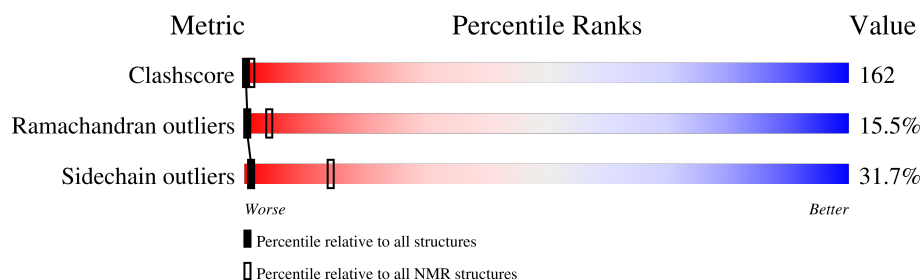
1 Overall quality at a glance

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	189	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:625-A:670, A:694-A:725, A:737-A:775, A:782-A:800 (136)	1.00	12

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

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

The models can be grouped into 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

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

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

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

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

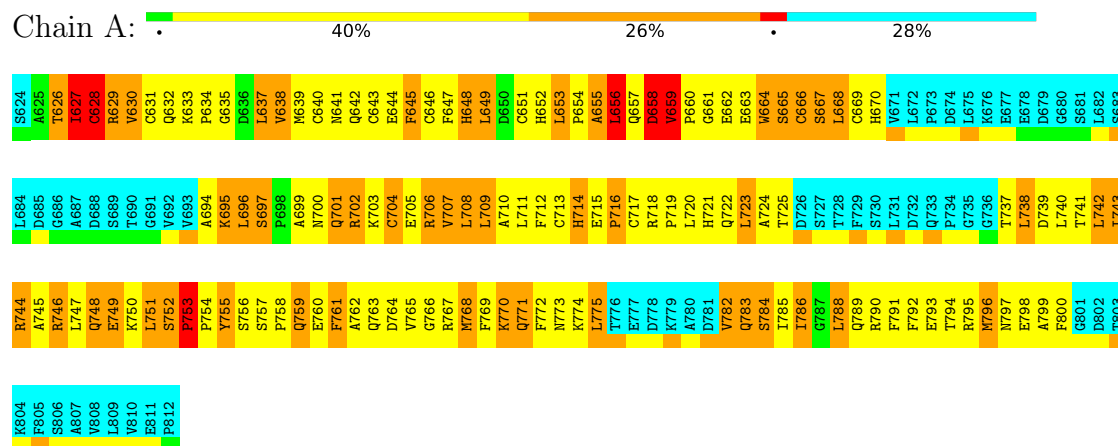
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Zn
			2	2

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, 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: Transcription intermediary factor 1-beta

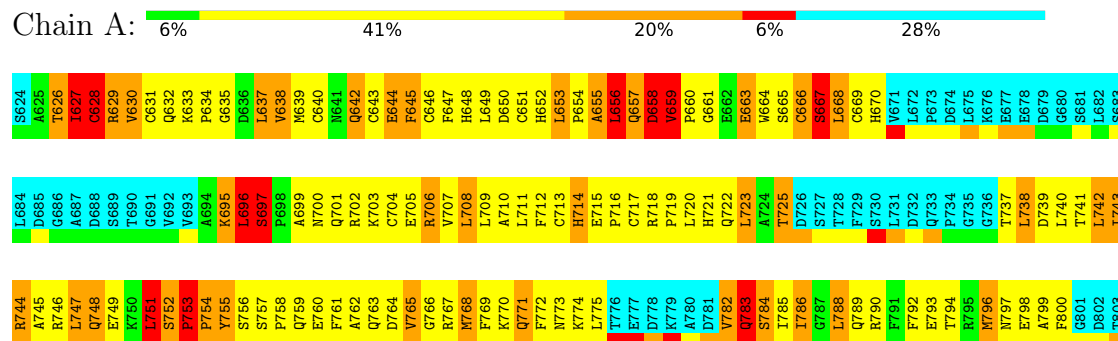


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

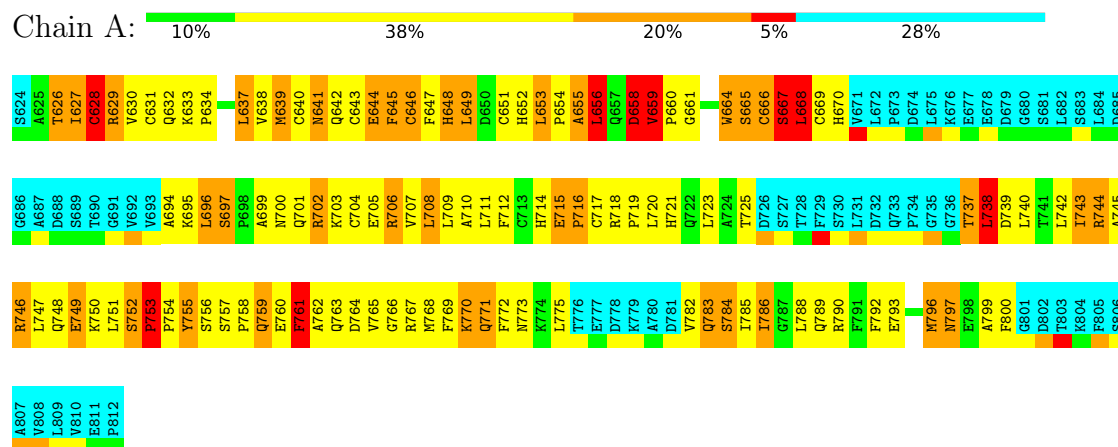
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





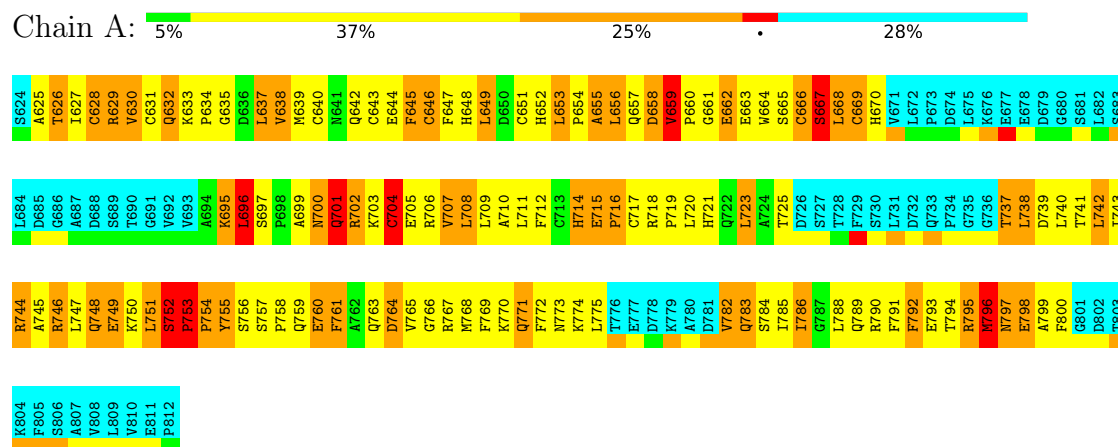
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



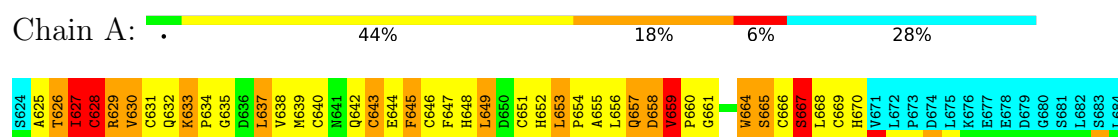
4.2.3 Score per residue for model 3

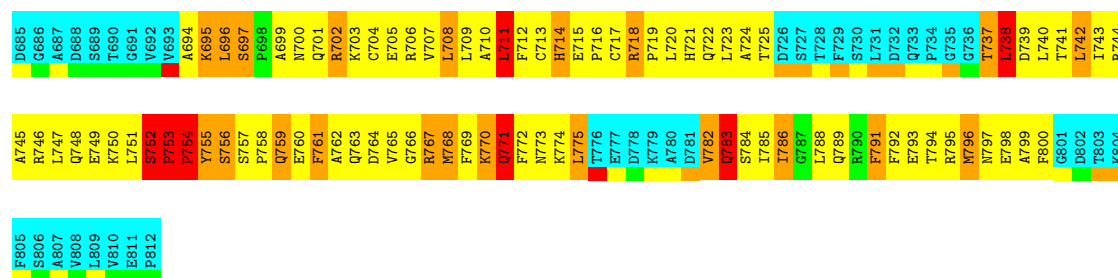
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.4 Score per residue for model 4

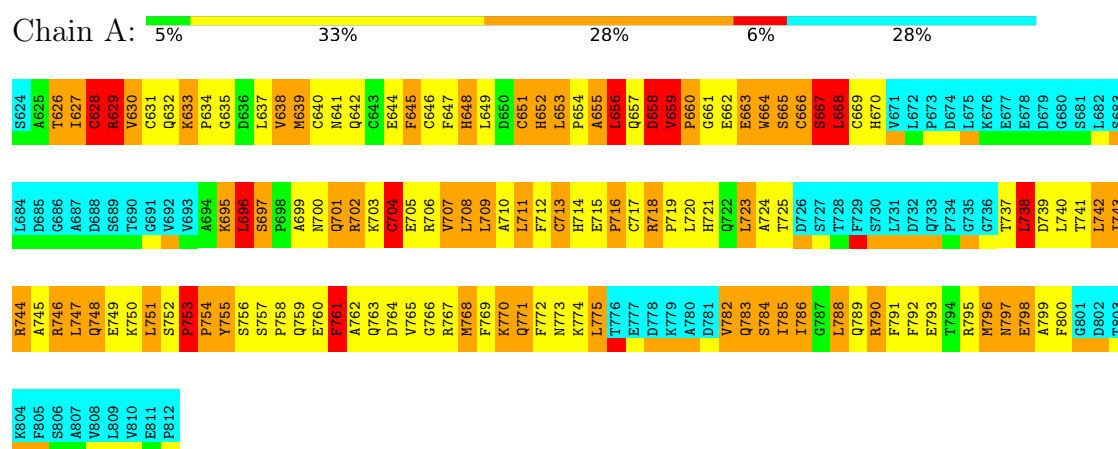
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





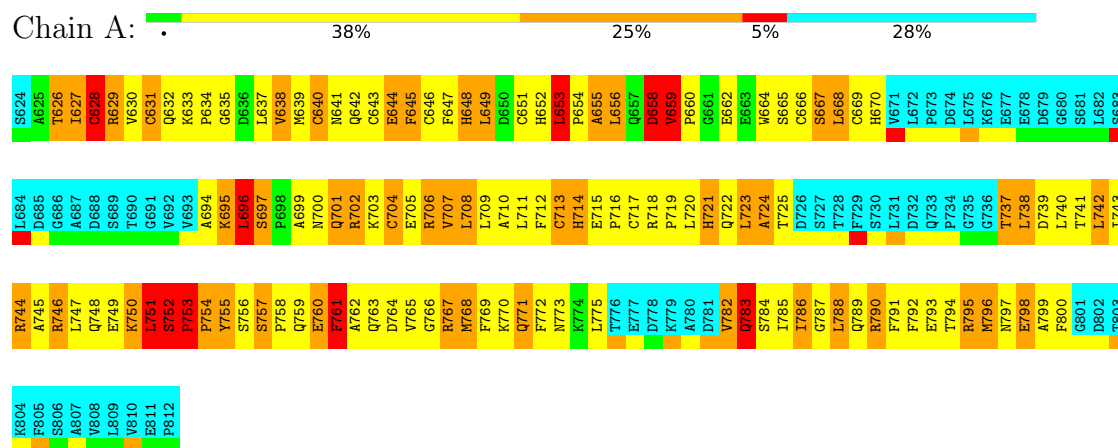
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



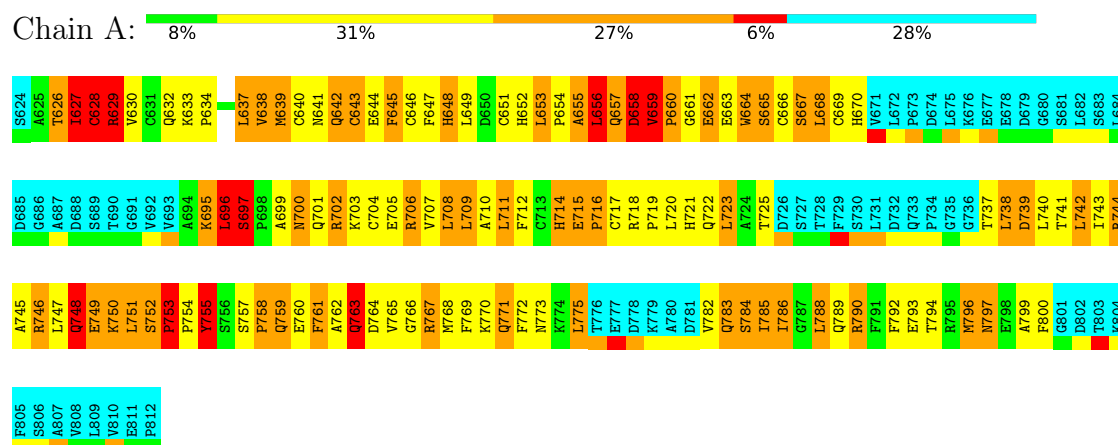
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



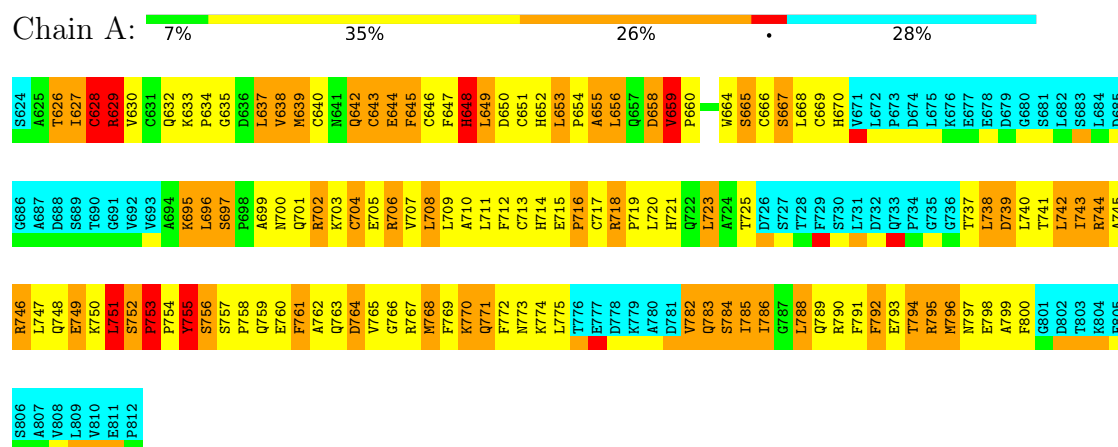
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



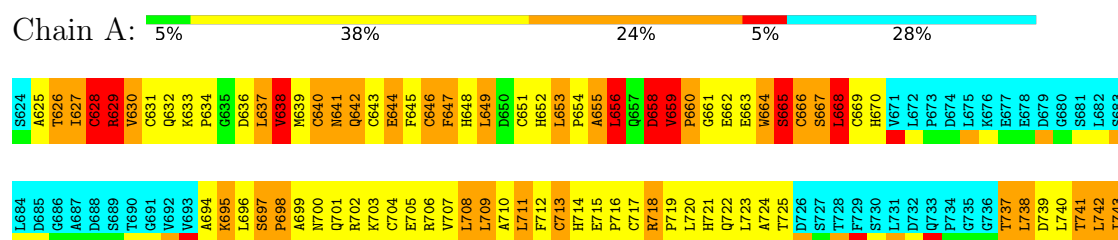
4.2.8 Score per residue for model 8

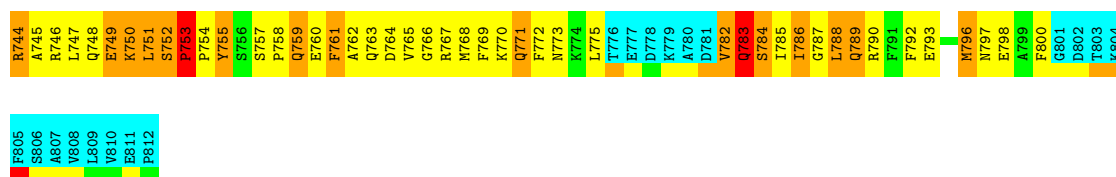
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.9 Score per residue for model 9

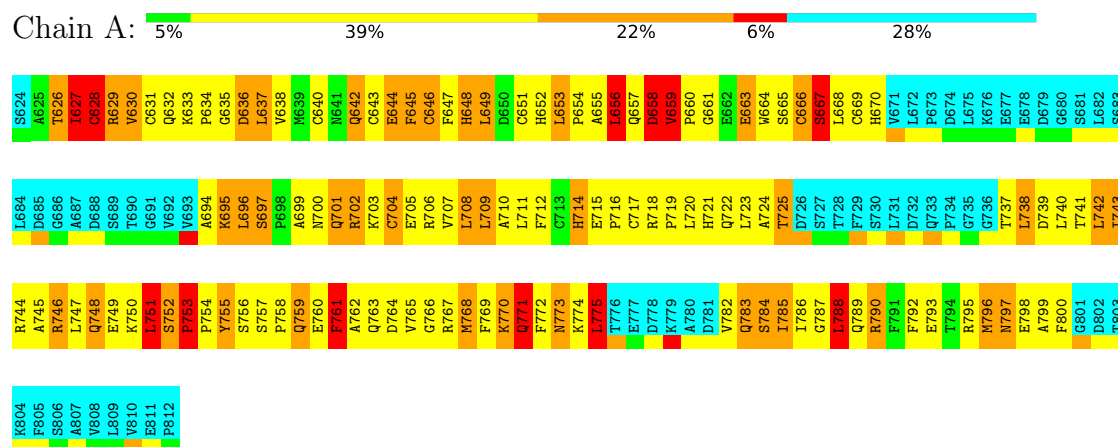
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





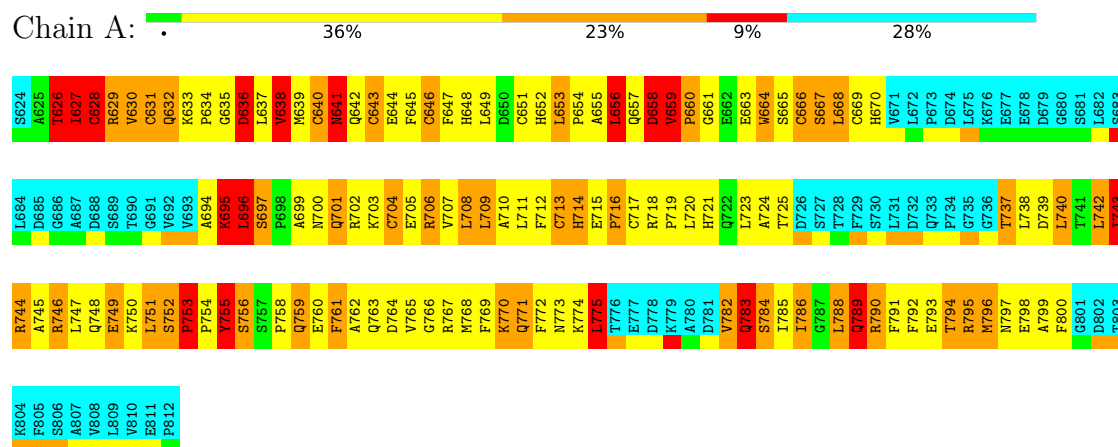
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.11 Score per residue for model 11

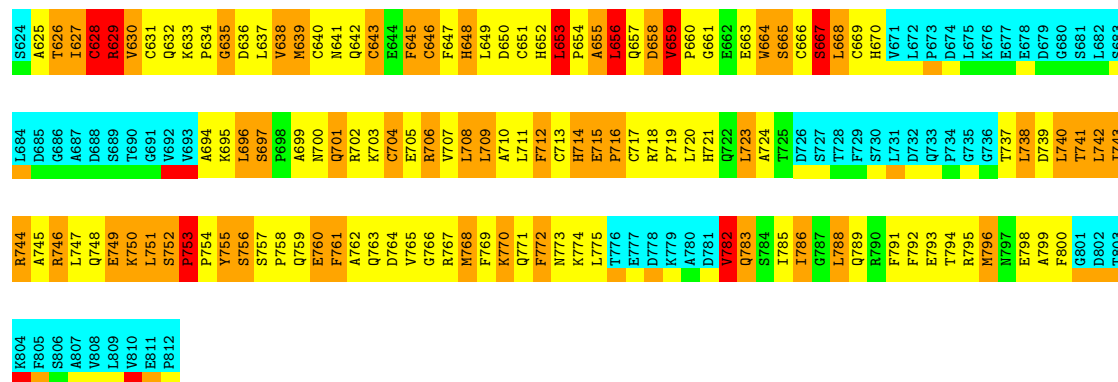
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

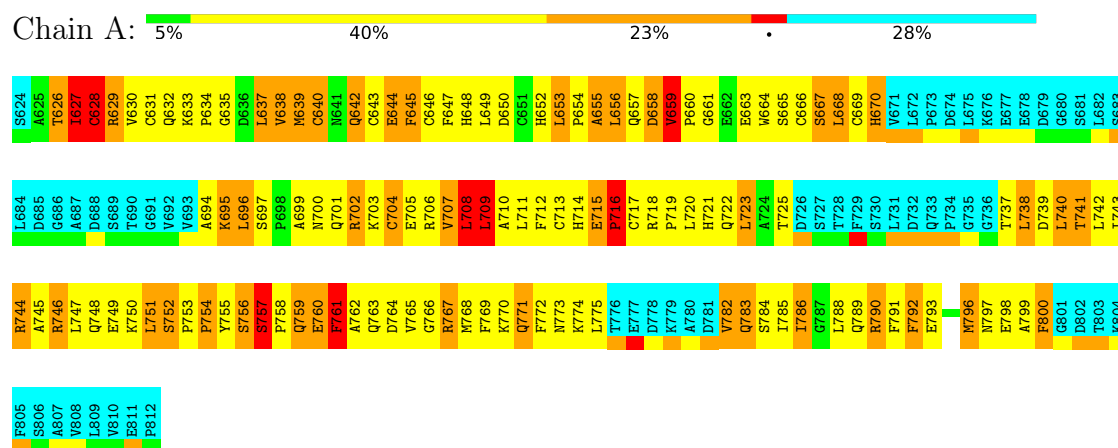
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





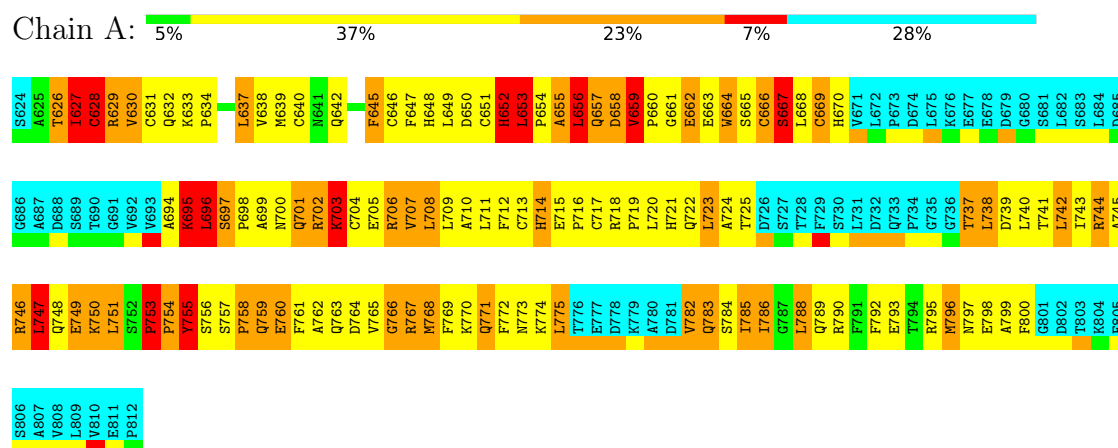
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



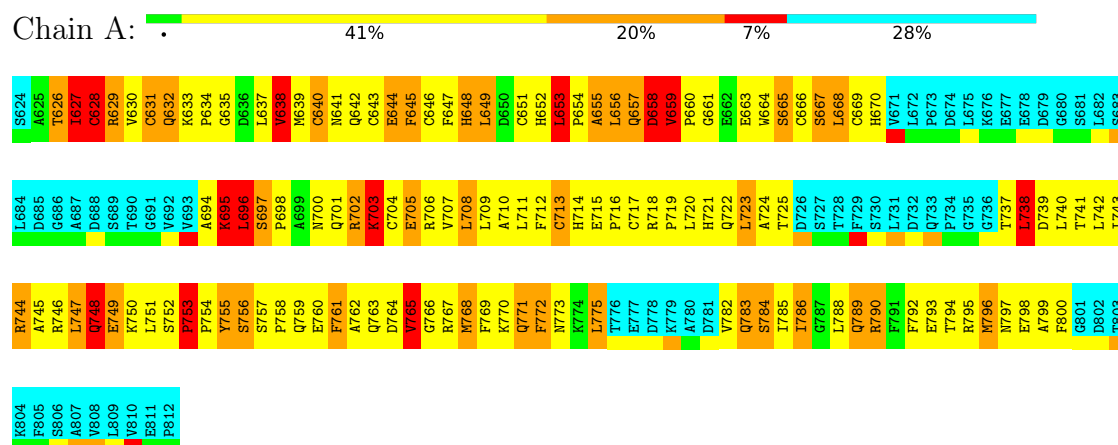
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



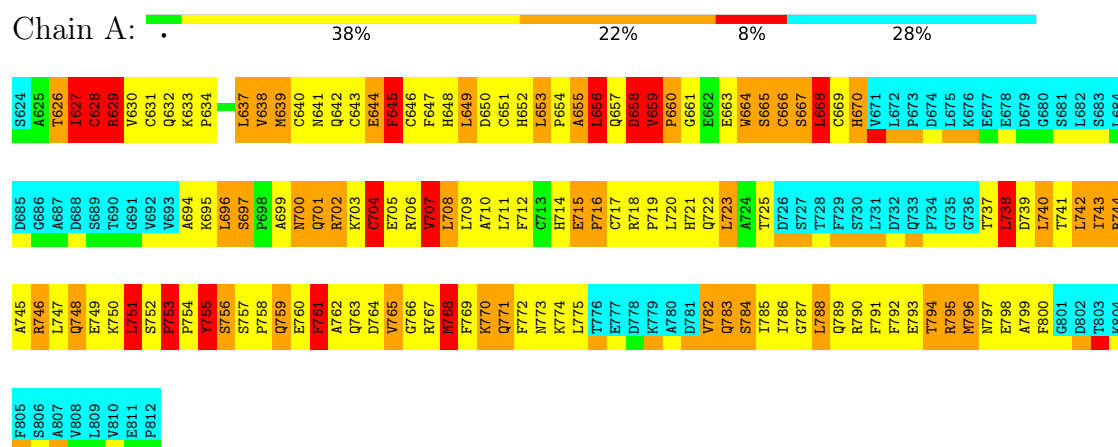
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



