



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 06:41 PM UTC

PDB ID : 6XQJ / pdb\_00006xqj  
BMRB ID : 30769  
Title : Structure of HIV-1 Vpr in complex with the human nucleotide excision repair protein hHR23A  
Authors : Byeon, I.-J.L.; Calero, G.; Wu, Y.; Byeon, C.H.; Gronenborn, A.M.  
Deposited on : 2020-07-09

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
wwPDB-RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
wwPDB-ShiftChecker : v1.2  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

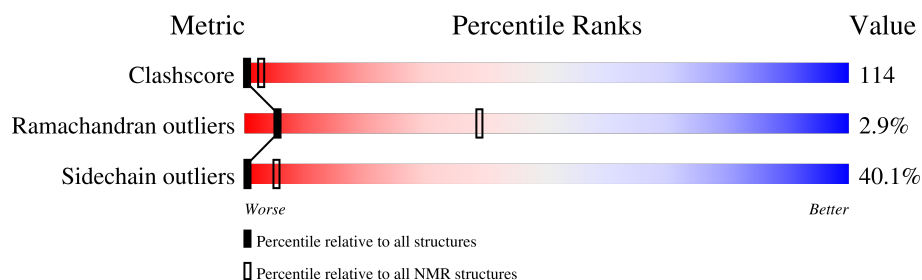
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 82%.

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



| Metric                | Whole archive<br>(#Entries) | NMR archive<br>(#Entries) |
|-----------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore            | 229148                      | 14424                     |
| Ramachandran outliers | 224038                      | 12848                     |
| Sidechain outliers    | 223484                      | 12823                     |

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1   | A     | 234    |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 55 models. Model 43 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:14-A:79, A:230-A:288, A:314-A:360 (172) | 0.90              | 43           |

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 13 clusters and 2 single-model clusters were found.

| Cluster number        | Models                                |
|-----------------------|---------------------------------------|
| 1                     | 7, 16, 21, 22, 26, 28, 36, 38, 48, 53 |
| 2                     | 5, 19, 23, 25, 27, 32, 43, 45, 50     |
| 3                     | 3, 4, 6, 14, 15, 34, 41               |
| 4                     | 2, 8, 11, 12, 29, 47                  |
| 5                     | 35, 37, 46, 51                        |
| 6                     | 1, 9, 42                              |
| 7                     | 17, 54                                |
| 8                     | 24, 44                                |
| 9                     | 33, 39                                |
| 10                    | 10, 13                                |
| 11                    | 18, 49                                |
| 12                    | 31, 55                                |
| 13                    | 20, 52                                |
| Single-model clusters | 30; 40                                |

### 3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2856 atoms, of which 1415 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |      |     |     |   | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| 1   | A     | 173      | Total | C   | H    | N   | O   | S | 0     |
|     |       |          | 2855  | 925 | 1415 | 252 | 259 | 4 |       |

There are 14 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment        | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A     | 80      | GLY      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 81      | GLY      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 82      | SER      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 83      | GLY      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 84      | GLY      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 85      | SER      | -      | linker         | UNP P12520 |
| A     | 364     | LEU      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 365     | GLU      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 366     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 367     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 368     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 369     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 370     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |
| A     | 371     | HIS      | -      | expression tag | UNP P54725 |

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

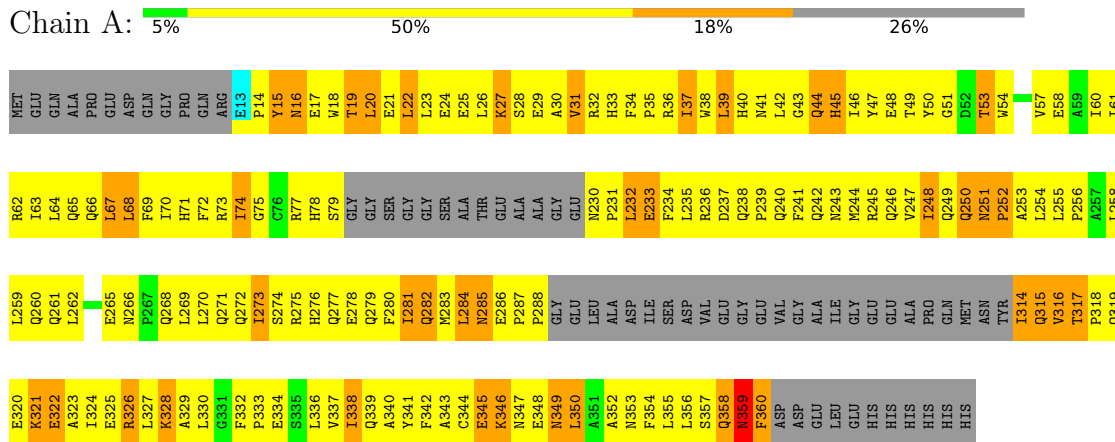
| Mol | Chain | Residues | Atoms |    |
|-----|-------|----------|-------|----|
| 2   | A     | 1        | Total | Zn |
|     |       |          | 1     | 1  |

## 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: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

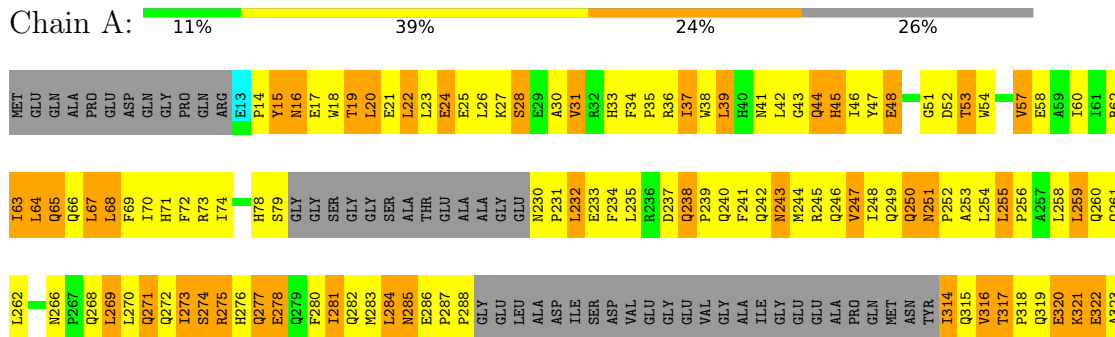


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

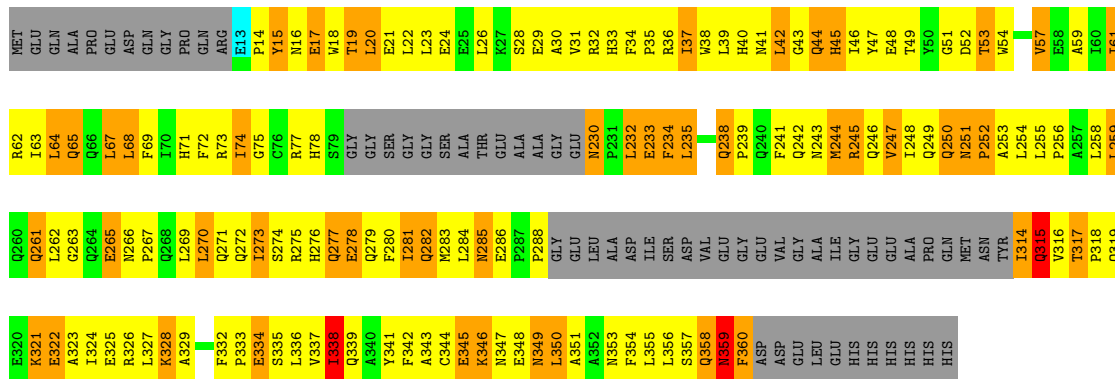
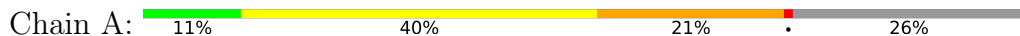
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



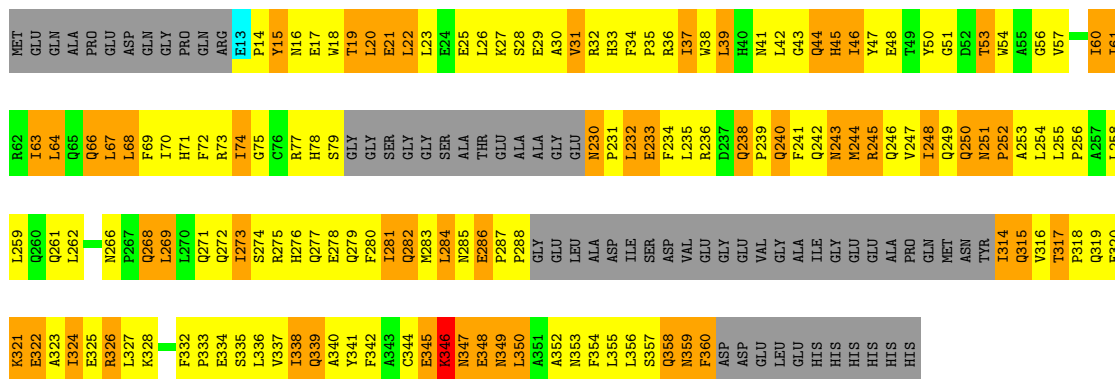
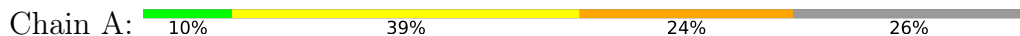
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A



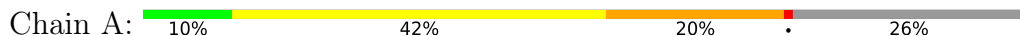
### 4.2.3 Score per residue for model 3

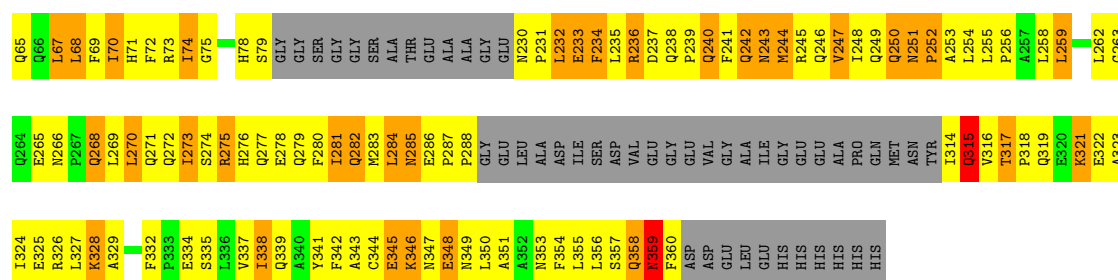
- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

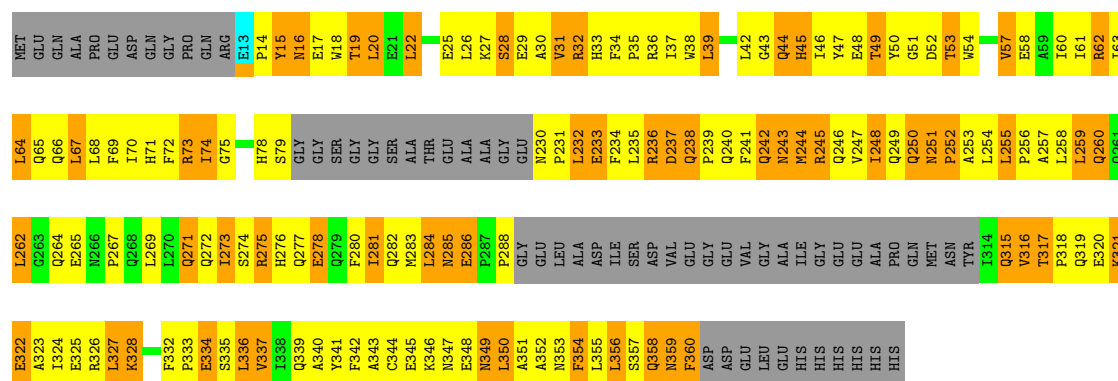




#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

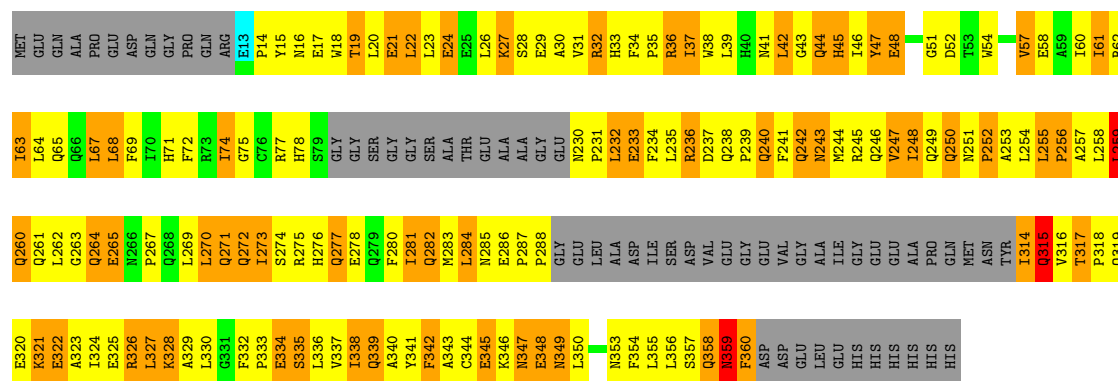
Chain A: 9% 38% 26% 26%



#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

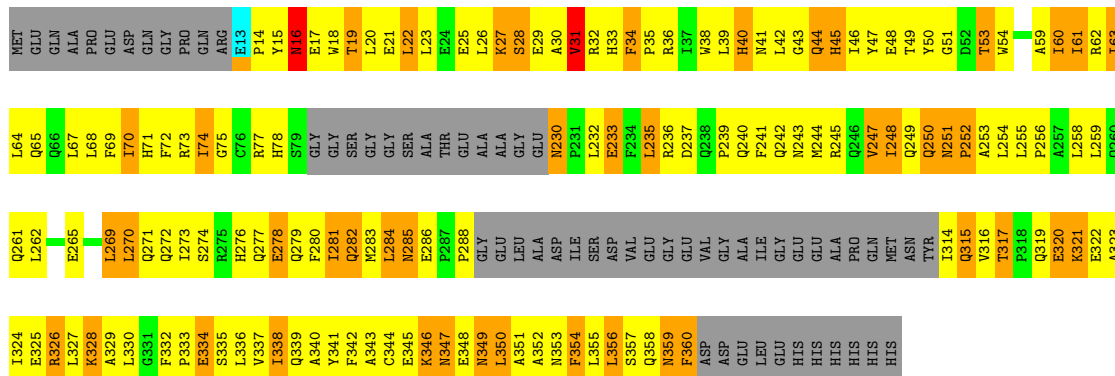
Chain A: 8% 38% 26% 26%



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

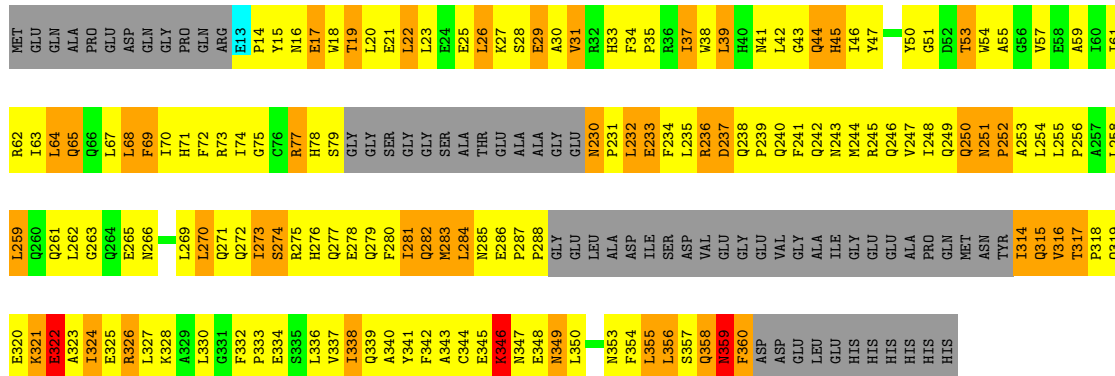
Chain A:  11% 43% 19% 1% 26%



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

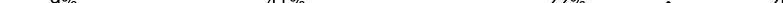
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A:  9% 44% 19% 1% 26%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A:  9% 41% 22% 1% 26%

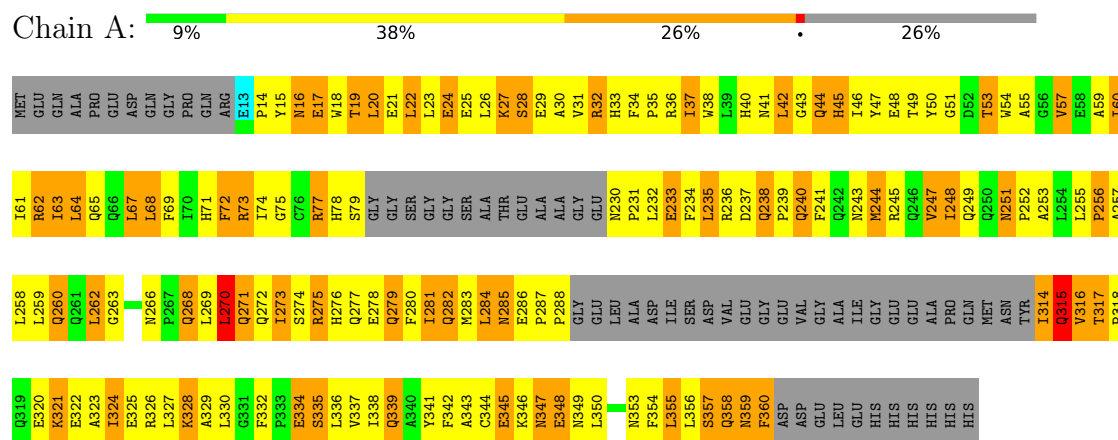






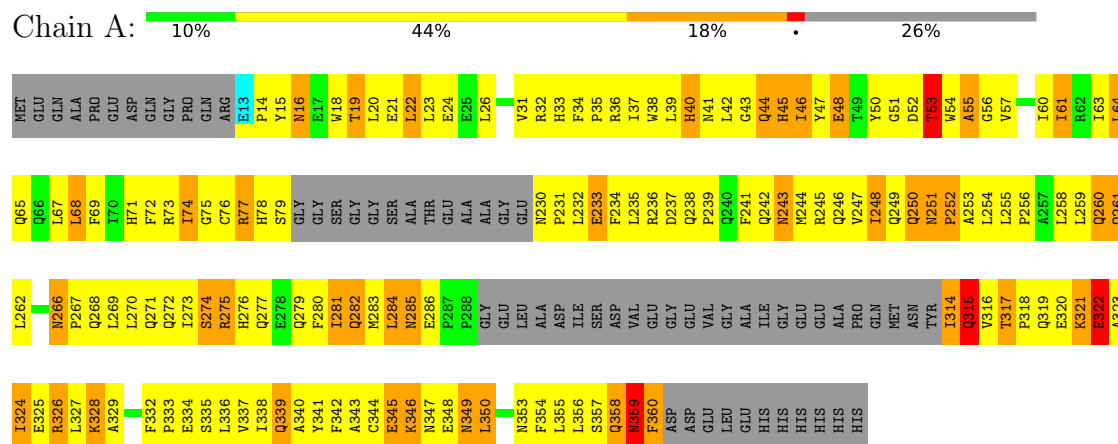
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

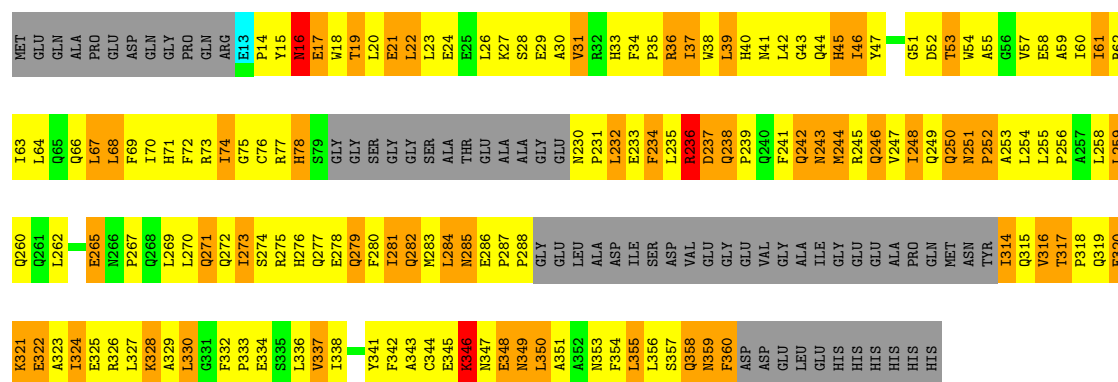
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

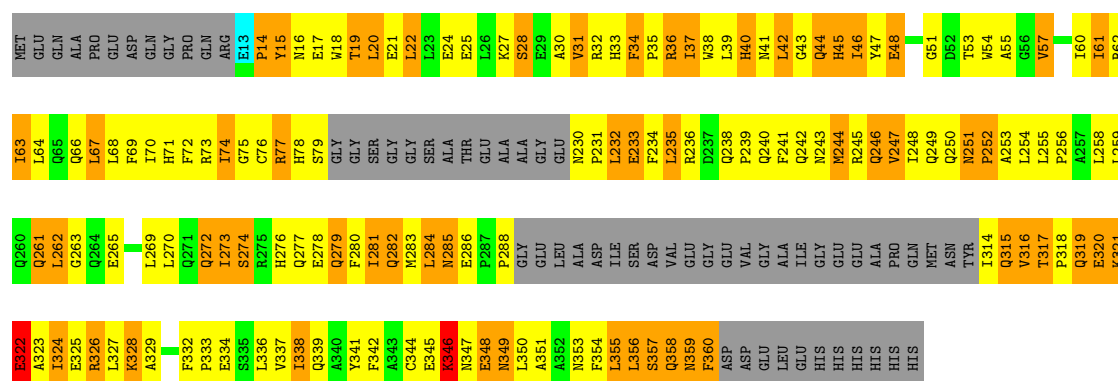




#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

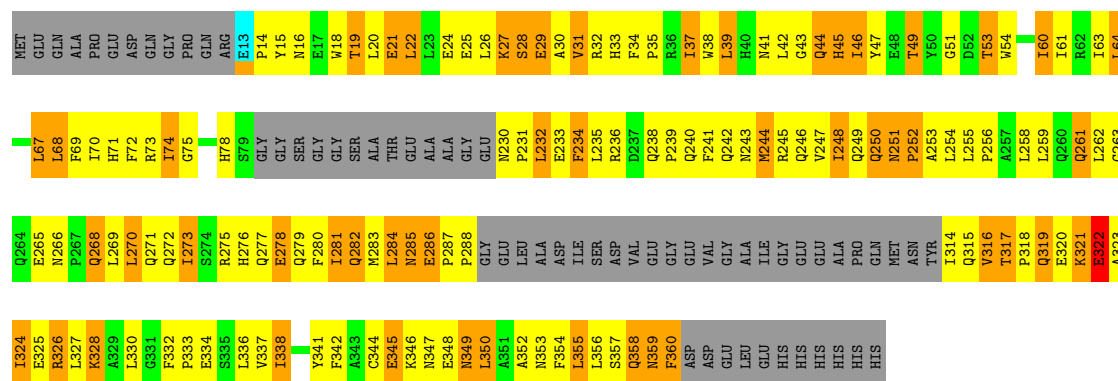
Chain A: 11% 37% 25% . 26%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