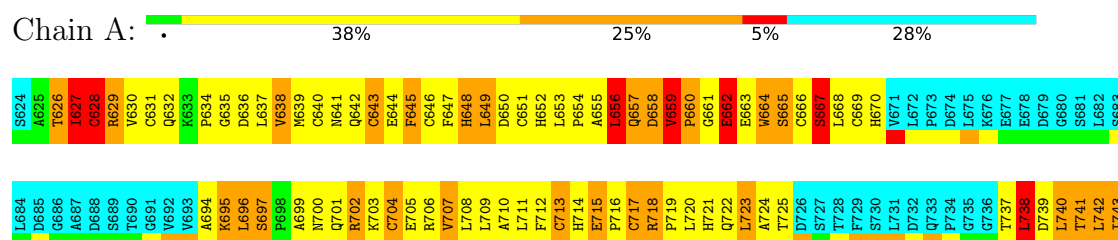
4.2.16 Score per residue for model 16

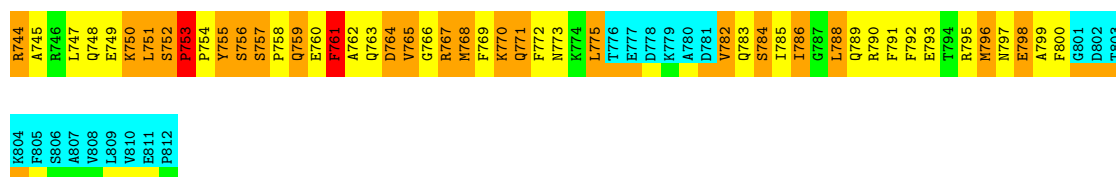
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.17 Score per residue for model 17

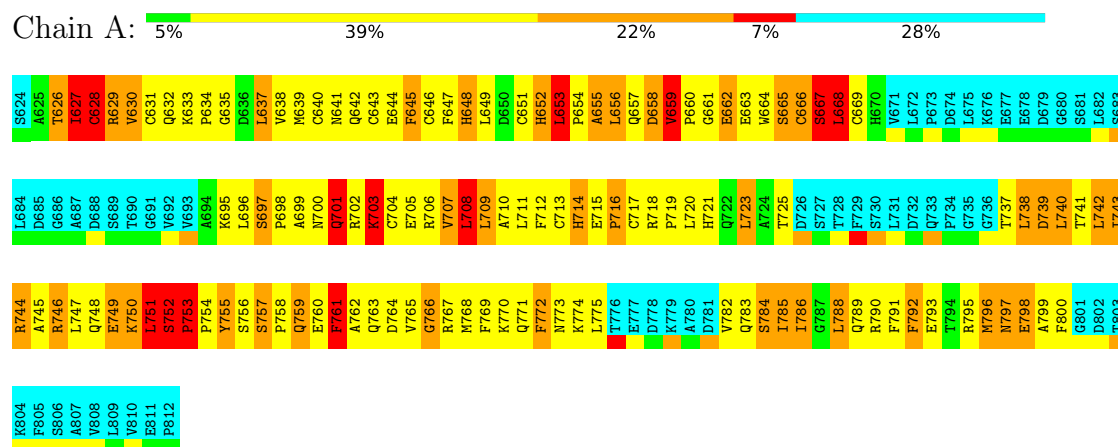
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





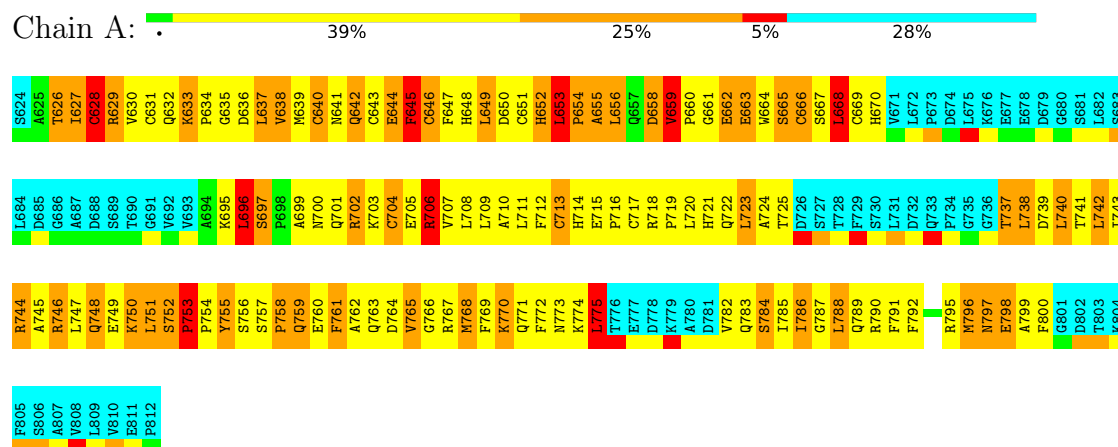
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



K804	R744	L684	S624
F805	A745	D685	A625
S806	R746	G686	T626
S807	L747	A687	L627
V808	Q748	D688	C628
L809	E749	S689	R629
V810	K750	T690	V630
E811	L751	G691	C631
F812	S752	V692	Q632
	P753	V693	K633
	P754	A694	P634
	Y755	K695	G635
	S756	L696	L636
	S757	S697	L637
	P758	P698	V638
	Q759	A699	M639
	E760	N700	C640
	F761	Q701	M641
	A762	R702	Q642
	Q763	K703	C643
	D764	C704	E644
	V765	E705	F645
	G766	R706	C646
	R767	V707	F647
	N768	L708	H648
	F769	L709	L649
	K770	A710	D650
	Q771	L711	C651
	F772	F712	H652
	N773	G713	L653
	K774	H714	P654
	L775	E715	A655
	T776	F716	L656
	E777	C717	Q657
	D778	R718	D658
	K779	P719	V659
	A780	L720	P660
	D781	H721	G661
	V782	Q722	E662
	Q783	L723	E663
	S784	A724	M664
	I785	T725	S665
	I786	D726	C666
	G787	S727	S667
	L788	T728	L668
	Q789	F729	C669
	R790	S730	H670
	F791	L731	V671
	E792	D732	L672
	E793	Q733	P673
	R794	P734	D674
	R795	G735	L675
	M796	G736	K676
	N797	T737	E677
	E798	L738	E678
	A799	D739	D679
	F800	L740	G680
	G801	T741	S681
	D802	L742	L682
	T803	I743	S683

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.32±0.03	2±1/1115 (0.1± 0.1%)	1.33±0.03	10±3/1508 (0.7± 0.2%)
All	All	1.32	30/22300 (0.1%)	1.33	197/30160 (0.7%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	654	PRO	N-CA	-6.91	1.42	1.47	20	1
1	A	765	VAL	CA-CB	-6.29	1.46	1.54	16	3
1	A	703	LYS	N-CA	-6.25	1.38	1.46	14	2
1	A	785	ILE	N-CA	-5.88	1.39	1.46	7	3
1	A	765	VAL	N-CA	-5.53	1.40	1.46	19	1
1	A	708	LEU	CA-C	-5.51	1.45	1.52	16	3
1	A	738	LEU	N-CA	-5.48	1.39	1.46	16	2
1	A	633	LYS	CA-CB	-5.46	1.46	1.53	19	2
1	A	709	LEU	N-CA	-5.39	1.39	1.46	13	3
1	A	659	VAL	N-CA	-5.24	1.40	1.46	16	2
1	A	755	TYR	CA-CB	-5.22	1.44	1.53	14	1
1	A	658	ASP	C-N	-5.21	1.27	1.33	16	1
1	A	743	ILE	CA-CB	-5.16	1.48	1.54	11	2
1	A	638	VAL	CA-CB	-5.14	1.47	1.53	9	1
1	A	761	PHE	N-CA	-5.08	1.39	1.46	15	1
1	A	763	GLN	N-CA	-5.06	1.40	1.46	7	1
1	A	696	LEU	N-CA	-5.02	1.41	1.46	11	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	659	VAL	N-CA-CB	-9.42	98.02	111.21	16	5
1	A	753	PRO	N-CA-CB	-9.39	93.97	103.08	16	16
1	A	784	SER	N-CA-C	-8.98	101.90	113.12	5	14
1	A	761	PHE	CA-CB-CG	7.70	121.50	113.80	16	8
1	A	795	ARG	N-CA-C	-7.69	102.90	111.82	11	4
1	A	659	VAL	CA-C-N	7.59	129.32	119.84	7	17
1	A	659	VAL	C-N-CA	7.59	129.32	119.84	7	17
1	A	753	PRO	N-CA-C	7.57	119.94	110.70	4	3
1	A	766	GLY	N-CA-C	-7.55	104.32	113.99	20	3
1	A	645	PHE	CA-CB-CG	7.52	121.32	113.80	19	1
1	A	696	LEU	N-CA-C	-7.37	103.27	111.82	14	9
1	A	752	SER	N-CA-C	7.36	114.75	108.13	13	1
1	A	746	ARG	N-CA-C	-7.32	103.24	111.14	12	2
1	A	708	LEU	N-CA-C	-7.08	103.56	111.28	13	3
1	A	743	ILE	N-CA-CB	-7.08	103.19	110.62	17	3
1	A	707	VAL	N-CA-C	7.03	117.14	110.74	16	2
1	A	757	SER	N-CA-C	6.93	114.24	108.07	6	1
1	A	667	SER	N-CA-C	-6.46	105.71	113.97	1	2
1	A	785	ILE	N-CA-C	-6.37	104.12	110.30	18	1
1	A	704	CYS	N-CA-C	-6.32	104.49	111.82	5	3
1	A	706	ARG	N-CA-C	-6.31	105.55	113.18	1	3
1	A	775	LEU	N-CA-C	-6.23	104.57	111.36	5	5
1	A	701	GLN	N-CA-C	-6.21	104.59	111.36	18	6
1	A	695	LYS	N-CA-C	-6.21	104.42	112.68	9	3
1	A	657	GLN	N-CA-C	-6.03	106.56	114.04	14	3
1	A	714	HIS	CA-CB-CG	5.96	119.76	113.80	12	9
1	A	638	VAL	N-CA-CB	-5.94	104.42	111.90	1	2
1	A	761	PHE	N-CA-CB	-5.93	101.68	110.10	6	1
1	A	783	GLN	N-CA-C	-5.93	106.09	113.15	11	1
1	A	703	LYS	N-CA-CB	-5.80	101.30	110.28	15	2
1	A	646	CYS	N-CA-C	5.75	118.31	110.55	19	1
1	A	757	SER	CA-C-N	5.74	127.01	119.84	13	1
1	A	757	SER	C-N-CA	5.74	127.01	119.84	13	1
1	A	789	GLN	N-CA-C	-5.65	105.48	112.38	11	1
1	A	772	PHE	N-CA-C	-5.59	105.27	111.36	18	1
1	A	707	VAL	N-CA-CB	-5.59	103.94	110.64	16	1
1	A	796	MET	N-CA-C	-5.54	106.37	113.01	3	1
1	A	771	GLN	N-CA-C	-5.50	104.69	111.40	20	3
1	A	768	MET	CA-C-N	5.50	127.91	120.38	16	1
1	A	768	MET	C-N-CA	5.50	127.91	120.38	16	1
1	A	707	VAL	CB-CA-C	-5.49	104.94	111.97	6	1
1	A	700	ASN	N-CA-C	-5.44	105.35	111.28	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	758	PRO	N-CA-C	-5.35	107.45	114.03	19	2
1	A	705	GLU	N-CA-C	-5.33	105.88	112.38	15	1
1	A	753	PRO	CA-C-N	5.30	126.46	119.84	4	4
1	A	753	PRO	C-N-CA	5.30	126.46	119.84	4	4
1	A	759	GLN	N-CA-C	-5.30	106.82	113.28	7	2
1	A	725	THR	N-CA-C	-5.29	105.11	112.30	10	2
1	A	645	PHE	CB-CA-C	5.28	118.75	110.19	19	1
1	A	747	LEU	N-CA-CB	-5.25	101.21	109.78	14	1
1	A	753	PRO	CB-CA-C	5.22	117.29	110.92	6	1
1	A	668	LEU	N-CA-C	-5.20	107.32	113.97	19	1
1	A	754	PRO	CA-N-CD	-5.19	104.73	112.00	4	1
1	A	638	VAL	CB-CA-C	-5.18	104.67	111.25	15	1
1	A	658	ASP	CA-C-N	5.18	131.72	122.13	16	1
1	A	658	ASP	C-N-CA	5.18	131.72	122.13	16	1
1	A	749	GLU	N-CA-C	-5.17	106.37	113.56	20	1
1	A	663	GLU	N-CA-C	-5.15	106.58	112.92	10	1
1	A	768	MET	N-CA-C	-5.14	104.75	111.02	4	1
1	A	654	PRO	N-CA-C	-5.14	108.03	114.20	19	1
1	A	669	CYS	N-CA-C	-5.13	107.68	114.04	3	2
1	A	797	ASN	N-CA-C	-5.09	105.38	112.45	3	1
1	A	743	ILE	CB-CA-C	-5.04	105.44	112.04	1	1
1	A	788	LEU	N-CA-C	-5.02	105.91	112.23	10	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1089	1081	1077	352±22
All	All	21820	21620	21540	7042

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 162.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:HE3	1.12	1.15	16	10
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HD13	1.06	1.27	11	2
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HG22	1.05	1.26	18	9
1:A:738:LEU:HD12	1:A:743:ILE:HD11	1.04	1.28	13	4
1:A:653:LEU:HD11	1:A:708:LEU:HB2	1.04	1.23	19	13
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:HG13	1.02	1.93	9	4
1:A:720:LEU:HD12	1:A:723:LEU:HD11	1.01	1.25	18	8
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:HB3	1.01	1.29	9	1
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:HD11	1.01	1.05	18	3
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:HD12	0.97	1.34	6	11
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE3	0.97	1.35	20	12
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:HD21	0.95	1.38	12	14
1:A:738:LEU:HD12	1:A:767:ARG:HD2	0.95	1.36	4	2
1:A:738:LEU:HD22	1:A:768:MET:HG3	0.94	1.39	17	2
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:CD	0.93	1.93	16	1
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HD12	0.93	1.63	18	2
1:A:738:LEU:HD21	1:A:767:ARG:HB3	0.93	1.41	7	5
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:HD11	0.92	2.05	5	3
1:A:738:LEU:HD13	1:A:738:LEU:O	0.92	1.62	2	2
1:A:653:LEU:HD23	1:A:709:LEU:HD23	0.92	1.37	12	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HD12	0.92	1.39	4	2
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HD12	0.91	1.81	1	11
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HD12	0.91	1.43	19	5
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:HG23	0.91	1.66	16	13
1:A:765:VAL:HG11	1:A:792:PHE:CE1	0.91	2.01	16	15
1:A:740:LEU:HD23	1:A:768:MET:SD	0.90	2.06	3	5
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:HD13	0.89	1.45	11	5
1:A:649:LEU:HD22	1:A:656:LEU:HD23	0.89	1.44	5	11
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HB3	0.89	1.41	10	11
1:A:707:VAL:HG13	1:A:795:ARG:NH2	0.89	1.80	6	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:HD21	0.89	2.08	20	2
1:A:738:LEU:HD23	1:A:743:ILE:HD11	0.89	1.43	15	2
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HD23	0.88	1.67	16	9
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:CG	0.88	2.03	18	3
1:A:703:LYS:HB3	1:A:799:ALA:HB1	0.88	1.43	3	5
1:A:742:LEU:HD12	1:A:743:ILE:H	0.88	1.26	18	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:660:PRO:HD3	0.88	1.45	10	14
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CE2	0.88	2.04	5	9
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:N	0.88	1.84	3	18
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CZ	0.88	2.03	3	9
1:A:742:LEU:HD12	1:A:743:ILE:N	0.88	1.84	18	4
1:A:653:LEU:HD11	1:A:708:LEU:CB	0.87	2.00	1	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:739:ASP:N	1:A:742:LEU:HD11	0.87	1.84	18	4
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:HG22	0.87	1.45	7	6
1:A:747:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CE2	0.87	2.04	3	10
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:HD23	0.87	1.44	19	6
1:A:707:VAL:HG13	1:A:792:PHE:CE2	0.87	2.04	16	1
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HD23	0.86	1.85	13	7
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:N	0.86	1.85	10	4
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:N	0.86	1.85	13	2
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD22	0.86	2.05	9	8
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:N	0.86	1.85	8	10
1:A:638:VAL:HG23	1:A:647:PHE:HB2	0.85	1.48	20	5
1:A:755:TYR:CE1	1:A:761:PHE:HB3	0.85	2.07	11	8
1:A:656:LEU:HD21	1:A:660:PRO:HG3	0.85	1.47	14	7
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:HB3	0.85	1.48	12	12
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HG13	0.85	1.45	9	8
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:HG2	0.84	1.48	16	3
1:A:738:LEU:HD13	1:A:738:LEU:N	0.84	1.87	6	3
1:A:796:MET:HE2	1:A:800:PHE:CE1	0.84	2.06	7	13
1:A:708:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HG22	0.84	2.01	18	5
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:N	0.84	1.87	15	5
1:A:711:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD21	0.84	1.47	9	1
1:A:711:LEU:O	1:A:717:CYS:SG	0.84	2.35	4	19
1:A:747:LEU:HD11	1:A:761:PHE:CD2	0.83	2.08	12	4
1:A:773:ASN:HB3	1:A:785:ILE:HG21	0.83	1.50	20	1
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:HG11	0.83	1.50	16	1
1:A:721:HIS:O	1:A:741:THR:HG23	0.83	1.74	4	9
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:C	0.83	1.97	20	8
1:A:653:LEU:HD12	1:A:705:GLU:O	0.83	1.72	1	11
1:A:638:VAL:HG13	1:A:659:VAL:HG12	0.83	1.49	5	10
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:CZ	0.83	2.08	16	1
1:A:740:LEU:N	1:A:768:MET:SD	0.83	2.52	19	11
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:HB2	0.83	1.49	5	4
1:A:711:LEU:HG	1:A:740:LEU:HD22	0.83	1.50	4	1
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:CE	0.83	2.04	20	8
1:A:720:LEU:HB3	1:A:768:MET:SD	0.83	2.14	5	8
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:HD12	0.82	1.50	11	2
1:A:703:LYS:C	1:A:703:LYS:HD2	0.82	2.00	15	1
1:A:656:LEU:CG	1:A:659:VAL:HG11	0.82	2.04	16	1
1:A:743:ILE:HD11	1:A:768:MET:HG3	0.82	1.51	14	9
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:HD13	0.82	1.51	10	1
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:SD	0.81	2.15	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:696:LEU:HD21	1:A:755:TYR:CD2	0.81	2.10	9	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HB2	0.81	1.50	18	3
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HD11	0.81	2.10	11	1
1:A:769:PHE:CD2	1:A:789:GLN:HG3	0.81	2.11	15	2
1:A:786:ILE:HG22	1:A:790:ARG:HD3	0.81	1.52	10	1
1:A:740:LEU:HA	1:A:743:ILE:HD12	0.81	1.53	5	3
1:A:649:LEU:HB3	1:A:656:LEU:HB2	0.81	1.52	6	14
1:A:737:THR:C	1:A:738:LEU:HD23	0.80	2.00	7	5
1:A:738:LEU:HD11	1:A:764:ASP:O	0.80	1.77	1	6
1:A:755:TYR:CG	1:A:760:GLU:HG2	0.80	2.11	3	6
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:HA	0.80	1.54	3	4
1:A:755:TYR:HA	1:A:760:GLU:HG2	0.80	1.53	13	3
1:A:720:LEU:HD22	1:A:768:MET:SD	0.80	2.15	16	8
1:A:747:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CD2	0.80	2.11	5	2
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HD13	0.80	2.06	11	2
1:A:757:SER:HB3	1:A:758:PRO:HD2	0.80	1.54	20	2
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD23	0.80	2.12	4	1
1:A:769:PHE:CD1	1:A:788:LEU:HD21	0.79	2.12	6	7
1:A:656:LEU:HD22	1:A:660:PRO:HG3	0.79	1.51	4	1
1:A:659:VAL:HG22	1:A:660:PRO:HD2	0.79	1.52	16	2
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:HD23	0.79	1.54	8	2
1:A:765:VAL:HG12	1:A:769:PHE:CZ	0.79	2.11	12	13
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:HE2	0.79	1.54	8	1
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:C	0.79	2.02	19	18
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:HB3	0.79	1.52	11	3
1:A:739:ASP:C	1:A:768:MET:SD	0.79	2.66	20	11
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:NE	0.79	1.92	2	1
1:A:773:ASN:HB2	1:A:785:ILE:HG21	0.79	1.55	19	10
1:A:659:VAL:CG2	1:A:660:PRO:HD2	0.78	2.08	16	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:701:GLN:N	0.78	1.92	16	3
1:A:634:PRO:HA	1:A:637:LEU:HD11	0.78	1.55	1	11
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HG	0.78	1.55	3	2
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HA	0.78	1.54	10	4
1:A:696:LEU:CB	1:A:757:SER:HB2	0.78	2.08	20	1
1:A:752:SER:C	1:A:754:PRO:HD2	0.78	2.04	20	2
1:A:747:LEU:HG	1:A:755:TYR:OH	0.78	1.78	20	1
1:A:638:VAL:HG12	1:A:647:PHE:O	0.78	1.79	10	7
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:HB2	0.78	1.78	1	10
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HD22	0.78	2.08	4	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HA	0.77	1.54	17	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:711:LEU:HD12	0.77	1.55	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:LEU:CB	1:A:656:LEU:HB2	0.77	2.09	6	6
1:A:738:LEU:HD21	1:A:764:ASP:O	0.77	1.78	15	6
1:A:791:PHE:CD2	1:A:792:PHE:N	0.77	2.53	4	1
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:HG21	0.77	1.56	16	1
1:A:746:ARG:HB2	1:A:751:LEU:HD23	0.77	1.55	4	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HG23	0.77	2.14	4	12
1:A:627:ILE:HG22	1:A:633:LYS:C	0.77	2.05	3	12
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:CG	0.77	2.15	16	6
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:HB	0.76	2.21	10	14
1:A:638:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HD2	0.76	2.10	20	11
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HD23	0.76	1.55	6	5
1:A:755:TYR:CE1	1:A:760:GLU:HB3	0.76	2.16	9	8
1:A:708:LEU:HD22	1:A:740:LEU:HD12	0.76	1.58	19	1
1:A:717:CYS:O	1:A:720:LEU:N	0.76	2.19	2	19
1:A:711:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HD11	0.76	2.11	4	1
1:A:747:LEU:N	1:A:755:TYR:OH	0.76	2.19	20	2
1:A:752:SER:HB2	1:A:753:PRO:HD3	0.76	1.58	12	11
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:CB	0.76	2.10	17	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:761:PHE:CE2	0.76	2.15	2	3
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:HD2	0.76	1.57	10	7
1:A:708:LEU:CD1	1:A:744:ARG:HA	0.76	2.11	19	7
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:HE2	0.75	1.40	19	7
1:A:640:CYS:HB2	1:A:666:CYS:HB3	0.75	1.58	3	7
1:A:765:VAL:HB	1:A:768:MET:HE2	0.75	1.59	20	3
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:CE	0.75	2.10	7	9
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD23	0.75	2.16	9	2
1:A:765:VAL:O	1:A:768:MET:HB2	0.75	1.82	15	16
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:HD11	0.75	1.57	7	9
1:A:638:VAL:O	1:A:646:CYS:HA	0.75	1.82	5	17
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD11	0.75	1.40	18	5
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HG	0.75	1.57	6	2
1:A:720:LEU:HD22	1:A:769:PHE:CZ	0.75	2.17	11	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:HB2	0.75	1.58	16	1
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HD13	0.74	1.82	16	13
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD13	0.74	1.59	3	3
1:A:761:PHE:CD1	1:A:761:PHE:C	0.74	2.65	5	14
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:CD2	0.74	2.17	16	2
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:HB2	0.74	1.82	8	18
1:A:761:PHE:C	1:A:761:PHE:HD1	0.74	1.90	18	9
1:A:638:VAL:HG21	1:A:656:LEU:HD21	0.74	1.57	17	1
1:A:751:LEU:HD22	1:A:752:SER:N	0.74	1.97	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:724:ALA:HB2	1:A:737:THR:HG22	0.74	1.56	6	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:628:CYS:O	0.74	2.44	16	12
1:A:751:LEU:HD13	1:A:752:SER:H	0.74	1.43	11	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD12	0.74	1.58	6	4
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:HD11	0.74	1.57	8	6
1:A:630:VAL:HG11	1:A:651:CYS:HB3	0.74	1.58	10	8
1:A:701:GLN:HA	1:A:704:CYS:SG	0.74	2.22	15	7
1:A:761:PHE:CD1	1:A:762:ALA:N	0.74	2.55	7	8
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:HD12	0.74	2.07	11	2
1:A:656:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG11	0.74	2.13	16	1
1:A:659:VAL:CB	1:A:660:PRO:HD2	0.74	2.12	16	1
1:A:711:LEU:HD13	1:A:791:PHE:CE2	0.74	2.18	4	1
1:A:649:LEU:HG	1:A:659:VAL:N	0.74	1.98	15	2
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CB	0.74	2.11	10	1
1:A:701:GLN:O	1:A:704:CYS:SG	0.74	2.45	20	3
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:CZ	0.74	2.18	14	4
1:A:765:VAL:HG11	1:A:792:PHE:CD1	0.74	2.18	4	14
1:A:711:LEU:HA	1:A:714:HIS:CE1	0.74	2.17	6	18
1:A:707:VAL:CG2	1:A:708:LEU:N	0.74	2.50	5	2
1:A:742:LEU:HD13	1:A:751:LEU:HD11	0.74	1.57	5	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:HB2	0.74	1.60	9	4
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD12	0.74	2.17	13	1
1:A:628:CYS:O	1:A:630:VAL:N	0.73	2.21	2	20
1:A:711:LEU:CB	1:A:740:LEU:HD11	0.73	2.13	11	6
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:HB3	0.73	1.83	11	6
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG12	0.73	1.59	5	2
1:A:749:GLU:HA	1:A:754:PRO:HG3	0.73	1.60	1	1
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CG	0.73	2.36	6	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:HG22	0.73	1.84	2	4
1:A:737:THR:C	1:A:738:LEU:HD13	0.73	2.08	15	2
1:A:716:PRO:O	1:A:719:PRO:HD2	0.73	1.82	4	19
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HB2	0.73	1.60	6	6
1:A:711:LEU:HA	1:A:714:HIS:NE2	0.73	1.99	11	12
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG13	0.73	1.59	5	11
1:A:723:LEU:HD12	1:A:738:LEU:O	0.73	1.82	3	8
1:A:649:LEU:O	1:A:652:HIS:HB3	0.73	1.82	3	18
1:A:645:PHE:CE2	1:A:668:LEU:HD23	0.73	2.19	7	4
1:A:704:CYS:SG	1:A:796:MET:HE1	0.73	2.24	11	4
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HD2	0.73	2.13	16	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:768:MET:CE	0.73	2.14	17	2
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:H	0.72	1.44	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:O	0.72	2.07	17	5
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CD2	0.72	2.19	5	1
1:A:701:GLN:HB2	1:A:756:SER:O	0.72	1.84	20	2
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HG2	0.72	1.85	15	3
1:A:786:ILE:HG22	1:A:790:ARG:HD2	0.72	1.58	16	2
1:A:738:LEU:CD1	1:A:743:ILE:HD11	0.72	2.15	19	4
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:HD12	0.72	2.18	11	3
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HD21	0.72	2.20	11	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HG2	0.72	1.59	2	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HB2	0.72	1.61	12	4
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CE2	0.72	2.20	19	2
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:NE2	0.72	1.99	19	17
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:HD23	0.72	2.20	19	5
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:HD13	0.71	2.00	16	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:HD2	0.71	1.43	16	1
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:HG	0.71	1.84	11	12
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:HD13	0.71	2.25	15	2
1:A:640:CYS:SG	1:A:665:SER:HA	0.71	2.24	4	17
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HD12	0.71	1.62	8	8
1:A:649:LEU:O	1:A:655:ALA:HA	0.71	1.85	5	16
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:HD2	0.71	1.43	7	5
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:HD13	0.71	1.61	13	3
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:HB2	0.71	1.60	10	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:CG	0.71	2.16	19	1
1:A:668:LEU:H	1:A:709:LEU:HD23	0.71	1.45	20	1
1:A:717:CYS:N	1:A:788:LEU:HD21	0.71	2.00	3	3
1:A:717:CYS:O	1:A:718:ARG:C	0.71	2.34	3	19
1:A:648:HIS:O	1:A:651:CYS:N	0.71	2.23	9	2
1:A:639:MET:HE3	1:A:644:GLU:HA	0.71	1.62	2	9
1:A:653:LEU:HD11	1:A:708:LEU:HB3	0.71	1.61	1	2
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:N	0.70	2.24	3	20
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD22	0.70	1.46	19	8
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:HB2	0.70	1.63	7	5
1:A:737:THR:HG23	1:A:738:LEU:N	0.70	1.99	6	1
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:HD2	0.70	1.59	16	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:CG1	0.70	2.17	9	4
1:A:747:LEU:HD22	1:A:761:PHE:HE2	0.70	1.44	4	2
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:CG2	0.70	2.16	9	4
1:A:708:LEU:HD23	1:A:747:LEU:HD12	0.70	1.63	8	3
1:A:647:PHE:C	1:A:649:LEU:H	0.70	1.94	2	17
1:A:707:VAL:CG2	1:A:796:MET:HE3	0.70	2.17	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HA	0.70	1.62	15	8
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:CG	0.70	2.16	16	1
1:A:707:VAL:HG11	1:A:796:MET:HE3	0.70	1.62	14	2
1:A:695:LYS:C	1:A:756:SER:HA	0.70	2.11	5	7
1:A:792:PHE:HA	1:A:795:ARG:NH2	0.70	2.02	6	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HA	0.70	1.62	19	2
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD23	0.70	1.47	13	2
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG12	0.70	1.87	3	2
1:A:743:ILE:HD11	1:A:765:VAL:N	0.70	2.02	12	3
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HB3	0.70	1.63	9	2
1:A:788:LEU:O	1:A:789:GLN:C	0.70	2.35	18	7
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HG3	0.70	1.64	20	2
1:A:792:PHE:HA	1:A:795:ARG:CZ	0.70	2.16	6	1
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CE1	0.70	2.22	13	6
1:A:742:LEU:O	1:A:745:ALA:HB3	0.69	1.87	11	9
1:A:660:PRO:HG3	1:A:664:TRP:CD1	0.69	2.22	16	2
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CE1	0.69	2.22	17	5
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CA	0.69	2.17	13	4
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:CG	0.69	2.22	9	4
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:CB	0.69	2.17	13	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:HD12	0.69	2.22	13	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:N	0.69	2.03	5	4
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:HB2	0.69	1.87	4	1
1:A:740:LEU:HD21	1:A:768:MET:CE	0.69	2.17	5	2
1:A:769:PHE:O	1:A:773:ASN:HB2	0.69	1.87	8	12
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:C	0.69	2.13	7	3
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HD3	0.69	1.64	15	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:CD1	0.69	2.18	12	1
1:A:703:LYS:CE	1:A:799:ALA:HB3	0.69	2.18	18	2
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:HB2	0.69	1.88	5	10
1:A:786:ILE:HD12	1:A:789:GLN:NE2	0.69	2.03	7	2
1:A:656:LEU:HD11	1:A:660:PRO:HG3	0.69	1.63	9	3
1:A:666:CYS:O	1:A:668:LEU:N	0.69	2.26	11	11
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CG	0.69	2.23	3	1
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:CD2	0.69	2.17	19	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:CD	0.69	2.17	11	6
1:A:707:VAL:HG22	1:A:761:PHE:CZ	0.69	2.22	17	3
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD12	0.69	1.88	5	6
1:A:766:GLY:HA2	1:A:769:PHE:CD2	0.69	2.23	5	4
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD11	0.68	2.23	20	7
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:HB3	0.68	1.88	8	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:HB2	0.68	1.88	6	11
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HD13	0.68	2.22	19	6
1:A:660:PRO:HB2	1:A:664:TRP:HB2	0.68	1.64	3	12
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD21	0.68	1.63	2	5
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HD2	0.68	1.66	6	2
1:A:708:LEU:HB3	1:A:744:ARG:HH22	0.68	1.47	17	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HG23	0.68	1.64	14	3
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:HB2	0.68	1.66	4	6
1:A:785:ILE:C	1:A:789:GLN:HG3	0.68	2.12	1	4
1:A:649:LEU:HD22	1:A:659:VAL:HG12	0.68	1.64	16	1
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:HB3	0.68	1.88	10	2
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HB2	0.68	2.24	6	1
1:A:654:PRO:HA	1:A:748:GLN:NE2	0.68	2.04	6	10
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HB3	0.68	1.88	7	7
1:A:747:LEU:HD11	1:A:761:PHE:CE2	0.68	2.23	8	6
1:A:724:ALA:HB2	1:A:737:THR:O	0.68	1.88	11	3
1:A:742:LEU:HD22	1:A:746:ARG:NH2	0.68	2.04	11	1
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:CD1	0.68	2.19	13	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:CG1	0.68	2.78	9	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:708:LEU:HB3	0.68	2.17	9	6
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HG2	0.68	1.89	18	3
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:HG3	0.68	2.19	5	4
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD23	0.68	1.89	18	3
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:HD11	0.68	1.66	7	3
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HG12	0.68	1.64	19	1
1:A:703:LYS:CB	1:A:799:ALA:HB1	0.68	2.18	3	8
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:HE2	0.68	1.65	2	7
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:HB3	0.68	1.65	10	2
1:A:720:LEU:HD22	1:A:769:PHE:CE1	0.68	2.24	11	1
1:A:740:LEU:HD13	1:A:768:MET:HE1	0.67	1.62	19	4
1:A:738:LEU:C	1:A:742:LEU:HD21	0.67	2.14	7	3
1:A:788:LEU:HD13	1:A:788:LEU:N	0.67	2.02	8	1
1:A:716:PRO:HG2	1:A:788:LEU:HD12	0.67	1.66	9	1
1:A:761:PHE:C	1:A:761:PHE:CD1	0.67	2.68	18	2
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HG	0.67	1.88	3	3
1:A:711:LEU:C	1:A:717:CYS:SG	0.67	2.77	17	7
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HE2	0.67	1.65	19	9
1:A:755:TYR:CE2	1:A:760:GLU:HB3	0.67	2.24	13	3
1:A:649:LEU:HD22	1:A:659:VAL:CG1	0.67	2.18	16	1
1:A:746:ARG:HD3	1:A:751:LEU:HG	0.67	1.65	18	1
1:A:703:LYS:O	1:A:707:VAL:HG23	0.67	1.89	7	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:HD2	0.67	1.65	5	8
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:CA	0.67	2.19	17	6
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:CB	0.67	2.42	6	7
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:LYS:HB2	0.67	1.67	11	7
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:CB	0.67	2.43	16	10
1:A:720:LEU:HD13	1:A:768:MET:CE	0.67	2.18	16	4
1:A:765:VAL:HG22	1:A:768:MET:HE2	0.67	1.67	3	7
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HZ3	0.67	1.32	4	2
1:A:707:VAL:HG13	1:A:795:ARG:HH21	0.67	1.45	6	1
1:A:628:CYS:O	1:A:631:CYS:N	0.67	2.27	9	10
1:A:711:LEU:HG	1:A:740:LEU:CD2	0.67	2.20	4	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD21	0.67	2.25	11	4
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HB3	0.67	1.65	6	3
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:HD12	0.67	2.24	4	8
1:A:696:LEU:HD13	1:A:747:LEU:HD12	0.67	1.65	3	1
1:A:720:LEU:HD13	1:A:768:MET:HE1	0.67	1.66	5	4
1:A:743:ILE:HD11	1:A:761:PHE:O	0.67	1.90	2	1
1:A:720:LEU:HD12	1:A:723:LEU:CD1	0.67	2.15	18	6
1:A:712:PHE:CE2	1:A:740:LEU:HB3	0.66	2.24	6	5
1:A:721:HIS:O	1:A:741:THR:HG22	0.66	1.90	14	3
1:A:769:PHE:HE2	1:A:789:GLN:N	0.66	1.87	15	1
1:A:711:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD22	0.66	1.65	7	1
1:A:758:PRO:O	1:A:759:GLN:C	0.66	2.36	20	2
1:A:744:ARG:O	1:A:747:LEU:HB2	0.66	1.90	15	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:CG1	0.66	2.20	19	1
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:HB2	0.66	1.89	16	9
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG13	0.66	1.68	1	3
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CG	0.66	2.26	3	6
1:A:696:LEU:HD23	1:A:696:LEU:H	0.66	1.48	8	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:H	0.66	1.50	17	1
1:A:666:CYS:SG	1:A:668:LEU:HD13	0.66	2.31	20	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE1	0.66	1.66	17	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:742:LEU:HD13	0.66	2.21	18	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:647:PHE:O	0.66	1.90	5	10
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:HG2	0.66	2.05	15	4
1:A:703:LYS:HG2	1:A:799:ALA:HB1	0.66	1.67	5	2
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:LEU:H	0.66	1.51	5	1
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD11	0.66	2.25	18	3
1:A:701:GLN:N	1:A:757:SER:HB3	0.66	2.05	13	1
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:OG	0.66	2.14	13	1
1:A:769:PHE:CD2	1:A:789:GLN:HG2	0.66	2.25	17	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:N	0.66	2.06	17	4
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:HD13	0.66	1.66	15	1
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:HB2	0.66	1.90	15	1
1:A:667:SER:C	1:A:669:CYS:H	0.66	1.98	9	12
1:A:746:ARG:NE	1:A:751:LEU:HD13	0.66	2.06	2	2
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:HD2	0.66	1.67	6	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:HG2	0.66	1.67	13	2
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HB3	0.66	2.25	13	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD12	0.66	1.67	7	4
1:A:653:LEU:N	1:A:709:LEU:HD23	0.66	2.05	13	3
1:A:755:TYR:HE1	1:A:761:PHE:HB3	0.66	1.51	18	6
1:A:628:CYS:O	1:A:628:CYS:SG	0.66	2.53	6	8
1:A:665:SER:O	1:A:666:CYS:C	0.66	2.38	9	11
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:N	0.66	2.29	16	11
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HD22	0.66	1.66	7	5
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:CG	0.66	2.21	15	9
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:HG3	0.66	2.06	7	3
1:A:745:ALA:O	1:A:748:GLN:N	0.66	2.29	9	2
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CD1	0.65	2.26	3	2
1:A:706:ARG:HD3	1:A:799:ALA:HB2	0.65	1.66	2	2
1:A:717:CYS:HB3	1:A:788:LEU:HD21	0.65	1.68	13	2
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:LEU:N	0.65	2.06	5	1
1:A:648:HIS:HB2	1:A:651:CYS:SG	0.65	2.31	19	11
1:A:653:LEU:CD2	1:A:705:GLU:HA	0.65	2.21	13	3
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CG	0.65	2.25	5	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CD2	0.65	2.26	13	1
1:A:711:LEU:HB3	1:A:717:CYS:SG	0.65	2.31	20	1
1:A:753:PRO:HB2	1:A:754:PRO:CD	0.65	2.21	6	15
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HD2	0.65	2.22	3	4
1:A:696:LEU:HD22	1:A:757:SER:C	0.65	2.15	13	1
1:A:746:ARG:HD3	1:A:751:LEU:HD13	0.65	1.69	14	1
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:N	0.65	2.30	5	10
1:A:630:VAL:HG12	1:A:631:CYS:N	0.65	2.05	20	7
1:A:637:LEU:HD12	1:A:647:PHE:C	0.65	2.16	10	2
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:NH2	0.65	2.05	17	1
1:A:765:VAL:HG23	1:A:769:PHE:CE2	0.65	2.26	19	1
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:HD22	0.65	1.68	4	2
1:A:668:LEU:HG	1:A:709:LEU:HD23	0.65	1.69	4	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:CD1	0.65	2.26	18	7
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:HB3	0.65	1.90	12	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CB	0.65	2.21	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:712:PHE:CE1	1:A:740:LEU:HB3	0.65	2.26	9	7
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:CD2	0.65	2.26	18	6
1:A:638:VAL:HG12	1:A:660:PRO:C	0.65	2.17	16	1
1:A:645:PHE:CE1	1:A:666:CYS:SG	0.65	2.90	19	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:CD2	0.65	2.84	20	1
1:A:755:TYR:CE1	1:A:760:GLU:CB	0.65	2.80	12	2
1:A:711:LEU:HD22	1:A:792:PHE:CD2	0.65	2.26	16	1
1:A:747:LEU:HB2	1:A:761:PHE:HD2	0.65	1.52	5	1
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:CD	0.65	2.73	16	1
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:N	0.65	2.30	6	8
1:A:705:GLU:N	1:A:747:LEU:HD21	0.65	2.07	3	1
1:A:744:ARG:C	1:A:744:ARG:HD2	0.65	2.17	6	2
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HB2	0.65	1.69	17	1
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:HB2	0.65	1.66	2	2
1:A:771:GLN:C	1:A:775:LEU:HD13	0.64	2.17	7	4
1:A:653:LEU:HD21	1:A:747:LEU:HD23	0.64	1.68	4	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:H	0.64	1.52	19	4
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HB3	0.64	1.69	8	2
1:A:738:LEU:HD22	1:A:768:MET:CG	0.64	2.21	17	1
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:HB2	0.64	1.92	9	7
1:A:707:VAL:CG1	1:A:761:PHE:CE1	0.64	2.80	3	2
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CA	0.64	2.22	19	2
1:A:649:LEU:CD2	1:A:656:LEU:HD23	0.64	2.23	18	6
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:CE1	0.64	2.85	4	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CE1	0.64	2.26	9	5
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:H	0.64	1.48	13	1
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HB	0.64	1.93	6	9
1:A:711:LEU:HB3	1:A:740:LEU:HD11	0.64	1.68	11	3
1:A:739:ASP:HA	1:A:768:MET:SD	0.64	2.31	1	4
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HB2	0.64	1.68	7	20
1:A:704:CYS:SG	1:A:705:GLU:N	0.64	2.70	20	2
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:HG2	0.64	1.69	20	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:HB3	0.64	1.68	2	2
1:A:757:SER:CB	1:A:758:PRO:HD2	0.64	2.23	13	2
1:A:626:THR:C	1:A:627:ILE:HG13	0.64	2.17	19	16
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:CG1	0.64	2.22	8	7
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:H	0.64	2.00	11	7
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:CE1	0.64	2.28	19	6
1:A:740:LEU:HG	1:A:768:MET:SD	0.64	2.33	10	5
1:A:703:LYS:HD2	1:A:704:CYS:N	0.64	2.07	15	1
1:A:707:VAL:HG13	1:A:792:PHE:CZ	0.64	2.26	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:755:TYR:CE2	1:A:761:PHE:HB3	0.64	2.27	20	1
1:A:700:ASN:O	1:A:758:PRO:HG3	0.64	1.93	1	8
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:HD22	0.64	2.07	12	2
1:A:638:VAL:CG1	1:A:659:VAL:HG12	0.64	2.23	3	4
1:A:628:CYS:O	1:A:632:GLN:N	0.64	2.30	8	12
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:H	0.64	1.52	9	5
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:HG3	0.64	2.21	17	3
1:A:747:LEU:CG	1:A:755:TYR:OH	0.64	2.45	20	1
1:A:638:VAL:HG13	1:A:664:TRP:CZ3	0.64	2.28	18	4
1:A:695:LYS:HG3	1:A:755:TYR:C	0.64	2.18	4	1
1:A:723:LEU:HD22	1:A:775:LEU:HD11	0.64	1.69	17	1
1:A:714:HIS:O	1:A:717:CYS:SG	0.63	2.56	5	18
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:CD	0.63	2.23	19	11
1:A:653:LEU:HB3	1:A:654:PRO:CD	0.63	2.23	14	6
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HG	0.63	1.70	18	2
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:O	0.63	1.92	15	2
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:HD2	0.63	1.92	20	9
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:CG1	0.63	2.23	5	5
1:A:656:LEU:C	1:A:658:ASP:H	0.63	1.99	4	8
1:A:649:LEU:HG	1:A:656:LEU:HB2	0.63	1.70	12	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:N	0.63	2.32	20	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:658:ASP:CA	0.63	2.23	12	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:664:TRP:CE3	0.63	2.27	9	9
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD13	0.63	2.28	8	2
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD22	0.63	1.71	9	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:CG	0.63	2.23	6	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:HD21	0.63	1.54	15	1
1:A:627:ILE:C	1:A:646:CYS:SG	0.63	2.81	19	1
1:A:757:SER:HB3	1:A:758:PRO:CD	0.63	2.23	20	1
1:A:758:PRO:HB2	1:A:762:ALA:HB2	0.63	1.70	20	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:H	0.63	1.54	1	2
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:HD13	0.63	1.94	19	5
1:A:652:HIS:HB2	1:A:656:LEU:HD22	0.63	1.71	16	2
1:A:708:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD12	0.63	2.23	19	3
1:A:644:GLU:O	1:A:645:PHE:C	0.63	2.42	17	8
1:A:738:LEU:HD13	1:A:738:LEU:C	0.63	2.18	2	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:747:LEU:CD1	0.63	2.23	3	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:HB2	0.63	1.69	13	2
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:HG3	0.63	1.94	20	2
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:CB	0.63	2.18	9	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD11	0.63	2.28	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:LEU:HD21	1:A:660:PRO:CG	0.63	2.22	7	6
1:A:746:ARG:HE	1:A:751:LEU:HD13	0.62	1.54	2	2
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HG3	0.62	1.94	6	1
1:A:718:ARG:HG3	1:A:719:PRO:HD3	0.62	1.71	4	2
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CB	0.62	2.24	8	3
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:CD1	0.62	2.82	17	8
1:A:665:SER:HB3	1:A:670:HIS:HB2	0.62	1.70	11	1
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:CE	0.62	2.22	12	9
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HB2	0.62	1.69	16	14
1:A:740:LEU:HD23	1:A:768:MET:CE	0.62	2.23	3	4
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:HB2	0.62	1.94	8	13
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG13	0.62	1.95	5	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:701:GLN:CA	0.62	2.24	16	2
1:A:630:VAL:HG11	1:A:647:PHE:CE2	0.62	2.29	9	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:764:ASP:C	0.62	2.19	17	4
1:A:628:CYS:N	1:A:637:LEU:HG	0.62	2.09	3	5
1:A:769:PHE:HB3	1:A:785:ILE:CG2	0.62	2.23	11	3
1:A:755:TYR:CE2	1:A:758:PRO:HA	0.62	2.30	16	7
1:A:638:VAL:HG21	1:A:656:LEU:CD2	0.62	2.24	17	2
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:CG1	0.62	2.23	16	1
1:A:656:LEU:HD23	1:A:659:VAL:HG11	0.62	1.70	16	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:743:ILE:HG13	0.62	1.70	18	1
1:A:666:CYS:SG	1:A:668:LEU:CD1	0.62	2.87	20	1
1:A:626:THR:O	1:A:646:CYS:SG	0.62	2.55	2	13
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HB2	0.62	2.10	5	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:758:PRO:N	0.62	2.09	7	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:CD1	0.62	2.25	8	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD22	0.62	1.69	11	1
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:CD1	0.62	2.30	15	2
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:NH1	0.62	2.08	17	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:765:VAL:HG12	0.62	2.24	19	1
1:A:755:TYR:HE2	1:A:761:PHE:HB3	0.62	1.54	20	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HD12	0.62	1.69	2	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:746:ARG:HH11	0.62	1.54	3	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CZ	0.62	2.30	5	1
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HD2	0.62	1.53	8	2
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HB2	0.62	1.95	14	4
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:HD23	0.62	1.71	7	4
1:A:656:LEU:HB3	1:A:659:VAL:HB	0.62	1.71	16	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:CD1	0.62	2.24	1	4
1:A:639:MET:O	1:A:640:CYS:C	0.62	2.43	6	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:653:LEU:CD1	1:A:705:GLU:O	0.62	2.48	17	6
1:A:665:SER:CB	1:A:669:CYS:SG	0.62	2.87	7	5
1:A:755:TYR:H	1:A:760:GLU:HG2	0.62	1.55	4	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:760:GLU:OE2	0.62	1.95	6	1
1:A:708:LEU:O	1:A:711:LEU:N	0.62	2.33	18	1
1:A:645:PHE:CD2	1:A:668:LEU:HD23	0.62	2.29	16	2
1:A:652:HIS:CG	1:A:652:HIS:O	0.62	2.53	14	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD23	0.62	1.72	15	2
1:A:639:MET:HA	1:A:645:PHE:O	0.62	1.93	2	3
1:A:655:ALA:O	1:A:656:LEU:C	0.62	2.42	7	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:HD12	0.62	1.70	7	2
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:HG2	0.62	1.72	16	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:CD1	0.62	2.23	4	2
1:A:653:LEU:CG	1:A:708:LEU:HB3	0.62	2.25	14	4
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:HB	0.62	1.55	18	3
1:A:696:LEU:N	1:A:756:SER:HA	0.61	2.10	3	3
1:A:773:ASN:CG	1:A:785:ILE:HG13	0.61	2.20	13	11
1:A:668:LEU:CD2	1:A:710:ALA:HB2	0.61	2.22	5	3
1:A:755:TYR:CE2	1:A:760:GLU:HB2	0.61	2.30	6	1
1:A:717:CYS:HB3	1:A:788:LEU:HD11	0.61	1.72	9	2
1:A:652:HIS:HD1	1:A:656:LEU:HD22	0.61	1.54	12	1
1:A:738:LEU:O	1:A:738:LEU:HD13	0.61	1.94	17	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:NE2	0.61	2.10	1	1
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:CB	0.61	2.48	4	10
1:A:747:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CD2	0.61	2.29	11	5
1:A:660:PRO:O	1:A:662:GLU:N	0.61	2.33	19	8
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:CD1	0.61	2.25	5	5
1:A:701:GLN:HE22	1:A:747:LEU:HD22	0.61	1.54	1	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:658:ASP:C	0.61	2.74	11	3
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE1	0.61	2.26	15	5
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:HB2	0.61	2.25	17	7
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:HB2	0.61	1.71	3	2
1:A:720:LEU:CD1	1:A:723:LEU:HD11	0.61	2.17	3	5
1:A:696:LEU:HG	1:A:697:SER:N	0.61	2.08	16	2
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:CD1	0.61	2.83	9	1
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD22	0.61	1.72	19	1
1:A:668:LEU:O	1:A:668:LEU:HD22	0.61	1.95	20	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:HG2	0.61	1.71	14	3
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:HA	0.61	2.34	3	7
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:HD3	0.61	1.96	4	2
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:CE1	0.61	2.30	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:HG3	1:A:704:CYS:SG	0.61	2.36	20	1
1:A:665:SER:O	1:A:669:CYS:HB2	0.61	1.96	1	9
1:A:720:LEU:CA	1:A:723:LEU:HD21	0.61	2.22	12	5
1:A:630:VAL:HA	1:A:713:CYS:HA	0.61	1.72	14	6
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:N	0.61	2.33	10	2
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:CB	0.61	2.25	16	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CZ	0.61	2.26	17	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:H	0.61	2.08	1	5
1:A:765:VAL:CG1	1:A:769:PHE:CZ	0.61	2.84	13	13
1:A:755:TYR:CZ	1:A:761:PHE:HB3	0.61	2.31	11	4
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CG	0.61	2.53	18	5
1:A:653:LEU:HB3	1:A:654:PRO:HD3	0.61	1.73	5	15
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HD22	0.61	1.73	20	4
1:A:712:PHE:O	1:A:717:CYS:SG	0.61	2.58	18	11
1:A:740:LEU:HD22	1:A:768:MET:SD	0.61	2.35	6	3
1:A:745:ALA:O	1:A:749:GLU:N	0.61	2.34	11	15
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:CA	0.61	2.23	11	3
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:HB2	0.61	1.96	13	12
1:A:775:LEU:HD23	1:A:775:LEU:C	0.61	2.19	17	3
1:A:717:CYS:SG	1:A:740:LEU:HD21	0.61	2.35	17	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HB2	0.61	1.73	14	6
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:HB2	0.61	1.96	12	3
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:HA	0.61	1.72	7	1
1:A:702:ARG:HG3	1:A:703:LYS:HD3	0.61	1.73	19	1
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:N	0.61	2.33	13	10
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:HD22	0.61	2.36	20	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CD	0.61	2.26	1	16
1:A:712:PHE:CZ	1:A:744:ARG:HD3	0.61	2.30	13	7
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:HB3	0.61	1.96	2	3
1:A:796:MET:HE2	1:A:800:PHE:CD1	0.61	2.30	6	3
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CD2	0.61	2.31	16	4
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:CD2	0.61	2.26	9	1