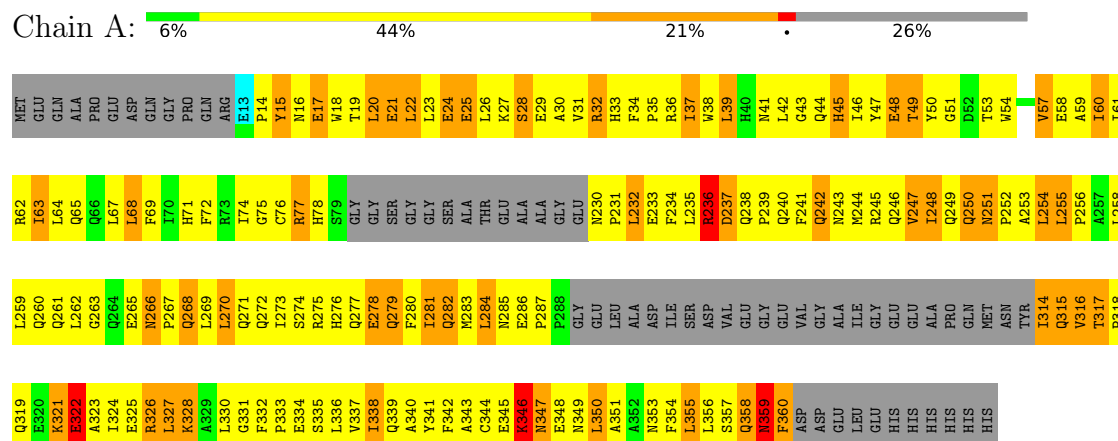
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A: 13% 38% 22% 26%



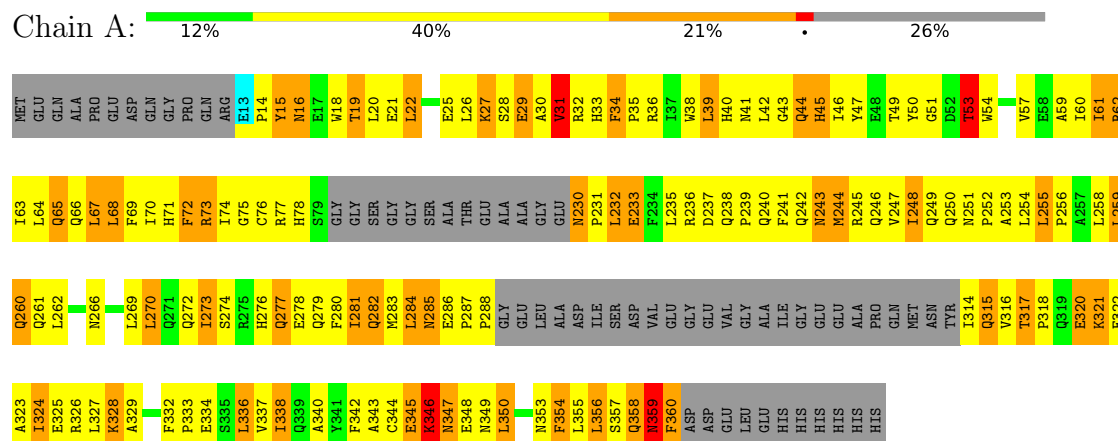
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



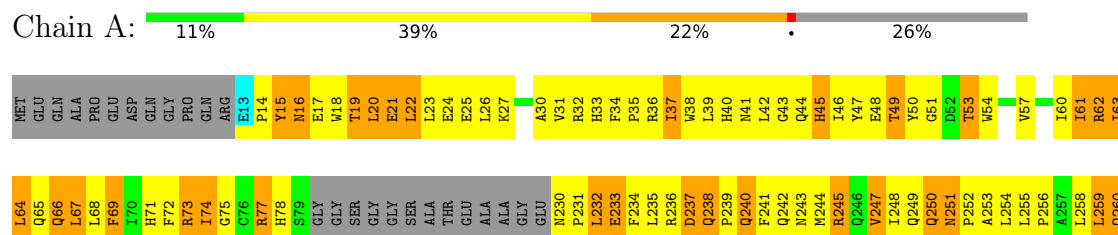
### 4.2.16 Score per residue for model 16

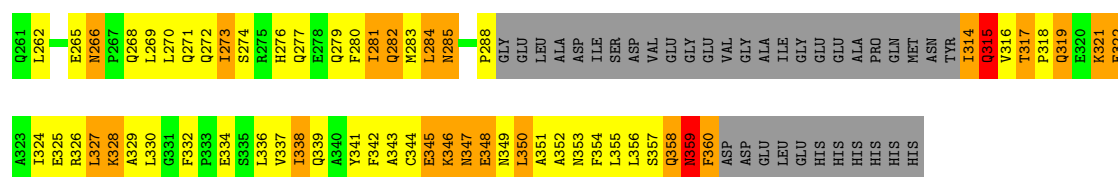
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



### 4.2.17 Score per residue for model 17

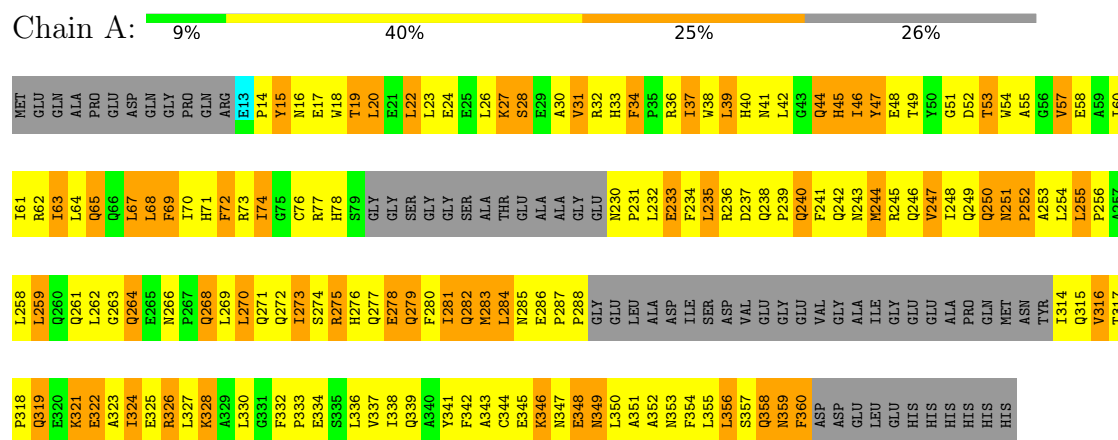
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A





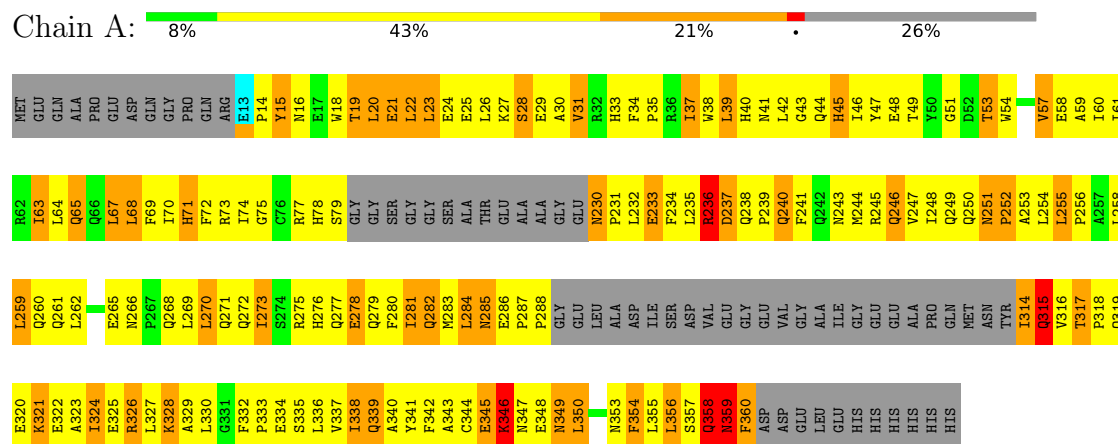
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

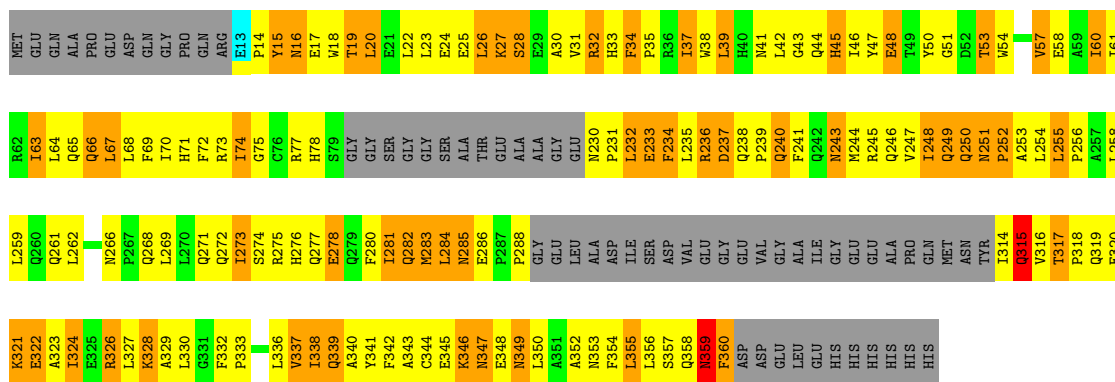
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

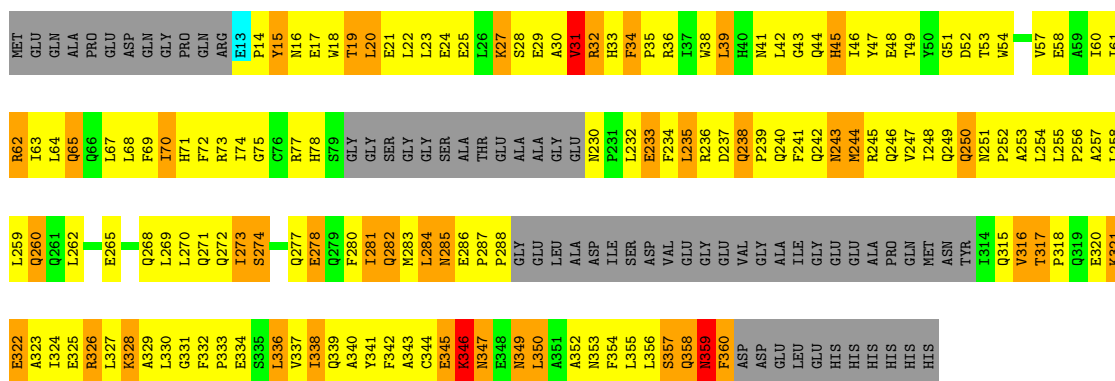
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A





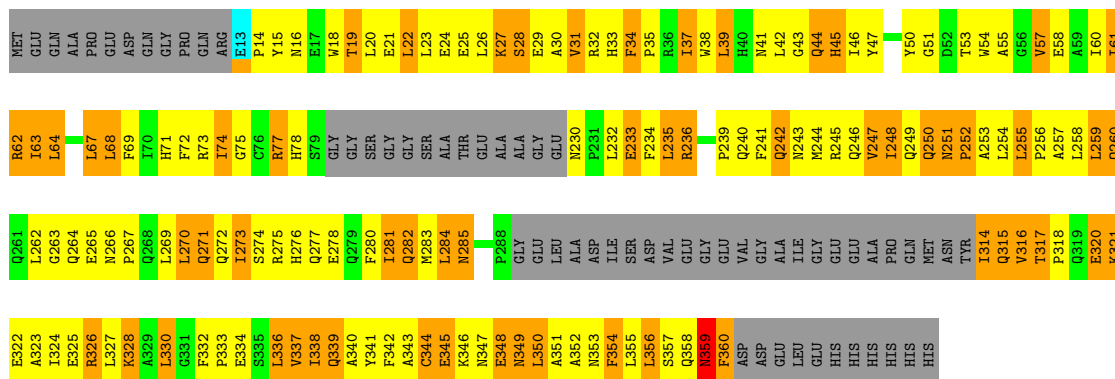
#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

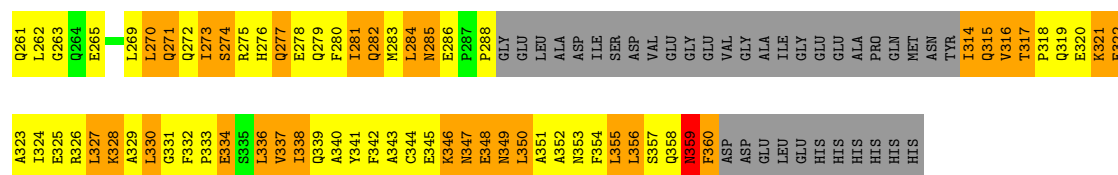


#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

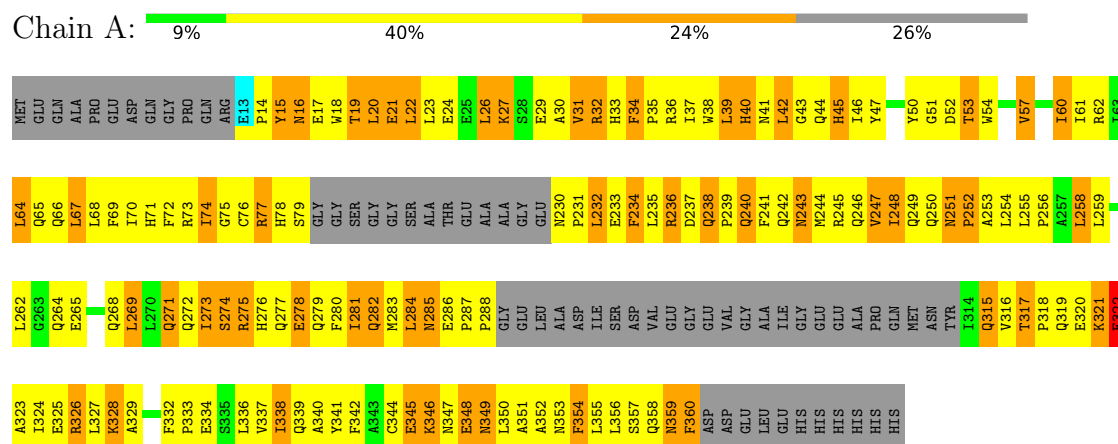






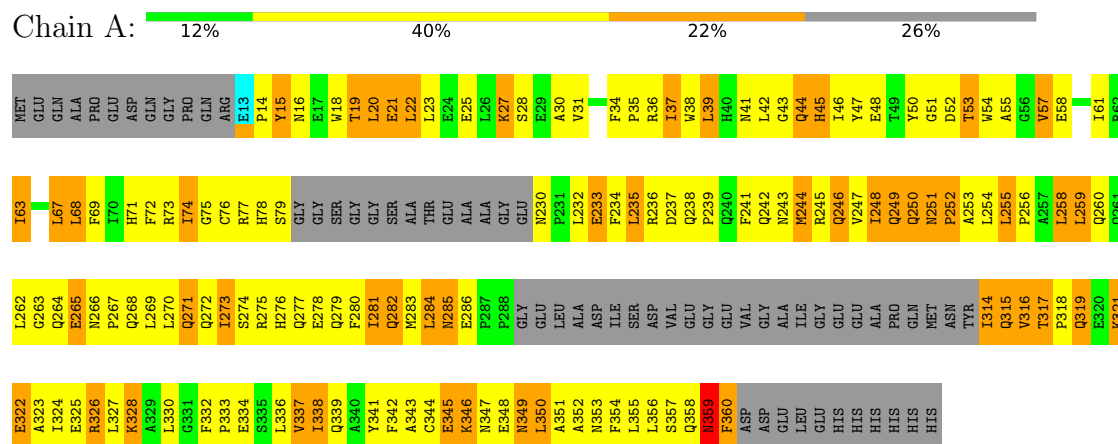
#### 4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.27 Score per residue for model 27

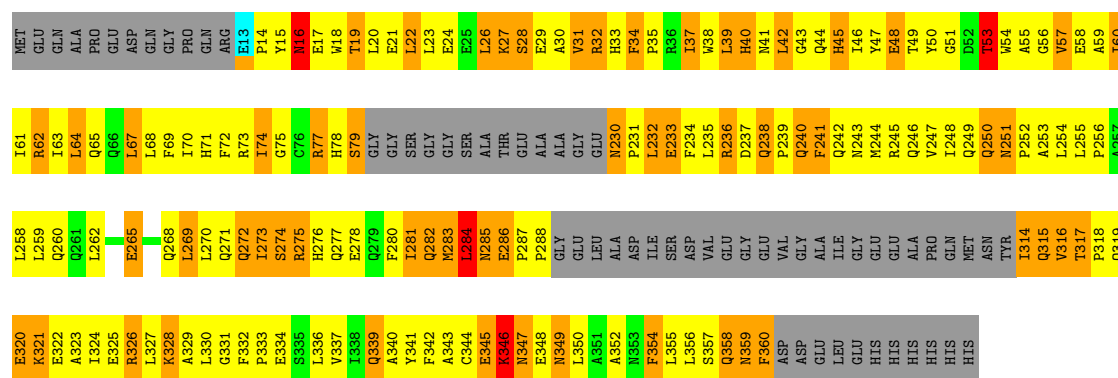
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

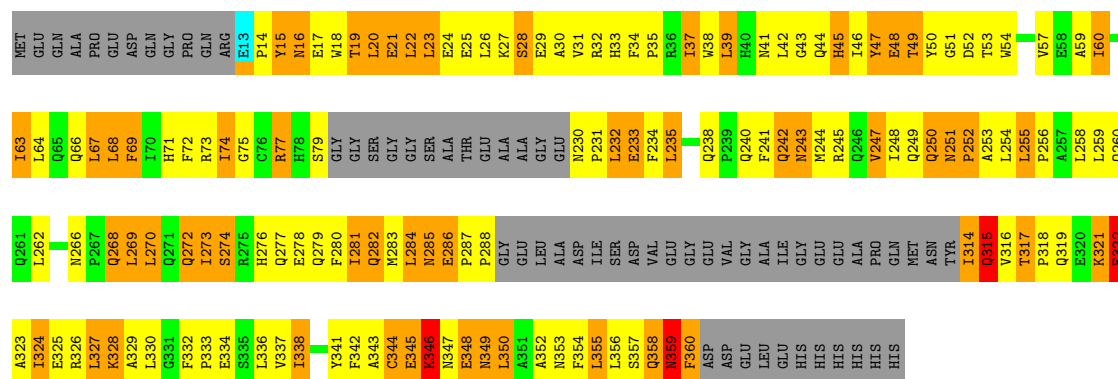




#### 4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

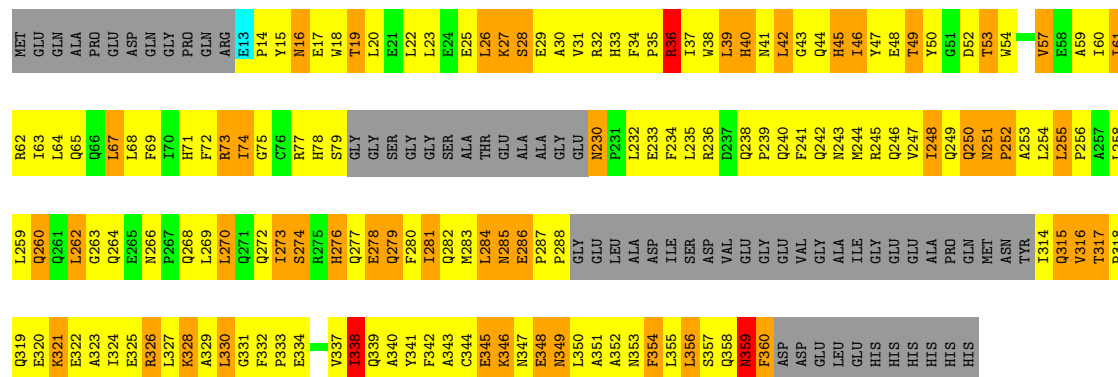
Chain A: 12% 35% 24% 26%



#### 4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

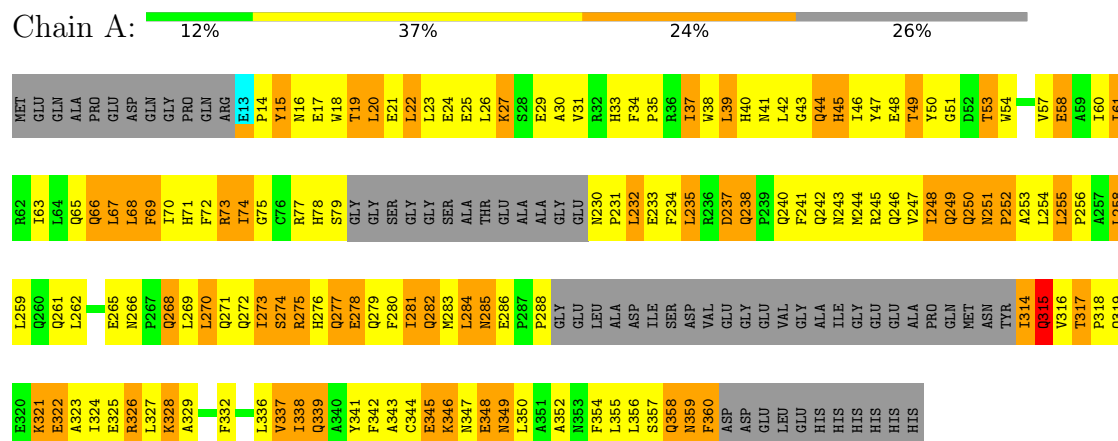
Chain A: 8% 43% 21% 26%





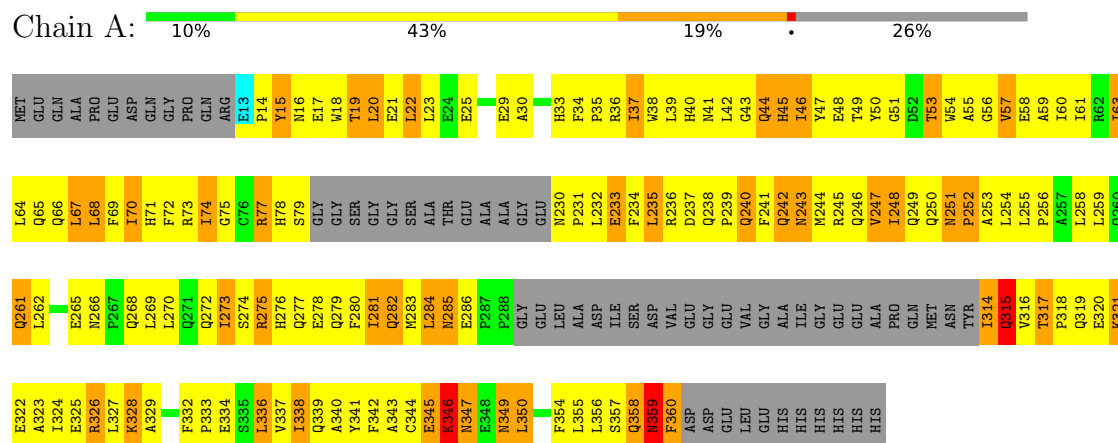
### 4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



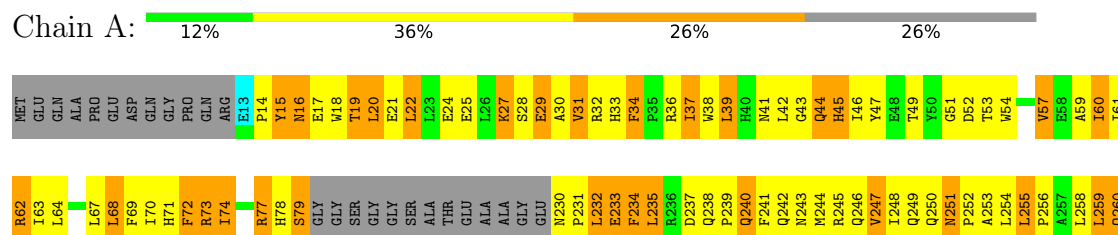
### 4.2.32 Score per residue for model 32

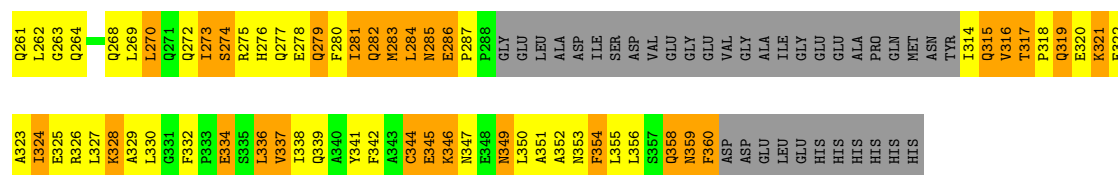
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



### 4.2.33 Score per residue for model 33

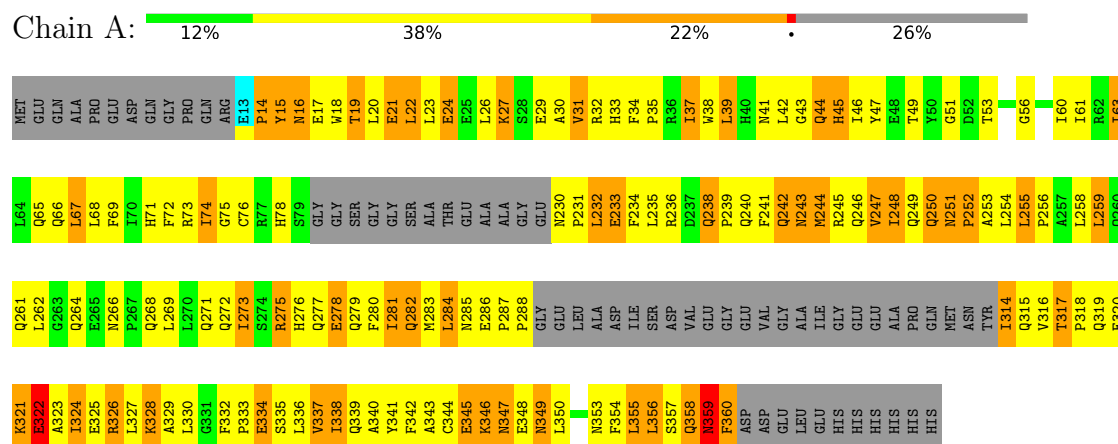
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A





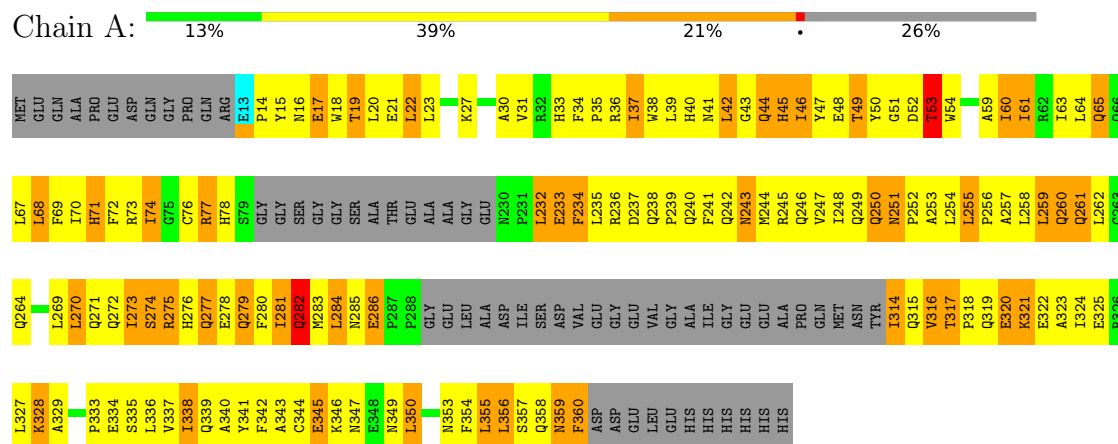
#### 4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.35 Score per residue for model 35

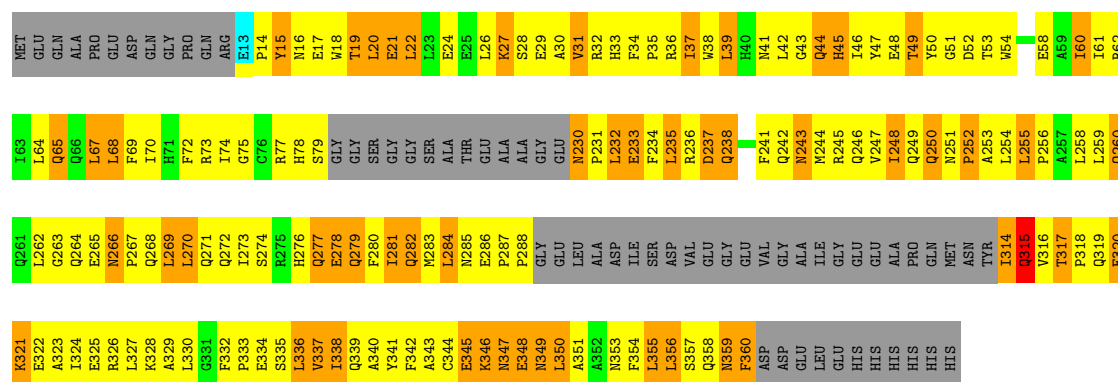
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

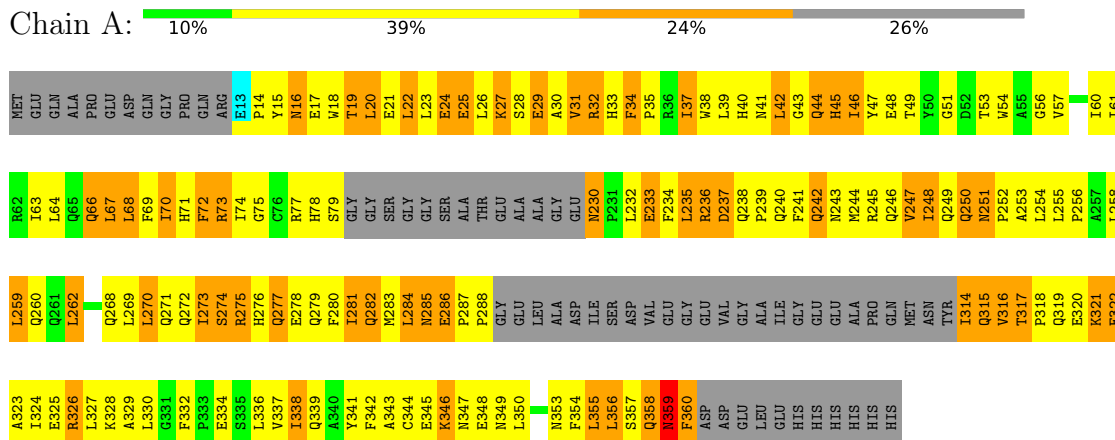




#### 4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

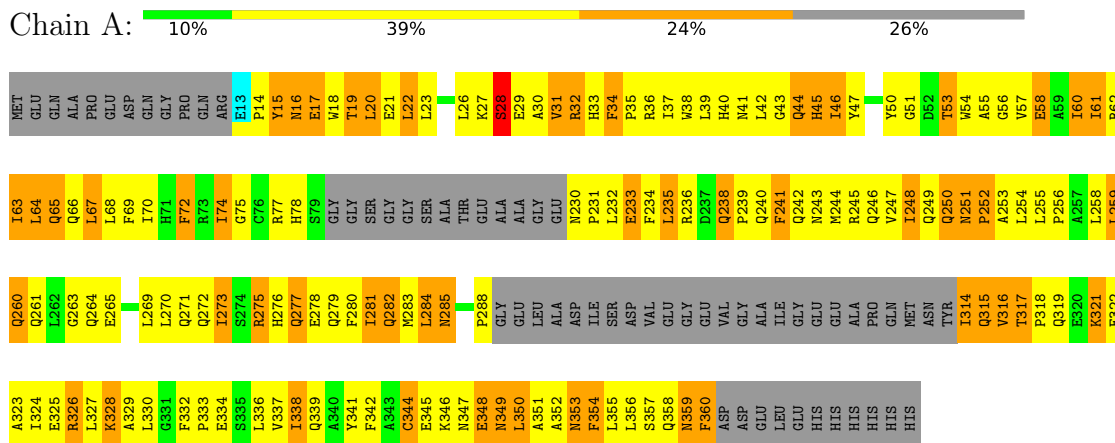
Chain A:



#### 4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

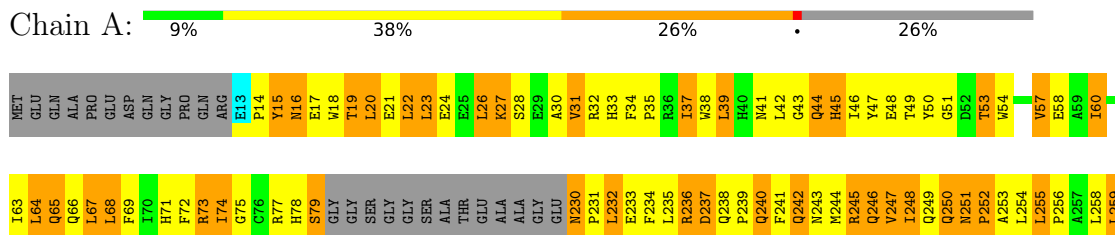
Chain A:

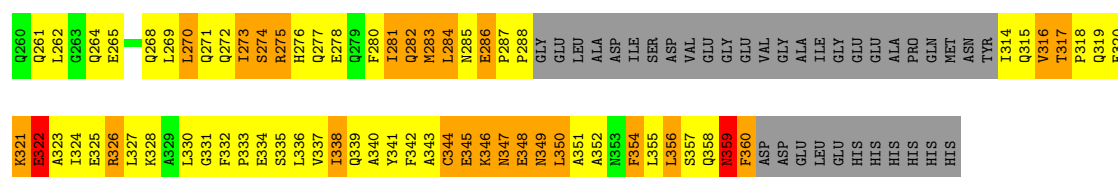


#### 4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

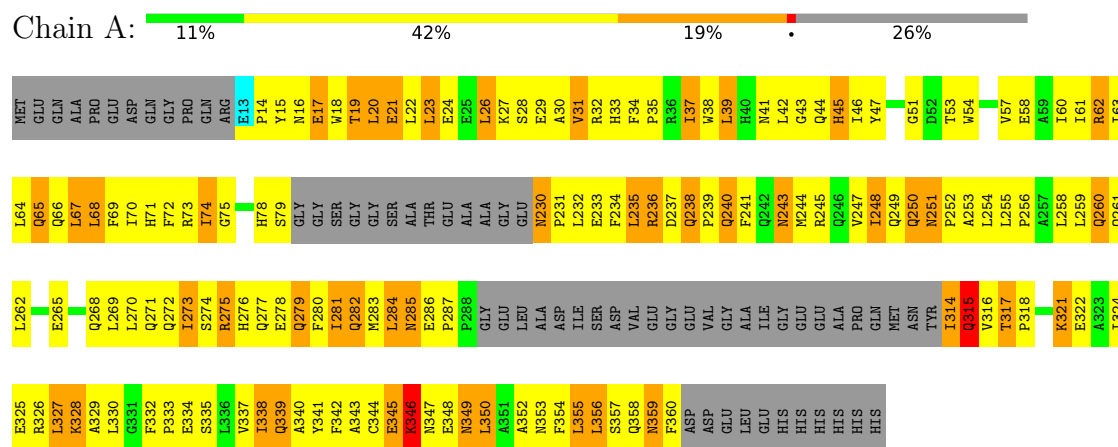
Chain A:





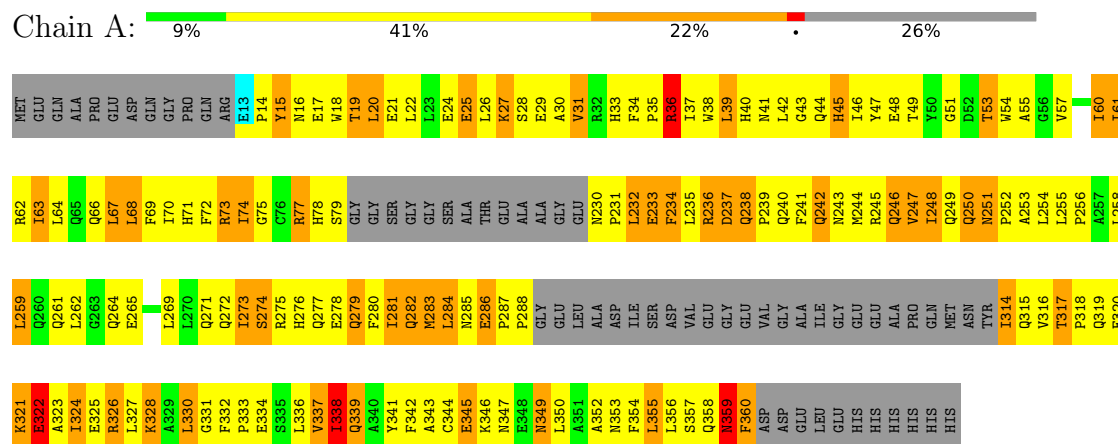
#### 4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.43 Score per residue for model 43 (medoid)

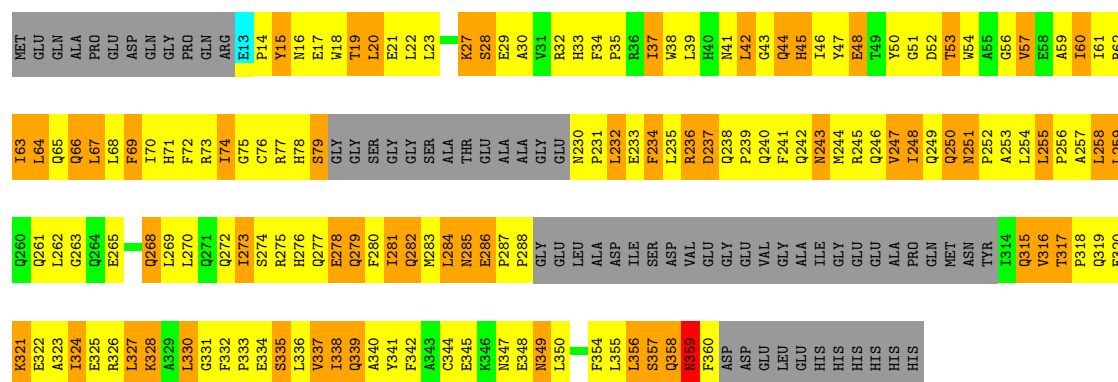
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

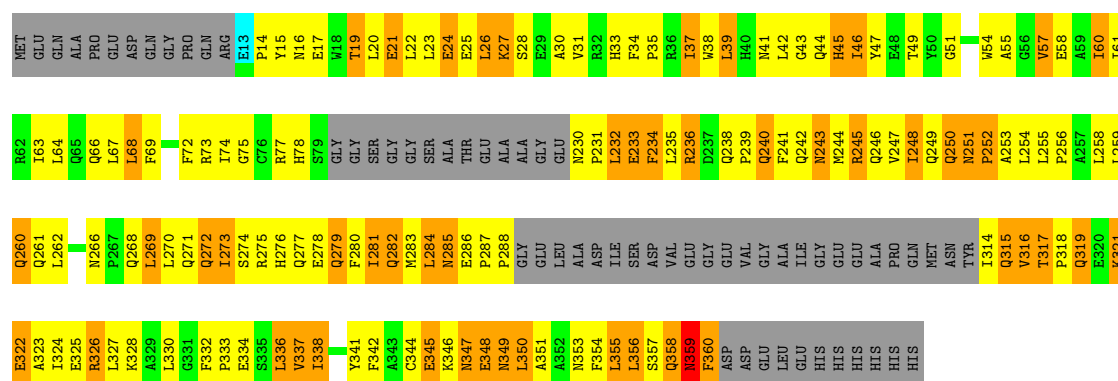




#### 4.2.45 Score per residue for model 45

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

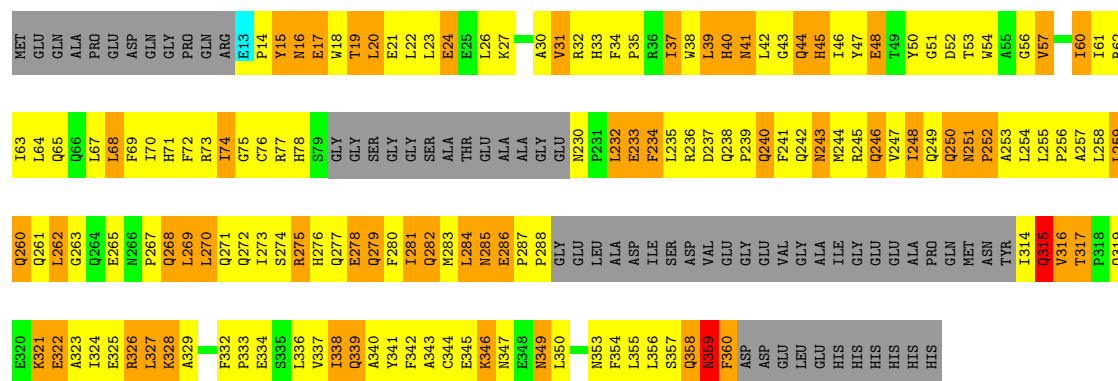
Chain A: 13% 38% 22% 26%



#### 4.2.46 Score per residue for model 46

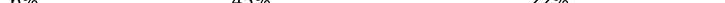
- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