1:A:788:LEU:HD23	1:A:789:GLN:N	0.61	2.11	11	1
1:A:695:LYS:HB3	1:A:756:SER:HB2	0.61	1.72	13	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:HB3	0.61	1.71	18	2
1:A:638:VAL:HG13	1:A:647:PHE:HB2	0.61	1.71	17	1
1:A:709:LEU:O	1:A:710:ALA:C	0.60	2.44	7	15
1:A:753:PRO:N	1:A:754:PRO:HD2	0.60	2.10	1	2
1:A:755:TYR:CD1	1:A:760:GLU:HG2	0.60	2.31	7	4
1:A:746:ARG:HD2	1:A:751:LEU:HB3	0.60	1.72	3	1
1:A:627:ILE:O	1:A:629:ARG:N	0.60	2.34	5	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:645:PHE:CB	1:A:666:CYS:SG	0.60	2.90	1	3
1:A:626:THR:O	1:A:634:PRO:HA	0.60	1.96	3	1
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:HZ	0.60	1.55	4	2
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:HB2	0.60	1.96	17	2
1:A:769:PHE:HE1	1:A:788:LEU:HD23	0.60	1.53	9	1
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:HD3	0.60	2.25	12	5
1:A:738:LEU:HD12	1:A:742:LEU:HD13	0.60	1.73	18	1
1:A:761:PHE:CD2	1:A:762:ALA:N	0.60	2.70	1	1
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:HB2	0.60	1.72	15	4
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HG12	0.60	1.56	10	2
1:A:655:ALA:HB1	1:A:657:GLN:HG3	0.60	1.73	15	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CZ	0.60	2.27	17	1
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:CH2	0.60	2.89	2	4
1:A:667:SER:C	1:A:669:CYS:N	0.60	2.58	5	11
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:CG2	0.60	2.26	2	3
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CB	0.60	2.26	13	2
1:A:703:LYS:C	1:A:703:LYS:CD	0.60	2.71	15	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:O	0.60	1.96	1	3
1:A:720:LEU:CG	1:A:740:LEU:HD21	0.60	2.26	7	3
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:CG	0.60	2.26	3	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD23	0.60	1.72	14	6
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HD23	0.60	1.74	6	4
1:A:762:ALA:CA	1:A:765:VAL:HG12	0.60	2.26	5	2
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:CD2	0.60	2.27	16	4
1:A:627:ILE:HA	1:A:637:LEU:HD21	0.60	1.72	8	2
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:CB	0.60	2.80	12	4
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HG3	0.60	1.97	8	10
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:HB	0.60	1.97	8	12
1:A:783:GLN:HE21	1:A:783:GLN:C	0.60	2.04	12	2
1:A:708:LEU:N	1:A:761:PHE:HZ	0.60	1.94	13	2
1:A:738:LEU:CD2	1:A:767:ARG:HB3	0.60	2.25	13	3
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:CB	0.60	2.25	12	10
1:A:795:ARG:HA	1:A:798:GLU:HB2	0.60	1.73	6	8
1:A:702:ARG:O	1:A:706:ARG:HG3	0.60	1.97	10	2
1:A:638:VAL:CG1	1:A:647:PHE:O	0.60	2.49	11	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:744:ARG:HD2	0.60	1.74	14	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:HG12	0.60	1.72	11	4
1:A:649:LEU:CA	1:A:656:LEU:HB2	0.60	2.27	16	3
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CD2	0.60	2.26	8	1
1:A:629:ARG:HH22	1:A:666:CYS:HB2	0.60	1.57	9	1
1:A:630:VAL:HG11	1:A:647:PHE:CD2	0.60	2.31	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:765:VAL:CG2	1:A:792:PHE:CE1	0.60	2.85	19	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:CG	0.59	2.27	14	5
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HD22	0.59	2.12	9	1
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CA	0.59	2.27	10	1
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:HB2	0.59	1.97	20	12
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:N	0.59	2.12	13	7
1:A:699:ALA:O	1:A:702:ARG:HB2	0.59	1.97	20	12
1:A:709:LEU:HA	1:A:712:PHE:HB2	0.59	1.73	8	10
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:N	0.59	2.35	20	2
1:A:720:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HD21	0.59	1.72	5	1
1:A:746:ARG:N	1:A:751:LEU:HB2	0.59	2.11	7	4
1:A:640:CYS:C	1:A:642:GLN:H	0.59	2.05	3	20
1:A:666:CYS:O	1:A:666:CYS:SG	0.59	2.61	11	6
1:A:720:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD21	0.59	2.27	2	4
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD23	0.59	1.54	4	1
1:A:648:HIS:O	1:A:650:ASP:N	0.59	2.35	19	3
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:C	0.59	2.45	9	2
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:CE	0.59	2.51	15	1
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:HG	0.59	1.97	18	1
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:HD3	0.59	2.27	18	6
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HA	0.59	2.13	1	12
1:A:744:ARG:CZ	1:A:748:GLN:HG3	0.59	2.28	2	1
1:A:703:LYS:HD3	1:A:800:PHE:HA	0.59	1.73	13	4
1:A:711:LEU:HD12	1:A:788:LEU:HD11	0.59	1.73	4	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:HG3	0.59	1.72	5	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:HA	0.59	1.75	8	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HG12	0.59	2.13	11	2
1:A:717:CYS:CB	1:A:788:LEU:HD21	0.59	2.27	13	1
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CG	0.59	2.09	15	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:714:HIS:NE2	0.59	2.12	17	2
1:A:707:VAL:O	1:A:708:LEU:C	0.59	2.45	1	8
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:OD1	0.59	1.96	3	1
1:A:701:GLN:HG3	1:A:747:LEU:HD11	0.59	1.74	16	2
1:A:740:LEU:HA	1:A:743:ILE:CD1	0.59	2.28	10	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:HA	0.59	2.32	12	10
1:A:738:LEU:HD12	1:A:768:MET:HG3	0.59	1.73	13	2
1:A:757:SER:HB3	1:A:760:GLU:HB2	0.59	1.75	7	1
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:SD	0.59	2.90	16	1
1:A:765:VAL:HG12	1:A:769:PHE:CE2	0.59	2.32	4	10
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:C	0.59	2.23	7	3
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:O	0.59	1.97	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:707:VAL:O	1:A:710:ALA:HB3	0.59	1.97	16	6
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CZ	0.59	2.33	5	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:CG2	0.59	2.27	16	1
1:A:652:HIS:O	1:A:655:ALA:N	0.59	2.36	18	13
1:A:664:TRP:CG	1:A:665:SER:H	0.59	2.15	12	16
1:A:737:THR:HA	1:A:771:GLN:HG3	0.59	1.74	13	5
1:A:630:VAL:HG23	1:A:721:HIS:CE1	0.59	2.33	9	2
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CB	0.59	2.27	11	2
1:A:665:SER:O	1:A:666:CYS:O	0.59	2.21	16	4
1:A:761:PHE:CG	1:A:762:ALA:N	0.59	2.70	7	4
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:CB	0.59	2.28	3	2
1:A:710:ALA:O	1:A:714:HIS:CE1	0.59	2.56	4	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CE2	0.59	2.32	13	5
1:A:626:THR:HA	1:A:646:CYS:SG	0.59	2.38	16	3
1:A:751:LEU:HD21	1:A:753:PRO:HD2	0.59	1.74	11	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CE2	0.59	2.84	16	1
1:A:696:LEU:O	1:A:700:ASN:HB2	0.59	1.98	15	10
1:A:707:VAL:HB	1:A:761:PHE:CZ	0.59	2.32	6	5
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:CD2	0.59	2.23	12	10
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:CB	0.59	2.27	16	6
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:CG2	0.59	2.28	1	10
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:HG3	0.59	1.98	1	7
1:A:752:SER:HB2	1:A:753:PRO:CD	0.59	2.27	17	11
1:A:765:VAL:CB	1:A:768:MET:HE2	0.59	2.28	20	4
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:N	0.59	2.35	18	8
1:A:665:SER:HB3	1:A:669:CYS:SG	0.59	2.38	8	3
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:HD21	0.59	1.72	15	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HD2	0.59	1.97	6	1
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HD12	0.59	1.98	14	1
1:A:716:PRO:C	1:A:719:PRO:HD2	0.58	2.23	9	8
1:A:719:PRO:HB2	1:A:772:PHE:CZ	0.58	2.33	15	6
1:A:637:LEU:CB	1:A:646:CYS:HB3	0.58	2.28	13	4
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:OD1	0.58	2.21	3	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:HB2	0.58	1.72	11	9
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CE2	0.58	2.32	13	5
1:A:718:ARG:HG2	1:A:719:PRO:HD3	0.58	1.73	9	1
1:A:789:GLN:O	1:A:793:GLU:HB2	0.58	1.97	16	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:HB3	0.58	1.74	19	1
1:A:707:VAL:O	1:A:710:ALA:N	0.58	2.36	1	5
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:HB3	0.58	1.75	7	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:660:PRO:HG3	0.58	1.74	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:HG3	0.58	1.75	16	5
1:A:742:LEU:HD12	1:A:751:LEU:HD11	0.58	1.74	14	2
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG22	0.58	1.97	14	2
1:A:758:PRO:O	1:A:760:GLU:N	0.58	2.36	20	1
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:HG13	0.58	1.98	19	6
1:A:638:VAL:O	1:A:638:VAL:HG13	0.58	1.97	1	1
1:A:765:VAL:C	1:A:768:MET:HB2	0.58	2.23	14	4
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:HD22	0.58	2.33	16	4
1:A:696:LEU:C	1:A:696:LEU:HD12	0.58	2.22	7	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:HB2	0.58	1.74	7	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:CD2	0.58	2.84	9	2
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:CD1	0.58	2.66	15	2
1:A:744:ARG:NH1	1:A:747:LEU:HD13	0.58	2.14	12	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:659:VAL:CG1	0.58	2.28	16	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:646:CYS:O	0.58	1.99	15	14
1:A:659:VAL:C	1:A:661:GLY:H	0.58	2.06	9	10
1:A:753:PRO:O	1:A:754:PRO:O	0.58	2.21	4	4
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HB2	0.58	1.76	15	4
1:A:630:VAL:HG13	1:A:712:PHE:CD1	0.58	2.34	3	2
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HD22	0.58	1.98	19	3
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CG	0.58	2.33	5	1
1:A:738:LEU:N	1:A:738:LEU:CD1	0.58	2.61	6	3
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:HD21	0.58	1.73	11	3
1:A:749:GLU:HG3	1:A:753:PRO:HA	0.58	1.75	19	2
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HB2	0.58	1.75	18	11
1:A:747:LEU:CD1	1:A:761:PHE:CD2	0.58	2.86	12	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:CD2	0.58	2.29	9	3
1:A:628:CYS:CA	1:A:637:LEU:HD11	0.58	2.28	10	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:768:MET:SD	0.58	2.38	15	3
1:A:701:GLN:HA	1:A:757:SER:HA	0.58	1.73	20	2
1:A:738:LEU:O	1:A:738:LEU:HD22	0.58	1.98	15	1
1:A:664:TRP:CG	1:A:665:SER:N	0.58	2.71	4	17
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:NE	0.58	2.37	12	2
1:A:792:PHE:O	1:A:796:MET:HB3	0.58	1.98	8	6
1:A:704:CYS:SG	1:A:762:ALA:HB2	0.58	2.39	13	3
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:CE1	0.58	2.34	11	2
1:A:769:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HG23	0.58	2.33	11	1
1:A:666:CYS:HB3	1:A:668:LEU:HD12	0.58	1.74	1	2
1:A:707:VAL:CG2	1:A:796:MET:HB2	0.58	2.28	9	5
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:HA	0.58	1.76	12	5
1:A:711:LEU:HD23	1:A:795:ARG:HH12	0.58	1.59	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HD23	0.58	2.28	7	1
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:N	0.58	2.60	10	2
1:A:704:CYS:SG	1:A:761:PHE:HE2	0.58	2.21	20	1
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:H	0.58	1.59	17	5
1:A:765:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CE1	0.58	2.85	16	3
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HD12	0.58	2.29	10	1
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD21	0.58	2.34	13	4
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HD23	0.58	1.76	5	3
1:A:751:LEU:HG	1:A:752:SER:H	0.58	1.58	4	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HG2	0.58	2.26	16	2
1:A:640:CYS:C	1:A:642:GLN:N	0.57	2.61	15	20
1:A:647:PHE:C	1:A:649:LEU:N	0.57	2.60	5	16
1:A:708:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HA	0.57	2.28	15	7
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HB2	0.57	1.76	5	6
1:A:772:PHE:CG	1:A:785:ILE:HD12	0.57	2.34	13	6
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:HG3	0.57	1.98	16	5
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:HB3	0.57	1.73	3	5
1:A:738:LEU:HD22	1:A:764:ASP:HB3	0.57	1.76	16	4
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:HD13	0.57	1.73	15	2
1:A:638:VAL:CG2	1:A:647:PHE:HB2	0.57	2.25	20	3
1:A:760:GLU:HG3	1:A:761:PHE:H	0.57	1.58	6	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:HB2	0.57	2.29	11	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:HB2	0.57	1.76	13	2
1:A:712:PHE:CD1	1:A:740:LEU:HG	0.57	2.34	19	1
1:A:656:LEU:C	1:A:658:ASP:N	0.57	2.61	15	6
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:CD2	0.57	2.33	8	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:656:LEU:HD23	0.57	1.73	11	2
1:A:653:LEU:HG	1:A:709:LEU:N	0.57	2.14	14	3
1:A:712:PHE:CE1	1:A:744:ARG:HG3	0.57	2.34	15	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:659:VAL:HG13	0.57	1.74	16	1
1:A:652:HIS:ND1	1:A:654:PRO:HD2	0.57	2.15	16	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:768:MET:HG3	0.57	2.28	16	7
1:A:746:ARG:HB2	1:A:751:LEU:HD22	0.57	1.75	3	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:747:LEU:CD2	0.57	2.29	4	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:744:ARG:HB2	0.57	1.76	4	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HB2	0.57	1.75	17	5
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:CD2	0.57	2.49	16	1
1:A:643:CYS:O	1:A:645:PHE:N	0.57	2.37	8	8
1:A:647:PHE:CD2	1:A:652:HIS:HA	0.57	2.34	19	6
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CE2	0.57	2.35	3	1
1:A:627:ILE:CA	1:A:637:LEU:HD21	0.57	2.30	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:751:LEU:HG	1:A:752:SER:N	0.57	2.14	12	1
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:N	0.57	2.37	18	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:SD	0.57	2.40	19	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:646:CYS:SG	0.57	2.40	17	8
1:A:626:THR:CB	1:A:637:LEU:HD12	0.57	2.28	18	11
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:CD	0.57	2.82	7	8
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CD1	0.57	2.87	19	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HG2	0.57	1.77	14	1
1:A:707:VAL:HG12	1:A:708:LEU:N	0.57	2.13	16	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:CD1	0.57	2.28	15	3
1:A:652:HIS:CE1	1:A:654:PRO:HD2	0.57	2.35	6	5
1:A:696:LEU:HD12	1:A:696:LEU:O	0.57	1.98	7	1
1:A:737:THR:O	1:A:737:THR:HG22	0.57	2.00	10	1
1:A:707:VAL:HG22	1:A:761:PHE:HZ	0.57	1.59	20	2
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:HB2	0.57	1.77	4	10
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CD2	0.57	2.35	4	4
1:A:754:PRO:O	1:A:755:TYR:O	0.57	2.23	4	2
1:A:639:MET:O	1:A:639:MET:HG3	0.57	1.99	6	2
1:A:634:PRO:CA	1:A:637:LEU:HD11	0.57	2.27	1	5
1:A:773:ASN:CB	1:A:785:ILE:HG13	0.57	2.30	3	8
1:A:703:LYS:HA	1:A:799:ALA:HB1	0.57	1.77	4	5
1:A:649:LEU:HB3	1:A:656:LEU:CB	0.57	2.30	14	7
1:A:640:CYS:SG	1:A:645:PHE:HB2	0.57	2.40	7	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:HE2	0.57	1.58	7	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HG2	0.57	2.30	15	1
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CD2	0.57	2.11	15	1
1:A:720:LEU:HB2	1:A:772:PHE:CE2	0.57	2.34	19	2
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD22	0.57	2.34	3	2
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:HB3	0.57	1.99	15	2
1:A:788:LEU:HD13	1:A:788:LEU:H	0.57	1.58	8	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:700:ASN:C	0.57	2.25	16	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:746:ARG:HH21	0.57	1.59	18	1
1:A:748:GLN:O	1:A:749:GLU:HB2	0.57	1.99	14	8
1:A:753:PRO:CD	1:A:754:PRO:HD2	0.57	2.28	5	3
1:A:772:PHE:CZ	1:A:785:ILE:HD13	0.57	2.35	4	4
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HG	0.57	1.75	8	4
1:A:720:LEU:HD22	1:A:768:MET:HE3	0.57	1.75	8	2
1:A:767:ARG:O	1:A:770:LYS:N	0.56	2.37	15	13
1:A:630:VAL:CG2	1:A:631:CYS:N	0.56	2.68	14	5
1:A:653:LEU:HD12	1:A:653:LEU:C	0.56	2.25	4	3
1:A:696:LEU:HD22	1:A:700:ASN:C	0.56	2.25	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:739:ASP:O	1:A:768:MET:SD	0.56	2.63	9	2
1:A:723:LEU:HD23	1:A:737:THR:CG2	0.56	2.29	10	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:CG	0.56	2.29	13	1
1:A:654:PRO:HA	1:A:748:GLN:CD	0.56	2.25	15	1
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:NE1	0.56	2.15	15	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:NH2	0.56	2.68	17	1
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:CB	0.56	2.30	3	3
1:A:639:MET:HA	1:A:644:GLU:O	0.56	1.99	5	1
1:A:792:PHE:HD2	1:A:793:GLU:HG2	0.56	1.61	20	5
1:A:708:LEU:CD2	1:A:747:LEU:HD12	0.56	2.30	20	2
1:A:653:LEU:HD12	1:A:705:GLU:HA	0.56	1.77	11	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:HD2	0.56	2.13	11	4
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:CD2	0.56	2.29	13	2
1:A:628:CYS:O	1:A:629:ARG:C	0.56	2.47	3	20
1:A:627:ILE:O	1:A:627:ILE:HD12	0.56	2.00	19	9
1:A:665:SER:OG	1:A:670:HIS:HB2	0.56	2.01	14	6
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB3	0.56	2.30	14	6
1:A:759:GLN:HG2	1:A:763:GLN:HG3	0.56	1.76	5	2
1:A:711:LEU:HD13	1:A:791:PHE:HE2	0.56	1.59	4	1
1:A:627:ILE:HD13	1:A:632:GLN:HB3	0.56	1.75	6	5
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:CD	0.56	2.83	6	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HB3	0.56	2.15	15	3
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:HD2	0.56	1.60	10	4
1:A:638:VAL:HG12	1:A:661:GLY:N	0.56	2.15	16	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:CD2	0.56	2.30	16	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:HA	0.56	2.15	17	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:740:LEU:HD12	0.56	1.77	18	1
1:A:747:LEU:CA	1:A:755:TYR:OH	0.56	2.52	20	1
1:A:660:PRO:HG3	1:A:664:TRP:CG	0.56	2.35	16	5
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:HG3	0.56	1.77	13	1
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:HB2	0.56	2.00	20	11
1:A:705:GLU:HG2	1:A:744:ARG:NH2	0.56	2.14	2	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:649:LEU:HD21	0.56	1.77	14	2
1:A:630:VAL:HG13	1:A:721:HIS:HE1	0.56	1.61	6	3
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HA	0.56	1.78	6	1
1:A:759:GLN:O	1:A:760:GLU:C	0.56	2.49	6	4
1:A:788:LEU:HA	1:A:791:PHE:HB2	0.56	1.76	11	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:799:ALA:HB3	0.56	2.16	18	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HG2	0.56	2.00	1	6
1:A:755:TYR:N	1:A:760:GLU:HG2	0.56	2.15	4	1
1:A:705:GLU:O	1:A:709:LEU:HB2	0.56	2.00	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:LEU:CG	1:A:656:LEU:HB2	0.56	2.31	12	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:760:GLU:HB2	0.56	1.77	20	1
1:A:740:LEU:HD22	1:A:740:LEU:H	0.56	1.61	18	3
1:A:638:VAL:CG1	1:A:660:PRO:CD	0.56	2.84	8	5
1:A:746:ARG:CA	1:A:751:LEU:HG	0.56	2.30	11	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:HA	0.56	1.78	12	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:795:ARG:O	0.56	2.34	14	2
1:A:659:VAL:O	1:A:660:PRO:O	0.56	2.23	16	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HD13	0.56	2.01	17	1
1:A:718:ARG:HB2	1:A:719:PRO:HD3	0.56	1.78	13	12
1:A:652:HIS:CB	1:A:656:LEU:HD22	0.56	2.31	2	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:HB2	0.56	1.78	2	2
1:A:716:PRO:HB3	1:A:784:SER:O	0.56	2.00	2	8
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:HD23	0.56	2.35	7	2
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:O	0.56	2.00	8	8
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:HG2	0.56	1.77	7	1
1:A:627:ILE:HA	1:A:633:LYS:O	0.56	2.01	20	13
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HD3	0.56	2.00	11	16
1:A:783:GLN:HA	1:A:786:ILE:HB	0.56	1.76	13	11
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HD3	0.56	2.30	9	4
1:A:711:LEU:O	1:A:717:CYS:CB	0.56	2.54	11	1
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:HG13	0.56	2.01	20	2
1:A:769:PHE:HB3	1:A:789:GLN:OE1	0.56	2.01	1	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:660:PRO:HD2	0.56	2.30	2	5
1:A:783:GLN:C	1:A:783:GLN:NE2	0.56	2.64	12	2
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:SG	0.56	2.64	4	3
1:A:747:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CG	0.56	2.35	5	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CD1	0.56	2.36	19	2
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:CB	0.56	2.54	19	6
1:A:695:LYS:HB3	1:A:696:LEU:HD23	0.56	1.78	8	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:742:LEU:HB3	0.56	1.78	14	1
1:A:630:VAL:HG13	1:A:721:HIS:CE1	0.56	2.36	20	3
1:A:752:SER:HB3	1:A:753:PRO:HD2	0.56	1.78	15	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:750:LYS:HE2	0.56	2.15	18	1
1:A:700:ASN:HB2	1:A:757:SER:OG	0.56	2.01	20	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HD3	0.55	1.79	1	6
1:A:695:LYS:HB3	1:A:755:TYR:O	0.55	2.01	14	3
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HD13	0.55	1.78	3	1
1:A:710:ALA:O	1:A:711:LEU:C	0.55	2.48	4	2
1:A:651:CYS:O	1:A:653:LEU:N	0.55	2.39	18	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:660:PRO:CD	0.55	2.31	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HB3	0.55	1.61	15	3
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:O	0.55	2.63	10	3
1:A:703:LYS:HD3	1:A:703:LYS:C	0.55	2.25	18	2
1:A:630:VAL:HG22	1:A:712:PHE:HB3	0.55	1.77	17	3
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:NH1	0.55	2.16	17	1
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:N	0.55	2.40	20	1
1:A:627:ILE:HA	1:A:633:LYS:C	0.55	2.27	19	11
1:A:646:CYS:C	1:A:647:PHE:CD1	0.55	2.84	17	8
1:A:737:THR:HA	1:A:771:GLN:CD	0.55	2.27	1	2
1:A:764:ASP:O	1:A:768:MET:HG3	0.55	2.02	4	3
1:A:647:PHE:O	1:A:649:LEU:HD23	0.55	2.01	16	4
1:A:769:PHE:CZ	1:A:792:PHE:HB2	0.55	2.36	10	7
1:A:745:ALA:O	1:A:746:ARG:C	0.55	2.49	9	2
1:A:720:LEU:C	1:A:740:LEU:HD23	0.55	2.26	17	2
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HB3	0.55	2.36	13	2
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:CB	0.55	2.31	19	1
1:A:744:ARG:O	1:A:748:GLN:N	0.55	2.39	4	3
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:HB2	0.55	1.79	13	6
1:A:631:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HE3	0.55	1.78	5	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:CG	0.55	2.89	5	1
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:CG	0.55	2.54	6	3
1:A:738:LEU:CB	1:A:742:LEU:HD11	0.55	2.31	15	2
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:CD	0.55	2.80	13	1
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HG	0.55	1.78	20	1
1:A:746:ARG:C	1:A:748:GLN:N	0.55	2.62	3	1
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:CD2	0.55	2.88	4	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:747:LEU:HD12	0.55	1.79	5	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:709:LEU:HG	0.55	1.78	6	2
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:HD2	0.55	1.62	9	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:658:ASP:HA	0.55	1.77	12	1
1:A:765:VAL:CG2	1:A:769:PHE:CZ	0.55	2.89	20	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:764:ASP:O	0.55	2.54	19	5
1:A:717:CYS:CA	1:A:788:LEU:HD21	0.55	2.30	13	5
1:A:664:TRP:CH2	1:A:666:CYS:HA	0.55	2.37	15	4
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:C	0.55	2.79	17	2
1:A:633:LYS:HB2	1:A:648:HIS:CE1	0.55	2.37	11	1
1:A:699:ALA:HB1	1:A:703:LYS:NZ	0.55	2.16	17	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD21	0.55	1.61	3	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD23	0.55	1.76	5	1
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD22	0.55	2.01	15	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG12	0.55	2.31	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:HD3	0.55	1.79	20	1
1:A:649:LEU:HD23	1:A:649:LEU:N	0.55	2.15	9	4
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD12	0.55	1.61	3	2
1:A:718:ARG:O	1:A:721:HIS:HB2	0.55	2.01	17	4
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:HB3	0.55	2.02	12	2
1:A:755:TYR:CE1	1:A:760:GLU:HB2	0.55	2.36	12	1
1:A:711:LEU:HB2	1:A:792:PHE:CD2	0.55	2.36	16	1
1:A:783:GLN:HE21	1:A:783:GLN:HA	0.55	1.61	11	4
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HG2	0.55	1.78	6	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:HB	0.55	1.79	6	1
1:A:696:LEU:HD12	1:A:700:ASN:CB	0.55	2.32	8	1
1:A:720:LEU:HD22	1:A:768:MET:CE	0.55	2.32	8	2
1:A:751:LEU:H	1:A:751:LEU:CD1	0.55	2.15	9	2
1:A:742:LEU:HA	1:A:751:LEU:HD11	0.55	1.76	17	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:743:ILE:CD1	0.55	2.31	2	1
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:H	0.55	1.62	4	4
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:HG3	0.55	1.79	3	4
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:O	0.55	2.01	16	3
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CD2	0.55	2.60	17	4
1:A:711:LEU:O	1:A:717:CYS:HB2	0.55	2.02	11	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:767:ARG:HD3	0.55	1.79	14	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:772:PHE:CD2	0.55	2.37	16	5
1:A:627:ILE:HD12	1:A:632:GLN:HG2	0.55	1.79	3	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:C	0.55	2.26	11	1
1:A:769:PHE:HZ	1:A:788:LEU:HD11	0.55	1.60	11	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:NH2	0.55	2.17	20	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:721:HIS:NE2	0.54	2.81	3	10
1:A:752:SER:N	1:A:753:PRO:CD	0.54	2.70	1	2
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:N	0.54	2.17	16	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HB2	0.54	2.32	20	1
1:A:770:LYS:O	1:A:774:LYS:HG2	0.54	2.01	19	9
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HG3	0.54	2.03	6	5
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:HD21	0.54	2.32	16	3
1:A:723:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HB2	0.54	1.80	11	2
1:A:708:LEU:HA	1:A:711:LEU:HD12	0.54	1.78	19	6
1:A:765:VAL:CA	1:A:768:MET:HE2	0.54	2.32	19	2
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:HG	0.54	1.78	11	1
1:A:721:HIS:N	1:A:740:LEU:HD23	0.54	2.17	12	7
1:A:630:VAL:HG13	1:A:712:PHE:HD1	0.54	1.62	3	3
1:A:695:LYS:HG2	1:A:756:SER:HB3	0.54	1.78	3	1
1:A:753:PRO:HD2	1:A:754:PRO:HD2	0.54	1.79	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:652:HIS:O	1:A:652:HIS:CG	0.54	2.61	5	3
1:A:762:ALA:HB1	1:A:792:PHE:HZ	0.54	1.61	5	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:HG3	0.54	1.79	8	5
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:CB	0.54	2.31	13	1
1:A:645:PHE:HB2	1:A:666:CYS:HB3	0.54	1.79	2	2
1:A:720:LEU:HD12	1:A:723:LEU:HD22	0.54	1.79	11	3
1:A:751:LEU:CD1	1:A:752:SER:H	0.54	2.14	11	2
1:A:717:CYS:HG	1:A:721:HIS:CD2	0.54	2.19	12	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:NH1	0.54	2.69	17	1
1:A:645:PHE:CD2	1:A:666:CYS:SG	0.54	3.00	20	5
1:A:653:LEU:HG	1:A:705:GLU:O	0.54	2.03	12	2
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:CB	0.54	2.33	12	2
1:A:753:PRO:CG	1:A:754:PRO:HD2	0.54	2.33	4	2
1:A:711:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD2	0.54	2.32	7	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CZ	0.54	2.37	16	3
1:A:703:LYS:HZ3	1:A:799:ALA:HB3	0.54	1.62	14	2
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:HB2	0.54	1.78	15	2
1:A:738:LEU:CA	1:A:742:LEU:HD11	0.54	2.32	15	1
1:A:749:GLU:HA	1:A:752:SER:O	0.54	2.02	15	1
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:HB2	0.54	2.02	20	1
1:A:651:CYS:HA	1:A:744:ARG:HH12	0.54	1.63	5	1
1:A:706:ARG:HE	1:A:799:ALA:HB2	0.54	1.62	6	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HD23	0.54	1.80	11	1
1:A:631:CYS:SG	1:A:633:LYS:HB2	0.54	2.43	13	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:756:SER:N	0.54	2.75	20	1
1:A:753:PRO:HB2	1:A:754:PRO:HD3	0.54	1.80	6	7
1:A:630:VAL:HG22	1:A:631:CYS:N	0.54	2.17	9	5
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HD22	0.54	1.78	8	3
1:A:638:VAL:HG22	1:A:639:MET:H	0.54	1.62	14	1
1:A:738:LEU:HG	1:A:768:MET:HG3	0.54	1.77	19	1
1:A:655:ALA:O	1:A:656:LEU:O	0.54	2.26	17	6
1:A:746:ARG:HG3	1:A:754:PRO:HA	0.54	1.79	1	1
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:N	0.54	2.40	1	9
1:A:789:GLN:O	1:A:792:PHE:HB3	0.54	2.03	19	6
1:A:643:CYS:O	1:A:644:GLU:HB3	0.54	2.03	10	2
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:CD	0.54	2.56	17	3
1:A:740:LEU:CD2	1:A:765:VAL:HG23	0.54	2.33	5	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:785:ILE:HG13	0.54	2.18	10	5
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:C	0.54	2.49	11	6
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HG22	0.54	1.79	16	2
1:A:695:LYS:HB2	1:A:756:SER:HB3	0.54	1.79	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:CG	0.54	2.33	20	1
1:A:643:CYS:C	1:A:645:PHE:H	0.54	2.10	18	7
1:A:741:THR:CA	1:A:744:ARG:HB3	0.54	2.33	7	1
1:A:708:LEU:HB3	1:A:744:ARG:NH2	0.54	2.18	17	1
1:A:712:PHE:CZ	1:A:740:LEU:HB3	0.54	2.37	17	1
1:A:738:LEU:CG	1:A:768:MET:HG3	0.54	2.33	19	1
1:A:703:LYS:CA	1:A:799:ALA:HB1	0.54	2.33	4	3
1:A:747:LEU:HB2	1:A:755:TYR:OH	0.54	2.02	4	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:CB	0.54	2.33	5	1
1:A:745:ALA:HA	1:A:750:LYS:HE2	0.54	1.79	5	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD11	0.54	1.63	8	1
1:A:629:ARG:HD3	1:A:630:VAL:N	0.54	2.19	9	1
1:A:662:GLU:C	1:A:663:GLU:HG3	0.54	2.26	20	5
1:A:653:LEU:CD2	1:A:709:LEU:HD23	0.54	2.22	12	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:755:TYR:HB3	0.54	1.80	16	1
1:A:796:MET:O	1:A:800:PHE:HB2	0.53	2.03	9	12
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HG12	0.53	1.79	5	1
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:HB3	0.53	2.38	13	3
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HB3	0.53	2.34	12	3
1:A:716:PRO:HG3	1:A:784:SER:HB2	0.53	1.78	11	2
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:CB	0.53	2.56	16	4
1:A:701:GLN:C	1:A:704:CYS:HG	0.53	2.09	15	1
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HB	0.53	1.63	15	2
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CD2	0.53	2.38	16	2
1:A:630:VAL:O	1:A:718:ARG:HD3	0.53	2.03	1	2
1:A:627:ILE:HA	1:A:634:PRO:HA	0.53	1.80	8	2
1:A:743:ILE:O	1:A:747:LEU:HG	0.53	2.03	13	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HB3	0.53	2.33	17	1
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:HB2	0.53	1.79	19	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:HA	0.53	2.33	12	4
1:A:715:GLU:HA	1:A:718:ARG:HB3	0.53	1.80	4	2
1:A:652:HIS:HD1	1:A:656:LEU:HD13	0.53	1.60	16	2
1:A:668:LEU:HD11	1:A:709:LEU:HB3	0.53	1.80	10	2
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:HG13	0.53	1.81	12	1
1:A:626:THR:CG2	1:A:637:LEU:HD12	0.53	2.34	16	4
1:A:707:VAL:HG11	1:A:796:MET:HB2	0.53	1.79	14	2
1:A:652:HIS:HB3	1:A:656:LEU:H	0.53	1.62	17	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:796:MET:HB2	0.53	2.34	17	1
1:A:629:ARG:HD2	1:A:713:CYS:SG	0.53	2.44	4	1
1:A:745:ALA:O	1:A:751:LEU:HD12	0.53	2.04	11	2
1:A:771:GLN:C	1:A:775:LEU:HG	0.53	2.29	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LEU:CD2	1:A:723:LEU:HD11	0.53	2.33	14	3
1:A:711:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE1	0.53	2.34	17	1
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CD2	0.53	2.33	20	1
1:A:707:VAL:HG11	1:A:792:PHE:CE1	0.53	2.39	4	5
1:A:717:CYS:SG	1:A:718:ARG:N	0.53	2.81	5	10
1:A:629:ARG:HE	1:A:713:CYS:HB2	0.53	1.64	9	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD23	0.53	2.37	15	1
1:A:715:GLU:N	1:A:716:PRO:HD2	0.53	2.18	1	4
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:HB2	0.53	2.28	10	7
1:A:649:LEU:CD2	1:A:649:LEU:N	0.53	2.71	2	2
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:CD1	0.53	2.92	2	6
1:A:707:VAL:CG1	1:A:708:LEU:N	0.53	2.72	18	3
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:HB2	0.53	2.33	19	8
1:A:720:LEU:O	1:A:740:LEU:N	0.53	2.41	8	1
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD22	0.53	2.39	11	1
1:A:721:HIS:CA	1:A:740:LEU:HD23	0.53	2.33	12	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:HA	0.53	1.80	13	2
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:CD1	0.53	2.71	16	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD23	0.53	1.81	5	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:HB3	0.53	2.31	9	2
1:A:626:THR:C	1:A:637:LEU:HD21	0.53	2.28	11	1
1:A:641:ASN:ND2	1:A:663:GLU:HA	0.53	2.19	16	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:646:CYS:C	0.53	2.28	17	4
1:A:660:PRO:C	1:A:662:GLU:N	0.53	2.66	5	8
1:A:696:LEU:HG	1:A:757:SER:N	0.53	2.19	3	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:761:PHE:CE2	0.53	2.39	10	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:CD	0.53	2.34	13	1
1:A:701:GLN:CA	1:A:757:SER:HA	0.53	2.34	20	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:654:PRO:HD2	0.53	2.38	3	7
1:A:745:ALA:CB	1:A:750:LYS:HB2	0.53	2.33	7	8
1:A:747:LEU:HB2	1:A:761:PHE:CD2	0.53	2.38	16	3
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:CD	0.53	2.33	6	1
1:A:668:LEU:HG	1:A:710:ALA:HA	0.53	1.81	20	1
1:A:700:ASN:O	1:A:758:PRO:HD3	0.53	2.04	20	1
1:A:742:LEU:HD23	1:A:743:ILE:N	0.53	2.19	2	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:CB	0.53	2.32	9	3
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HD23	0.53	1.78	12	1
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CE2	0.53	2.39	16	1
1:A:653:LEU:HG	1:A:744:ARG:NH2	0.53	2.19	17	1
1:A:661:GLY:C	1:A:663:GLU:H	0.52	2.12	10	5
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:HB2	0.52	1.79	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:653:LEU:HD21	1:A:705:GLU:HA	0.52	1.80	4	3
1:A:696:LEU:HD21	1:A:758:PRO:HA	0.52	1.80	4	1
1:A:756:SER:N	1:A:760:GLU:OE1	0.52	2.42	6	2
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:CB	0.52	2.57	18	5
1:A:741:THR:HA	1:A:744:ARG:HB3	0.52	1.78	17	5
1:A:645:PHE:HB2	1:A:666:CYS:SG	0.52	2.44	10	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:HB2	0.52	2.04	19	1
1:A:716:PRO:O	1:A:772:PHE:CZ	0.52	2.62	6	8
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:HB3	0.52	2.05	3	2
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HG	0.52	2.34	5	2
1:A:761:PHE:HD1	1:A:762:ALA:N	0.52	2.02	18	4
1:A:738:LEU:O	1:A:743:ILE:HG13	0.52	2.05	6	1
1:A:708:LEU:O	1:A:711:LEU:HB2	0.52	2.04	20	3
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HB2	0.52	1.79	10	1
1:A:652:HIS:O	1:A:653:LEU:C	0.52	2.53	2	17
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:HD1	0.52	1.88	1	4
1:A:709:LEU:O	1:A:712:PHE:HB2	0.52	2.04	6	4
1:A:792:PHE:CD2	1:A:793:GLU:HG3	0.52	2.39	3	6
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HG	0.52	1.80	14	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:750:LYS:HZ2	0.52	2.16	15	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:CE2	0.52	3.02	18	1
1:A:702:ARG:NH1	1:A:706:ARG:HE	0.52	2.03	19	1
1:A:721:HIS:NE2	1:A:740:LEU:HD23	0.52	2.18	19	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CB	0.52	2.34	8	8
1:A:638:VAL:HG13	1:A:649:LEU:HD21	0.52	1.81	5	2
1:A:653:LEU:C	1:A:655:ALA:H	0.52	2.12	15	5
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CZ	0.52	2.38	13	3
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HB2	0.52	2.39	8	3
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:NH1	0.52	2.19	15	1
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:HG13	0.52	2.04	19	1
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:HD2	0.52	2.04	11	10
1:A:786:ILE:O	1:A:789:GLN:N	0.52	2.43	1	6
1:A:696:LEU:O	1:A:701:GLN:N	0.52	2.42	3	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:721:HIS:HE1	0.52	1.63	4	3
1:A:718:ARG:HG3	1:A:719:PRO:CD	0.52	2.33	4	2
1:A:785:ILE:C	1:A:789:GLN:HE21	0.52	2.12	17	6
1:A:628:CYS:HB2	1:A:648:HIS:H	0.52	1.65	16	3
1:A:639:MET:HA	1:A:646:CYS:HA	0.52	1.80	11	1
1:A:631:CYS:HA	1:A:718:ARG:HD3	0.52	1.81	12	1
1:A:724:ALA:HB2	1:A:738:LEU:N	0.52	2.18	19	1
1:A:741:THR:O	1:A:744:ARG:HG3	0.52	2.05	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:HH21	0.52	1.64	20	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:755:TYR:N	0.52	2.71	20	1
1:A:703:LYS:HD2	1:A:799:ALA:HB1	0.52	1.82	1	3
1:A:752:SER:H	1:A:753:PRO:HD2	0.52	1.64	1	3
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HB2	0.52	1.82	7	4
1:A:710:ALA:O	1:A:714:HIS:ND1	0.52	2.43	12	2
1:A:708:LEU:O	1:A:709:LEU:C	0.52	2.49	18	3
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:HD3	0.52	1.82	5	2
1:A:642:GLN:HE21	1:A:642:GLN:HA	0.52	1.64	9	1
1:A:642:GLN:HG3	1:A:665:SER:HB3	0.52	1.82	9	1
1:A:697:SER:HB2	1:A:700:ASN:HB2	0.52	1.82	20	2
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CG	0.52	2.39	14	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD13	0.52	1.65	16	1
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:HB2	0.52	1.81	20	3
1:A:708:LEU:CD1	1:A:744:ARG:CA	0.52	2.87	7	5
1:A:639:MET:HG2	1:A:644:GLU:HA	0.52	1.82	3	3
1:A:790:ARG:HD3	1:A:790:ARG:N	0.52	2.19	5	1
1:A:631:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HD3	0.52	1.82	9	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:CB	0.52	2.34	12	2
1:A:767:ARG:CA	1:A:770:LYS:HB2	0.52	2.35	11	1
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HB3	0.52	2.04	15	2
1:A:711:LEU:HD22	1:A:792:PHE:CE2	0.52	2.40	16	1
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:HB3	0.52	2.05	18	2
1:A:720:LEU:O	1:A:722:GLN:N	0.52	2.43	6	2
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:HB3	0.52	1.82	1	5
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HA	0.52	1.64	16	9
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:CB	0.52	2.58	18	15
1:A:705:GLU:O	1:A:706:ARG:C	0.52	2.52	6	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HD23	0.52	2.30	8	1
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HD22	0.52	2.04	8	1
1:A:694:ALA:HA	1:A:697:SER:HA	0.52	1.81	14	1
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:H	0.52	2.17	18	2
1:A:769:PHE:CD1	1:A:788:LEU:HD13	0.52	2.39	20	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:701:GLN:HA	0.52	1.81	1	2
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:HH2	0.52	2.23	2	2
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HD12	0.52	1.82	20	2
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HE3	0.52	1.65	11	2
1:A:700:ASN:HA	1:A:703:LYS:HB3	0.52	1.81	15	1
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:HG12	0.52	2.05	20	2
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:CG2	0.52	2.35	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:696:LEU:H	1:A:756:SER:HB3	0.52	1.64	20	1