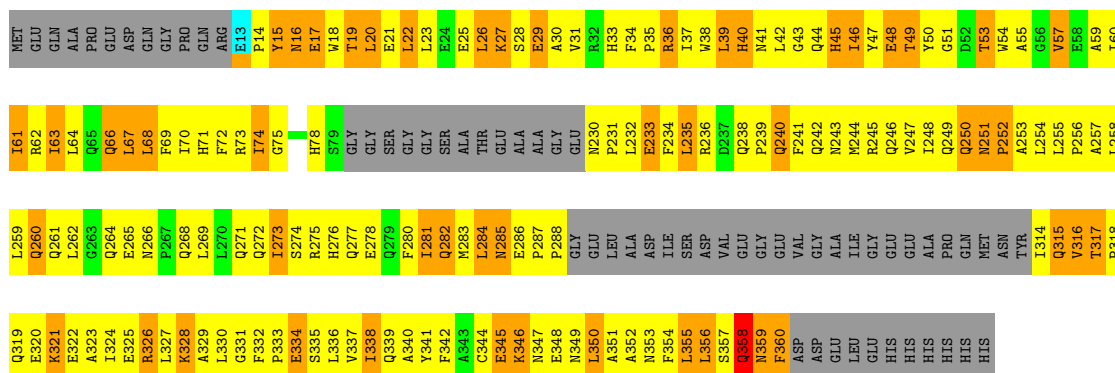
Chain A: 9% 40% 24% 26%



#### 4.2.47 Score per residue for model 47

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

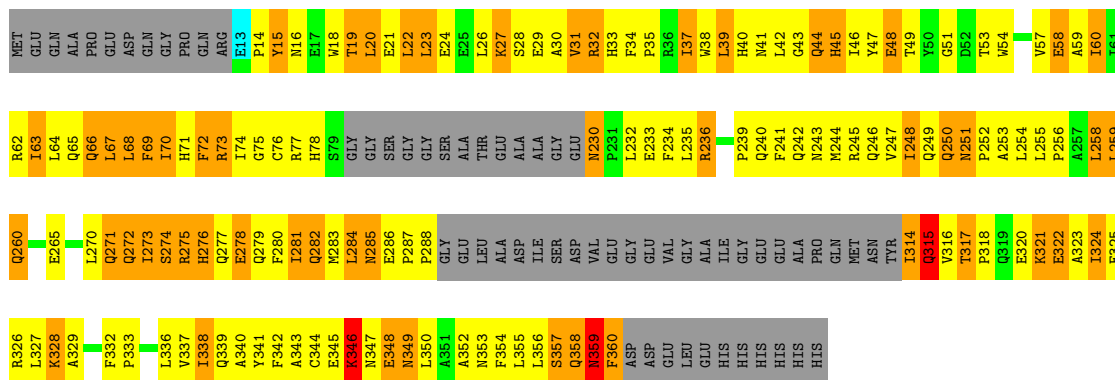
Chain A:  6% 45% 22% 26%



#### 4.2.48 Score per residue for model 48

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A

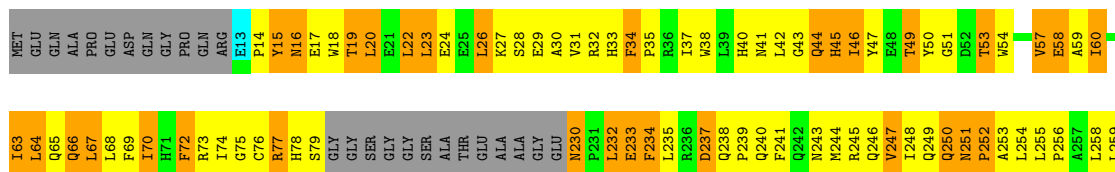
Chain A:  12% 38% 23% . 26%



#### 4.2.49 Score per residue for model 49

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

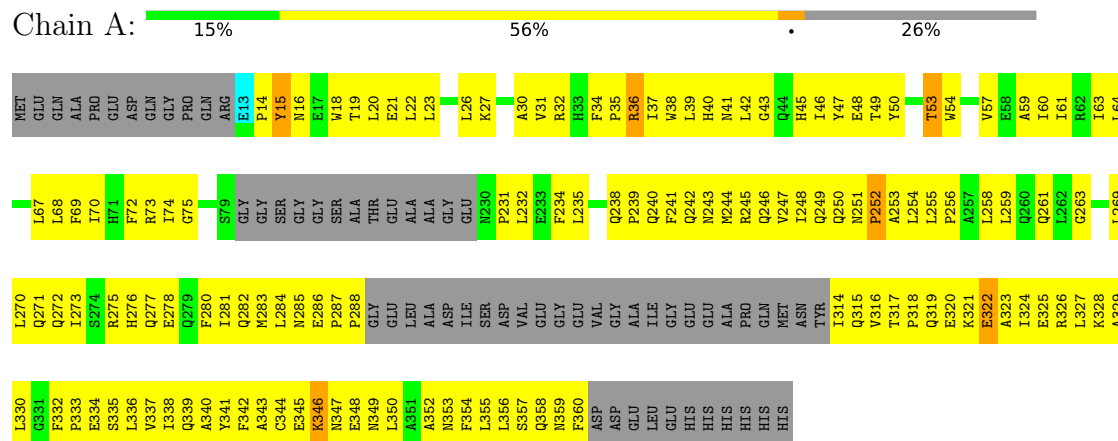
Chain A:  12% 36% 24% . 26%





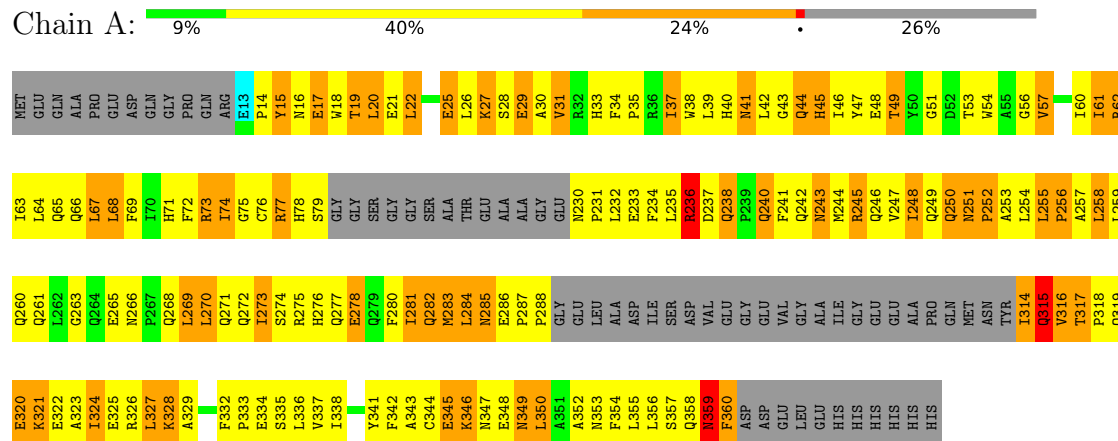
#### 4.2.50 Score per residue for model 50

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.51 Score per residue for model 51

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



#### 4.2.52 Score per residue for model 52

- Molecule 1: Protein Vpr,UV excision repair protein RAD23 homolog A



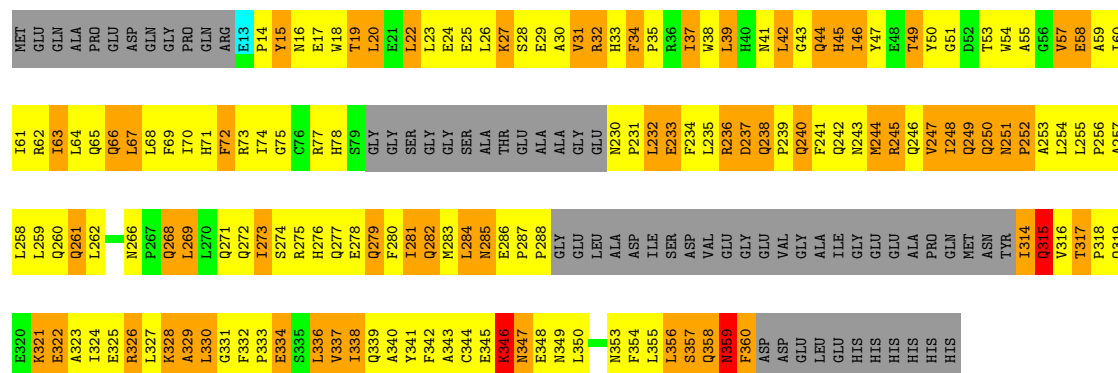




#### 4.2.55 Score per residue for model 55

- Molecule 1: Protein Vpr, UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A:  7% 39% 26% . 26%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 960 calculated structures, 55 were deposited, based on the following criterion: *lowest energy structures*.

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

| Software name | Classification        | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| X-PLOR NIH    | structure calculation | 2.48    |

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

|                                              |                |
|----------------------------------------------|----------------|
| Chemical shift file(s)                       | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists               | 1              |
| Total number of shifts                       | 2569           |
| Number of shifts mapped to atoms             | 2067           |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 502            |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 82%            |

## 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     | 0.60±0.00    | 0±0/1465 ( 0.0± 0.0%) | 1.12±0.01   | 0±0/1985 ( 0.0± 0.0%) |
| All | All   | 0.60         | 0/80575 ( 0.0%)       | 1.12        | 4/109175 ( 0.0%)      |

There are no bond-length outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms    | Z     | Observed(°) | Ideal(°) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|----------|-------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |          |       |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 360 | PHE  | CA-CB-CG | -5.12 | 108.67      | 113.80   | 49     | 1     |
| 1   | A     | 241 | PHE  | CA-CB-CG | -5.12 | 108.68      | 113.80   | 40     | 2     |
| 1   | A     | 342 | PHE  | CA-CB-CG | -5.10 | 108.70      | 113.80   | 24     | 1     |

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts [i](#)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1   | A     | 1431  | 1409     | 1410     | 323±24  |
| All | All   | 78760 | 77495    | 77550    | 17789   |

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 114.