1:A:653:LEU:C	1:A:744:ARG:HE	0.52	2.12	2	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:CA	0.52	2.34	12	2
1:A:715:GLU:O	1:A:716:PRO:C	0.52	2.52	5	14
1:A:760:GLU:O	1:A:764:ASP:OD2	0.52	2.28	3	1
1:A:771:GLN:O	1:A:774:LYS:HB2	0.52	2.05	3	2
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CB	0.52	2.87	15	3
1:A:638:VAL:HB	1:A:649:LEU:CD2	0.51	2.34	4	1
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:HB2	0.51	2.05	4	5
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CD	0.51	2.53	6	1
1:A:764:ASP:O	1:A:765:VAL:C	0.51	2.51	6	5
1:A:667:SER:H	1:A:709:LEU:CD2	0.51	2.17	7	1
1:A:772:PHE:CG	1:A:785:ILE:HD13	0.51	2.40	10	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG13	0.51	2.35	17	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CD1	0.51	3.03	10	6
1:A:742:LEU:CD1	1:A:751:LEU:HD11	0.51	2.32	5	2
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CD1	0.51	2.41	8	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:HD1	0.51	2.19	9	1
1:A:786:ILE:O	1:A:787:GLY:C	0.51	2.53	16	2
1:A:773:ASN:HA	1:A:785:ILE:HD12	0.51	1.82	11	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HB	0.51	2.20	15	2
1:A:740:LEU:HD23	1:A:740:LEU:N	0.51	2.21	16	1
1:A:643:CYS:O	1:A:644:GLU:CB	0.51	2.58	10	2
1:A:666:CYS:O	1:A:667:SER:C	0.51	2.53	18	10
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:CA	0.51	2.34	15	2
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:HB3	0.51	2.04	3	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:721:HIS:CD2	0.51	3.03	12	4
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HB	0.51	1.82	5	1
1:A:788:LEU:O	1:A:790:ARG:N	0.51	2.43	18	5
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:CD2	0.51	2.93	11	1
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HG	0.51	2.34	19	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HB	0.51	1.81	5	2
1:A:759:GLN:HA	1:A:762:ALA:HB3	0.51	1.81	2	1
1:A:626:THR:C	1:A:637:LEU:HD23	0.51	2.30	3	1
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:CB	0.51	2.31	5	4
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HA	0.51	2.19	13	1
1:A:640:CYS:O	1:A:642:GLN:N	0.51	2.43	6	8
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:N	0.51	2.73	11	5
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CD2	0.51	2.35	15	3
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HB2	0.51	2.36	16	3
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HE2	0.51	1.64	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:696:LEU:HD23	1:A:696:LEU:N	0.51	2.20	8	1
1:A:628:CYS:HB2	1:A:648:HIS:N	0.51	2.20	16	3
1:A:706:ARG:HG2	1:A:799:ALA:HB2	0.51	1.83	19	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HD12	0.51	2.35	2	1
1:A:721:HIS:HD2	1:A:740:LEU:HD12	0.51	1.66	5	3
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:HD13	0.51	2.21	13	4
1:A:649:LEU:CD2	1:A:649:LEU:H	0.51	2.19	11	2
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD13	0.51	1.83	9	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:HG	0.51	1.83	20	2
1:A:751:LEU:HD13	1:A:752:SER:N	0.51	2.18	11	2
1:A:704:CYS:SG	1:A:761:PHE:CE2	0.51	3.03	11	4
1:A:701:GLN:CA	1:A:704:CYS:SG	0.51	2.97	15	1
1:A:740:LEU:HD23	1:A:768:MET:HE1	0.51	1.81	15	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:HB	0.51	1.83	16	1
1:A:630:VAL:CG1	1:A:631:CYS:N	0.51	2.72	20	1
1:A:707:VAL:C	1:A:709:LEU:N	0.51	2.64	1	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:771:GLN:HE22	0.51	1.66	5	2
1:A:720:LEU:C	1:A:740:LEU:HG	0.51	2.30	7	2
1:A:790:ARG:N	1:A:790:ARG:HD2	0.51	2.20	3	4
1:A:772:PHE:O	1:A:775:LEU:CD2	0.51	2.58	19	3
1:A:649:LEU:HD22	1:A:656:LEU:CD2	0.51	2.27	5	2
1:A:739:ASP:O	1:A:741:THR:N	0.51	2.44	18	2
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:CB	0.51	2.59	5	11
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:HB3	0.51	1.81	18	10
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:CD1	0.51	2.93	2	1
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:HG21	0.51	1.81	6	1
1:A:639:MET:HG2	1:A:644:GLU:O	0.51	2.04	17	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CB	0.51	2.19	10	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:653:LEU:N	0.51	2.78	12	2
1:A:714:HIS:CE1	1:A:788:LEU:HD23	0.51	2.41	13	1
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:O	0.51	2.28	14	16
1:A:653:LEU:CD1	1:A:708:LEU:HB3	0.51	2.35	1	2
1:A:769:PHE:CD2	1:A:789:GLN:CG	0.51	2.94	2	5
1:A:746:ARG:NH2	1:A:753:PRO:O	0.51	2.43	3	1
1:A:766:GLY:O	1:A:769:PHE:HB2	0.51	2.05	12	5
1:A:782:VAL:O	1:A:785:ILE:N	0.51	2.44	4	7
1:A:772:PHE:CE2	1:A:785:ILE:HD13	0.51	2.41	4	5
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:CZ2	0.51	2.41	6	3
1:A:739:ASP:N	1:A:742:LEU:HD21	0.51	2.21	15	3
1:A:696:LEU:HG	1:A:755:TYR:HB3	0.51	1.81	18	3
1:A:715:GLU:HB2	1:A:716:PRO:HD3	0.51	1.83	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:790:ARG:O	1:A:794:THR:HB	0.51	2.05	16	2
1:A:701:GLN:HG3	1:A:756:SER:O	0.51	2.06	13	1
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CG	0.51	2.36	20	1
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:N	0.51	2.44	3	3
1:A:767:ARG:O	1:A:768:MET:C	0.51	2.53	17	12
1:A:758:PRO:HG2	1:A:800:PHE:CZ	0.51	2.41	7	2
1:A:773:ASN:HA	1:A:785:ILE:HG13	0.51	1.82	3	5
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:HD2	0.51	2.21	13	5
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:HE2	0.51	1.80	11	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:O	0.51	2.05	18	2
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HD13	0.51	1.82	16	1
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:CD2	0.50	2.36	2	6
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CE1	0.50	2.41	14	3
1:A:752:SER:HB3	1:A:753:PRO:CD	0.50	2.36	7	3
1:A:716:PRO:C	1:A:788:LEU:HD21	0.50	2.31	3	4
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HD3	0.50	1.83	5	4
1:A:706:ARG:HD2	1:A:799:ALA:HB2	0.50	1.83	7	1
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HB3	0.50	1.82	18	3
1:A:708:LEU:N	1:A:761:PHE:CZ	0.50	2.78	13	1
1:A:703:LYS:HZ3	1:A:799:ALA:CB	0.50	2.18	18	2
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HA	0.50	2.06	15	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HG2	0.50	2.06	10	3
1:A:711:LEU:O	1:A:714:HIS:CD2	0.50	2.64	9	8
1:A:699:ALA:C	1:A:703:LYS:HE2	0.50	2.32	13	6
1:A:708:LEU:HD11	1:A:740:LEU:HA	0.50	1.81	4	2
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:HB2	0.50	2.06	10	4
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HD11	0.50	1.83	8	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:CG1	0.50	2.36	11	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HA	0.50	1.81	11	1
1:A:741:THR:HG23	1:A:744:ARG:NH2	0.50	2.22	15	1
1:A:755:TYR:CE2	1:A:761:PHE:HA	0.50	2.42	1	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:666:CYS:N	0.50	2.84	3	10
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HG3	0.50	1.82	8	3
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CD1	0.50	2.41	5	1
1:A:788:LEU:C	1:A:790:ARG:N	0.50	2.68	11	3
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HG13	0.50	2.36	14	2
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HG21	0.50	1.82	19	1
1:A:765:VAL:O	1:A:768:MET:CB	0.50	2.58	15	3
1:A:769:PHE:O	1:A:772:PHE:HB3	0.50	2.06	14	6
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HB	0.50	2.07	8	2
1:A:773:ASN:ND2	1:A:785:ILE:HB	0.50	2.22	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:HG3	0.50	2.36	3	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:HG22	0.50	2.47	4	1
1:A:708:LEU:HD21	1:A:744:ARG:N	0.50	2.21	4	4
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HG13	0.50	2.06	10	3
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:CB	0.50	2.59	10	5
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG23	0.50	1.83	7	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:CD2	0.50	2.41	12	4
1:A:720:LEU:CD2	1:A:769:PHE:CZ	0.50	2.91	11	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HG	0.50	2.41	15	1
1:A:630:VAL:HA	1:A:712:PHE:O	0.50	2.06	18	1
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CE2	0.50	2.94	13	5
1:A:737:THR:O	1:A:771:GLN:HG3	0.50	2.07	2	6
1:A:769:PHE:O	1:A:773:ASN:CB	0.50	2.60	11	5
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:N	0.50	2.44	4	4
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:CA	0.50	2.36	8	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HD2	0.50	1.83	12	1
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HG2	0.50	1.83	13	1
1:A:702:ARG:HH12	1:A:706:ARG:HE	0.50	1.50	19	1
1:A:701:GLN:N	1:A:757:SER:OG	0.50	2.45	20	1
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:CB	0.50	2.35	2	2
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:CD2	0.50	2.41	9	1
1:A:771:GLN:HA	1:A:774:LYS:HB2	0.50	1.83	19	2
1:A:790:ARG:CD	1:A:790:ARG:N	0.50	2.75	13	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:N	0.50	2.21	16	1
1:A:792:PHE:CD2	1:A:793:GLU:HG2	0.50	2.41	1	6
1:A:708:LEU:CD2	1:A:761:PHE:CE2	0.50	2.94	4	2
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:CB	0.50	2.59	16	5
1:A:795:ARG:HA	1:A:798:GLU:CB	0.50	2.36	12	2
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HD13	0.50	2.06	8	1
1:A:769:PHE:CD1	1:A:788:LEU:HD23	0.50	2.42	8	1
1:A:796:MET:HE1	1:A:800:PHE:CE1	0.50	2.42	8	2
1:A:704:CYS:C	1:A:706:ARG:N	0.50	2.67	15	3
1:A:746:ARG:HH21	1:A:760:GLU:HG3	0.50	1.67	10	1
1:A:749:GLU:HA	1:A:753:PRO:O	0.50	2.06	10	2
1:A:772:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HD13	0.50	2.41	10	1
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:CB	0.50	2.20	18	3
1:A:628:CYS:C	1:A:630:VAL:N	0.50	2.70	3	10
1:A:699:ALA:HA	1:A:702:ARG:HB2	0.50	1.84	8	10
1:A:720:LEU:O	1:A:721:HIS:C	0.50	2.55	14	9
1:A:748:GLN:NE2	1:A:750:LYS:NZ	0.50	2.60	3	1
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:HB2	0.50	2.07	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:705:GLU:HA	1:A:747:LEU:HD21	0.50	1.83	4	2
1:A:695:LYS:HG3	1:A:755:TYR:O	0.50	2.07	18	3
1:A:708:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD12	0.50	1.84	12	1
1:A:666:CYS:C	1:A:668:LEU:H	0.50	2.14	17	1
1:A:748:GLN:O	1:A:749:GLU:CB	0.50	2.60	12	2
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:CD2	0.50	2.95	5	2
1:A:665:SER:C	1:A:670:HIS:HB2	0.50	2.31	8	1
1:A:788:LEU:O	1:A:791:PHE:N	0.50	2.45	13	4
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD22	0.50	1.67	9	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:HD2	0.50	1.66	14	2
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CD1	0.50	2.36	15	1
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:CG	0.50	2.37	19	1
1:A:762:ALA:CA	1:A:765:VAL:HG13	0.49	2.37	20	3
1:A:667:SER:O	1:A:669:CYS:N	0.49	2.45	18	7
1:A:746:ARG:NH2	1:A:751:LEU:HD22	0.49	2.22	2	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:665:SER:CA	0.49	3.00	11	3
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:O	0.49	2.44	7	2
1:A:708:LEU:CD2	1:A:744:ARG:CA	0.49	2.89	18	2
1:A:720:LEU:HD11	1:A:788:LEU:CD2	0.49	2.37	5	1
1:A:740:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE2	0.49	1.83	5	1
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:HB3	0.49	2.07	8	2
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:HE	0.49	1.65	9	1
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CB	0.49	2.36	12	2
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:HD2	0.49	2.32	13	1
1:A:626:THR:O	1:A:646:CYS:HB2	0.49	2.07	4	5
1:A:665:SER:C	1:A:669:CYS:HB2	0.49	2.32	5	6
1:A:711:LEU:O	1:A:712:PHE:C	0.49	2.54	9	8
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HG3	0.49	1.84	2	1
1:A:782:VAL:O	1:A:784:SER:N	0.49	2.45	9	4
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:CB	0.49	2.59	6	1
1:A:695:LYS:HB3	1:A:756:SER:CB	0.49	2.36	13	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:653:LEU:C	0.49	2.32	17	1
1:A:738:LEU:N	1:A:738:LEU:HD22	0.49	2.22	18	1
1:A:746:ARG:HB2	1:A:755:TYR:CZ	0.49	2.42	19	1
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:HD3	0.49	2.32	20	1
1:A:720:LEU:C	1:A:722:GLN:N	0.49	2.66	14	9
1:A:751:LEU:HB3	1:A:753:PRO:HD2	0.49	1.84	1	1
1:A:769:PHE:CA	1:A:772:PHE:HB3	0.49	2.37	9	8
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:CD1	0.49	3.00	18	4
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:CE	0.49	2.90	5	5
1:A:742:LEU:HD23	1:A:751:LEU:HD11	0.49	1.83	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:765:VAL:CG2	1:A:768:MET:HE2	0.49	2.37	20	2
1:A:648:HIS:C	1:A:649:LEU:HG	0.49	2.32	7	3
1:A:649:LEU:CA	1:A:656:LEU:HD12	0.49	2.27	4	1
1:A:667:SER:OG	1:A:706:ARG:HA	0.49	2.06	7	1
1:A:667:SER:OG	1:A:709:LEU:HB3	0.49	2.07	7	1
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD22	0.49	1.65	11	1
1:A:744:ARG:HE	1:A:748:GLN:HE21	0.49	1.51	12	1
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:CD	0.49	2.60	19	1
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HD22	0.49	2.07	3	2
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:NZ	0.49	2.06	8	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:N	0.49	2.70	15	2
1:A:790:ARG:HD2	1:A:790:ARG:N	0.49	2.21	6	1
1:A:638:VAL:HG23	1:A:647:PHE:H	0.49	1.68	8	1
1:A:723:LEU:H	1:A:739:ASP:HB3	0.49	1.67	8	2
1:A:653:LEU:C	1:A:655:ALA:N	0.49	2.69	15	3
1:A:752:SER:HB2	1:A:753:PRO:HD2	0.49	1.84	13	2
1:A:721:HIS:N	1:A:740:LEU:HD12	0.49	2.22	15	2
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:CD1	0.49	2.76	14	6
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:HE3	0.49	1.83	9	4
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:HG13	0.49	1.84	5	3
1:A:717:CYS:O	1:A:721:HIS:N	0.49	2.46	17	4
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:CG	0.49	2.38	5	1
1:A:723:LEU:CD1	1:A:739:ASP:HA	0.49	2.36	7	1
1:A:755:TYR:CE1	1:A:761:PHE:N	0.49	2.80	10	7
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:HG13	0.49	2.07	11	2
1:A:653:LEU:HD12	1:A:705:GLU:CA	0.49	2.38	11	1
1:A:649:LEU:HG	1:A:656:LEU:CB	0.49	2.38	20	2
1:A:712:PHE:HA	1:A:717:CYS:SG	0.49	2.48	17	1
1:A:764:ASP:HA	1:A:767:ARG:HD3	0.49	1.82	20	2
1:A:766:GLY:HA2	1:A:769:PHE:HD2	0.49	1.64	19	1
1:A:717:CYS:HG	1:A:788:LEU:HD23	0.49	1.67	20	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HB3	0.49	2.38	17	3
1:A:701:GLN:HG2	1:A:747:LEU:HD11	0.49	1.85	6	3
1:A:703:LYS:CG	1:A:799:ALA:HB1	0.49	2.36	6	2
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HD21	0.49	2.37	5	1
1:A:740:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE1	0.49	1.83	8	4
1:A:633:LYS:HB2	1:A:648:HIS:HE1	0.49	1.65	11	5
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HG3	0.49	2.08	6	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:709:LEU:CD1	0.49	2.96	9	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:709:LEU:HD21	0.49	2.43	9	1
1:A:630:VAL:HG22	1:A:713:CYS:N	0.49	2.23	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:757:SER:CB	1:A:758:PRO:CD	0.49	2.90	20	2
1:A:717:CYS:SG	1:A:717:CYS:O	0.49	2.71	17	1
1:A:640:CYS:HB3	1:A:644:GLU:N	0.49	2.23	19	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:664:TRP:CE3	0.49	2.41	2	3
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:CZ2	0.49	3.01	8	2
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:HG3	0.49	1.85	19	2
1:A:762:ALA:C	1:A:765:VAL:HG12	0.49	2.32	5	1
1:A:791:PHE:O	1:A:795:ARG:HD3	0.49	2.08	6	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:CG	0.49	2.38	13	2
1:A:629:ARG:CZ	1:A:645:PHE:CD2	0.49	2.95	9	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CD2	0.49	2.37	9	1
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:HD2	0.49	2.38	9	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HB2	0.49	1.85	9	2
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:OH	0.49	2.66	16	3
1:A:707:VAL:CG2	1:A:761:PHE:CE1	0.49	2.95	14	3
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HB3	0.49	1.84	17	1
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:CD1	0.49	2.65	19	1
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:CB	0.49	2.60	3	2
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:CD	0.49	2.90	6	16
1:A:667:SER:HA	1:A:670:HIS:C	0.49	2.33	4	5
1:A:629:ARG:HA	1:A:629:ARG:HE	0.49	1.67	12	3
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD11	0.49	1.66	16	3
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:HD12	0.49	2.22	14	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:743:ILE:CD1	0.49	2.28	15	1
1:A:656:LEU:CG	1:A:659:VAL:HG21	0.49	2.33	16	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:767:ARG:CB	0.49	2.37	1	2
1:A:769:PHE:O	1:A:785:ILE:HG21	0.49	2.08	4	3
1:A:660:PRO:C	1:A:662:GLU:H	0.49	2.16	7	7
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:N	0.49	2.46	7	2
1:A:738:LEU:HD23	1:A:764:ASP:HB3	0.49	1.84	10	1
1:A:763:GLN:O	1:A:767:ARG:HG3	0.49	2.08	14	2
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:HE3	0.49	2.07	15	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CE1	0.49	2.43	19	1
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CB	0.49	2.61	2	4
1:A:653:LEU:HA	1:A:744:ARG:HD2	0.49	1.84	9	2
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:CE2	0.49	2.43	4	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:795:ARG:NH2	0.49	2.67	6	1
1:A:641:ASN:HB3	1:A:664:TRP:O	0.49	2.07	16	5
1:A:706:ARG:NE	1:A:799:ALA:HB2	0.49	2.23	11	1
1:A:649:LEU:O	1:A:652:HIS:CB	0.48	2.61	1	5
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:N	0.48	2.23	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:640:CYS:SG	1:A:642:GLN:HB2	0.48	2.48	16	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:CG	0.48	2.37	9	2
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:CD1	0.48	2.35	2	2
1:A:710:ALA:O	1:A:713:CYS:HB3	0.48	2.08	4	1
1:A:706:ARG:HG3	1:A:799:ALA:HB2	0.48	1.84	5	1
1:A:740:LEU:HD23	1:A:765:VAL:HG23	0.48	1.84	5	1
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:N	0.48	2.45	6	2
1:A:746:ARG:HE	1:A:751:LEU:HG	0.48	1.67	8	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:C	0.48	2.53	10	2
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:CD2	0.48	2.70	13	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:764:ASP:HB3	0.48	1.84	14	1
1:A:664:TRP:O	1:A:665:SER:OG	0.48	2.31	16	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:767:ARG:HB3	0.48	1.84	18	1
1:A:652:HIS:O	1:A:709:LEU:HD11	0.48	2.08	19	1
1:A:718:ARG:HB3	1:A:719:PRO:HD3	0.48	1.83	2	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD11	0.48	1.83	3	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:N	0.48	2.23	14	3
1:A:746:ARG:CB	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.96	14	1
1:A:659:VAL:CB	1:A:660:PRO:CD	0.48	2.89	16	1
1:A:705:GLU:HG3	1:A:747:LEU:HD21	0.48	1.84	18	2
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:CB	0.48	2.60	18	2
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:CD2	0.48	2.76	19	1
1:A:656:LEU:HD11	1:A:664:TRP:NE1	0.48	2.22	19	1
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HD2	0.48	1.84	20	1
1:A:652:HIS:CG	1:A:656:LEU:HD22	0.48	2.43	2	1
1:A:772:PHE:CD1	1:A:772:PHE:C	0.48	2.91	12	4
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD13	0.48	2.08	3	1
1:A:711:LEU:CD1	1:A:765:VAL:HG21	0.48	2.38	5	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:714:HIS:CE1	0.48	2.43	7	1
1:A:635:GLY:O	1:A:636:ASP:C	0.48	2.55	12	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:747:LEU:CD2	1:A:761:PHE:CE2	0.48	2.97	18	2
1:A:786:ILE:HG22	1:A:790:ARG:CD	0.48	2.37	16	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:792:PHE:CD1	0.48	2.43	18	1
1:A:668:LEU:HB3	1:A:709:LEU:HB3	0.48	1.85	20	1
1:A:755:TYR:HD2	1:A:760:GLU:CG	0.48	2.22	20	1
1:A:717:CYS:C	1:A:721:HIS:CD2	0.48	2.91	20	5
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:CD2	0.48	2.38	3	2
1:A:796:MET:HE2	1:A:800:PHE:CZ	0.48	2.43	15	2
1:A:649:LEU:HD23	1:A:649:LEU:H	0.48	1.67	9	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:760:GLU:HB3	0.48	2.44	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:636:ASP:O	1:A:649:LEU:HD23	0.48	2.09	11	1
1:A:701:GLN:HG3	1:A:756:SER:C	0.48	2.33	13	1
1:A:786:ILE:HG13	1:A:790:ARG:NE	0.48	2.23	13	1
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:HD21	0.48	1.83	17	3
1:A:746:ARG:CD	1:A:751:LEU:HD13	0.48	2.38	14	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:711:LEU:HD23	0.48	1.84	16	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:CB	0.48	2.38	16	1
1:A:743:ILE:HG12	1:A:764:ASP:HB3	0.48	1.85	17	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:740:LEU:CA	0.48	2.38	4	1
1:A:714:HIS:CD2	1:A:717:CYS:HB3	0.48	2.42	8	4
1:A:708:LEU:CD1	1:A:743:ILE:HG22	0.48	2.38	16	2
1:A:669:CYS:SG	1:A:670:HIS:N	0.48	2.86	17	2
1:A:647:PHE:CD2	1:A:652:HIS:N	0.48	2.82	9	1
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:HA	0.48	1.86	13	1
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:HD1	0.48	1.69	14	1
1:A:703:LYS:C	1:A:706:ARG:HB2	0.48	2.34	15	1
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG23	0.48	1.84	18	1
1:A:753:PRO:N	1:A:754:PRO:CD	0.48	2.77	1	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HG3	0.48	2.08	2	4
1:A:747:LEU:CB	1:A:755:TYR:OH	0.48	2.62	4	2
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:CB	0.48	2.61	4	3
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CG	0.48	2.39	5	1
1:A:653:LEU:HG	1:A:708:LEU:HB3	0.48	1.85	14	3
1:A:629:ARG:NH1	1:A:645:PHE:HB3	0.48	2.24	9	1
1:A:626:THR:CB	1:A:637:LEU:HD23	0.48	2.39	10	2
1:A:743:ILE:HG22	1:A:744:ARG:N	0.48	2.23	12	1
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:HB2	0.48	2.09	15	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:HD22	0.48	1.84	18	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.44	20	1
1:A:747:LEU:HD23	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.43	20	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:CG	0.48	2.38	2	1
1:A:765:VAL:CG1	1:A:768:MET:HE2	0.48	2.39	2	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:CD1	0.48	2.97	5	3
1:A:645:PHE:HB3	1:A:647:PHE:HE1	0.48	1.69	7	6
1:A:629:ARG:NH2	1:A:645:PHE:HD2	0.48	2.07	9	1
1:A:753:PRO:CG	1:A:754:PRO:HD3	0.48	2.38	13	1
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD13	0.48	1.69	14	1
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:HD2	0.48	1.85	15	2
1:A:659:VAL:HG22	1:A:660:PRO:CD	0.48	2.34	16	1
1:A:711:LEU:CB	1:A:740:LEU:HD21	0.48	2.38	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:637:LEU:HD13	1:A:637:LEU:N	0.48	2.23	2	3
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:HA	0.48	1.86	4	2
1:A:702:ARG:O	1:A:706:ARG:HG2	0.48	2.09	17	3
1:A:633:LYS:O	1:A:637:LEU:HD11	0.48	2.08	8	1
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:CD1	0.48	2.85	9	2
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:CD	0.48	2.71	10	1
1:A:647:PHE:HB2	1:A:664:TRP:CH2	0.48	2.44	11	2
1:A:654:PRO:HA	1:A:744:ARG:HH21	0.48	1.68	12	1
1:A:796:MET:SD	1:A:800:PHE:CZ	0.48	3.07	14	1
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:HB2	0.48	2.08	2	2
1:A:648:HIS:HB2	1:A:651:CYS:HB2	0.48	1.84	7	3
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:CA	0.48	2.39	7	1
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:CD1	0.48	2.94	13	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:N	0.48	2.77	15	1
1:A:769:PHE:CG	1:A:789:GLN:HG2	0.48	2.44	18	2
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CD	0.48	2.34	1	1
1:A:700:ASN:O	1:A:704:CYS:SG	0.48	2.71	3	3
1:A:715:GLU:HB3	1:A:716:PRO:CD	0.48	2.39	15	3
1:A:745:ALA:HA	1:A:750:LYS:HE3	0.48	1.85	7	4
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:NE2	0.48	2.24	10	2
1:A:751:LEU:N	1:A:751:LEU:CD1	0.48	2.77	11	2
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HD2	0.48	2.21	11	4
1:A:696:LEU:HG	1:A:755:TYR:CD2	0.48	2.44	18	3
1:A:714:HIS:HD2	1:A:717:CYS:SG	0.48	2.30	11	1
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:HB3	0.48	1.86	11	1
1:A:721:HIS:O	1:A:722:GLN:HG2	0.48	2.09	17	2
1:A:741:THR:O	1:A:742:LEU:C	0.48	2.57	17	2
1:A:738:LEU:HG	1:A:764:ASP:O	0.48	2.09	18	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:HD23	0.48	2.48	20	1
1:A:765:VAL:CA	1:A:768:MET:HB2	0.47	2.38	16	7
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CA	0.47	2.38	18	2
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:HB3	0.47	2.08	6	2
1:A:711:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD21	0.47	2.29	9	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:CE	0.47	2.87	20	3
1:A:668:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HD23	0.47	2.39	14	1
1:A:647:PHE:CD1	1:A:664:TRP:CH2	0.47	3.02	17	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:HA	0.47	1.84	19	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:747:LEU:CD1	0.47	2.39	19	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:720:LEU:HD23	0.47	2.49	20	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:755:TYR:C	0.47	2.92	20	1
1:A:651:CYS:O	1:A:652:HIS:C	0.47	2.56	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:743:ILE:CD1	1:A:761:PHE:O	0.47	2.60	2	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:HG13	0.47	2.38	3	1
1:A:700:ASN:HD22	1:A:703:LYS:HD2	0.47	1.69	3	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:CE1	0.47	2.98	9	1
1:A:664:TRP:CD1	1:A:670:HIS:HD1	0.47	2.28	16	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:744:ARG:HB2	0.47	2.39	17	1
1:A:630:VAL:HG22	1:A:712:PHE:C	0.47	2.35	19	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:NE	0.47	2.24	19	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD21	0.47	2.44	2	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:N	0.47	2.75	2	1
1:A:656:LEU:O	1:A:658:ASP:N	0.47	2.47	15	2
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HG	0.47	2.39	8	1
1:A:794:THR:HG22	1:A:795:ARG:N	0.47	2.24	8	1
1:A:723:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HB2	0.47	2.38	12	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:708:LEU:HB2	0.47	2.39	13	1
1:A:764:ASP:C	1:A:767:ARG:HB2	0.47	2.34	20	1
1:A:770:LYS:O	1:A:773:ASN:ND2	0.47	2.47	20	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:O	0.47	2.32	1	2
1:A:701:GLN:HG3	1:A:747:LEU:CD1	0.47	2.40	4	2
1:A:772:PHE:CE2	1:A:785:ILE:HA	0.47	2.43	4	2
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:C	0.47	2.34	11	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:CD2	0.47	2.40	5	2
1:A:737:THR:CG2	1:A:738:LEU:N	0.47	2.67	6	2
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:HD3	0.47	2.39	8	3
1:A:704:CYS:HB2	1:A:761:PHE:CD1	0.47	2.44	7	2
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:HD2	0.47	2.39	7	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:CB	0.47	2.39	14	2
1:A:707:VAL:CG2	1:A:761:PHE:CZ	0.47	2.97	20	2
1:A:711:LEU:HD13	1:A:792:PHE:HB2	0.47	1.86	16	1
1:A:711:LEU:HD13	1:A:792:PHE:CB	0.47	2.39	16	1
1:A:723:LEU:CB	1:A:739:ASP:HB3	0.47	2.39	2	2
1:A:744:ARG:CZ	1:A:748:GLN:CG	0.47	2.92	2	1
1:A:696:LEU:O	1:A:700:ASN:CB	0.47	2.62	3	3
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:HD3	0.47	2.45	3	2
1:A:757:SER:OG	1:A:760:GLU:HB2	0.47	2.10	3	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:664:TRP:CZ3	0.47	2.98	5	3
1:A:638:VAL:HG23	1:A:664:TRP:CZ3	0.47	2.44	5	2
1:A:704:CYS:C	1:A:707:VAL:HG13	0.47	2.34	5	1
1:A:707:VAL:HG23	1:A:711:LEU:CD1	0.47	2.40	5	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HD11	0.47	2.40	17	3
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:H	0.47	2.21	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:N	0.47	2.42	7	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:HE2	0.47	2.33	18	2
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:O	0.47	2.10	9	2
1:A:630:VAL:CG2	1:A:647:PHE:CE2	0.47	2.98	20	2
1:A:637:LEU:HA	1:A:647:PHE:O	0.47	2.10	20	2
1:A:668:LEU:H	1:A:668:LEU:HD22	0.47	1.69	16	1
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:HG	0.47	2.35	5	6
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:O	0.47	2.32	17	7
1:A:700:ASN:ND2	1:A:703:LYS:NZ	0.47	2.63	7	1
1:A:648:HIS:O	1:A:651:CYS:HB2	0.47	2.10	9	1
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:CD2	0.47	2.93	9	1
1:A:782:VAL:C	1:A:784:SER:H	0.47	2.17	15	3
1:A:668:LEU:N	1:A:709:LEU:HD23	0.47	2.22	20	1
1:A:794:THR:O	1:A:797:ASN:HB3	0.47	2.09	1	3
1:A:628:CYS:HB2	1:A:637:LEU:HD12	0.47	1.87	3	2
1:A:640:CYS:HA	1:A:664:TRP:O	0.47	2.08	3	1
1:A:652:HIS:ND1	1:A:664:TRP:HZ2	0.47	2.08	6	4
1:A:706:ARG:O	1:A:710:ALA:HB2	0.47	2.10	13	4
1:A:720:LEU:CD2	1:A:788:LEU:HD21	0.47	2.37	4	1
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:N	0.47	2.43	16	4
1:A:796:MET:O	1:A:800:PHE:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:638:VAL:HG12	1:A:662:GLU:HA	0.47	1.86	6	1
1:A:667:SER:H	1:A:709:LEU:HD23	0.47	1.70	7	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:755:TYR:HB2	0.47	2.25	8	1
1:A:629:ARG:NE	1:A:647:PHE:CE1	0.47	2.83	9	1
1:A:713:CYS:SG	1:A:714:HIS:N	0.47	2.88	11	2
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:HB3	0.47	2.10	20	2
1:A:638:VAL:HG13	1:A:638:VAL:O	0.47	2.09	18	2
1:A:664:TRP:CZ2	1:A:666:CYS:HA	0.47	2.45	19	3
1:A:703:LYS:HG2	1:A:799:ALA:HB3	0.47	1.87	15	3
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:HA	0.47	1.85	17	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:740:LEU:CD1	0.47	2.93	19	2
1:A:738:LEU:HD11	1:A:746:ARG:NH2	0.47	2.25	18	1
1:A:742:LEU:HD12	1:A:746:ARG:HE	0.47	1.70	19	1
1:A:740:LEU:C	1:A:742:LEU:N	0.47	2.71	20	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:C	0.47	2.57	14	11
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CG	0.47	2.98	7	5
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:OH	0.47	2.10	4	1
1:A:716:PRO:HA	1:A:784:SER:HB3	0.47	1.87	5	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HD2	0.47	2.22	5	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HE21	0.47	1.69	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:CD1	0.47	2.38	8	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HD13	0.47	2.25	14	1
1:A:701:GLN:O	1:A:702:ARG:C	0.47	2.56	20	1
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:704:CYS:O	1:A:705:GLU:C	0.47	2.58	6	3
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:HD1	0.47	1.93	7	2
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:CD1	0.47	2.98	15	2
1:A:767:ARG:HG2	1:A:771:GLN:NE2	0.47	2.24	15	2
1:A:786:ILE:CG2	1:A:790:ARG:HD3	0.47	2.35	10	1
1:A:719:PRO:HB2	1:A:772:PHE:CE1	0.47	2.45	13	2
1:A:626:THR:C	1:A:646:CYS:SG	0.47	2.98	19	1
1:A:739:ASP:O	1:A:740:LEU:C	0.47	2.58	10	8
1:A:720:LEU:CD1	1:A:768:MET:HB3	0.47	2.34	3	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:CG	0.47	2.40	9	2
1:A:665:SER:OG	1:A:669:CYS:HB3	0.47	2.10	11	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CD2	0.47	2.45	16	1
1:A:752:SER:N	1:A:753:PRO:HD2	0.46	2.25	1	1
1:A:758:PRO:HB2	1:A:800:PHE:CZ	0.46	2.45	9	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:CD2	0.46	2.40	2	1
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:CB	0.46	2.39	4	1
1:A:633:LYS:HD2	1:A:633:LYS:N	0.46	2.23	9	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:C	0.46	2.34	14	2
1:A:772:PHE:C	1:A:775:LEU:HD22	0.46	2.34	19	3
1:A:711:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HD11	0.46	1.87	16	1
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:HZ	0.46	1.65	16	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:HB2	0.46	1.86	20	1
1:A:762:ALA:O	1:A:763:GLN:C	0.46	2.58	19	2
1:A:706:ARG:CD	1:A:799:ALA:HB2	0.46	2.41	7	2
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:CB	0.46	2.38	10	1
1:A:744:ARG:HH12	1:A:747:LEU:HD13	0.46	1.67	12	1
1:A:756:SER:C	1:A:757:SER:OG	0.46	2.57	13	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:CD1	0.46	2.98	13	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:C	0.46	2.34	15	1
1:A:627:ILE:CG2	1:A:634:PRO:HD3	0.46	2.39	1	2
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:HD2	0.46	1.93	1	1
1:A:656:LEU:HD22	1:A:660:PRO:CG	0.46	2.34	4	2
1:A:795:ARG:C	1:A:797:ASN:N	0.46	2.72	5	2
1:A:711:LEU:HG	1:A:795:ARG:HH22	0.46	1.70	6	1
1:A:741:THR:C	1:A:744:ARG:HB3	0.46	2.35	7	1
1:A:761:PHE:CZ	1:A:765:VAL:HG21	0.46	2.45	7	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:750:LYS:HB3	0.46	2.40	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:696:LEU:HB2	1:A:757:SER:OG	0.46	2.09	13	1
1:A:668:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HB3	0.46	2.39	14	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:NE	0.46	2.83	17	1
1:A:738:LEU:HB3	1:A:768:MET:CG	0.46	2.40	18	1
1:A:722:GLN:C	1:A:723:LEU:HG	0.46	2.34	19	1
1:A:771:GLN:O	1:A:772:PHE:C	0.46	2.58	20	1
1:A:668:LEU:HA	1:A:706:ARG:HD3	0.46	1.86	1	1
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CD2	0.46	2.99	1	1
1:A:760:GLU:O	1:A:763:GLN:HB2	0.46	2.11	1	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:708:LEU:CB	0.46	2.92	7	3
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:N	0.46	2.48	5	2
1:A:758:PRO:CB	1:A:800:PHE:HZ	0.46	2.24	4	1
1:A:765:VAL:HG22	1:A:769:PHE:CZ	0.46	2.46	5	1
1:A:640:CYS:HB2	1:A:645:PHE:HB2	0.46	1.88	18	3
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:CE2	0.46	2.68	6	2
1:A:645:PHE:HB3	1:A:647:PHE:CE1	0.46	2.45	10	2
1:A:629:ARG:NH1	1:A:645:PHE:C	0.46	2.74	9	1
1:A:746:ARG:N	1:A:751:LEU:HG	0.46	2.24	9	2
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:CA	0.46	2.41	16	2
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:CD1	0.46	2.46	15	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:NH2	0.46	2.81	17	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:668:LEU:C	0.46	2.36	20	1
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CE1	0.46	2.46	8	3
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:CD1	0.46	2.63	2	4
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CG	0.46	2.41	3	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:CE2	0.46	2.45	4	1
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:HD2	0.46	2.41	5	1
1:A:645:PHE:CB	1:A:666:CYS:HB3	0.46	2.40	18	2
1:A:704:CYS:C	1:A:761:PHE:CE2	0.46	2.94	13	2
1:A:699:ALA:O	1:A:702:ARG:CB	0.46	2.63	7	2
1:A:715:GLU:HB2	1:A:716:PRO:CD	0.46	2.41	11	2
1:A:696:LEU:CB	1:A:757:SER:OG	0.46	2.64	13	1
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:C	0.46	2.35	13	1
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:HB	0.46	2.11	14	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:C	0.46	2.36	17	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:711:LEU:CD1	0.46	2.34	18	1
1:A:737:THR:O	1:A:768:MET:HA	0.46	2.11	18	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HE	0.46	1.68	2	1
1:A:745:ALA:O	1:A:750:LYS:N	0.46	2.49	6	3
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CD2	0.46	2.45	3	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:CG2	0.46	2.40	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:663:GLU:O	1:A:664:TRP:O	0.46	2.33	5	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:639:MET:N	0.46	2.25	14	1
1:A:769:PHE:HB3	1:A:789:GLN:CG	0.46	2.41	20	2
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:765:VAL:O	1:A:769:PHE:CG	0.46	2.69	14	6
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:HB3	0.46	2.11	18	2
1:A:627:ILE:O	1:A:646:CYS:SG	0.46	2.73	3	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD11	0.46	2.46	5	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HD22	0.46	2.46	6	1
1:A:714:HIS:ND1	1:A:791:PHE:CD1	0.46	2.83	6	2
1:A:744:ARG:HG2	1:A:750:LYS:HZ1	0.46	1.71	8	1
1:A:642:GLN:CG	1:A:665:SER:HB3	0.46	2.40	9	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD13	0.46	2.44	9	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:CD2	0.46	2.98	11	1
1:A:786:ILE:HG13	1:A:789:GLN:HE21	0.46	1.69	12	1
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:HD3	0.46	2.41	13	1
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:CB	0.46	2.63	15	1
1:A:634:PRO:HA	1:A:637:LEU:CD1	0.46	2.36	1	1
1:A:641:ASN:OD1	1:A:642:GLN:HG2	0.46	2.10	2	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:701:GLN:N	0.46	2.24	11	4
1:A:772:PHE:C	1:A:775:LEU:H	0.46	2.18	3	2
1:A:773:ASN:CA	1:A:785:ILE:HG13	0.46	2.41	3	3
1:A:790:ARG:N	1:A:790:ARG:CD	0.46	2.78	7	4
1:A:710:ALA:CB	1:A:795:ARG:HG3	0.46	2.41	5	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:CG	0.46	2.94	7	3
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:CD1	0.46	2.64	19	3
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:CE2	0.46	2.46	6	2
1:A:743:ILE:CG1	1:A:764:ASP:HB3	0.46	2.41	8	1
1:A:668:LEU:HD13	1:A:709:LEU:HD23	0.46	1.88	14	1
1:A:747:LEU:HD11	1:A:761:PHE:HD2	0.46	1.70	14	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:758:PRO:HA	0.46	2.26	15	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:HB2	0.46	2.26	16	1
1:A:707:VAL:HG12	1:A:761:PHE:CZ	0.46	2.45	16	1
1:A:638:VAL:O	1:A:664:TRP:CZ3	0.46	2.69	2	2
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:CD1	0.46	2.94	2	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:747:LEU:HB3	0.46	2.26	2	1
1:A:746:ARG:CB	1:A:755:TYR:CZ	0.46	2.99	19	2
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:CB	0.46	2.64	5	4
1:A:653:LEU:HD22	1:A:709:LEU:H	0.46	1.69	4	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:723:LEU:HD22	0.46	2.41	11	2
1:A:665:SER:CB	1:A:670:HIS:HB2	0.46	2.41	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HB2	0.46	2.36	6	1
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:CD2	0.46	2.34	6	1
1:A:652:HIS:CG	1:A:654:PRO:HD2	0.46	2.45	10	4
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:HB2	0.46	2.09	18	2
1:A:737:THR:HG22	1:A:738:LEU:O	0.46	2.11	16	7
1:A:738:LEU:CD1	1:A:764:ASP:HB3	0.46	2.41	13	2
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CB	0.46	2.41	20	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:HD3	0.46	1.87	13	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:CZ	0.46	2.94	17	1
1:A:742:LEU:CD1	1:A:743:ILE:N	0.46	2.72	18	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:HE3	0.46	1.88	19	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:CD	0.46	2.40	20	1
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD11	0.46	1.87	20	1
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:CG	0.45	2.41	14	3
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HB2	0.45	2.11	1	2
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:CE1	0.45	2.46	3	1
1:A:721:HIS:HB3	1:A:722:GLN:NE2	0.45	2.26	4	2
1:A:772:PHE:C	1:A:785:ILE:HD12	0.45	2.37	20	4
1:A:711:LEU:HD23	1:A:795:ARG:NH1	0.45	2.24	6	1
1:A:716:PRO:CG	1:A:788:LEU:HB2	0.45	2.41	6	1
1:A:653:LEU:CB	1:A:709:LEU:HG	0.45	2.41	8	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:701:GLN:HA	0.45	1.88	16	2
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:CD1	0.45	2.39	14	3
1:A:704:CYS:HA	1:A:796:MET:HE1	0.45	1.88	9	1
1:A:755:TYR:HE1	1:A:761:PHE:N	0.45	2.10	9	1
1:A:626:THR:CG2	1:A:637:LEU:HD23	0.45	2.41	10	2
1:A:633:LYS:O	1:A:648:HIS:CE1	0.45	2.69	20	3
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:CB	0.45	2.79	10	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:C	0.45	2.36	12	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:CA	0.45	2.41	13	1
1:A:658:ASP:C	1:A:659:VAL:HG22	0.45	2.35	10	4
1:A:743:ILE:HG12	1:A:761:PHE:HB2	0.45	1.88	2	1
1:A:791:PHE:O	1:A:792:PHE:C	0.45	2.59	13	6
1:A:653:LEU:CB	1:A:654:PRO:CD	0.45	2.95	13	3
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:HD2	0.45	2.10	5	2
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:N	0.45	2.49	5	3
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:CG	0.45	2.79	7	2
1:A:629:ARG:HE	1:A:713:CYS:CB	0.45	2.24	9	1
1:A:628:CYS:N	1:A:637:LEU:HD13	0.45	2.25	12	1
1:A:762:ALA:HB2	1:A:796:MET:HE1	0.45	1.87	15	1
1:A:708:LEU:HB2	1:A:761:PHE:CZ	0.45	2.46	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:744:ARG:CZ	1:A:744:ARG:CB	0.45	2.92	17	1
1:A:717:CYS:O	1:A:720:LEU:HB2	0.45	2.10	1	2
1:A:738:LEU:HD12	1:A:743:ILE:CD1	0.45	2.38	1	2
1:A:723:LEU:CD1	1:A:772:PHE:HB2	0.45	2.41	2	1
1:A:765:VAL:HG22	1:A:768:MET:CE	0.45	2.39	3	1
1:A:746:ARG:HD3	1:A:754:PRO:HG2	0.45	1.89	4	1
1:A:772:PHE:CA	1:A:775:LEU:HD22	0.45	2.41	4	2
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:CD1	0.45	3.04	16	2
1:A:746:ARG:HG3	1:A:751:LEU:HD13	0.45	1.87	5	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:768:MET:CG	0.45	2.41	7	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:664:TRP:CZ3	0.45	2.46	8	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:CD2	0.45	2.98	11	1
1:A:711:LEU:HB2	1:A:740:LEU:HD11	0.45	1.87	12	2
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:CG	0.45	2.40	11	1
1:A:696:LEU:HG	1:A:701:GLN:HA	0.45	1.88	15	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:750:LYS:HE3	0.45	2.26	15	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HH22	0.45	2.24	17	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HH22	0.45	1.70	17	1
1:A:721:HIS:CA	1:A:740:LEU:HD12	0.45	2.40	20	1
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:HD23	0.45	2.25	4	2
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HG	0.45	2.46	4	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:HB3	0.45	2.42	17	2
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:CB	0.45	2.64	13	1
1:A:757:SER:N	1:A:760:GLU:HG2	0.45	2.27	15	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:CA	0.45	2.42	17	1
1:A:783:GLN:HE22	1:A:786:ILE:HG21	0.45	1.72	18	1
1:A:628:CYS:HB2	1:A:647:PHE:HA	0.45	1.89	20	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CG	0.45	2.39	2	1
1:A:763:GLN:O	1:A:767:ARG:HB2	0.45	2.12	5	1
1:A:721:HIS:C	1:A:739:ASP:HB2	0.45	2.35	18	3
1:A:755:TYR:HD2	1:A:760:GLU:CD	0.45	2.19	6	1
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:CB	0.45	2.65	7	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:743:ILE:CG2	0.45	2.93	8	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:CG1	0.45	2.41	12	1
1:A:655:ALA:CB	1:A:657:GLN:HG3	0.45	2.41	15	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:CA	0.45	2.80	17	1
1:A:709:LEU:CD1	1:A:713:CYS:SG	0.45	3.05	1	1
1:A:753:PRO:O	1:A:754:PRO:C	0.45	2.59	1	1
1:A:704:CYS:CA	1:A:707:VAL:HG13	0.45	2.42	5	1
1:A:709:LEU:C	1:A:709:LEU:HD12	0.45	2.36	6	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:N	0.45	2.80	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:CB	1:A:756:SER:O	0.45	2.63	13	1
1:A:783:GLN:O	1:A:783:GLN:NE2	0.45	2.50	13	1
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:CG	0.45	2.65	16	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:796:MET:HE3	0.45	2.42	17	1
1:A:629:ARG:HG3	1:A:645:PHE:HA	0.45	1.87	15	2
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:CG	0.45	2.36	3	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:637:LEU:HD23	0.45	1.89	11	1
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HD12	0.45	1.89	12	1
1:A:655:ALA:HB3	1:A:657:GLN:HE21	0.45	1.71	13	1
1:A:745:ALA:HB2	1:A:750:LYS:NZ	0.45	2.27	14	1
1:A:738:LEU:O	1:A:739:ASP:HB3	0.45	2.12	18	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:HG3	0.45	1.88	2	1
1:A:769:PHE:HZ	1:A:792:PHE:HB2	0.45	1.71	18	4
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:CB	0.45	2.41	7	1
1:A:668:LEU:HA	1:A:706:ARG:HB2	0.45	1.88	8	1
1:A:708:LEU:CG	1:A:761:PHE:CZ	0.45	2.99	16	2
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:CD1	0.45	2.40	14	2
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:CA	0.45	2.41	14	1
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:C	0.45	2.60	18	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:750:LYS:CE	0.45	2.79	18	1
1:A:706:ARG:HB2	1:A:799:ALA:HB2	0.45	1.89	4	1
1:A:791:PHE:O	1:A:794:THR:HB	0.45	2.12	4	1
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:CG	0.45	2.65	7	1
1:A:744:ARG:O	1:A:748:GLN:HB2	0.45	2.10	7	3
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HB3	0.45	2.26	8	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CD1	0.45	2.19	8	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD13	0.45	2.47	13	1
1:A:656:LEU:HD22	1:A:660:PRO:HB3	0.45	1.87	15	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:785:ILE:O	0.45	2.70	15	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CZ	0.45	2.99	16	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:746:ARG:NH1	0.45	2.25	3	1
1:A:666:CYS:C	1:A:668:LEU:N	0.45	2.75	4	2
1:A:796:MET:HE3	1:A:796:MET:HA	0.45	1.87	5	1
1:A:711:LEU:CD2	1:A:795:ARG:HH12	0.45	2.24	6	1
1:A:755:TYR:CZ	1:A:761:PHE:CD2	0.45	3.05	9	2
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:SD	0.45	2.51	13	2
1:A:738:LEU:HD22	1:A:743:ILE:HG12	0.45	1.89	11	1
1:A:790:ARG:HA	1:A:790:ARG:NE	0.45	2.27	11	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HG	0.45	1.89	18	3
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD2	0.45	2.42	13	1
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CB	0.45	2.42	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:LEU:CD1	1:A:658:ASP:HA	0.45	2.42	17	1
1:A:704:CYS:HB2	1:A:761:PHE:CG	0.44	2.47	1	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:705:GLU:HA	0.44	2.40	15	6
1:A:786:ILE:HG22	1:A:787:GLY:N	0.44	2.27	6	2
1:A:718:ARG:CG	1:A:719:PRO:HD3	0.44	2.40	9	2
1:A:782:VAL:C	1:A:784:SER:N	0.44	2.74	15	2
1:A:759:GLN:HB3	1:A:763:GLN:HE21	0.44	1.72	11	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:768:MET:HG3	0.44	1.87	12	1
1:A:739:ASP:HA	1:A:768:MET:HG2	0.44	1.88	15	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:711:LEU:HD12	0.44	2.36	18	1
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CG	0.44	2.39	19	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:H	0.44	1.71	20	1
1:A:695:LYS:HB2	1:A:756:SER:CB	0.44	2.42	20	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:HB2	0.44	1.87	3	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:HB3	0.44	1.89	4	1
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:N	0.44	2.50	6	2
1:A:649:LEU:CD1	1:A:649:LEU:N	0.44	2.80	8	1
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HB2	0.44	2.46	8	1
1:A:792:PHE:HD2	1:A:793:GLU:HG3	0.44	1.72	18	3
1:A:661:GLY:C	1:A:663:GLU:N	0.44	2.75	10	3
1:A:647:PHE:CZ	1:A:713:CYS:HB2	0.44	2.47	11	1
1:A:772:PHE:CE1	1:A:785:ILE:HD11	0.44	2.48	11	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:701:GLN:NE2	0.44	2.80	12	1
1:A:756:SER:H	1:A:760:GLU:HG2	0.44	1.73	12	1
1:A:698:PRO:O	1:A:702:ARG:CG	0.44	2.65	14	1
1:A:716:PRO:HB3	1:A:784:SER:HB2	0.44	1.90	15	1
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:OG	0.44	2.36	16	1
1:A:745:ALA:HA	1:A:748:GLN:HB2	0.44	1.89	19	1
1:A:762:ALA:C	1:A:764:ASP:N	0.44	2.73	19	1
1:A:643:CYS:C	1:A:645:PHE:N	0.44	2.75	9	7
1:A:639:MET:CG	1:A:644:GLU:HA	0.44	2.43	3	1
1:A:738:LEU:HD22	1:A:764:ASP:HB2	0.44	1.88	3	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:C	0.44	2.76	7	1
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:CD2	0.44	2.80	10	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:CE	0.44	2.42	11	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD21	0.44	2.47	11	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CG	0.44	2.42	14	1
1:A:700:ASN:CG	1:A:758:PRO:HG3	0.44	2.37	15	1
1:A:769:PHE:HD2	1:A:785:ILE:HG22	0.44	1.71	15	1
1:A:720:LEU:HD12	1:A:788:LEU:HD11	0.44	1.88	17	1
1:A:721:HIS:O	1:A:741:THR:CG2	0.44	2.66	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:704:CYS:HB2	1:A:747:LEU:HD22	0.44	1.88	18	1
1:A:709:LEU:O	1:A:713:CYS:HB3	0.44	2.13	18	1
1:A:758:PRO:C	1:A:760:GLU:N	0.44	2.73	18	2
1:A:648:HIS:C	1:A:649:LEU:CG	0.44	2.90	7	3
1:A:788:LEU:HD12	1:A:791:PHE:CD2	0.44	2.48	4	1
1:A:699:ALA:HA	1:A:702:ARG:HB3	0.44	1.89	19	2
1:A:704:CYS:C	1:A:761:PHE:HE2	0.44	2.20	8	2
1:A:642:GLN:HG2	1:A:665:SER:OG	0.44	2.13	16	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CD1	0.44	2.42	16	1
1:A:708:LEU:HA	1:A:792:PHE:HE2	0.44	1.72	16	1
1:A:648:HIS:C	1:A:650:ASP:H	0.44	2.19	17	1
1:A:737:THR:O	1:A:737:THR:CG2	0.44	2.64	3	2
1:A:641:ASN:CB	1:A:664:TRP:O	0.44	2.66	18	3
1:A:660:PRO:HB2	1:A:664:TRP:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:HG13	0.44	1.72	10	1
1:A:643:CYS:HB2	1:A:645:PHE:CD1	0.44	2.47	12	1
1:A:720:LEU:C	1:A:740:LEU:CD2	0.44	2.91	12	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:748:GLN:HE21	0.44	2.10	12	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:800:PHE:N	0.44	2.27	14	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HD11	0.44	2.42	17	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CD2	0.44	2.47	19	1
1:A:738:LEU:C	1:A:738:LEU:HD22	0.44	2.37	2	1
1:A:655:ALA:O	1:A:657:GLN:HG3	0.44	2.12	4	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HD2	0.44	1.89	5	2
1:A:700:ASN:N	1:A:700:ASN:HD22	0.44	2.10	7	1
1:A:772:PHE:C	1:A:774:LYS:N	0.44	2.75	11	2
1:A:783:GLN:NE2	1:A:786:ILE:HG21	0.44	2.27	8	1
1:A:718:ARG:N	1:A:719:PRO:CD	0.44	2.81	9	1
1:A:639:MET:HG3	1:A:646:CYS:SG	0.44	2.53	11	1
1:A:767:ARG:C	1:A:770:LYS:H	0.44	2.21	11	1
1:A:758:PRO:HG2	1:A:800:PHE:HZ	0.44	1.73	12	1
1:A:742:LEU:HG	1:A:746:ARG:HH21	0.44	1.72	14	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:795:ARG:HD2	0.44	1.90	17	1
1:A:782:VAL:HA	1:A:785:ILE:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:HD22	0.44	2.43	1	1
1:A:711:LEU:HD13	1:A:768:MET:HE1	0.44	1.88	3	3
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CD	0.44	2.42	3	1
1:A:660:PRO:CB	1:A:664:TRP:HB2	0.44	2.42	16	3
1:A:772:PHE:O	1:A:772:PHE:CD1	0.44	2.71	3	1
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:HE21	0.44	1.73	10	2
1:A:696:LEU:C	1:A:700:ASN:HB2	0.44	2.37	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:790:ARG:HA	1:A:790:ARG:HE	0.44	1.72	11	2
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:N	0.44	2.51	19	2
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:CD2	0.44	2.26	9	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:637:LEU:HD11	0.44	1.89	10	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:CB	0.44	2.95	12	1
1:A:700:ASN:HA	1:A:703:LYS:HB2	0.44	1.90	14	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:HA	0.44	1.90	14	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:653:LEU:C	0.44	2.90	17	1
1:A:742:LEU:HA	1:A:751:LEU:CD1	0.44	2.42	17	1
1:A:696:LEU:HD12	1:A:700:ASN:HB3	0.44	1.88	19	1
1:A:773:ASN:CB	1:A:785:ILE:HG21	0.44	2.34	20	1
1:A:791:PHE:O	1:A:795:ARG:HG2	0.44	2.12	20	1
1:A:659:VAL:C	1:A:661:GLY:N	0.44	2.75	2	5
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:CZ	0.44	2.71	5	6
1:A:702:ARG:O	1:A:705:GLU:HB2	0.44	2.13	3	1
1:A:664:TRP:CE2	1:A:665:SER:O	0.44	2.71	8	1
1:A:667:SER:CA	1:A:670:HIS:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:772:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HD11	0.44	2.47	11	2
1:A:788:LEU:HA	1:A:791:PHE:HB3	0.44	1.88	20	2
1:A:647:PHE:HZ	1:A:709:LEU:HD21	0.44	1.73	2	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CD1	0.44	2.43	3	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HB2	0.44	2.12	3	1
1:A:746:ARG:CA	1:A:751:LEU:HB2	0.44	2.43	3	1
1:A:757:SER:OG	1:A:758:PRO:HD2	0.44	2.13	4	1
1:A:663:GLU:C	1:A:664:TRP:O	0.44	2.61	5	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD12	0.44	2.47	9	1
1:A:720:LEU:O	1:A:723:LEU:HB2	0.44	2.13	11	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HG12	0.44	2.43	11	1
1:A:769:PHE:HB3	1:A:785:ILE:HG23	0.44	1.89	11	1
1:A:739:ASP:OD1	1:A:742:LEU:N	0.44	2.51	14	1
1:A:742:LEU:O	1:A:743:ILE:C	0.44	2.59	15	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:649:LEU:HD22	0.43	2.43	2	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:701:GLN:HB2	0.43	1.90	3	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:643:CYS:N	0.43	2.86	4	3
1:A:648:HIS:C	1:A:650:ASP:N	0.43	2.76	17	3
1:A:652:HIS:HE2	1:A:667:SER:CB	0.43	2.26	17	1
1:A:656:LEU:HD11	1:A:664:TRP:CD1	0.43	2.48	19	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:757:SER:HB2	0.43	2.42	20	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HE1	0.43	1.71	20	1
1:A:765:VAL:C	1:A:767:ARG:N	0.43	2.66	20	1
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:HD23	0.43	2.28	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:628:CYS:CA	1:A:637:LEU:HG	0.43	2.42	2	3
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:HD12	0.43	2.43	2	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE3	0.43	2.35	11	3
1:A:746:ARG:HH11	1:A:751:LEU:HB3	0.43	1.73	3	1
1:A:748:GLN:NE2	1:A:750:LYS:HZ1	0.43	2.11	3	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:HB2	0.43	1.89	4	2
1:A:643:CYS:O	1:A:643:CYS:SG	0.43	2.76	11	2
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HB2	0.43	2.12	8	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:645:PHE:HD2	0.43	2.25	9	1
1:A:652:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HA	0.43	1.89	17	2
1:A:786:ILE:O	1:A:789:GLN:HB2	0.43	2.12	10	1
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:HB3	0.43	2.12	12	1
1:A:668:LEU:H	1:A:709:LEU:HD12	0.43	1.72	12	1
1:A:742:LEU:O	1:A:746:ARG:HB2	0.43	2.13	13	1
1:A:641:ASN:HB2	1:A:663:GLU:C	0.43	2.38	16	1
1:A:701:GLN:HB2	1:A:756:SER:C	0.43	2.39	20	1
1:A:755:TYR:CG	1:A:756:SER:N	0.43	2.82	20	1
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HG	0.43	2.43	12	3
1:A:738:LEU:HG	1:A:764:ASP:HB3	0.43	1.90	2	2
1:A:659:VAL:HA	1:A:660:PRO:HD3	0.43	1.65	8	3
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:CD2	0.43	3.01	11	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:CG2	0.43	2.43	14	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HB2	0.43	2.13	14	1
1:A:641:ASN:CG	1:A:663:GLU:HB3	0.43	2.38	20	2
1:A:757:SER:C	1:A:759:GLN:N	0.43	2.77	9	4
1:A:668:LEU:CD2	1:A:706:ARG:O	0.43	2.66	2	1
1:A:717:CYS:O	1:A:721:HIS:CD2	0.43	2.72	4	1
1:A:788:LEU:O	1:A:788:LEU:HG	0.43	2.11	5	1
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:CB	0.43	2.66	7	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:738:LEU:N	0.43	2.27	7	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:795:ARG:HD3	1:A:798:GLU:CD	0.43	2.39	8	1
1:A:697:SER:O	1:A:698:PRO:C	0.43	2.62	9	1
1:A:743:ILE:HG21	1:A:761:PHE:CD1	0.43	2.48	11	2
1:A:695:LYS:HD3	1:A:754:PRO:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:651:CYS:C	1:A:653:LEU:H	0.43	2.21	19	1
1:A:762:ALA:C	1:A:765:VAL:HG13	0.43	2.39	20	1
1:A:637:LEU:CD2	1:A:648:HIS:CD2	0.43	3.02	15	3
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:CG	0.43	2.61	1	1
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:CD2	0.43	2.44	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:N	0.43	2.51	18	2
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:CA	0.43	2.43	15	2
1:A:665:SER:HB2	1:A:669:CYS:SG	0.43	2.54	7	1
1:A:699:ALA:C	1:A:702:ARG:HB2	0.43	2.38	7	1
1:A:627:ILE:HD12	1:A:632:GLN:HA	0.43	1.90	8	1
1:A:788:LEU:H	1:A:788:LEU:HD22	0.43	1.73	8	1
1:A:629:ARG:CD	1:A:630:VAL:N	0.43	2.82	9	1
1:A:637:LEU:N	1:A:637:LEU:HD13	0.43	2.28	9	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:709:LEU:HD11	0.43	2.48	9	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:646:CYS:HB2	0.43	1.90	11	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:658:ASP:C	0.43	2.38	12	1
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:CG	0.43	2.67	20	2
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:CD1	0.43	2.81	14	1
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:N	0.43	2.44	16	1
1:A:744:ARG:HH11	1:A:744:ARG:CG	0.43	2.27	17	1
1:A:707:VAL:O	1:A:709:LEU:N	0.43	2.51	1	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:O	0.43	2.50	2	1
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:LYS:CG	0.43	2.44	17	2
1:A:710:ALA:O	1:A:713:CYS:SG	0.43	2.77	5	1
1:A:625:ALA:O	1:A:627:ILE:N	0.43	2.52	9	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:HG21	0.43	1.89	9	2
1:A:795:ARG:HD3	1:A:798:GLU:OE1	0.43	2.13	11	1
1:A:795:ARG:O	1:A:798:GLU:HB3	0.43	2.13	12	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:788:LEU:C	0.43	2.96	15	1
1:A:650:ASP:HA	1:A:655:ALA:HB1	0.43	1.89	16	1
1:A:696:LEU:CB	1:A:755:TYR:HB3	0.43	2.43	16	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:649:LEU:CD2	0.43	2.96	18	1
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:HA	0.43	2.14	18	1
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CG	0.43	2.43	1	1
1:A:714:HIS:NE2	1:A:791:PHE:CE1	0.43	2.86	4	1
1:A:710:ALA:HB3	1:A:795:ARG:CZ	0.43	2.44	6	1
1:A:715:GLU:HB3	1:A:716:PRO:HD3	0.43	1.90	8	2
1:A:629:ARG:HG2	1:A:713:CYS:SG	0.43	2.54	11	1
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CB	0.43	2.67	11	1
1:A:772:PHE:C	1:A:772:PHE:CD1	0.43	2.96	11	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CZ	0.43	2.43	12	1
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD21	0.43	1.70	13	1
1:A:741:THR:HA	1:A:744:ARG:HH11	0.43	1.74	13	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HH12	0.43	2.26	17	1
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:N	0.43	2.51	18	1
1:A:701:GLN:OE1	1:A:747:LEU:O	0.43	2.37	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:CB	0.43	2.66	2	3
1:A:773:ASN:OD1	1:A:782:VAL:HG13	0.43	2.14	2	1
1:A:754:PRO:O	1:A:755:TYR:HB2	0.43	2.11	13	2
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:N	0.43	2.51	7	2
1:A:737:THR:C	1:A:738:LEU:O	0.43	2.62	8	1
1:A:627:ILE:O	1:A:628:CYS:C	0.43	2.62	11	2
1:A:754:PRO:O	1:A:755:TYR:C	0.43	2.62	12	1
1:A:714:HIS:CD2	1:A:716:PRO:HB2	0.43	2.49	13	1
1:A:796:MET:O	1:A:796:MET:HG3	0.43	2.13	13	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:C	0.43	2.39	14	1
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HE2	0.43	1.73	14	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:637:LEU:HD12	0.43	1.90	16	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:758:PRO:N	0.43	2.29	2	2
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:CG	0.43	2.44	7	2
1:A:744:ARG:O	1:A:745:ALA:C	0.43	2.61	2	1
1:A:668:LEU:N	1:A:709:LEU:CD2	0.43	2.82	4	1
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:CD1	0.43	3.01	8	1
1:A:645:PHE:CD1	1:A:645:PHE:N	0.43	2.87	10	2
1:A:694:ALA:O	1:A:695:LYS:C	0.43	2.62	12	1
1:A:771:GLN:O	1:A:774:LYS:N	0.43	2.48	12	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HD1	0.43	1.73	13	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:750:LYS:NZ	0.43	2.81	15	1
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HG	0.43	1.90	16	1
1:A:653:LEU:O	1:A:748:GLN:NE2	0.43	2.51	19	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:788:LEU:HD11	0.43	2.44	19	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:748:GLN:HG3	0.43	2.28	2	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CD1	0.43	2.49	3	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:CD2	0.43	2.49	4	1
1:A:714:HIS:ND1	1:A:714:HIS:N	0.43	2.65	4	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:649:LEU:CD1	0.43	2.96	6	2
1:A:711:LEU:N	1:A:795:ARG:NH1	0.43	2.67	6	1
1:A:739:ASP:OD1	1:A:742:LEU:HG	0.43	2.14	7	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:666:CYS:HB2	0.43	2.49	14	2
1:A:751:LEU:CD2	1:A:753:PRO:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:746:ARG:HD2	1:A:755:TYR:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG12	0.43	1.90	15	1
1:A:698:PRO:O	1:A:702:ARG:HG3	0.43	2.14	15	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:HG3	0.43	2.48	15	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:649:LEU:HD22	0.43	1.89	17	1
1:A:714:HIS:HD2	1:A:717:CYS:H	0.43	1.57	17	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD22	0.42	1.90	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:CD1	0.42	2.96	2	1
1:A:643:CYS:O	1:A:644:GLU:C	0.42	2.62	3	1
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HB3	0.42	2.44	5	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:744:ARG:CD	0.42	2.44	9	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:HB3	0.42	2.28	10	1
1:A:712:PHE:C	1:A:717:CYS:SG	0.42	3.02	14	2
1:A:639:MET:O	1:A:641:ASN:N	0.42	2.52	11	2
1:A:647:PHE:HB2	1:A:664:TRP:CZ3	0.42	2.49	11	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:747:LEU:HG	0.42	2.44	15	1
1:A:746:ARG:O	1:A:753:PRO:O	0.42	2.36	15	1
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HG	0.42	2.49	15	1
1:A:704:CYS:CA	1:A:707:VAL:HB	0.42	2.43	16	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD21	0.42	1.91	17	1
1:A:746:ARG:HD2	1:A:751:LEU:HD13	0.42	1.90	1	1
1:A:656:LEU:HB3	1:A:660:PRO:HD3	0.42	1.91	4	1
1:A:746:ARG:CB	1:A:751:LEU:HD23	0.42	2.38	4	1
1:A:662:GLU:C	1:A:663:GLU:HG2	0.42	2.39	7	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:761:PHE:CD2	0.42	2.49	10	1
1:A:744:ARG:HH12	1:A:747:LEU:HB3	0.42	1.74	12	1
1:A:783:GLN:NE2	1:A:783:GLN:C	0.42	2.77	13	1
1:A:629:ARG:HG2	1:A:646:CYS:H	0.42	1.73	14	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:705:GLU:HG2	0.42	1.91	15	1
1:A:703:LYS:HD2	1:A:799:ALA:O	0.42	2.14	16	1
1:A:653:LEU:CG	1:A:744:ARG:NH2	0.42	2.81	17	1
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:HZ	0.42	1.97	17	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CD1	0.42	2.49	1	1
1:A:744:ARG:O	1:A:747:LEU:HB3	0.42	2.15	2	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:708:LEU:HB3	0.42	1.90	4	1
1:A:737:THR:HG23	1:A:739:ASP:N	0.42	2.29	6	1
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.97	9	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:701:GLN:HG3	0.42	2.44	10	1
1:A:626:THR:C	1:A:637:LEU:CD2	0.42	2.91	11	1
1:A:772:PHE:O	1:A:775:LEU:HB2	0.42	2.12	11	1
1:A:759:GLN:HG2	1:A:763:GLN:NE2	0.42	2.29	13	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:712:PHE:CD2	0.42	3.02	2	1
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:O	0.42	2.14	5	1
1:A:631:CYS:O	1:A:632:GLN:HB2	0.42	2.15	9	2
1:A:655:ALA:C	1:A:656:LEU:O	0.42	2.62	20	2
1:A:629:ARG:HA	1:A:629:ARG:NE	0.42	2.30	7	1
1:A:747:LEU:HD23	1:A:755:TYR:CD2	0.42	2.49	7	2
1:A:768:MET:HE3	1:A:768:MET:HB3	0.42	1.61	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:769:PHE:HB3	1:A:789:GLN:CD	0.42	2.40	16	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD1	0.42	2.45	17	1
1:A:657:GLN:C	1:A:658:ASP:CG	0.42	2.88	1	3
1:A:697:SER:C	1:A:699:ALA:N	0.42	2.77	4	2
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:HG22	0.42	1.90	5	1
1:A:711:LEU:HG	1:A:788:LEU:HD22	0.42	1.92	7	1
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:HB3	0.42	1.92	14	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:761:PHE:HZ	0.42	2.27	19	1
1:A:638:VAL:O	1:A:638:VAL:CG1	0.42	2.67	1	1
1:A:744:ARG:HH11	1:A:748:GLN:HE21	0.42	1.56	1	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:743:ILE:HG13	0.42	1.90	2	1
1:A:746:ARG:O	1:A:747:LEU:C	0.42	2.63	15	2
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HB2	0.42	2.14	3	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HE21	0.42	1.74	5	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:HB3	0.42	2.54	16	2
1:A:656:LEU:HD21	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.45	7	1
1:A:718:ARG:HB2	1:A:719:PRO:CD	0.42	2.44	16	2
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.98	9	1
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HB2	0.42	2.15	13	1
1:A:746:ARG:HG3	1:A:751:LEU:HB3	0.42	1.90	13	1
1:A:700:ASN:CA	1:A:703:LYS:HE2	0.42	2.44	15	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:767:ARG:HB2	0.42	1.92	16	1
1:A:786:ILE:C	1:A:788:LEU:N	0.42	2.75	16	1
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CD1	0.42	2.73	18	1
1:A:636:ASP:O	1:A:649:LEU:HG	0.42	2.15	19	1
1:A:767:ARG:O	1:A:770:LYS:HB2	0.42	2.15	19	1
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:HD3	0.42	2.14	6	1
1:A:705:GLU:HG3	1:A:747:LEU:HD22	0.42	1.90	9	1
1:A:742:LEU:HD22	1:A:746:ARG:HH21	0.42	1.74	11	1
1:A:742:LEU:CD1	1:A:751:LEU:HD13	0.42	2.45	12	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HA	0.42	1.89	13	1
1:A:696:LEU:CB	1:A:757:SER:CB	0.42	2.98	13	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:CA	0.42	3.03	15	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:HD2	0.42	2.22	16	1
1:A:717:CYS:HG	1:A:788:LEU:CD2	0.42	2.26	20	1
1:A:625:ALA:O	1:A:627:ILE:HG12	0.42	2.14	3	1
1:A:715:GLU:C	1:A:717:CYS:N	0.42	2.75	12	2
1:A:667:SER:HG	1:A:706:ARG:HA	0.42	1.73	7	1
1:A:743:ILE:C	1:A:745:ALA:N	0.42	2.75	11	1
1:A:783:GLN:HE21	1:A:786:ILE:HB	0.42	1.75	11	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:SD	0.42	3.08	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:742:LEU:HG	1:A:746:ARG:NH2	0.42	2.30	14	1
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HG	0.42	2.14	20	2
1:A:711:LEU:CG	1:A:740:LEU:HD11	0.42	2.45	17	1
1:A:628:CYS:H	1:A:637:LEU:HD21	0.42	1.75	19	1
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:CD1	0.42	2.73	1	1
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:CD2	0.42	2.98	3	1
1:A:629:ARG:N	1:A:646:CYS:O	0.42	2.53	5	1
1:A:708:LEU:HA	1:A:711:LEU:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:759:GLN:HB3	1:A:763:GLN:CD	0.42	2.40	6	2
1:A:751:LEU:CD2	1:A:752:SER:N	0.42	2.77	11	2
1:A:710:ALA:C	1:A:712:PHE:N	0.42	2.77	11	1
1:A:755:TYR:HA	1:A:760:GLU:OE1	0.42	2.15	11	1
1:A:653:LEU:HG	1:A:654:PRO:HD3	0.42	1.92	13	1
1:A:717:CYS:N	1:A:788:LEU:CD1	0.42	2.82	15	1
1:A:704:CYS:C	1:A:707:VAL:HB	0.42	2.40	16	1
1:A:765:VAL:O	1:A:766:GLY:C	0.42	2.63	17	1
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CE2	0.42	2.50	20	1
1:A:714:HIS:CD2	1:A:717:CYS:SG	0.42	3.13	11	3
1:A:696:LEU:HA	1:A:757:SER:N	0.42	2.30	4	2
1:A:647:PHE:O	1:A:649:LEU:N	0.42	2.53	5	1
1:A:696:LEU:C	1:A:696:LEU:CD1	0.42	2.93	7	1
1:A:720:LEU:O	1:A:740:LEU:HG	0.42	2.15	7	1
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:CG	0.42	2.45	9	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:767:ARG:CB	0.42	2.45	9	1
1:A:644:GLU:O	1:A:646:CYS:SG	0.42	2.76	16	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:656:LEU:C	1:A:657:GLN:HG3	0.42	2.38	16	1
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:CG	0.42	2.48	16	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:769:PHE:HE1	0.42	1.75	16	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:764:ASP:C	0.41	2.37	1	1
1:A:707:VAL:HB	1:A:796:MET:HE3	0.41	1.90	3	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HD2	0.41	1.91	10	2
1:A:638:VAL:HG12	1:A:649:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD13	0.41	2.50	10	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:CB	0.41	2.44	12	1
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:CD	0.41	2.40	13	1
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:HE2	0.41	2.14	15	1
1:A:796:MET:HB2	1:A:796:MET:HE3	0.41	1.74	15	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:CG	0.41	2.82	17	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:740:LEU:CD1	0.41	2.98	18	1
1:A:710:ALA:HB1	1:A:791:PHE:CE1	0.41	2.50	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LEU:CD1	1:A:768:MET:CG	0.41	2.96	19	1
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HD23	0.41	1.90	20	1
1:A:701:GLN:CD	1:A:747:LEU:O	0.41	2.63	3	1
1:A:746:ARG:O	1:A:748:GLN:N	0.41	2.52	3	1
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:HA	0.41	2.15	5	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:CD2	0.41	2.99	5	1
1:A:743:ILE:O	1:A:746:ARG:HB2	0.41	2.14	5	1
1:A:715:GLU:H	1:A:716:PRO:HD2	0.41	1.75	6	1
1:A:745:ALA:HB2	1:A:750:LYS:HZ1	0.41	1.75	7	1
1:A:630:VAL:CG1	1:A:651:CYS:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:715:GLU:HA	1:A:718:ARG:HG2	0.41	1.92	13	2
1:A:769:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HG22	0.41	2.50	15	1
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:HE1	0.41	1.75	1	1
1:A:696:LEU:HA	1:A:756:SER:C	0.41	2.40	2	1
1:A:737:THR:HG23	1:A:771:GLN:HG3	0.41	1.91	15	2
1:A:740:LEU:HD23	1:A:743:ILE:HD12	0.41	1.92	5	1
1:A:700:ASN:ND2	1:A:703:LYS:HZ1	0.41	2.13	7	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HB3	0.41	1.93	7	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:O	0.41	2.69	10	1
1:A:710:ALA:HB1	1:A:791:PHE:CD1	0.41	2.50	11	2
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:652:HIS:CE1	1:A:664:TRP:HZ2	0.41	2.34	15	1
1:A:697:SER:OG	1:A:698:PRO:HD2	0.41	2.15	18	1
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:HB3	0.41	2.16	1	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:748:GLN:NE2	0.41	2.67	1	1
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:HD23	0.41	2.45	5	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:CB	0.41	2.41	6	1
1:A:637:LEU:HB3	1:A:646:CYS:HB3	0.41	1.93	13	2
1:A:697:SER:O	1:A:700:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:794:THR:HG23	1:A:798:GLU:OE1	0.41	2.15	11	1
1:A:710:ALA:CB	1:A:795:ARG:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:654:PRO:C	1:A:748:GLN:NE2	0.41	2.78	13	1
1:A:712:PHE:CD2	1:A:721:HIS:CE1	0.41	3.08	13	1
1:A:783:GLN:C	1:A:783:GLN:HE21	0.41	2.24	13	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:742:LEU:CD1	0.41	2.45	18	1
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:SG	0.41	2.55	1	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CG	0.41	3.14	7	2
1:A:667:SER:O	1:A:706:ARG:HG2	0.41	2.16	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:645:PHE:CE2	1:A:713:CYS:SG	0.41	3.12	12	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:772:PHE:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:769:PHE:HE2	1:A:788:LEU:C	0.41	2.23	15	1
1:A:641:ASN:HD22	1:A:642:GLN:NE2	0.41	2.13	17	1
1:A:665:SER:OG	1:A:670:HIS:CB	0.41	2.69	19	1
1:A:642:GLN:NE2	1:A:665:SER:HB2	0.41	2.30	3	1
1:A:667:SER:O	1:A:670:HIS:N	0.41	2.53	11	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD22	0.41	1.93	3	1
1:A:656:LEU:H	1:A:656:LEU:HG	0.41	1.47	4	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HG	0.41	2.15	5	2
1:A:742:LEU:HD13	1:A:751:LEU:HD21	0.41	1.91	6	1
1:A:737:THR:C	1:A:738:LEU:CD2	0.41	2.86	7	1
1:A:716:PRO:HG2	1:A:788:LEU:CD1	0.41	2.42	9	1
1:A:738:LEU:HD22	1:A:738:LEU:C	0.41	2.41	10	1
1:A:707:VAL:C	1:A:711:LEU:HG	0.41	2.39	11	1
1:A:641:ASN:C	1:A:642:GLN:HE21	0.41	2.22	12	1
1:A:630:VAL:HA	1:A:713:CYS:CA	0.41	2.44	14	1
1:A:703:LYS:HD3	1:A:796:MET:HE2	0.41	1.93	15	1
1:A:708:LEU:CB	1:A:761:PHE:CZ	0.41	3.04	16	1
1:A:773:ASN:CG	1:A:782:VAL:HG13	0.41	2.41	19	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:764:ASP:C	0.41	2.93	1	1
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:OG	0.41	2.35	3	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:705:GLU:CA	0.41	2.98	8	1
1:A:709:LEU:HD23	1:A:709:LEU:HA	0.41	1.80	11	1
1:A:771:GLN:CD	1:A:771:GLN:N	0.41	2.79	12	1
1:A:652:HIS:HD2	1:A:656:LEU:HD13	0.41	1.75	13	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG23	0.41	2.42	14	1
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:N	0.41	2.54	15	1
1:A:769:PHE:CD2	1:A:785:ILE:O	0.41	2.74	15	1
1:A:709:LEU:O	1:A:712:PHE:N	0.41	2.54	17	1
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:CB	0.41	2.69	17	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HB2	0.41	2.45	18	1
1:A:769:PHE:C	1:A:772:PHE:HB3	0.41	2.41	1	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:CA	0.41	2.46	5	1
1:A:696:LEU:HB2	1:A:755:TYR:HB3	0.41	1.92	7	1
1:A:746:ARG:O	1:A:755:TYR:N	0.41	2.53	11	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:648:HIS:NE2	0.41	2.31	15	1
1:A:651:CYS:C	1:A:653:LEU:N	0.41	2.77	19	1
1:A:716:PRO:O	1:A:772:PHE:HZ	0.41	1.98	19	1
1:A:747:LEU:N	1:A:755:TYR:CZ	0.41	2.89	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:HD23	0.41	1.92	2	1
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HG2	0.41	2.51	2	3
1:A:653:LEU:HD12	1:A:744:ARG:HD2	0.41	1.93	4	1
1:A:641:ASN:HD22	1:A:642:GLN:HE22	0.41	1.58	7	1
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HB2	0.41	1.91	7	1
1:A:787:GLY:HA2	1:A:790:ARG:HE	0.41	1.76	10	1
1:A:695:LYS:CG	1:A:696:LEU:H	0.41	2.29	11	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:746:ARG:NH2	0.41	2.30	11	1
1:A:745:ALA:C	1:A:748:GLN:H	0.41	2.24	11	1
1:A:782:VAL:O	1:A:785:ILE:HB	0.41	2.16	12	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HE2	0.41	2.16	13	1
1:A:629:ARG:O	1:A:713:CYS:O	0.41	2.38	14	1
1:A:745:ALA:HB2	1:A:750:LYS:HZ2	0.41	1.75	14	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:O	0.41	2.16	15	1
1:A:717:CYS:C	1:A:721:HIS:HD2	0.41	2.24	15	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:CD	0.41	2.42	15	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HG3	0.41	1.92	16	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CD2	0.41	3.14	19	1
1:A:770:LYS:HA	1:A:773:ASN:ND2	0.41	2.30	20	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:CG	0.41	3.00	1	1
1:A:746:ARG:NH1	1:A:752:SER:OG	0.41	2.54	2	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:740:LEU:CB	0.41	3.04	3	1
1:A:625:ALA:O	1:A:626:THR:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:696:LEU:HD23	1:A:758:PRO:N	0.41	2.31	4	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:768:MET:SD	0.41	3.09	4	1
1:A:652:HIS:HA	1:A:709:LEU:HD21	0.41	1.92	5	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:757:SER:C	0.41	2.94	6	1
1:A:638:VAL:HG13	1:A:659:VAL:HA	0.41	1.92	9	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:743:ILE:CG2	0.41	2.99	9	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:659:VAL:HG12	0.41	2.45	10	1
1:A:653:LEU:HD11	1:A:747:LEU:HD12	0.41	1.93	13	1
1:A:631:CYS:SG	1:A:633:LYS:HG3	0.41	2.56	16	1
1:A:746:ARG:HH21	1:A:764:ASP:CG	0.41	2.24	18	1
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:HG3	0.41	2.41	19	1
1:A:797:ASN:ND2	1:A:797:ASN:C	0.41	2.78	19	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:761:PHE:O	0.40	2.16	4	1
1:A:667:SER:O	1:A:668:LEU:C	0.40	2.64	8	1
1:A:723:LEU:H	1:A:739:ASP:CB	0.40	2.29	8	1
1:A:741:THR:OG1	1:A:750:LYS:NZ	0.40	2.53	8	1
1:A:759:GLN:HB3	1:A:763:GLN:NE2	0.40	2.31	8	2
1:A:795:ARG:O	1:A:798:GLU:HB2	0.40	2.16	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:723:LEU:HD13	1:A:772:PHE:HA	0.40	1.92	20	1
1:A:748:GLN:HB3	1:A:750:LYS:HB2	0.40	1.93	20	1
1:A:629:ARG:O	1:A:632:GLN:HG3	0.40	2.17	1	1
1:A:788:LEU:O	1:A:791:PHE:HD2	0.40	1.99	4	1
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CD1	0.40	2.45	5	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:701:GLN:HG2	0.40	2.44	7	1
1:A:742:LEU:O	1:A:746:ARG:HG2	0.40	2.15	14	1
1:A:646:CYS:O	1:A:647:PHE:CD1	0.40	2.74	17	1
1:A:739:ASP:CA	1:A:768:MET:SD	0.40	3.09	18	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CE1	0.40	2.52	19	1
1:A:787:GLY:O	1:A:791:PHE:HB2	0.40	2.16	19	1
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:HD22	0.40	1.93	2	1
1:A:797:ASN:C	1:A:799:ALA:N	0.40	2.80	3	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:HA	0.40	1.92	4	1
1:A:637:LEU:HB3	1:A:647:PHE:N	0.40	2.30	7	1
1:A:645:PHE:HE2	1:A:668:LEU:HD23	0.40	1.68	7	1
1:A:629:ARG:HG3	1:A:646:CYS:O	0.40	2.16	9	1
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CG	0.40	2.46	12	1
1:A:695:LYS:HG2	1:A:755:TYR:O	0.40	2.17	12	1
1:A:751:LEU:CG	1:A:752:SER:N	0.40	2.77	12	1
1:A:765:VAL:HG12	1:A:769:PHE:CE1	0.40	2.51	12	1
1:A:794:THR:HA	1:A:797:ASN:HB3	0.40	1.94	16	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:795:ARG:HH11	0.40	1.76	17	1
1:A:765:VAL:HB	1:A:768:MET:CE	0.40	2.46	19	1
1:A:634:PRO:C	1:A:637:LEU:HD11	0.40	2.41	1	1
1:A:634:PRO:HA	1:A:637:LEU:HD21	0.40	1.93	8	1
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:CG	0.40	2.46	8	1
1:A:654:PRO:HB3	1:A:705:GLU:OE2	0.40	2.16	9	1
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HD12	0.40	1.93	13	1
1:A:703:LYS:O	1:A:704:CYS:C	0.40	2.64	14	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:CG	0.40	2.80	15	1
1:A:707:VAL:HB	1:A:761:PHE:HZ	0.40	1.77	15	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:647:PHE:HB2	0.40	2.46	17	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:HB3	0.40	2.15	18	1
1:A:696:LEU:HG	1:A:701:GLN:HB2	0.40	1.92	19	1
1:A:721:HIS:O	1:A:722:GLN:HG3	0.40	2.17	20	1
1:A:751:LEU:CG	1:A:752:SER:H	0.40	2.25	4	1
1:A:629:ARG:HG2	1:A:645:PHE:CE2	0.40	2.52	6	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:646:CYS:CB	0.40	2.45	11	1
1:A:723:LEU:CD2	1:A:768:MET:O	0.40	2.69	11	1
1:A:723:LEU:HB3	1:A:775:LEU:CD1	0.40	2.46	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:703:LYS:HZ1	1:A:758:PRO:HA	0.40	1.76	15	1
1:A:768:MET:C	1:A:772:PHE:HB2	0.40	2.41	20	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	136/189 (72%)	82±4 (60±3%)	33±3 (24±3%)	21±3 (16±2%)	0	4
All	All	2720/3780 (72%)	1632 (60%)	666 (24%)	422 (16%)	0	4