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

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:HD22  | 1.12     | 1.18        | 54     | 14    |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:342:PHE:CZ   | 1.09     | 1.81        | 52     | 38    |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:HD21  | 1.07     | 1.15        | 55     | 10    |
| 1:A:258:LEU:HD13 | 1:A:259:LEU:N    | 1.07     | 1.63        | 26     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:HD13 | 1.07     | 1.19        | 51     | 10    |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:HD23 | 1.07     | 1.14        | 30     | 11    |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:68:LEU:HD21  | 1.07     | 1.24        | 20     | 6     |
| 1:A:232:LEU:HD22 | 1:A:276:HIS:CD2  | 1.06     | 1.84        | 41     | 10    |
| 1:A:255:LEU:HD11 | 1:A:259:LEU:HD12 | 1.05     | 1.25        | 5      | 18    |
| 1:A:254:LEU:HD13 | 1:A:255:LEU:N    | 1.05     | 1.66        | 54     | 1     |
| 1:A:262:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HD23 | 1.05     | 1.10        | 23     | 29    |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:HD22  | 1.04     | 1.86        | 43     | 22    |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CD1  | 1.04     | 1.87        | 39     | 12    |
| 1:A:232:LEU:HD22 | 1:A:276:HIS:ND1  | 1.03     | 1.66        | 51     | 5     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:HE3  | 1.03     | 1.89        | 51     | 9     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:HG22 | 1.02     | 1.55        | 9      | 12    |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:68:LEU:HD11  | 1.02     | 1.29        | 53     | 15    |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:HD11 | 1.02     | 1.89        | 16     | 13    |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:68:LEU:HD12  | 1.02     | 1.90        | 30     | 6     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HD21 | 1.02     | 1.29        | 23     | 7     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:283:MET:HE2  | 1.00     | 1.89        | 40     | 13    |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:337:VAL:HG11 | 1.00     | 1.56        | 16     | 29    |
| 1:A:31:VAL:CG2   | 1:A:39:LEU:HD21  | 1.00     | 1.87        | 55     | 12    |
| 1:A:316:VAL:HG11 | 1:A:324:ILE:HD11 | 0.99     | 1.32        | 52     | 8     |
| 1:A:254:LEU:HD22 | 1:A:254:LEU:O    | 0.99     | 1.56        | 54     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.99     | 1.04        | 10     | 9     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.98     | 1.88        | 41     | 9     |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:20:LEU:HD22  | 0.98     | 1.56        | 42     | 6     |
| 1:A:284:LEU:O    | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.98     | 1.58        | 2      | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.98     | 1.89        | 54     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:283:MET:HE3  | 0.98     | 1.92        | 41     | 7     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.98     | 1.94        | 19     | 23    |
| 1:A:333:PRO:O    | 1:A:337:VAL:HG23 | 0.98     | 1.59        | 15     | 25    |
| 1:A:63:ILE:HG23  | 1:A:343:ALA:O    | 0.98     | 1.58        | 41     | 16    |
| 1:A:316:VAL:HG21 | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.98     | 1.29        | 6      | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.97     | 1.94        | 41     | 22    |
| 1:A:37:ILE:HD11  | 1:A:357:SER:OG   | 0.97     | 1.58        | 10     | 3     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HG22 | 0.97     | 1.59        | 55     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HD13  | 0.97     | 1.94        | 24     | 10    |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:HG13 | 0.97     | 1.59        | 55     | 13    |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.97     | 1.35        | 40     | 7     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:HD11 | 0.97     | 1.95        | 1      | 9     |
| 1:A:328:LYS:N    | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.97     | 1.74        | 12     | 15    |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.97     | 1.94        | 17     | 12    |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:258:LEU:HD22 | 0.97     | 1.58        | 26     | 1     |
| 1:A:356:LEU:HD13 | 1:A:357:SER:N    | 0.97     | 1.73        | 47     | 1     |
| 1:A:22:LEU:HD23  | 1:A:23:LEU:N     | 0.96     | 1.76        | 1      | 5     |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.96     | 1.96        | 2      | 5     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HD12 | 0.96     | 1.61        | 47     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:283:MET:HE3  | 0.96     | 1.95        | 23     | 3     |
| 1:A:255:LEU:HD11 | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.96     | 1.90        | 49     | 11    |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:HD21 | 0.96     | 1.96        | 50     | 19    |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.95     | 1.91        | 6      | 7     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HD22  | 0.95     | 1.97        | 32     | 20    |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:HE2  | 0.95     | 1.96        | 31     | 20    |
| 1:A:269:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.95     | 1.36        | 9      | 6     |
| 1:A:67:LEU:HD22  | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.95     | 1.97        | 35     | 2     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HD22 | 0.95     | 1.62        | 30     | 3     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.95     | 1.76        | 39     | 24    |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:HG22 | 0.95     | 1.62        | 27     | 11    |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:327:LEU:HD23 | 0.95     | 1.61        | 48     | 6     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:HD22  | 0.94     | 1.97        | 28     | 8     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:232:LEU:HD23 | 0.94     | 1.61        | 46     | 6     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.94     | 1.91        | 26     | 7     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:351:ALA:HB2  | 0.93     | 2.04        | 40     | 11    |
| 1:A:31:VAL:CG2   | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.93     | 1.94        | 54     | 5     |
| 1:A:262:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HD22 | 0.92     | 1.39        | 7      | 3     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:HG13 | 0.92     | 1.64        | 20     | 5     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:283:MET:HE2  | 0.92     | 2.00        | 27     | 9     |
| 1:A:232:LEU:HD13 | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.91     | 2.01        | 41     | 13    |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.91     | 1.95        | 10     | 4     |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:356:LEU:HD22 | 0.91     | 1.64        | 47     | 1     |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.91     | 2.01        | 15     | 14    |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.90     | 1.42        | 54     | 9     |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:HD13 | 0.90     | 2.01        | 45     | 1     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:71:HIS:C     | 0.90     | 1.75        | 35     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:CD1  | 0.89     | 2.02        | 2      | 1     |
| 1:A:73:ARG:N     | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.89     | 1.82        | 3      | 12    |
| 1:A:42:LEU:HD13  | 1:A:43:GLY:N     | 0.89     | 1.83        | 55     | 5     |
| 1:A:247:VAL:HG11 | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.89     | 1.42        | 52     | 5     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.89     | 1.97        | 52     | 5     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:26:LEU:HD12  | 0.88     | 1.68        | 26     | 17    |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.88     | 1.97        | 55     | 23    |
| 1:A:328:LYS:CB   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.88     | 1.97        | 41     | 7     |
| 1:A:327:LEU:HD12 | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.88     | 1.41        | 49     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:GLN:CB   | 0.88     | 1.98        | 52     | 1     |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:HD13  | 0.88     | 2.02        | 28     | 20    |
| 1:A:64:LEU:O     | 1:A:68:LEU:HD12  | 0.88     | 1.68        | 32     | 12    |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:232:LEU:O    | 0.88     | 1.68        | 1      | 28    |
| 1:A:332:PHE:CD1  | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.88     | 2.04        | 18     | 4     |
| 1:A:262:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:CD2  | 0.88     | 1.98        | 28     | 17    |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:327:LEU:HD12 | 0.88     | 1.68        | 25     | 21    |
| 1:A:73:ARG:N     | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.88     | 1.83        | 34     | 13    |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.88     | 1.98        | 30     | 11    |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CD2  | 0.88     | 2.04        | 5      | 13    |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:46:ILE:HD12  | 0.87     | 2.04        | 55     | 7     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HD12 | 0.87     | 1.69        | 52     | 6     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:HD11 | 0.87     | 2.04        | 6      | 16    |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:HB2  | 0.87     | 1.46        | 16     | 13    |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:61:ILE:HD13  | 0.87     | 1.69        | 28     | 1     |
| 1:A:330:LEU:C    | 1:A:330:LEU:HD23 | 0.87     | 1.95        | 25     | 3     |
| 1:A:251:ASN:HB3  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.86     | 1.45        | 54     | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD13 | 1:A:254:LEU:C    | 0.86     | 1.94        | 54     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.86     | 1.30        | 19     | 24    |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:354:PHE:CD1  | 0.86     | 2.06        | 21     | 4     |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:GLN:HB2  | 0.86     | 1.45        | 52     | 2     |
| 1:A:74:ILE:HG21  | 1:A:358:GLN:O    | 0.86     | 1.71        | 44     | 6     |
| 1:A:273:ILE:HD11 | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.86     | 2.05        | 9      | 8     |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:68:LEU:CD2   | 0.86     | 2.01        | 20     | 3     |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.86     | 2.05        | 51     | 3     |
| 1:A:314:ILE:CG2  | 1:A:316:VAL:HG22 | 0.86     | 2.00        | 16     | 3     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.86     | 1.47        | 25     | 7     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:CE1   | 0.85     | 2.06        | 18     | 4     |
| 1:A:22:LEU:HD13  | 1:A:22:LEU:O     | 0.85     | 1.72        | 41     | 5     |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.85     | 1.47        | 30     | 9     |
| 1:A:330:LEU:HD21 | 1:A:332:PHE:CG   | 0.85     | 2.06        | 30     | 3     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.85     | 2.02        | 30     | 7     |
| 1:A:72:PHE:C     | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.85     | 1.96        | 11     | 11    |
| 1:A:262:LEU:HD21 | 1:A:269:LEU:HD23 | 0.85     | 1.49        | 37     | 6     |
| 1:A:18:TRP:CE2   | 1:A:22:LEU:HD13  | 0.85     | 2.06        | 7      | 11    |
| 1:A:37:ILE:HD11  | 1:A:357:SER:CB   | 0.85     | 2.01        | 22     | 4     |
| 1:A:356:LEU:HD22 | 1:A:356:LEU:C    | 0.85     | 1.97        | 47     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CZ    | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.85     | 2.07        | 33     | 40    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:255:LEU:HD11 | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.85     | 1.46        | 41     | 2     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.84     | 1.49        | 50     | 13    |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.84     | 1.97        | 23     | 15    |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:HG13  | 0.84     | 1.49        | 16     | 9     |
| 1:A:68:LEU:HD23  | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.84     | 2.01        | 51     | 9     |
| 1:A:37:ILE:HD11  | 1:A:357:SER:HB2  | 0.84     | 1.49        | 28     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:42:LEU:HD23  | 0.84     | 2.07        | 27     | 2     |
| 1:A:255:LEU:HD12 | 1:A:255:LEU:O    | 0.84     | 1.72        | 53     | 14    |
| 1:A:317:THR:HG22 | 1:A:318:PRO:HD3  | 0.84     | 1.50        | 17     | 3     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.84     | 2.07        | 55     | 1     |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.84     | 1.97        | 10     | 13    |
| 1:A:232:LEU:HD22 | 1:A:276:HIS:CG   | 0.84     | 2.08        | 46     | 10    |
| 1:A:42:LEU:C     | 1:A:42:LEU:HD13  | 0.84     | 1.98        | 29     | 5     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:HD12  | 0.84     | 1.73        | 44     | 10    |
| 1:A:232:LEU:HD22 | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.84     | 2.08        | 49     | 11    |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.83     | 2.08        | 32     | 20    |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.83     | 2.03        | 10     | 6     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:HD11 | 0.83     | 1.47        | 35     | 6     |
| 1:A:255:LEU:HD23 | 1:A:255:LEU:O    | 0.83     | 1.73        | 48     | 4     |
| 1:A:277:GLN:OE1  | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.83     | 1.72        | 28     | 8     |
| 1:A:314:ILE:HD11 | 1:A:316:VAL:O    | 0.83     | 1.74        | 50     | 3     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:336:LEU:HD23 | 0.83     | 1.73        | 3      | 9     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:350:LEU:HD22 | 0.83     | 1.88        | 9      | 8     |
| 1:A:281:ILE:HD13 | 1:A:281:ILE:N    | 0.83     | 1.89        | 33     | 45    |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.83     | 2.08        | 8      | 8     |
| 1:A:74:ILE:HG21  | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.83     | 1.89        | 39     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CG   | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.83     | 2.07        | 50     | 3     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.82     | 1.74        | 53     | 5     |
| 1:A:273:ILE:HD11 | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.82     | 2.10        | 4      | 5     |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:42:LEU:HD13  | 0.82     | 1.73        | 27     | 2     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.82     | 1.75        | 52     | 1     |
| 1:A:258:LEU:HD22 | 1:A:258:LEU:C    | 0.82     | 1.98        | 26     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HD23 | 1:A:331:GLY:N    | 0.82     | 1.89        | 44     | 3     |
| 1:A:328:LYS:HG2  | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.81     | 1.49        | 24     | 4     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.81     | 2.11        | 41     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HD21 | 1:A:348:GLU:O    | 0.81     | 1.75        | 28     | 1     |
| 1:A:259:LEU:CD1  | 1:A:270:LEU:HD21 | 0.81     | 2.05        | 41     | 2     |
| 1:A:251:ASN:CG   | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.81     | 2.01        | 49     | 9     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.81     | 1.99        | 10     | 6     |
| 1:A:336:LEU:CD2  | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.81     | 2.06        | 10     | 2     |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:60:ILE:HG22  | 0.81     | 1.75        | 53     | 15    |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:42:LEU:HD13  | 1:A:42:LEU:C     | 0.81     | 1.99        | 55     | 3     |
| 1:A:254:LEU:C    | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.81     | 2.00        | 37     | 3     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.81     | 2.05        | 38     | 3     |
| 1:A:330:LEU:HD21 | 1:A:332:PHE:CD2  | 0.81     | 2.10        | 44     | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD12  | 1:A:42:LEU:O     | 0.81     | 1.75        | 44     | 11    |
| 1:A:247:VAL:HG12 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.81     | 1.51        | 34     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD22 | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.81     | 1.89        | 27     | 10    |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:67:LEU:HD22  | 0.81     | 2.09        | 28     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.81     | 1.53        | 13     | 4     |
| 1:A:60:ILE:HD12  | 1:A:60:ILE:O     | 0.81     | 1.76        | 23     | 2     |
| 1:A:77:ARG:CZ    | 1:A:78:HIS:HE2   | 0.81     | 1.87        | 31     | 1     |
| 1:A:74:ILE:HD13  | 1:A:74:ILE:N     | 0.80     | 1.91        | 31     | 28    |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:20:LEU:HD12  | 0.80     | 1.76        | 14     | 15    |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.80     | 2.16        | 51     | 6     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:HG13  | 0.80     | 1.54        | 25     | 6     |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.80     | 2.11        | 51     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD22 | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.80     | 1.50        | 16     | 3     |
| 1:A:74:ILE:HD11  | 1:A:336:LEU:HD11 | 0.80     | 1.53        | 54     | 17    |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CG   | 0.80     | 2.12        | 38     | 11    |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:HD21 | 0.80     | 2.12        | 29     | 5     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.80     | 1.53        | 14     | 11    |
| 1:A:314:ILE:HG23 | 1:A:316:VAL:HG22 | 0.80     | 1.51        | 16     | 8     |
| 1:A:68:LEU:HD13  | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.80     | 1.77        | 41     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HZ    | 1:A:259:LEU:HD21 | 0.79     | 1.36        | 20     | 13    |
| 1:A:340:ALA:HB2  | 1:A:355:LEU:HD13 | 0.79     | 1.54        | 37     | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:HG12  | 0.79     | 1.54        | 52     | 4     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.79     | 1.54        | 23     | 12    |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:CB   | 0.79     | 2.06        | 16     | 12    |
| 1:A:327:LEU:N    | 1:A:327:LEU:HD22 | 0.79     | 1.93        | 20     | 10    |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:HD12  | 0.79     | 2.13        | 30     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HG22 | 1:A:315:GLN:N    | 0.79     | 1.93        | 16     | 18    |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.79     | 2.12        | 43     | 4     |
| 1:A:263:GLY:CA   | 1:A:270:LEU:HD13 | 0.79     | 2.07        | 33     | 6     |
| 1:A:73:ARG:CA    | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.78     | 2.08        | 8      | 7     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.78     | 1.54        | 25     | 3     |
| 1:A:328:LYS:CG   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.78     | 2.08        | 53     | 6     |
| 1:A:240:GLN:NE2  | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.78     | 1.93        | 5      | 1     |
| 1:A:27:LYS:HD2   | 1:A:31:VAL:HG21  | 0.78     | 1.55        | 22     | 1     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:57:VAL:HG12  | 0.78     | 1.78        | 33     | 9     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.78     | 2.14        | 18     | 11    |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.78     | 2.08        | 4      | 6     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:249:GLN:CD   | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.78     | 2.04        | 3      | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD11 | 1:A:259:LEU:CG   | 0.78     | 2.09        | 51     | 5     |
| 1:A:321:LYS:HA   | 1:A:324:ILE:HD13 | 0.78     | 1.56        | 39     | 3     |
| 1:A:244:MET:HB2  | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.78     | 1.56        | 51     | 7     |
| 1:A:70:ILE:HG21  | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.78     | 2.14        | 48     | 3     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HD23  | 0.78     | 2.14        | 27     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.78     | 1.56        | 10     | 7     |
| 1:A:244:MET:HE1  | 1:A:262:LEU:HD22 | 0.77     | 1.53        | 17     | 10    |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:CD2  | 0.77     | 2.07        | 23     | 9     |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:CG   | 0.77     | 2.09        | 32     | 14    |
| 1:A:49:THR:HG21  | 1:A:345:GLU:OE1  | 0.77     | 1.77        | 38     | 4     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.77     | 2.14        | 18     | 8     |
| 1:A:254:LEU:N    | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.77     | 1.95        | 52     | 10    |
| 1:A:280:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.77     | 2.14        | 4      | 11    |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:HD23 | 0.77     | 1.54        | 12     | 3     |
| 1:A:34:PHE:HB3   | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.77     | 1.56        | 12     | 3     |
| 1:A:323:ALA:HB1  | 1:A:348:GLU:OE2  | 0.77     | 1.79        | 55     | 3     |
| 1:A:49:THR:HG21  | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.77     | 1.80        | 43     | 4     |
| 1:A:263:GLY:HA3  | 1:A:270:LEU:HD23 | 0.77     | 1.54        | 25     | 2     |
| 1:A:270:LEU:HD13 | 1:A:270:LEU:O    | 0.77     | 1.80        | 35     | 3     |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:HG    | 0.77     | 1.57        | 41     | 2     |
| 1:A:255:LEU:HD12 | 1:A:255:LEU:C    | 0.77     | 2.04        | 34     | 14    |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:HD22 | 0.77     | 2.15        | 51     | 5     |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:61:ILE:HD12  | 0.77     | 1.80        | 47     | 5     |
| 1:A:41:ASN:C     | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.77     | 2.05        | 16     | 20    |
| 1:A:68:LEU:HD13  | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.77     | 1.80        | 14     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CZ    | 1:A:281:ILE:HG23 | 0.76     | 2.15        | 46     | 53    |
| 1:A:42:LEU:N     | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.76     | 1.94        | 52     | 16    |
| 1:A:255:LEU:HD23 | 1:A:255:LEU:C    | 0.76     | 2.03        | 48     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:327:LEU:N    | 0.76     | 1.95        | 37     | 5     |
| 1:A:74:ILE:HG21  | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.76     | 1.41        | 39     | 2     |
| 1:A:69:PHE:HZ    | 1:A:259:LEU:HD11 | 0.76     | 1.41        | 8      | 3     |
| 1:A:317:THR:HG22 | 1:A:318:PRO:CD   | 0.76     | 2.09        | 17     | 5     |
| 1:A:258:LEU:HD13 | 1:A:258:LEU:C    | 0.76     | 2.05        | 26     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG22 | 1:A:314:ILE:O    | 0.76     | 1.78        | 45     | 13    |
| 1:A:248:ILE:HD12 | 1:A:255:LEU:HG   | 0.76     | 1.57        | 55     | 1     |
| 1:A:68:LEU:HD23  | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.76     | 1.56        | 51     | 8     |
| 1:A:316:VAL:HG23 | 1:A:317:THR:N    | 0.76     | 1.95        | 28     | 6     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.76     | 1.95        | 17     | 10    |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:336:LEU:HD12 | 0.75     | 1.80        | 12     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:HG13 | 0.75     | 1.56        | 46     | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:247:VAL:HG12 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.75     | 1.56        | 54     | 1     |
| 1:A:72:PHE:C     | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.75     | 2.05        | 51     | 12    |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.75     | 1.82        | 31     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:26:LEU:O     | 0.75     | 1.82        | 40     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:HD13 | 0.75     | 2.17        | 5      | 6     |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.75     | 2.16        | 19     | 12    |
| 1:A:244:MET:HB2  | 1:A:258:LEU:HD13 | 0.75     | 1.58        | 1      | 10    |
| 1:A:244:MET:HB3  | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.75     | 1.56        | 29     | 4     |
| 1:A:273:ILE:HG22 | 1:A:274:SER:N    | 0.75     | 1.96        | 55     | 25    |
| 1:A:254:LEU:HD22 | 1:A:254:LEU:C    | 0.75     | 2.06        | 54     | 1     |
| 1:A:254:LEU:O    | 1:A:258:LEU:HD23 | 0.75     | 1.82        | 34     | 9     |
| 1:A:23:LEU:HB2   | 1:A:61:ILE:HD11  | 0.75     | 1.58        | 50     | 3     |
| 1:A:330:LEU:HD21 | 1:A:332:PHE:CD1  | 0.75     | 2.17        | 25     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG22 | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.75     | 2.17        | 45     | 11    |
| 1:A:69:PHE:HZ    | 1:A:259:LEU:HD22 | 0.75     | 1.41        | 51     | 3     |
| 1:A:259:LEU:HD23 | 1:A:270:LEU:HD11 | 0.75     | 1.57        | 44     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.74     | 2.16        | 54     | 8     |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:235:LEU:HB2  | 0.74     | 1.59        | 24     | 12    |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:273:ILE:HG21 | 0.74     | 2.17        | 15     | 4     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.74     | 2.21        | 53     | 2     |
| 1:A:41:ASN:CB    | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.74     | 2.12        | 27     | 3     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HD22 | 0.74     | 1.58        | 22     | 6     |
| 1:A:244:MET:CB   | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.74     | 2.13        | 51     | 10    |
| 1:A:254:LEU:N    | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.74     | 1.96        | 15     | 2     |
| 1:A:235:LEU:CD1  | 1:A:269:LEU:HD11 | 0.74     | 2.12        | 21     | 8     |
| 1:A:26:LEU:C     | 1:A:26:LEU:HD12  | 0.74     | 2.07        | 53     | 3     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.74     | 1.83        | 37     | 1     |
| 1:A:240:GLN:CD   | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.74     | 2.08        | 5      | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.74     | 2.18        | 49     | 6     |
| 1:A:332:PHE:CD1  | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.74     | 2.18        | 5      | 2     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:358:GLN:HG3  | 0.74     | 1.43        | 22     | 7     |
| 1:A:356:LEU:HD23 | 1:A:356:LEU:O    | 0.74     | 1.83        | 29     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.73     | 2.16        | 43     | 5     |
| 1:A:263:GLY:HA3  | 1:A:270:LEU:HD13 | 0.73     | 1.57        | 33     | 14    |
| 1:A:73:ARG:CA    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.73     | 2.13        | 39     | 10    |
| 1:A:344:CYS:HB3  | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.73     | 1.59        | 43     | 3     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HD12 | 0.73     | 1.83        | 10     | 6     |
| 1:A:71:HIS:C     | 1:A:71:HIS:ND1   | 0.73     | 2.36        | 35     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD23 | 1:A:256:PRO:N    | 0.73     | 1.99        | 12     | 11    |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:HD13  | 0.73     | 2.18        | 16     | 12    |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.73     | 2.17        | 42     | 3     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:18:TRP:NE1   | 1:A:22:LEU:HD13  | 0.73     | 1.98        | 7      | 9     |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.73     | 1.60        | 4      | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:61:ILE:CD1   | 0.73     | 2.13        | 51     | 1     |
| 1:A:45:HIS:HD1   | 1:A:350:LEU:HD22 | 0.73     | 1.44        | 9      | 2     |
| 1:A:42:LEU:HG    | 1:A:60:ILE:HD11  | 0.73     | 1.57        | 33     | 2     |
| 1:A:255:LEU:HD13 | 1:A:256:PRO:N    | 0.73     | 1.98        | 23     | 8     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.73     | 1.59        | 8      | 5     |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.73     | 1.82        | 5      | 1     |
| 1:A:72:PHE:HZ    | 1:A:281:ILE:HG23 | 0.72     | 1.44        | 43     | 45    |
| 1:A:269:LEU:CD2  | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.72     | 2.14        | 9      | 8     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:42:LEU:HD13  | 0.72     | 2.19        | 1      | 7     |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.72     | 2.37        | 54     | 5     |
| 1:A:279:GLN:C    | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.72     | 2.47        | 31     | 2     |
| 1:A:241:PHE:HA   | 1:A:244:MET:HE3  | 0.72     | 1.61        | 39     | 4     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:241:PHE:N    | 0.72     | 2.22        | 53     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.72     | 1.61        | 48     | 25    |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.72     | 2.13        | 6      | 2     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:338:ILE:HA   | 0.72     | 1.60        | 6      | 1     |
| 1:A:251:ASN:HD21 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.72     | 1.44        | 14     | 13    |
| 1:A:273:ILE:HD12 | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.72     | 2.20        | 36     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD22  | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.72     | 1.61        | 42     | 8     |
| 1:A:73:ARG:CA    | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.72     | 2.14        | 44     | 12    |
| 1:A:330:LEU:HD13 | 1:A:356:LEU:HD12 | 0.72     | 1.59        | 37     | 2     |
| 1:A:269:LEU:HG   | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.72     | 1.60        | 19     | 11    |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:CG   | 0.72     | 2.20        | 2      | 7     |
| 1:A:238:GLN:CD   | 1:A:238:GLN:C    | 0.72     | 2.58        | 51     | 2     |
| 1:A:344:CYS:HB2  | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.72     | 1.60        | 1      | 7     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:350:LEU:HD22 | 0.72     | 2.19        | 9      | 1     |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.71     | 2.43        | 38     | 51    |
| 1:A:336:LEU:HD23 | 1:A:336:LEU:C    | 0.71     | 2.10        | 3      | 7     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:70:ILE:HD12  | 0.71     | 1.62        | 35     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:HB2  | 0.71     | 1.62        | 28     | 1     |
| 1:A:327:LEU:N    | 1:A:327:LEU:HD12 | 0.71     | 2.00        | 21     | 11    |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.71     | 2.20        | 5      | 4     |
| 1:A:64:LEU:HD13  | 1:A:64:LEU:C     | 0.71     | 2.11        | 36     | 1     |
| 1:A:356:LEU:HD13 | 1:A:356:LEU:C    | 0.71     | 2.09        | 47     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:SD   | 0.71     | 2.84        | 47     | 19    |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:283:MET:SD   | 0.71     | 2.83        | 53     | 6     |
| 1:A:332:PHE:HB3  | 1:A:336:LEU:HD23 | 0.71     | 1.60        | 38     | 4     |
| 1:A:73:ARG:CA    | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.71     | 2.16        | 43     | 9     |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:HG3  | 0.71     | 1.62        | 32     | 13    |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:269:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.71     | 2.15        | 9      | 13    |
| 1:A:263:GLY:CA   | 1:A:270:LEU:HD23 | 0.71     | 2.15        | 15     | 4     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HD11 | 0.71     | 1.60        | 10     | 5     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:273:ILE:HG21 | 0.71     | 2.20        | 11     | 23    |
| 1:A:70:ILE:HD13  | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.71     | 2.21        | 36     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:283:MET:SD   | 0.71     | 2.83        | 39     | 10    |
| 1:A:327:LEU:HD12 | 1:A:337:VAL:HG13 | 0.70     | 1.63        | 46     | 3     |
| 1:A:247:VAL:HG22 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.70     | 1.61        | 50     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:CG1   | 0.70     | 2.15        | 52     | 9     |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.70     | 2.69        | 38     | 22    |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:360:PHE:CD1  | 0.70     | 2.70        | 36     | 26    |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:HA   | 0.70     | 1.64        | 22     | 3     |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:247:VAL:HG22 | 0.70     | 1.64        | 20     | 3     |
| 1:A:317:THR:HG23 | 1:A:319:GLN:H    | 0.70     | 1.45        | 25     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:CD2  | 0.70     | 2.13        | 40     | 3     |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:324:ILE:HD11 | 0.70     | 2.15        | 52     | 2     |
| 1:A:328:LYS:CA   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.70     | 2.15        | 28     | 7     |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:HD22 | 0.70     | 1.62        | 18     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:HD13 | 0.70     | 1.61        | 31     | 3     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:HG12  | 0.70     | 1.61        | 36     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.70     | 2.79        | 43     | 1     |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:360:PHE:CG   | 0.70     | 2.69        | 47     | 41    |
| 1:A:336:LEU:HD23 | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.70     | 1.63        | 10     | 1     |
| 1:A:360:PHE:CD1  | 1:A:360:PHE:N    | 0.70     | 2.58        | 54     | 18    |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:46:ILE:HG22  | 0.70     | 1.86        | 43     | 3     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HD11 | 0.70     | 2.15        | 35     | 1     |
| 1:A:333:PRO:O    | 1:A:337:VAL:HG22 | 0.69     | 1.86        | 45     | 6     |
| 1:A:230:ASN:HB2  | 1:A:232:LEU:HD23 | 0.69     | 1.62        | 48     | 7     |
| 1:A:262:LEU:CD1  | 1:A:269:LEU:HD23 | 0.69     | 2.16        | 21     | 3     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.69     | 1.86        | 27     | 3     |
| 1:A:259:LEU:HD12 | 1:A:270:LEU:HD13 | 0.69     | 1.64        | 27     | 1     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:HD12  | 0.69     | 1.88        | 22     | 6     |
| 1:A:26:LEU:HD21  | 1:A:64:LEU:CB    | 0.69     | 2.18        | 3      | 2     |
| 1:A:272:GLN:C    | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.69     | 2.71        | 35     | 23    |
| 1:A:328:LYS:HB2  | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.69     | 1.64        | 5      | 1     |
| 1:A:354:PHE:C    | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.69     | 2.71        | 8      | 6     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.69     | 2.18        | 20     | 1     |
| 1:A:22:LEU:HD13  | 1:A:22:LEU:C     | 0.69     | 2.13        | 21     | 3     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.69     | 1.88        | 12     | 2     |
| 1:A:251:ASN:HD21 | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.69     | 1.47        | 53     | 3     |
| 1:A:316:VAL:HG11 | 1:A:324:ILE:CD1  | 0.69     | 2.15        | 52     | 3     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:67:LEU:HD13  | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.69     | 2.23        | 22     | 1     |
| 1:A:41:ASN:HB2   | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.69     | 1.65        | 27     | 2     |
| 1:A:72:PHE:HE2   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.69     | 1.45        | 28     | 4     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.69     | 2.13        | 5      | 9     |
| 1:A:328:LYS:HZ1  | 1:A:332:PHE:C    | 0.69     | 1.96        | 36     | 1     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.69     | 1.88        | 55     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:HD21  | 0.69     | 1.65        | 4      | 1     |
| 1:A:45:HIS:C     | 1:A:45:HIS:CD2   | 0.69     | 2.71        | 13     | 13    |
| 1:A:78:HIS:HE2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.69     | 1.86        | 10     | 1     |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:359:ASN:CG   | 0.68     | 2.61        | 16     | 18    |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:HD13 | 0.68     | 1.65        | 43     | 11    |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:HD22  | 0.68     | 2.22        | 50     | 8     |
| 1:A:26:LEU:HD12  | 1:A:26:LEU:O     | 0.68     | 1.87        | 20     | 3     |
| 1:A:33:HIS:C     | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.68     | 2.72        | 35     | 2     |
| 1:A:240:GLN:CB   | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.68     | 2.19        | 55     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD12  | 1:A:26:LEU:C     | 0.68     | 2.12        | 28     | 12    |
| 1:A:47:TYR:C     | 1:A:47:TYR:CD2   | 0.68     | 2.72        | 17     | 7     |
| 1:A:234:PHE:CD1  | 1:A:234:PHE:C    | 0.68     | 2.72        | 13     | 25    |
| 1:A:316:VAL:HG21 | 1:A:321:LYS:N    | 0.68     | 2.02        | 41     | 2     |
| 1:A:247:VAL:HB   | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.68     | 1.64        | 31     | 1     |
| 1:A:22:LEU:C     | 1:A:22:LEU:HD12  | 0.68     | 2.13        | 27     | 6     |
| 1:A:34:PHE:CB    | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.68     | 2.17        | 41     | 4     |
| 1:A:42:LEU:HD12  | 1:A:42:LEU:C     | 0.68     | 2.11        | 44     | 7     |
| 1:A:255:LEU:HD11 | 1:A:259:LEU:HG   | 0.68     | 1.65        | 49     | 5     |
| 1:A:327:LEU:CB   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.68     | 2.18        | 31     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:HD11  | 0.68     | 1.66        | 55     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HE2   | 1:A:259:LEU:HD11 | 0.68     | 1.46        | 55     | 1     |
| 1:A:234:PHE:C    | 1:A:234:PHE:CD2  | 0.68     | 2.72        | 53     | 13    |
| 1:A:20:LEU:HD11  | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.68     | 2.24        | 39     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HD12 | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.68     | 2.24        | 7      | 2     |
| 1:A:250:GLN:CD   | 1:A:250:GLN:C    | 0.68     | 2.62        | 48     | 17    |
| 1:A:328:LYS:N    | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.68     | 2.03        | 45     | 5     |
| 1:A:45:HIS:CG    | 1:A:347:ASN:CG   | 0.68     | 2.72        | 52     | 10    |
| 1:A:354:PHE:CG   | 1:A:355:LEU:N    | 0.68     | 2.62        | 40     | 2     |
| 1:A:45:HIS:CG    | 1:A:46:ILE:N     | 0.68     | 2.62        | 19     | 53    |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.68     | 2.62        | 45     | 15    |
| 1:A:331:GLY:C    | 1:A:332:PHE:CD2  | 0.68     | 2.72        | 15     | 5     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.68     | 1.65        | 25     | 3     |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.68     | 2.18        | 33     | 4     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:358:GLN:CD   | 0.68     | 2.72        | 40     | 3     |
| 1:A:67:LEU:HD11  | 1:A:343:ALA:O    | 0.68     | 1.89        | 48     | 7     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:247:VAL:HG12 | 1:A:248:ILE:N    | 0.68     | 2.04        | 18     | 5     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:347:ASN:CG   | 0.68     | 2.72        | 26     | 17    |
| 1:A:259:LEU:HD13 | 1:A:270:LEU:HD21 | 0.68     | 1.66        | 41     | 1     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:CD1  | 0.67     | 2.47        | 41     | 14    |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:C    | 0.67     | 2.37        | 45     | 28    |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:235:LEU:CB   | 0.67     | 2.20        | 43     | 10    |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.67     | 1.65        | 51     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.67     | 2.77        | 26     | 24    |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:HG12  | 0.67     | 1.89        | 3      | 7     |
| 1:A:240:GLN:C    | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.67     | 2.37        | 9      | 8     |
| 1:A:282:GLN:NE2  | 1:A:282:GLN:N    | 0.67     | 2.43        | 31     | 2     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:CG   | 0.67     | 2.72        | 40     | 16    |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.67     | 2.48        | 42     | 4     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.67     | 2.62        | 8      | 9     |
| 1:A:54:TRP:CE2   | 1:A:57:VAL:HG11  | 0.67     | 2.24        | 39     | 6     |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:358:GLN:CD   | 0.67     | 2.72        | 18     | 6     |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:317:THR:N    | 0.67     | 2.57        | 41     | 4     |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:319:GLN:CD   | 0.67     | 2.36        | 37     | 6     |
| 1:A:255:LEU:CG   | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.67     | 2.19        | 39     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HG23 | 1:A:316:VAL:HG23 | 0.67     | 1.65        | 45     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CG   | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.67     | 2.25        | 22     | 2     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.67     | 1.64        | 54     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.67     | 2.76        | 6      | 22    |
| 1:A:47:TYR:CD1   | 1:A:47:TYR:C     | 0.67     | 2.72        | 39     | 8     |
| 1:A:327:LEU:HD12 | 1:A:327:LEU:H    | 0.67     | 1.49        | 33     | 10    |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.67     | 1.65        | 31     | 11    |
| 1:A:254:LEU:HD21 | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.67     | 2.19        | 54     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:283:MET:CE   | 0.67     | 2.78        | 45     | 6     |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:HD13  | 0.67     | 2.25        | 2      | 2     |
| 1:A:249:GLN:CD   | 1:A:285:ASN:C    | 0.67     | 2.63        | 28     | 2     |
| 1:A:282:GLN:CD   | 1:A:283:MET:N    | 0.67     | 2.53        | 45     | 19    |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CD2  | 0.67     | 2.63        | 8      | 6     |
| 1:A:359:ASN:CG   | 1:A:360:PHE:N    | 0.67     | 2.53        | 21     | 5     |
| 1:A:330:LEU:C    | 1:A:330:LEU:CD2  | 0.67     | 2.67        | 44     | 3     |
| 1:A:358:GLN:N    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.67     | 2.63        | 38     | 26    |
| 1:A:244:MET:CB   | 1:A:258:LEU:HD13 | 0.67     | 2.20        | 11     | 14    |
| 1:A:37:ILE:HD12  | 1:A:38:TRP:N     | 0.67     | 2.05        | 22     | 4     |
| 1:A:238:GLN:CD   | 1:A:238:GLN:O    | 0.67     | 2.37        | 51     | 2     |
| 1:A:241:PHE:C    | 1:A:241:PHE:CD2  | 0.67     | 2.71        | 17     | 12    |
| 1:A:69:PHE:C     | 1:A:69:PHE:CD2   | 0.67     | 2.72        | 36     | 7     |
| 1:A:69:PHE:HE2   | 1:A:259:LEU:HD13 | 0.67     | 1.49        | 5      | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:60:ILE:C     | 1:A:60:ILE:HD13  | 0.67     | 2.14        | 24     | 1     |
| 1:A:315:GLN:CA   | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.67     | 2.78        | 24     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:241:PHE:C    | 0.66     | 2.72        | 25     | 21    |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:354:PHE:CB   | 0.66     | 2.79        | 40     | 17    |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.66     | 2.24        | 18     | 5     |
| 1:A:354:PHE:CD1  | 1:A:354:PHE:C    | 0.66     | 2.73        | 19     | 6     |
| 1:A:43:GLY:HA2   | 1:A:60:ILE:HD11  | 0.66     | 1.66        | 29     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD22  | 1:A:61:ILE:HG23  | 0.66     | 1.67        | 39     | 3     |
| 1:A:354:PHE:CD1  | 1:A:355:LEU:N    | 0.66     | 2.63        | 28     | 7     |
| 1:A:34:PHE:CB    | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.66     | 2.20        | 42     | 1     |
| 1:A:334:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:C    | 0.66     | 2.63        | 29     | 3     |
| 1:A:251:ASN:CG   | 1:A:251:ASN:O    | 0.66     | 2.39        | 9      | 5     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.66     | 2.78        | 32     | 7     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.66     | 2.64        | 16     | 28    |
| 1:A:360:PHE:N    | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.66     | 2.63        | 2      | 3     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.66     | 2.63        | 28     | 8     |
| 1:A:26:LEU:CD2   | 1:A:61:ILE:HG23  | 0.66     | 2.21        | 5      | 3     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:321:LYS:CD   | 0.66     | 2.68        | 42     | 25    |
| 1:A:69:PHE:CG    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.66     | 2.63        | 18     | 3     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.66     | 2.74        | 7      | 37    |
| 1:A:234:PHE:CD1  | 1:A:235:LEU:N    | 0.66     | 2.64        | 4      | 15    |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.66     | 2.64        | 20     | 15    |
| 1:A:70:ILE:HG22  | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.66     | 1.90        | 44     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HG23 | 1:A:316:VAL:CG2  | 0.66     | 2.20        | 39     | 4     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:45:HIS:C     | 0.66     | 2.73        | 55     | 8     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CD1  | 0.66     | 2.63        | 17     | 6     |
| 1:A:234:PHE:CD2  | 1:A:235:LEU:N    | 0.66     | 2.64        | 45     | 8     |
| 1:A:78:HIS:CD2   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.66     | 2.74        | 26     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:46:ILE:N     | 0.66     | 2.64        | 47     | 26    |
| 1:A:354:PHE:CD1  | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.66     | 2.64        | 41     | 4     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:245:ARG:NH1  | 0.66     | 2.64        | 5      | 5     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.66     | 2.49        | 50     | 22    |
| 1:A:30:ALA:CB    | 1:A:68:LEU:HD11  | 0.66     | 2.19        | 20     | 10    |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:CE   | 0.66     | 2.79        | 19     | 9     |
| 1:A:354:PHE:CE2  | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.66     | 2.64        | 42     | 8     |
| 1:A:282:GLN:CD   | 1:A:282:GLN:C    | 0.66     | 2.63        | 16     | 14    |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.66     | 2.79        | 50     | 42    |
| 1:A:349:ASN:C    | 1:A:349:ASN:ND2  | 0.66     | 2.54        | 5      | 12    |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.66     | 2.26        | 2      | 3     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.66     | 2.20        | 55     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.66     | 2.21        | 37     | 3     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:NH1  | 0.66     | 2.64        | 31     | 2     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.66     | 2.73        | 55     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:283:MET:CE   | 0.65     | 2.80        | 52     | 12    |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.65     | 1.91        | 23     | 9     |
| 1:A:33:HIS:O     | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.65     | 2.49        | 52     | 21    |
| 1:A:322:GLU:CD   | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.65     | 2.54        | 42     | 5     |
| 1:A:60:ILE:HA    | 1:A:63:ILE:HD11  | 0.65     | 1.68        | 40     | 6     |
| 1:A:48:GLU:CD    | 1:A:48:GLU:C     | 0.65     | 2.65        | 38     | 6     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:273:ILE:CG2  | 0.65     | 2.79        | 16     | 11    |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.65     | 2.26        | 48     | 3     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:CD1   | 0.65     | 2.80        | 11     | 8     |
| 1:A:358:GLN:CB   | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.65     | 2.79        | 18     | 8     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.65     | 2.65        | 52     | 8     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:CG   | 0.65     | 2.79        | 47     | 6     |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.65     | 2.80        | 17     | 19    |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.65     | 2.49        | 50     | 15    |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.65     | 2.79        | 26     | 29    |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.65     | 2.50        | 7      | 23    |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.65     | 2.21        | 39     | 7     |
| 1:A:26:LEU:HD21  | 1:A:64:LEU:HB3   | 0.65     | 1.68        | 3      | 4     |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:56:GLY:CA    | 0.65     | 2.80        | 46     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:67:LEU:CD2   | 0.65     | 2.80        | 16     | 5     |
| 1:A:316:VAL:HG22 | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.65     | 2.27        | 45     | 4     |
| 1:A:358:GLN:N    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.65     | 2.64        | 38     | 4     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.65     | 2.80        | 2      | 7     |
| 1:A:244:MET:HG3  | 1:A:248:ILE:HD12 | 0.65     | 1.68        | 4      | 2     |
| 1:A:233:GLU:C    | 1:A:233:GLU:CD   | 0.65     | 2.64        | 5      | 2     |
| 1:A:358:GLN:CB   | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.65     | 2.80        | 16     | 8     |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.65     | 2.25        | 8      | 2     |
| 1:A:358:GLN:CB   | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.65     | 2.80        | 55     | 8     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:CD1   | 0.65     | 2.80        | 22     | 6     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:324:ILE:HD13 | 0.65     | 1.92        | 12     | 6     |
| 1:A:240:GLN:CD   | 1:A:240:GLN:C    | 0.65     | 2.65        | 25     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.65     | 2.60        | 45     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:CG   | 0.65     | 2.80        | 37     | 11    |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:HG   | 0.65     | 1.69        | 30     | 7     |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:235:LEU:HB3  | 0.65     | 1.68        | 43     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:273:ILE:CG2  | 0.65     | 2.80        | 31     | 9     |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:251:ASN:CG   | 0.65     | 2.55        | 25     | 29    |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.65     | 2.50        | 51     | 16    |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.65     | 1.67        | 27     | 9     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:273:ILE:CD1  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.65     | 2.80        | 9      | 7     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.65     | 2.84        | 12     | 1     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.65     | 2.80        | 20     | 5     |
| 1:A:263:GLY:HA3  | 1:A:270:LEU:HD22 | 0.65     | 1.66        | 44     | 1     |
| 1:A:236:ARG:C    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.65     | 2.55        | 53     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:245:ARG:NH1  | 0.65     | 2.65        | 2      | 1     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.65     | 2.80        | 24     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:HD13 | 0.65     | 2.27        | 23     | 4     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.65     | 1.45        | 41     | 2     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.65     | 2.49        | 12     | 1     |
| 1:A:324:ILE:N    | 1:A:324:ILE:HD13 | 0.65     | 2.07        | 29     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:273:ILE:CG2  | 0.65     | 2.80        | 1      | 17    |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:GLN:HG3  | 0.65     | 1.68        | 1      | 4     |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.65     | 2.64        | 1      | 10    |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.65     | 2.55        | 45     | 16    |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:351:ALA:CB   | 0.65     | 2.84        | 40     | 3     |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.65     | 2.54        | 51     | 5     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:CB   | 0.65     | 2.45        | 40     | 34    |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:CG   | 0.65     | 2.50        | 54     | 13    |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:CD2   | 0.65     | 2.80        | 13     | 9     |
| 1:A:274:SER:C    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.65     | 2.56        | 6      | 1     |
| 1:A:66:GLN:O     | 1:A:70:ILE:HD12  | 0.65     | 1.91        | 40     | 4     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:CG   | 0.65     | 2.21        | 10     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:68:LEU:HD22  | 0.65     | 2.27        | 42     | 1     |
| 1:A:327:LEU:CD1  | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.65     | 2.22        | 49     | 1     |
| 1:A:44:GLN:C     | 1:A:44:GLN:CD    | 0.64     | 2.64        | 3      | 14    |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.64     | 2.79        | 46     | 7     |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.64     | 2.80        | 2      | 9     |
| 1:A:73:ARG:CB    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.64     | 2.22        | 21     | 8     |
| 1:A:280:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.64     | 2.80        | 24     | 14    |
| 1:A:251:ASN:CG   | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.64     | 2.18        | 23     | 9     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.64     | 2.27        | 11     | 2     |
| 1:A:246:GLN:C    | 1:A:246:GLN:CD   | 0.64     | 2.63        | 38     | 4     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.64     | 2.27        | 40     | 3     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:235:LEU:HD23 | 0.64     | 2.21        | 49     | 4     |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.64     | 2.80        | 51     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.64     | 2.51        | 38     | 10    |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:283:MET:HE3  | 0.64     | 1.45        | 2      | 2     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:347:ASN:O    | 0.64     | 2.56        | 29     | 11    |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.64     | 2.50        | 2      | 19    |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:46:ILE:HD12  | 0.64     | 2.07        | 14     | 8     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.64     | 2.80        | 26     | 9     |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.64     | 2.45        | 41     | 23    |
| 1:A:233:GLU:CD   | 1:A:234:PHE:N    | 0.64     | 2.55        | 13     | 3     |
| 1:A:255:LEU:HD21 | 1:A:259:LEU:CG   | 0.64     | 2.22        | 23     | 2     |
| 1:A:15:TYR:C     | 1:A:19:THR:HG1   | 0.64     | 2.01        | 39     | 1     |
| 1:A:33:HIS:O     | 1:A:71:HIS:CE1   | 0.64     | 2.51        | 54     | 20    |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:CD2  | 0.64     | 2.81        | 15     | 12    |
| 1:A:230:ASN:C    | 1:A:230:ASN:OD1  | 0.64     | 2.38        | 52     | 2     |
| 1:A:342:PHE:CD2  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.64     | 2.81        | 7      | 9     |
| 1:A:250:GLN:C    | 1:A:250:GLN:NE2  | 0.64     | 2.56        | 37     | 12    |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:67:LEU:HD21  | 0.64     | 2.26        | 16     | 3     |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:250:GLN:C    | 0.64     | 2.56        | 19     | 5     |
| 1:A:242:GLN:CD   | 1:A:242:GLN:N    | 0.64     | 2.56        | 54     | 12    |
| 1:A:49:THR:HG22  | 1:A:50:TYR:N     | 0.64     | 2.07        | 9      | 4     |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CD2  | 0.64     | 2.80        | 17     | 8     |
| 1:A:317:THR:HG23 | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.64     | 2.07        | 49     | 3     |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.64     | 2.80        | 28     | 3     |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.64     | 2.80        | 22     | 1     |
| 1:A:234:PHE:CD2  | 1:A:234:PHE:C    | 0.64     | 2.73        | 43     | 5     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.64     | 2.55        | 47     | 1     |
| 1:A:58:GLU:CD    | 1:A:58:GLU:C     | 0.64     | 2.64        | 52     | 2     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.64     | 2.51        | 53     | 32    |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:54:TRP:CE2   | 0.64     | 2.51        | 53     | 24    |
| 1:A:38:TRP:CE3   | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.64     | 2.27        | 3      | 2     |
| 1:A:250:GLN:CD   | 1:A:250:GLN:O    | 0.64     | 2.41        | 54     | 13    |
| 1:A:75:GLY:O     | 1:A:360:PHE:CG   | 0.64     | 2.51        | 12     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:61:ILE:HG23  | 0.64     | 1.70        | 20     | 2     |
| 1:A:315:GLN:C    | 1:A:316:VAL:CG1  | 0.64     | 2.71        | 24     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:CD1   | 0.64     | 2.80        | 2      | 4     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.64     | 2.27        | 17     | 7     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:N    | 0.64     | 2.30        | 13     | 22    |
| 1:A:243:ASN:CG   | 1:A:244:MET:N    | 0.64     | 2.55        | 43     | 22    |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:284:LEU:HD21 | 0.64     | 1.70        | 15     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CB   | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.64     | 2.23        | 31     | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HD13 | 0.64     | 1.93        | 41     | 3     |
| 1:A:69:PHE:HE1   | 1:A:259:LEU:HD13 | 0.64     | 1.49        | 45     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:CB   | 0.64     | 2.23        | 31     | 7     |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.64     | 2.71        | 17     | 14    |
| 1:A:26:LEU:HD13  | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.64     | 1.92        | 6      | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:344:CYS:SG   | 0.64     | 2.56        | 11     | 13    |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:CB   | 0.64     | 2.46        | 49     | 8     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:250:GLN:CD   | 1:A:251:ASN:CG   | 0.64     | 2.66        | 36     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HD21 | 1:A:355:LEU:HD11 | 0.64     | 1.69        | 41     | 2     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:346:LYS:O    | 0.64     | 2.51        | 27     | 5     |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.64     | 2.81        | 54     | 5     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.64     | 2.81        | 41     | 2     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:64:LEU:CD2   | 0.64     | 2.80        | 35     | 1     |
| 1:A:42:LEU:CD1   | 1:A:60:ILE:HD11  | 0.64     | 2.23        | 51     | 2     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.64     | 2.51        | 30     | 14    |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:HG13 | 0.64     | 1.70        | 32     | 9     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.64     | 2.51        | 24     | 3     |
| 1:A:250:GLN:C    | 1:A:250:GLN:CD   | 0.64     | 2.66        | 39     | 5     |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.64     | 2.51        | 36     | 10    |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:347:ASN:CG   | 0.64     | 2.56        | 50     | 2     |
| 1:A:332:PHE:HB3  | 1:A:336:LEU:HD22 | 0.64     | 1.69        | 19     | 2     |
| 1:A:30:ALA:CB    | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.64     | 2.14        | 20     | 3     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:HE3  | 0.64     | 1.93        | 43     | 2     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:68:LEU:CD2   | 0.64     | 2.80        | 42     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:241:PHE:O    | 0.63     | 2.51        | 35     | 8     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.63     | 2.51        | 41     | 51    |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.63     | 2.52        | 4      | 19    |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.63     | 2.80        | 2      | 6     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:241:PHE:CD1  | 0.63     | 2.51        | 4      | 3     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:244:MET:N    | 0.63     | 2.46        | 46     | 6     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.63     | 2.66        | 4      | 6     |
| 1:A:45:HIS:CG    | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.63     | 2.51        | 52     | 8     |
| 1:A:277:GLN:HG3  | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.63     | 1.68        | 28     | 8     |
| 1:A:249:GLN:CD   | 1:A:284:LEU:O    | 0.63     | 2.41        | 55     | 43    |
| 1:A:328:LYS:HG3  | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.63     | 1.70        | 37     | 4     |
| 1:A:341:TYR:CZ   | 1:A:346:LYS:O    | 0.63     | 2.52        | 20     | 41    |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:49:THR:OG1   | 0.63     | 2.52        | 39     | 7     |
| 1:A:76:CYS:SG    | 1:A:78:HIS:O     | 0.63     | 2.56        | 54     | 6     |
| 1:A:314:ILE:CG2  | 1:A:315:GLN:N    | 0.63     | 2.62        | 35     | 3     |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.63     | 2.28        | 28     | 3     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:O    | 0.63     | 2.51        | 34     | 6     |
| 1:A:354:PHE:CD1  | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.63     | 2.52        | 9      | 3     |
| 1:A:317:THR:HG1  | 1:A:319:GLN:CD   | 0.63     | 2.00        | 13     | 2     |
| 1:A:31:VAL:HA    | 1:A:39:LEU:HD13  | 0.63     | 1.70        | 14     | 3     |
| 1:A:250:GLN:CD   | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.63     | 2.56        | 36     | 1     |
| 1:A:273:ILE:CD1  | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.63     | 2.82        | 4      | 3     |
| 1:A:231:PRO:O    | 1:A:234:PHE:CE2  | 0.63     | 2.52        | 34     | 15    |
| 1:A:77:ARG:CD    | 1:A:77:ARG:C     | 0.63     | 2.71        | 33     | 4     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:254:LEU:C    | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.63     | 2.71        | 37     | 4     |
| 1:A:34:PHE:HB2   | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.63     | 1.69        | 42     | 1     |
| 1:A:254:LEU:O    | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.63     | 1.92        | 55     | 4     |
| 1:A:359:ASN:N    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.63     | 2.46        | 19     | 10    |
| 1:A:281:ILE:N    | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.63     | 2.61        | 28     | 37    |
| 1:A:338:ILE:HG22 | 1:A:339:GLN:N    | 0.63     | 2.09        | 42     | 11    |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:CD   | 0.63     | 2.41        | 7      | 2     |
| 1:A:354:PHE:CE2  | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.63     | 2.52        | 7      | 3     |
| 1:A:279:GLN:O    | 1:A:283:MET:SD   | 0.63     | 2.57        | 12     | 10    |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:324:ILE:N    | 0.63     | 2.61        | 48     | 3     |
| 1:A:15:TYR:CE2   | 1:A:18:TRP:CZ3   | 0.63     | 2.86        | 42     | 2     |
| 1:A:315:GLN:C    | 1:A:316:VAL:HG12 | 0.63     | 2.18        | 24     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:354:PHE:CD1  | 0.63     | 2.28        | 51     | 4     |
| 1:A:33:HIS:O     | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.63     | 2.52        | 29     | 3     |
| 1:A:46:ILE:O     | 1:A:50:TYR:CE1   | 0.63     | 2.51        | 32     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD23 | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.63     | 1.68        | 35     | 1     |
| 1:A:231:PRO:O    | 1:A:234:PHE:CE1  | 0.63     | 2.52        | 15     | 17    |
| 1:A:317:THR:CB   | 1:A:318:PRO:CD   | 0.63     | 2.77        | 24     | 36    |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.63     | 2.72        | 54     | 26    |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.63     | 2.52        | 7      | 19    |
| 1:A:348:GLU:C    | 1:A:348:GLU:CD   | 0.63     | 2.67        | 30     | 4     |
| 1:A:237:ASP:C    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.63     | 2.57        | 36     | 4     |
| 1:A:338:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CD1  | 0.63     | 2.52        | 20     | 4     |
| 1:A:70:ILE:HG21  | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.63     | 2.28        | 43     | 4     |
| 1:A:18:TRP:CH2   | 1:A:22:LEU:HD13  | 0.63     | 2.28        | 47     | 2     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.63     | 2.52        | 39     | 5     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.63     | 2.32        | 25     | 43    |
| 1:A:282:GLN:NE2  | 1:A:283:MET:N    | 0.63     | 2.47        | 15     | 13    |
| 1:A:41:ASN:C     | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.63     | 2.72        | 9      | 9     |
| 1:A:69:PHE:CD1   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.63     | 2.52        | 9      | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:51:GLY:O     | 0.63     | 2.52        | 11     | 2     |
| 1:A:262:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.63     | 2.24        | 29     | 7     |
| 1:A:314:ILE:HG12 | 1:A:338:ILE:HG21 | 0.63     | 1.70        | 30     | 1     |
| 1:A:331:GLY:O    | 1:A:332:PHE:CD2  | 0.63     | 2.52        | 52     | 4     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:SD   | 0.63     | 2.56        | 54     | 8     |
| 1:A:46:ILE:O     | 1:A:50:TYR:CD2   | 0.63     | 2.52        | 28     | 3     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:CG1   | 0.63     | 2.24        | 29     | 6     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:237:ASP:N    | 0.63     | 2.31        | 51     | 7     |
| 1:A:69:PHE:CG    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.63     | 2.52        | 9      | 2     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.63     | 2.52        | 24     | 4     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:HG22 | 0.63     | 1.71        | 12     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:270:LEU:HD13 | 1:A:270:LEU:C    | 0.63     | 2.18        | 35     | 2     |
| 1:A:337:VAL:HG13 | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.63     | 2.24        | 47     | 1     |
| 1:A:36:ARG:C     | 1:A:36:ARG:CD    | 0.63     | 2.71        | 52     | 1     |
| 1:A:231:PRO:O    | 1:A:234:PHE:CZ   | 0.62     | 2.52        | 29     | 6     |
| 1:A:337:VAL:HG22 | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.62     | 1.70        | 47     | 4     |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.62     | 2.52        | 29     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:CD2  | 0.62     | 2.82        | 29     | 2     |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.62     | 2.81        | 42     | 2     |
| 1:A:328:LYS:NZ   | 1:A:333:PRO:O    | 0.62     | 2.32        | 36     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:CG   | 0.62     | 2.82        | 41     | 2     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:341:TYR:CE2  | 0.62     | 2.51        | 7      | 1     |
| 1:A:259:LEU:HD23 | 1:A:262:LEU:HD23 | 0.62     | 1.71        | 36     | 4     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:63:ILE:HD11  | 0.62     | 1.71        | 13     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.62     | 2.52        | 13     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:46:ILE:CD1   | 0.62     | 2.80        | 55     | 9     |
| 1:A:74:ILE:HG21  | 1:A:359:ASN:O    | 0.62     | 1.94        | 13     | 2     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:284:LEU:C    | 0.62     | 2.57        | 30     | 7     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:N    | 0.62     | 2.32        | 52     | 12    |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:HD1   | 0.62     | 1.55        | 42     | 4     |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:47:TYR:CD2   | 0.62     | 2.52        | 30     | 1     |
| 1:A:74:ILE:HG22  | 1:A:359:ASN:HD22 | 0.62     | 1.54        | 32     | 1     |
| 1:A:238:GLN:NE2  | 1:A:238:GLN:N    | 0.62     | 2.47        | 53     | 4     |
| 1:A:42:LEU:C     | 1:A:42:LEU:CD1   | 0.62     | 2.72        | 8      | 14    |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.62     | 2.52        | 28     | 3     |
| 1:A:46:ILE:O     | 1:A:50:TYR:CE2   | 0.62     | 2.52        | 11     | 3     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.62     | 1.55        | 11     | 2     |
| 1:A:68:LEU:HD22  | 1:A:281:ILE:HG13 | 0.62     | 1.70        | 31     | 2     |
| 1:A:254:LEU:N    | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.62     | 2.62        | 49     | 11    |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.62     | 1.94        | 3      | 2     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.62     | 1.72        | 39     | 2     |
| 1:A:78:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.62     | 2.51        | 52     | 6     |
| 1:A:42:LEU:C     | 1:A:42:LEU:HD22  | 0.62     | 2.20        | 55     | 2     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.62     | 2.48        | 15     | 22    |
| 1:A:327:LEU:N    | 1:A:327:LEU:CD2  | 0.62     | 2.63        | 20     | 14    |
| 1:A:356:LEU:CD1  | 1:A:356:LEU:N    | 0.62     | 2.62        | 24     | 12    |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:CG   | 0.62     | 2.42        | 41     | 15    |
| 1:A:328:LYS:N    | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.62     | 2.62        | 5      | 4     |
| 1:A:71:HIS:ND1   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.62     | 2.48        | 7      | 1     |
| 1:A:358:GLN:CA   | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.62     | 2.83        | 38     | 8     |
| 1:A:332:PHE:HD1  | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.62     | 1.54        | 25     | 2     |
| 1:A:27:LYS:C     | 1:A:27:LYS:CE    | 0.62     | 2.72        | 31     | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:46:ILE:CG2  | 1:A:50:TYR:CE2   | 0.62     | 2.82        | 46     | 1     |
| 1:A:61:ILE:HG22 | 1:A:62:ARG:N     | 0.62     | 2.08        | 2      | 9     |
| 1:A:230:ASN:ND2 | 1:A:233:GLU:N    | 0.62     | 2.48        | 6      | 18    |
| 1:A:232:LEU:HB2 | 1:A:269:LEU:HD11 | 0.62     | 1.71        | 8      | 1     |
| 1:A:358:GLN:C   | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.62     | 2.77        | 41     | 8     |
| 1:A:69:PHE:CD1  | 1:A:259:LEU:HD11 | 0.62     | 2.30        | 16     | 3     |
| 1:A:315:GLN:NE2 | 1:A:346:LYS:NZ   | 0.62     | 2.48        | 34     | 1     |
| 1:A:27:LYS:CB   | 1:A:27:LYS:NZ    | 0.62     | 2.63        | 45     | 1     |
| 1:A:249:GLN:CG  | 1:A:284:LEU:O    | 0.62     | 2.48        | 25     | 50    |
| 1:A:317:THR:OG1 | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.62     | 2.33        | 14     | 4     |
| 1:A:69:PHE:CD1  | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.62     | 2.68        | 18     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CD1 | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.62     | 2.81        | 18     | 2     |
| 1:A:239:PRO:O   | 1:A:243:ASN:N    | 0.62     | 2.32        | 55     | 20    |
| 1:A:270:LEU:C   | 1:A:270:LEU:CD1  | 0.62     | 2.73        | 51     | 2     |
| 1:A:358:GLN:C   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.62     | 2.43        | 36     | 1     |
| 1:A:356:LEU:C   | 1:A:356:LEU:CD2  | 0.62     | 2.69        | 47     | 1     |
| 1:A:37:ILE:O    | 1:A:41:ASN:ND2   | 0.62     | 2.33        | 51     | 38    |
| 1:A:243:ASN:C   | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.62     | 2.43        | 5      | 1     |
| 1:A:358:GLN:O   | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.62     | 2.53        | 12     | 2     |
| 1:A:346:LYS:N   | 1:A:346:LYS:CD   | 0.61     | 2.63        | 8      | 22    |
| 1:A:33:HIS:HE2  | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.61     | 1.53        | 33     | 5     |
| 1:A:47:TYR:CD1  | 1:A:51:GLY:O     | 0.61     | 2.53        | 33     | 5     |
| 1:A:15:TYR:C    | 1:A:19:THR:OG1   | 0.61     | 2.43        | 39     | 1     |
| 1:A:331:GLY:C   | 1:A:332:PHE:CD1  | 0.61     | 2.78        | 47     | 2     |
| 1:A:44:GLN:O    | 1:A:48:GLU:CG    | 0.61     | 2.48        | 10     | 4     |
| 1:A:74:ILE:CD1  | 1:A:74:ILE:N     | 0.61     | 2.62        | 54     | 16    |
| 1:A:15:TYR:O    | 1:A:19:THR:HG22  | 0.61     | 1.95        | 34     | 16    |
| 1:A:272:GLN:NE2 | 1:A:272:GLN:N    | 0.61     | 2.48        | 13     | 3     |
| 1:A:29:GLU:O    | 1:A:33:HIS:CD2   | 0.61     | 2.53        | 24     | 7     |
| 1:A:322:GLU:C   | 1:A:322:GLU:CD   | 0.61     | 2.68        | 23     | 3     |
| 1:A:44:GLN:OE1  | 1:A:48:GLU:CD    | 0.61     | 2.44        | 15     | 2     |
| 1:A:255:LEU:N   | 1:A:256:PRO:CD   | 0.61     | 2.64        | 4      | 41    |
| 1:A:279:GLN:O   | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.61     | 2.33        | 23     | 22    |
| 1:A:314:ILE:O   | 1:A:315:GLN:C    | 0.61     | 2.43        | 11     | 23    |
| 1:A:325:GLU:O   | 1:A:328:LYS:CG   | 0.61     | 2.48        | 12     | 21    |
| 1:A:342:PHE:CE2 | 1:A:346:LYS:CE   | 0.61     | 2.83        | 55     | 5     |
| 1:A:69:PHE:CD2  | 1:A:274:SER:OG   | 0.61     | 2.52        | 7      | 1     |
| 1:A:327:LEU:C   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.61     | 2.21        | 12     | 1     |
| 1:A:322:GLU:O   | 1:A:326:ARG:NE   | 0.61     | 2.33        | 23     | 6     |
| 1:A:239:PRO:C   | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.61     | 2.44        | 21     | 2     |
| 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:60:ILE:HG13  | 0.61     | 1.71        | 43     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:77:ARG:NE    | 1:A:78:HIS:NE2   | 0.61     | 2.48        | 6      | 1     |
| 1:A:238:GLN:O    | 1:A:242:GLN:CD   | 0.61     | 2.44        | 41     | 4     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:CD   | 0.61     | 2.43        | 42     | 3     |
| 1:A:345:GLU:OE1  | 1:A:345:GLU:C    | 0.61     | 2.43        | 24     | 2     |
| 1:A:240:GLN:NE2  | 1:A:262:LEU:HD13 | 0.61     | 2.10        | 34     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG12 | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.61     | 2.23        | 34     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:346:LYS:NZ   | 0.61     | 2.09        | 50     | 2     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:54:TRP:NE1   | 0.61     | 2.34        | 37     | 30    |
| 1:A:243:ASN:OD1  | 1:A:244:MET:N    | 0.61     | 2.33        | 54     | 16    |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:350:LEU:CD2  | 0.61     | 2.64        | 5      | 10    |
| 1:A:322:GLU:C    | 1:A:322:GLU:OE1  | 0.61     | 2.43        | 21     | 2     |
| 1:A:284:LEU:HD13 | 1:A:284:LEU:O    | 0.61     | 1.96        | 14     | 1     |
| 1:A:244:MET:C    | 1:A:248:ILE:HD13 | 0.61     | 2.20        | 24     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:HD12  | 0.61     | 2.30        | 22     | 1     |
| 1:A:275:ARG:C    | 1:A:275:ARG:CD   | 0.61     | 2.73        | 32     | 2     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:238:GLN:O    | 0.61     | 2.19        | 53     | 2     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:285:ASN:N    | 0.61     | 2.34        | 25     | 52    |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:CG   | 0.61     | 2.48        | 42     | 11    |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:350:LEU:CD2  | 0.61     | 2.81        | 17     | 10    |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.61     | 2.61        | 8      | 7     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.61     | 2.64        | 38     | 11    |
| 1:A:276:HIS:HD1  | 1:A:280:PHE:HB2  | 0.61     | 1.55        | 7      | 4     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.61     | 2.53        | 54     | 6     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:354:PHE:CD1  | 0.61     | 2.84        | 41     | 3     |
| 1:A:332:PHE:CG   | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.61     | 2.84        | 43     | 1     |
| 1:A:18:TRP:CH2   | 1:A:22:LEU:CD2   | 0.61     | 2.84        | 30     | 5     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:CB   | 0.61     | 2.84        | 48     | 5     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.61     | 2.30        | 13     | 3     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.61     | 2.68        | 55     | 4     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:CG   | 0.61     | 2.49        | 45     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG11 | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.61     | 1.72        | 50     | 1     |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:20:LEU:HD21  | 0.61     | 1.95        | 21     | 20    |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:284:LEU:O    | 0.61     | 2.34        | 9      | 41    |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:251:ASN:OD1  | 0.61     | 2.34        | 12     | 27    |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.61     | 2.79        | 4      | 4     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:235:LEU:CD2  | 0.61     | 2.79        | 49     | 5     |
| 1:A:354:PHE:CG   | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.61     | 2.54        | 24     | 1     |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:249:GLN:CD   | 0.61     | 2.43        | 31     | 2     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.61     | 1.38        | 44     | 2     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:347:ASN:CG   | 0.61     | 2.44        | 47     | 1     |
| 1:A:65:GLN:CD    | 1:A:274:SER:O    | 0.61     | 2.44        | 1      | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:230:ASN:C    | 0.61     | 2.44        | 27     | 16    |
| 1:A:275:ARG:CD   | 1:A:275:ARG:N    | 0.61     | 2.63        | 37     | 2     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:324:ILE:N    | 0.61     | 2.34        | 2      | 48    |
| 1:A:324:ILE:HG22 | 1:A:337:VAL:HB   | 0.61     | 1.73        | 5      | 4     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:CB   | 0.61     | 2.79        | 55     | 11    |
| 1:A:359:ASN:ND2  | 1:A:359:ASN:N    | 0.61     | 2.49        | 16     | 3     |
| 1:A:328:LYS:CE   | 1:A:334:GLU:N    | 0.61     | 2.64        | 28     | 8     |
| 1:A:232:LEU:HB2  | 1:A:235:LEU:HD13 | 0.61     | 1.72        | 27     | 5     |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:320:GLU:CD   | 0.61     | 2.20        | 22     | 1     |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:246:GLN:CD   | 0.61     | 2.44        | 25     | 2     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:CD   | 0.61     | 2.44        | 31     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CB   | 0.61     | 2.26        | 49     | 3     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.61     | 2.64        | 43     | 1     |
| 1:A:22:LEU:N     | 1:A:22:LEU:CD2   | 0.61     | 2.64        | 49     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.61     | 2.34        | 18     | 12    |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:232:LEU:N    | 0.61     | 2.34        | 41     | 5     |
| 1:A:78:HIS:NE2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.61     | 2.48        | 10     | 5     |
| 1:A:74:ILE:HG22  | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.61     | 1.96        | 17     | 2     |
| 1:A:20:LEU:CD1   | 1:A:20:LEU:N     | 0.61     | 2.64        | 19     | 4     |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:321:LYS:N    | 0.61     | 2.63        | 41     | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD22  | 1:A:42:LEU:O     | 0.61     | 1.95        | 55     | 1     |
| 1:A:14:PRO:O     | 1:A:16:ASN:N     | 0.60     | 2.34        | 17     | 37    |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:HD11 | 0.60     | 2.31        | 3      | 24    |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:318:PRO:CD   | 0.60     | 2.49        | 25     | 28    |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:258:LEU:HD13 | 0.60     | 1.71        | 39     | 7     |
| 1:A:72:PHE:HD2   | 1:A:248:ILE:HD13 | 0.60     | 1.57        | 46     | 1     |
| 1:A:65:GLN:CG    | 1:A:66:GLN:N     | 0.60     | 2.64        | 31     | 3     |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:257:ALA:N    | 0.60     | 2.33        | 54     | 8     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:355:LEU:N    | 0.60     | 2.69        | 41     | 4     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.60     | 2.35        | 12     | 4     |
| 1:A:48:GLU:CD    | 1:A:48:GLU:O     | 0.60     | 2.44        | 11     | 5     |
| 1:A:275:ARG:CD   | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.60     | 2.84        | 38     | 3     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:CD1  | 0.60     | 2.50        | 40     | 5     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:352:ALA:CA   | 0.60     | 2.26        | 21     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HG21 | 1:A:284:LEU:HD21 | 0.60     | 1.72        | 55     | 1     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:N    | 0.60     | 2.34        | 42     | 44    |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:CB   | 0.60     | 2.80        | 36     | 10    |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:CB   | 0.60     | 2.48        | 37     | 18    |
| 1:A:334:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:O    | 0.60     | 2.44        | 3      | 1     |
| 1:A:358:GLN:CD   | 1:A:358:GLN:O    | 0.60     | 2.44        | 3      | 3     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:CD   | 0.60     | 2.44        | 4      | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:358:GLN:CG   | 0.60     | 2.84        | 47     | 3     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:286:GLU:N    | 0.60     | 2.49        | 28     | 1     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:343:ALA:CB   | 0.60     | 2.80        | 50     | 4     |
| 1:A:284:LEU:HD23 | 1:A:284:LEU:C    | 0.60     | 2.22        | 2      | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.60     | 2.19        | 18     | 16    |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:250:GLN:O    | 0.60     | 2.34        | 42     | 4     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:CD   | 0.60     | 2.45        | 30     | 3     |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:250:GLN:N    | 0.60     | 2.35        | 31     | 5     |
| 1:A:248:ILE:CG1  | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.60     | 2.79        | 15     | 2     |
| 1:A:317:THR:CG2  | 1:A:318:PRO:CD   | 0.60     | 2.80        | 17     | 1     |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:20:LEU:CD2   | 0.60     | 2.50        | 1      | 35    |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:285:ASN:C    | 0.60     | 2.44        | 2      | 1     |
| 1:A:73:ARG:CG    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.60     | 2.27        | 17     | 4     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:HD21 | 0.60     | 2.32        | 4      | 4     |
| 1:A:354:PHE:HD2  | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.60     | 1.56        | 21     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.60     | 2.31        | 14     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG22 | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.60     | 1.73        | 52     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.60     | 2.32        | 20     | 2     |
| 1:A:281:ILE:N    | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.60     | 2.50        | 23     | 2     |
| 1:A:240:GLN:C    | 1:A:240:GLN:NE2  | 0.60     | 2.60        | 25     | 1     |
| 1:A:73:ARG:CG    | 1:A:74:ILE:N     | 0.60     | 2.63        | 39     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.60     | 1.96        | 54     | 1     |
| 1:A:65:GLN:CD    | 1:A:66:GLN:N     | 0.60     | 2.59        | 1      | 1     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:HG12 | 0.60     | 1.96        | 55     | 46    |
| 1:A:269:LEU:CD2  | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.60     | 2.80        | 14     | 12    |
| 1:A:35:PRO:CG    | 1:A:357:SER:O    | 0.60     | 2.50        | 50     | 13    |
| 1:A:31:VAL:CG1   | 1:A:32:ARG:N     | 0.60     | 2.65        | 50     | 4     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:324:ILE:N    | 0.60     | 2.11        | 7      | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.60     | 1.74        | 50     | 1     |
| 1:A:236:ARG:C    | 1:A:238:GLN:HE21 | 0.60     | 2.05        | 53     | 1     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:233:GLU:CA   | 0.60     | 2.64        | 39     | 13    |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:243:ASN:CB   | 0.60     | 2.50        | 39     | 21    |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:315:GLN:CG   | 0.60     | 2.50        | 4      | 8     |
| 1:A:41:ASN:CB    | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.60     | 2.27        | 9      | 8     |
| 1:A:74:ILE:HD11  | 1:A:336:LEU:HD21 | 0.60     | 1.72        | 5      | 1     |
| 1:A:23:LEU:HD13  | 1:A:61:ILE:HG12  | 0.60     | 1.72        | 53     | 5     |
| 1:A:328:LYS:NZ   | 1:A:334:GLU:O    | 0.60     | 2.34        | 14     | 1     |
| 1:A:22:LEU:HD23  | 1:A:22:LEU:C     | 0.60     | 2.22        | 40     | 2     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:347:ASN:CG   | 0.60     | 2.59        | 21     | 5     |
| 1:A:22:LEU:HD12  | 1:A:22:LEU:O     | 0.60     | 1.97        | 27     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.60     | 1.72        | 27     | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:314:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.60     | 1.73        | 29     | 1     |
| 1:A:348:GLU:O    | 1:A:348:GLU:CD   | 0.60     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:325:GLU:OE1  | 0.60     | 2.35        | 55     | 3     |
| 1:A:52:ASP:OD2   | 1:A:52:ASP:C     | 0.60     | 2.45        | 27     | 4     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:CD   | 0.60     | 2.75        | 18     | 2     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HD13 | 0.60     | 1.96        | 21     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:284:LEU:O    | 0.60     | 2.35        | 45     | 1     |
| 1:A:23:LEU:HD21  | 1:A:27:LYS:NZ    | 0.60     | 2.11        | 53     | 1     |
| 1:A:276:HIS:O    | 1:A:276:HIS:ND1  | 0.60     | 2.35        | 35     | 9     |
| 1:A:324:ILE:N    | 1:A:324:ILE:CD1  | 0.60     | 2.65        | 7      | 5     |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:51:GLY:N     | 0.60     | 2.70        | 46     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:283:MET:O    | 0.60     | 2.35        | 25     | 4     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:CG   | 0.60     | 2.84        | 24     | 4     |
| 1:A:78:HIS:O     | 1:A:79:SER:C     | 0.60     | 2.44        | 28     | 4     |
| 1:A:354:PHE:CE2  | 1:A:358:GLN:CD   | 0.60     | 2.80        | 40     | 6     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:70:ILE:HD11  | 0.60     | 1.96        | 26     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:CD2   | 0.60     | 2.85        | 27     | 1     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.60     | 2.35        | 30     | 15    |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:N    | 0.60     | 2.35        | 51     | 4     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:33:HIS:CD2   | 0.60     | 2.54        | 36     | 3     |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:319:GLN:OE1  | 0.60     | 2.20        | 39     | 3     |
| 1:A:233:GLU:OE2  | 1:A:234:PHE:N    | 0.60     | 2.35        | 55     | 2     |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.59     | 2.84        | 4      | 10    |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:323:ALA:N    | 0.59     | 2.36        | 45     | 31    |
| 1:A:341:TYR:O    | 1:A:346:LYS:N    | 0.59     | 2.35        | 29     | 37    |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:N    | 0.59     | 2.36        | 38     | 22    |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:344:CYS:O    | 0.59     | 2.55        | 20     | 9     |
| 1:A:273:ILE:HD12 | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.59     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:358:GLN:NE2  | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.59     | 2.70        | 12     | 1     |
| 1:A:70:ILE:HD11  | 1:A:339:GLN:HB3  | 0.59     | 1.74        | 39     | 8     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:C    | 0.59     | 2.45        | 44     | 8     |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:354:PHE:CD1  | 0.59     | 2.85        | 50     | 1     |
| 1:A:30:ALA:O     | 1:A:34:PHE:N     | 0.59     | 2.36        | 4      | 43    |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:O    | 0.59     | 2.20        | 41     | 19    |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:283:MET:O    | 0.59     | 2.35        | 2      | 11    |
| 1:A:349:ASN:ND2  | 1:A:350:LEU:N    | 0.59     | 2.51        | 28     | 12    |
| 1:A:47:TYR:CD2   | 1:A:51:GLY:O     | 0.59     | 2.55        | 16     | 6     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:230:ASN:O    | 0.59     | 2.21        | 18     | 12    |
| 1:A:284:LEU:O    | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.59     | 2.50        | 14     | 5     |
| 1:A:66:GLN:O     | 1:A:66:GLN:CD    | 0.59     | 2.45        | 47     | 3     |
| 1:A:338:ILE:CG2  | 1:A:339:GLN:N    | 0.59     | 2.65        | 22     | 6     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:68:LEU:HD23  | 1:A:281:ILE:HG13 | 0.59     | 1.72        | 54     | 2     |
| 1:A:45:HIS:HB3   | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.59     | 1.73        | 23     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:245:ARG:HA   | 0.59     | 2.12        | 45     | 1     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:284:LEU:N    | 0.59     | 2.35        | 45     | 14    |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:CG   | 0.59     | 2.51        | 30     | 6     |
| 1:A:234:PHE:O    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.59     | 2.35        | 55     | 7     |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.59     | 1.73        | 9      | 4     |
| 1:A:314:ILE:CG1  | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.59     | 2.27        | 12     | 1     |
| 1:A:319:GLN:NE2  | 1:A:320:GLU:N    | 0.59     | 2.50        | 14     | 2     |
| 1:A:60:ILE:HD12  | 1:A:60:ILE:C     | 0.59     | 2.23        | 37     | 2     |
| 1:A:19:THR:HG23  | 1:A:61:ILE:HD13  | 0.59     | 1.73        | 50     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HG3   | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.59     | 1.73        | 1      | 2     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:N    | 0.59     | 2.35        | 25     | 51    |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:357:SER:N    | 0.59     | 2.35        | 21     | 29    |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:CG1  | 0.59     | 2.51        | 22     | 15    |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.59     | 2.32        | 5      | 1     |
| 1:A:358:GLN:HB3  | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.59     | 2.33        | 10     | 9     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:CG1  | 0.59     | 2.50        | 11     | 12    |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.59     | 2.50        | 55     | 3     |
| 1:A:276:HIS:ND1  | 1:A:276:HIS:O    | 0.59     | 2.36        | 49     | 2     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:HG23  | 0.59     | 1.97        | 47     | 3     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:CB   | 0.59     | 2.51        | 43     | 4     |
| 1:A:243:ASN:HD21 | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.59     | 1.56        | 44     | 1     |
| 1:A:279:GLN:N    | 1:A:279:GLN:OE1  | 0.59     | 2.35        | 55     | 1     |
| 1:A:278:GLU:O    | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.59     | 2.36        | 31     | 16    |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.59     | 1.74        | 2      | 1     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:327:LEU:CD1  | 0.59     | 2.51        | 21     | 22    |
| 1:A:60:ILE:CG2   | 1:A:61:ILE:N     | 0.59     | 2.65        | 7      | 8     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:316:VAL:HG22 | 0.59     | 2.23        | 11     | 6     |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:245:ARG:NH1  | 0.59     | 2.36        | 38     | 2     |
| 1:A:322:GLU:OE1  | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.59     | 2.35        | 31     | 6     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:283:MET:O    | 0.59     | 2.35        | 28     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HG21 | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.59     | 2.28        | 55     | 7     |
| 1:A:238:GLN:N    | 1:A:238:GLN:OE1  | 0.59     | 2.36        | 23     | 2     |
| 1:A:77:ARG:CZ    | 1:A:78:HIS:NE2   | 0.59     | 2.64        | 31     | 1     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:N    | 0.59     | 2.36        | 42     | 2     |
| 1:A:72:PHE:O     | 1:A:252:PRO:CB   | 0.59     | 2.51        | 25     | 2     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.59     | 2.35        | 52     | 7     |
| 1:A:71:HIS:ND1   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.59     | 2.36        | 2      | 2     |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.59     | 2.54        | 47     | 7     |
| 1:A:67:LEU:HA    | 1:A:70:ILE:HD12  | 0.59     | 1.75        | 8      | 4     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:19:THR:CG2   | 0.59     | 2.51        | 34     | 16    |
| 1:A:64:LEU:C     | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.59     | 2.23        | 16     | 2     |
| 1:A:14:PRO:C     | 1:A:16:ASN:OD1   | 0.59     | 2.46        | 11     | 2     |
| 1:A:269:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.59     | 1.75        | 11     | 6     |
| 1:A:50:TYR:OH    | 1:A:345:GLU:CD   | 0.59     | 2.45        | 36     | 2     |
| 1:A:20:LEU:HD21  | 1:A:54:TRP:CH2   | 0.59     | 2.33        | 39     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:337:VAL:O    | 0.59     | 1.97        | 49     | 1     |
| 1:A:238:GLN:C    | 1:A:238:GLN:OE1  | 0.59     | 2.46        | 51     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HA    | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.59     | 1.75        | 55     | 1     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:232:LEU:CD1  | 0.59     | 2.51        | 5      | 26    |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:51:GLY:N     | 0.59     | 2.36        | 7      | 27    |
| 1:A:276:HIS:O    | 1:A:280:PHE:N    | 0.59     | 2.36        | 4      | 25    |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:250:GLN:CB   | 0.59     | 2.51        | 22     | 22    |
| 1:A:357:SER:O    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.59     | 2.36        | 15     | 3     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:19:THR:N     | 0.59     | 2.35        | 10     | 16    |
| 1:A:69:PHE:N     | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.59     | 2.35        | 15     | 4     |
| 1:A:358:GLN:OE1  | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.59     | 2.36        | 42     | 2     |
| 1:A:248:ILE:CG1  | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.59     | 2.28        | 54     | 3     |
| 1:A:348:GLU:OE2  | 1:A:349:ASN:N    | 0.59     | 2.35        | 29     | 1     |
| 1:A:237:ASP:C    | 1:A:238:GLN:OE1  | 0.59     | 2.46        | 31     | 2     |
| 1:A:64:LEU:HD13  | 1:A:64:LEU:O     | 0.59     | 1.98        | 36     | 1     |
| 1:A:41:ASN:CG    | 1:A:353:ASN:OD1  | 0.59     | 2.45        | 37     | 1     |
| 1:A:256:PRO:O    | 1:A:260:GLN:NE2  | 0.59     | 2.36        | 42     | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.59     | 2.35        | 47     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:253:ALA:N    | 0.59     | 2.35        | 41     | 51    |
| 1:A:319:GLN:N    | 1:A:319:GLN:CD   | 0.59     | 2.58        | 27     | 5     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:327:LEU:CD2  | 0.59     | 2.51        | 49     | 14    |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.59     | 2.51        | 5      | 9     |
| 1:A:314:ILE:HG12 | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.59     | 1.74        | 16     | 3     |
| 1:A:22:LEU:C     | 1:A:22:LEU:CD1   | 0.59     | 2.76        | 21     | 6     |
| 1:A:273:ILE:CG2  | 1:A:274:SER:N    | 0.59     | 2.65        | 55     | 9     |
| 1:A:38:TRP:O     | 1:A:42:LEU:CB    | 0.59     | 2.51        | 50     | 12    |
| 1:A:315:GLN:C    | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.59     | 2.81        | 5      | 3     |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:20:LEU:CD1   | 0.59     | 2.51        | 6      | 16    |
| 1:A:19:THR:CG2   | 1:A:20:LEU:N     | 0.59     | 2.65        | 6      | 16    |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:NE    | 0.59     | 2.35        | 10     | 4     |
| 1:A:41:ASN:ND2   | 1:A:353:ASN:OD1  | 0.59     | 2.36        | 48     | 4     |
| 1:A:233:GLU:CG   | 1:A:234:PHE:N    | 0.59     | 2.65        | 43     | 3     |
| 1:A:321:LYS:HB2  | 1:A:324:ILE:HD12 | 0.59     | 1.74        | 23     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.59     | 2.80        | 35     | 4     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:N     | 0.59     | 2.36        | 4      | 28    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:44:GLN:N     | 0.59     | 2.36        | 44     | 10    |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:N    | 0.59     | 2.36        | 37     | 18    |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:64:LEU:HD11  | 0.59     | 1.74        | 4      | 1     |
| 1:A:20:LEU:HD13  | 1:A:20:LEU:N     | 0.59     | 2.13        | 21     | 12    |
| 1:A:71:HIS:ND1   | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.59     | 2.36        | 5      | 6     |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.59     | 2.86        | 26     | 6     |
| 1:A:67:LEU:HD22  | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.59     | 2.33        | 24     | 2     |
| 1:A:266:ASN:CG   | 1:A:269:LEU:CB   | 0.59     | 2.76        | 53     | 2     |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:258:LEU:N    | 0.59     | 2.35        | 15     | 18    |
| 1:A:273:ILE:O    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.59     | 2.36        | 1      | 8     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:280:PHE:N    | 0.59     | 2.35        | 55     | 43    |
| 1:A:283:MET:O    | 1:A:286:GLU:O    | 0.59     | 2.21        | 28     | 13    |
| 1:A:31:VAL:CG2   | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.59     | 2.80        | 52     | 9     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:CB   | 0.59     | 2.51        | 27     | 4     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:O    | 0.59     | 2.21        | 47     | 11    |
| 1:A:334:GLU:OE2  | 1:A:335:SER:N    | 0.59     | 2.36        | 51     | 3     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:32:ARG:NH2   | 0.59     | 2.36        | 10     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CE   | 1:A:332:PHE:O    | 0.59     | 2.51        | 55     | 8     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:CG   | 0.59     | 2.81        | 34     | 9     |
| 1:A:259:LEU:HD13 | 1:A:262:LEU:HD23 | 0.59     | 1.75        | 27     | 2     |
| 1:A:230:ASN:N    | 1:A:230:ASN:OD1  | 0.59     | 2.35        | 28     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:HD22 | 0.59     | 2.33        | 39     | 1     |
| 1:A:261:GLN:O    | 1:A:261:GLN:NE2  | 0.59     | 2.35        | 41     | 1     |
| 1:A:70:ILE:HG21  | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.59     | 2.32        | 43     | 1     |
| 1:A:15:TYR:N     | 1:A:15:TYR:CD2   | 0.59     | 2.69        | 55     | 4     |
| 1:A:43:GLY:O     | 1:A:47:TYR:CB    | 0.58     | 2.51        | 39     | 45    |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.58     | 2.85        | 20     | 4     |
| 1:A:248:ILE:O    | 1:A:252:PRO:CD   | 0.58     | 2.51        | 18     | 30    |
| 1:A:335:SER:O    | 1:A:339:GLN:NE2  | 0.58     | 2.36        | 44     | 2     |
| 1:A:77:ARG:CB    | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.58     | 2.51        | 21     | 5     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:HD2   | 0.58     | 1.58        | 14     | 3     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:CG2  | 0.58     | 2.51        | 17     | 6     |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.58     | 2.20        | 21     | 4     |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:358:GLN:CD   | 0.58     | 2.70        | 29     | 2     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:CB   | 0.58     | 2.51        | 42     | 1     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:67:LEU:N     | 0.58     | 2.36        | 49     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.58     | 2.71        | 55     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:CG   | 0.58     | 2.52        | 54     | 7     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:CB   | 0.58     | 2.50        | 29     | 17    |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:251:ASN:O    | 0.58     | 2.35        | 49     | 14    |
| 1:A:319:GLN:O    | 1:A:322:GLU:CG   | 0.58     | 2.51        | 41     | 9     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:357:SER:CB   | 0.58     | 2.51        | 47     | 23    |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:232:LEU:CD2  | 0.58     | 2.51        | 41     | 5     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.58     | 2.36        | 36     | 5     |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.58     | 1.75        | 55     | 2     |
| 1:A:336:LEU:CD2  | 1:A:355:LEU:HD22 | 0.58     | 2.28        | 9      | 1     |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.58     | 2.36        | 13     | 11    |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:246:GLN:NE2  | 0.58     | 2.36        | 44     | 3     |
| 1:A:277:GLN:CG   | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.58     | 2.28        | 28     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:284:LEU:HG   | 0.58     | 2.14        | 45     | 1     |
| 1:A:19:THR:O     | 1:A:23:LEU:CB    | 0.58     | 2.52        | 1      | 9     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:266:ASN:ND2  | 0.58     | 2.36        | 1      | 1     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.58     | 2.36        | 45     | 7     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:314:ILE:CG2  | 0.58     | 2.51        | 45     | 4     |
| 1:A:47:TYR:CD2   | 1:A:47:TYR:C     | 0.58     | 2.78        | 30     | 3     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:CD   | 0.58     | 2.52        | 54     | 8     |
| 1:A:35:PRO:CB    | 1:A:357:SER:OG   | 0.58     | 2.51        | 21     | 11    |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:OD1  | 0.58     | 2.22        | 36     | 4     |
| 1:A:41:ASN:HB2   | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.58     | 1.73        | 9      | 7     |
| 1:A:321:LYS:HZ2  | 1:A:325:GLU:HG3  | 0.58     | 1.58        | 38     | 2     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:CD2  | 0.58     | 2.84        | 47     | 2     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:246:GLN:CG   | 0.58     | 2.51        | 19     | 1     |
| 1:A:64:LEU:CD2   | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.58     | 2.81        | 21     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.58     | 2.85        | 25     | 1     |
| 1:A:42:LEU:C     | 1:A:42:LEU:HD12  | 0.58     | 2.22        | 53     | 2     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.58     | 2.52        | 41     | 1     |
| 1:A:252:PRO:O    | 1:A:256:PRO:CD   | 0.58     | 2.52        | 55     | 3     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.58     | 2.35        | 54     | 2     |
| 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:269:LEU:CD2  | 0.58     | 2.29        | 20     | 5     |
| 1:A:328:LYS:CA   | 1:A:332:PHE:O    | 0.58     | 2.52        | 46     | 6     |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.58     | 1.75        | 22     | 4     |
| 1:A:25:GLU:C     | 1:A:25:GLU:CD    | 0.58     | 2.71        | 20     | 2     |
| 1:A:70:ILE:HD13  | 1:A:70:ILE:N     | 0.58     | 2.12        | 32     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CD2   | 1:A:57:VAL:HG11  | 0.58     | 2.32        | 39     | 2     |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:356:LEU:CD1  | 0.58     | 2.51        | 47     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CD   | 1:A:332:PHE:O    | 0.58     | 2.51        | 5      | 12    |
| 1:A:238:GLN:CD   | 1:A:238:GLN:N    | 0.58     | 2.61        | 26     | 5     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:NH1  | 0.58     | 2.36        | 2      | 1     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:235:LEU:CB   | 0.58     | 2.52        | 17     | 23    |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:21:GLU:CG    | 0.58     | 2.52        | 28     | 3     |
| 1:A:267:PRO:O    | 1:A:271:GLN:NE2  | 0.58     | 2.36        | 12     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:CD2  | 0.58     | 2.34        | 33     | 4     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:325:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.58     | 2.46        | 24     | 2     |
| 1:A:314:ILE:CD1  | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.58     | 2.29        | 45     | 1     |
| 1:A:35:PRO:CG    | 1:A:357:SER:OG   | 0.58     | 2.51        | 47     | 1     |
| 1:A:237:ASP:OD2  | 1:A:238:GLN:N    | 0.58     | 2.35        | 53     | 1     |
| 1:A:65:GLN:CG    | 1:A:274:SER:O    | 0.58     | 2.52        | 20     | 2     |
| 1:A:333:PRO:O    | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.58     | 2.52        | 38     | 5     |
| 1:A:240:GLN:HA   | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.58     | 1.98        | 20     | 15    |
| 1:A:358:GLN:HB3  | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.58     | 2.34        | 26     | 16    |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:CB   | 0.58     | 2.52        | 33     | 7     |
| 1:A:269:LEU:CD2  | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.58     | 2.27        | 45     | 5     |
| 1:A:71:HIS:ND1   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.58     | 2.50        | 55     | 2     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:CD   | 0.58     | 2.52        | 1      | 13    |
| 1:A:19:THR:OG1   | 1:A:61:ILE:CD1   | 0.58     | 2.52        | 3      | 6     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.58     | 1.97        | 15     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:CE   | 0.58     | 2.52        | 18     | 3     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:272:GLN:CG   | 0.58     | 2.52        | 28     | 4     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.58     | 2.28        | 31     | 1     |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:51:GLY:CA    | 0.58     | 2.52        | 24     | 50    |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:354:PHE:HB2  | 0.58     | 2.34        | 28     | 46    |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:358:GLN:CG   | 0.58     | 2.52        | 46     | 7     |
| 1:A:358:GLN:HB2  | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.58     | 2.33        | 16     | 5     |
| 1:A:68:LEU:O     | 1:A:71:HIS:CB    | 0.58     | 2.52        | 29     | 7     |
| 1:A:327:LEU:HD12 | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.58     | 2.25        | 49     | 3     |
| 1:A:272:GLN:N    | 1:A:272:GLN:CD   | 0.58     | 2.62        | 48     | 6     |
| 1:A:65:GLN:NE2   | 1:A:275:ARG:O    | 0.58     | 2.36        | 28     | 4     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.58     | 2.56        | 24     | 1     |
| 1:A:285:ASN:C    | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.58     | 2.61        | 39     | 2     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:CA   | 0.58     | 2.51        | 42     | 1     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:323:ALA:HB3  | 0.58     | 1.99        | 9      | 19    |
| 1:A:348:GLU:CD   | 1:A:348:GLU:C    | 0.58     | 2.72        | 1      | 2     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:48:GLU:CG    | 0.58     | 2.52        | 48     | 5     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:344:CYS:N    | 0.58     | 2.36        | 32     | 6     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.58     | 1.74        | 21     | 3     |
| 1:A:275:ARG:O    | 1:A:276:HIS:ND1  | 0.58     | 2.37        | 6      | 4     |
| 1:A:320:GLU:CD   | 1:A:341:TYR:CE2  | 0.58     | 2.81        | 28     | 2     |
| 1:A:339:GLN:O    | 1:A:343:ALA:CB   | 0.58     | 2.52        | 11     | 4     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:283:MET:O    | 0.58     | 2.51        | 12     | 5     |
| 1:A:319:GLN:NE2  | 1:A:320:GLU:H    | 0.58     | 1.96        | 14     | 2     |
| 1:A:31:VAL:HG13  | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.58     | 1.75        | 17     | 1     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.58     | 2.87        | 44     | 2     |
| 1:A:332:PHE:N    | 1:A:332:PHE:CD2  | 0.58     | 2.71        | 32     | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.58     | 2.37        | 34     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:259:LEU:CD2  | 0.58     | 2.82        | 38     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CG   | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.58     | 2.82        | 53     | 2     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:CB   | 0.58     | 2.52        | 46     | 6     |
| 1:A:359:ASN:ND2  | 1:A:360:PHE:N    | 0.58     | 2.52        | 48     | 7     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:HE2  | 0.58     | 1.99        | 18     | 2     |
| 1:A:15:TYR:CD1   | 1:A:19:THR:OG1   | 0.58     | 2.51        | 10     | 1     |
| 1:A:64:LEU:O     | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.58     | 2.52        | 10     | 3     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:CD2   | 0.58     | 2.34        | 51     | 5     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.58     | 2.52        | 31     | 1     |
| 1:A:314:ILE:CD1  | 1:A:316:VAL:O    | 0.58     | 2.50        | 50     | 2     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:N    | 0.57     | 2.37        | 15     | 14    |
| 1:A:75:GLY:CA    | 1:A:252:PRO:CB   | 0.57     | 2.81        | 15     | 18    |
| 1:A:326:ARG:CD   | 1:A:326:ARG:N    | 0.57     | 2.65        | 4      | 2     |
| 1:A:317:THR:CB   | 1:A:318:PRO:HD2  | 0.57     | 2.28        | 50     | 18    |
| 1:A:328:LYS:HA   | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.57     | 1.76        | 47     | 3     |
| 1:A:27:LYS:HD3   | 1:A:31:VAL:HG21  | 0.57     | 1.75        | 26     | 2     |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:60:ILE:HG23  | 0.57     | 1.99        | 37     | 1     |
| 1:A:354:PHE:CG   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.57     | 2.72        | 48     | 1     |
| 1:A:287:PRO:O    | 1:A:288:PRO:O    | 0.57     | 2.23        | 41     | 11    |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:232:LEU:CG   | 0.57     | 2.53        | 36     | 5     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:316:VAL:N    | 0.57     | 2.62        | 13     | 27    |
| 1:A:255:LEU:HD13 | 1:A:255:LEU:O    | 0.57     | 1.99        | 4      | 7     |
| 1:A:23:LEU:HD13  | 1:A:61:ILE:HG13  | 0.57     | 1.75        | 22     | 3     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:NE2  | 0.57     | 2.35        | 35     | 3     |
| 1:A:70:ILE:O     | 1:A:74:ILE:HD13  | 0.57     | 1.99        | 33     | 3     |
| 1:A:327:LEU:HD21 | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.57     | 1.99        | 14     | 2     |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:GLN:CG   | 0.57     | 2.28        | 46     | 3     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:CG   | 0.57     | 2.52        | 22     | 2     |
| 1:A:348:GLU:CD   | 1:A:349:ASN:N    | 0.57     | 2.62        | 27     | 1     |
| 1:A:64:LEU:C     | 1:A:64:LEU:CD1   | 0.57     | 2.77        | 36     | 1     |
| 1:A:246:GLN:CD   | 1:A:246:GLN:O    | 0.57     | 2.47        | 38     | 1     |
| 1:A:77:ARG:NH1   | 1:A:78:HIS:NE2   | 0.57     | 2.52        | 33     | 3     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:76:CYS:HA    | 0.57     | 2.34        | 35     | 4     |
| 1:A:244:MET:HE2  | 1:A:248:ILE:HD11 | 0.57     | 1.75        | 22     | 1     |
| 1:A:270:LEU:O    | 1:A:270:LEU:CD1  | 0.57     | 2.52        | 31     | 2     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:CD1  | 0.57     | 2.52        | 42     | 5     |
| 1:A:348:GLU:C    | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.57     | 2.47        | 40     | 2     |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:247:VAL:HG23 | 0.57     | 1.76        | 41     | 1     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:CD   | 0.57     | 2.52        | 42     | 2     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:CB   | 0.57     | 2.52        | 45     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:17:GLU:HA    | 1:A:20:LEU:HD23  | 0.57     | 1.77        | 47     | 15    |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:CZ   | 0.57     | 2.52        | 38     | 15    |
| 1:A:262:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:HD13 | 0.57     | 1.75        | 52     | 11    |
| 1:A:342:PHE:CD2  | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.57     | 2.34        | 50     | 11    |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:343:ALA:O    | 0.57     | 2.53        | 49     | 6     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:CB   | 0.57     | 2.82        | 32     | 7     |
| 1:A:281:ILE:CG2  | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.57     | 2.68        | 15     | 2     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:351:ALA:N    | 0.57     | 2.77        | 33     | 3     |
| 1:A:16:ASN:OD1   | 1:A:17:GLU:N     | 0.57     | 2.37        | 20     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:320:GLU:CG   | 0.57     | 2.29        | 22     | 1     |
| 1:A:240:GLN:NE2  | 1:A:240:GLN:C    | 0.57     | 2.63        | 34     | 1     |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:346:LYS:NZ   | 0.57     | 2.68        | 34     | 2     |
| 1:A:38:TRP:HZ2   | 1:A:344:CYS:HG   | 0.57     | 1.41        | 43     | 1     |
| 1:A:269:LEU:HD23 | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.57     | 1.77        | 46     | 2     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:CG2   | 0.57     | 2.52        | 47     | 1     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:C     | 0.57     | 2.46        | 49     | 1     |
| 1:A:75:GLY:CA    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.57     | 2.68        | 54     | 1     |
| 1:A:276:HIS:O    | 1:A:280:PHE:CB   | 0.57     | 2.53        | 12     | 10    |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:CG1   | 0.57     | 2.52        | 3      | 6     |
| 1:A:320:GLU:OE1  | 1:A:341:TYR:CE2  | 0.57     | 2.58        | 7      | 3     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:CB    | 0.57     | 2.52        | 50     | 2     |
| 1:A:321:LYS:CB   | 1:A:324:ILE:HD12 | 0.57     | 2.29        | 23     | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:323:ALA:CA   | 0.57     | 2.52        | 23     | 2     |
| 1:A:62:ARG:CB    | 1:A:62:ARG:CZ    | 0.57     | 2.81        | 25     | 1     |
| 1:A:15:TYR:CE1   | 1:A:18:TRP:CZ3   | 0.57     | 2.92        | 33     | 1     |
| 1:A:75:GLY:O     | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.57     | 2.38        | 54     | 2     |
| 1:A:42:LEU:CD1   | 1:A:43:GLY:N     | 0.57     | 2.64        | 55     | 1     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:CG   | 0.57     | 2.52        | 1      | 2     |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CD1  | 0.57     | 2.87        | 1      | 7     |
| 1:A:342:PHE:CD1  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.57     | 2.87        | 13     | 7     |
| 1:A:358:GLN:HB2  | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.57     | 2.35        | 55     | 4     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:30:ALA:N     | 0.57     | 2.38        | 12     | 1     |
| 1:A:356:LEU:N    | 1:A:356:LEU:HD12 | 0.57     | 2.15        | 12     | 3     |
| 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:269:LEU:HD11 | 0.57     | 1.77        | 14     | 2     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:CG   | 0.57     | 2.52        | 49     | 2     |
| 1:A:65:GLN:CD    | 1:A:275:ARG:O    | 0.57     | 2.47        | 23     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.57     | 2.87        | 35     | 2     |
| 1:A:277:GLN:OE1  | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.57     | 2.52        | 28     | 2     |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:341:TYR:N    | 0.57     | 2.38        | 42     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:249:GLN:HG3  | 0.57     | 2.15        | 45     | 1     |
| 1:A:77:ARG:CG    | 1:A:77:ARG:O     | 0.57     | 2.52        | 54     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:26:LEU:N     | 0.57     | 2.38        | 45     | 14    |
| 1:A:328:LYS:O    | 1:A:330:LEU:N    | 0.57     | 2.38        | 36     | 10    |
| 1:A:328:LYS:O    | 1:A:332:PHE:O    | 0.57     | 2.23        | 26     | 20    |
| 1:A:238:GLN:O    | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.57     | 2.23        | 35     | 10    |
| 1:A:316:VAL:HG22 | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.57     | 2.34        | 9      | 1     |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CE1  | 0.57     | 2.32        | 39     | 3     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:273:ILE:HG22 | 0.57     | 2.35        | 16     | 5     |
| 1:A:286:GLU:CG   | 1:A:286:GLU:O    | 0.57     | 2.52        | 27     | 1     |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:318:PRO:HD2  | 0.57     | 2.00        | 37     | 43    |
| 1:A:254:LEU:O    | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.57     | 2.52        | 55     | 3     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:321:LYS:HD3  | 0.57     | 2.25        | 42     | 8     |
| 1:A:72:PHE:HE1   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.57     | 1.57        | 14     | 2     |
| 1:A:326:ARG:O    | 1:A:329:ALA:HB3  | 0.57     | 1.99        | 24     | 5     |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.57     | 2.23        | 20     | 6     |
| 1:A:342:PHE:CE2  | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.57     | 2.35        | 55     | 4     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:CG1   | 0.57     | 2.53        | 50     | 6     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:HB3  | 0.57     | 2.00        | 29     | 21    |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:273:ILE:HG21 | 0.57     | 2.35        | 7      | 3     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:336:LEU:CD1  | 0.57     | 2.52        | 12     | 1     |
| 1:A:50:TYR:C     | 1:A:50:TYR:CD2   | 0.57     | 2.83        | 32     | 1     |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:OE1  | 0.57     | 2.23        | 33     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HD12  | 0.57     | 2.33        | 35     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:CB   | 0.57     | 2.53        | 9      | 4     |
| 