All 58 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	628	CYS	20
1	A	629	ARG	20
1	A	658	ASP	20
1	A	627	ILE	19
1	A	659	VAL	18
1	A	655	ALA	17
1	A	697	SER	17
1	A	753	PRO	17
1	A	645	PHE	16
1	A	752	SER	15
1	A	738	LEU	14
1	A	656	LEU	12
1	A	644	GLU	11
1	A	666	CYS	11
1	A	755	TYR	11
1	A	667	SER	11
1	A	749	GLU	11
1	A	664	TRP	10
1	A	653	LEU	10
1	A	751	LEU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	648	HIS	9
1	A	754	PRO	8
1	A	724	ALA	8
1	A	695	LYS	7
1	A	668	LEU	7
1	A	661	GLY	7
1	A	662	GLU	7
1	A	640	CYS	7
1	A	630	VAL	6
1	A	783	GLN	6
1	A	756	SER	6
1	A	660	PRO	6
1	A	792	PHE	5
1	A	665	SER	4
1	A	657	GLN	3
1	A	652	HIS	3
1	A	739	ASP	3
1	A	740	LEU	3
1	A	711	LEU	2
1	A	663	GLU	2
1	A	641	ASN	2
1	A	748	GLN	2
1	A	636	ASP	2
1	A	625	ALA	2
1	A	737	THR	2
1	A	757	SER	2
1	A	721	HIS	1
1	A	649	LEU	1
1	A	698	PRO	1
1	A	626	THR	1
1	A	635	GLY	1
1	A	782	VAL	1
1	A	716	PRO	1
1	A	800	PHE	1
1	A	703	LYS	1
1	A	775	LEU	1
1	A	765	VAL	1
1	A	758	PRO	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	123/167 (74%)	84±5 (68±4%)	39±5 (32±4%)	1	14
All	All	2460/3340 (74%)	1680 (68%)	780 (32%)	1	14

All 100 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	659	VAL	20
1	A	796	MET	20
1	A	626	THR	19
1	A	628	CYS	19
1	A	656	LEU	19
1	A	744	ARG	18
1	A	783	GLN	18
1	A	786	ILE	18
1	A	667	SER	17
1	A	696	LEU	17
1	A	742	LEU	17
1	A	771	GLN	17
1	A	761	PHE	17
1	A	753	PRO	16
1	A	653	LEU	15
1	A	708	LEU	15
1	A	751	LEU	15
1	A	788	LEU	15
1	A	723	LEU	14
1	A	782	VAL	14
1	A	702	ARG	14
1	A	638	VAL	14
1	A	637	LEU	13
1	A	668	LEU	13
1	A	746	ARG	13
1	A	627	ILE	12
1	A	755	TYR	12
1	A	768	MET	11
1	A	649	LEU	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	770	LYS	11
1	A	704	CYS	11
1	A	716	PRO	10
1	A	759	GLN	10
1	A	658	ASP	9
1	A	748	GLN	9
1	A	738	LEU	9
1	A	665	SER	9
1	A	639	MET	8
1	A	706	ARG	8
1	A	743	ILE	8
1	A	775	LEU	8
1	A	713	CYS	8
1	A	790	ARG	8
1	A	750	LYS	8
1	A	642	GLN	7
1	A	715	GLU	7
1	A	707	VAL	7
1	A	767	ARG	7
1	A	695	LYS	7
1	A	709	LEU	7
1	A	646	CYS	6
1	A	737	THR	6
1	A	797	ASN	6
1	A	798	GLU	6
1	A	643	CYS	6
1	A	629	ARG	6
1	A	741	THR	5
1	A	701	GLN	5
1	A	760	GLU	5
1	A	794	THR	5
1	A	630	VAL	5
1	A	718	ARG	5
1	A	747	LEU	4
1	A	641	ASN	4
1	A	752	SER	4
1	A	636	ASP	4
1	A	740	LEU	4
1	A	650	ASP	3
1	A	663	GLU	3
1	A	765	VAL	3
1	A	632	GLN	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	645	PHE	3
1	A	764	ASP	3
1	A	711	LEU	3
1	A	631	CYS	3
1	A	789	GLN	3
1	A	756	SER	3
1	A	670	HIS	3
1	A	703	LYS	3
1	A	697	SER	2
1	A	700	ASN	2
1	A	714	HIS	2
1	A	648	HIS	2
1	A	722	GLN	2
1	A	785	ILE	2
1	A	772	PHE	2
1	A	652	HIS	2
1	A	791	PHE	1
1	A	633	LYS	1
1	A	651	CYS	1
1	A	795	ARG	1
1	A	763	GLN	1
1	A	647	PHE	1
1	A	773	ASN	1
1	A	712	PHE	1
1	A	757	SER	1
1	A	784	SER	1
1	A	758	PRO	1
1	A	662	GLU	1
1	A	717	CYS	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

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

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided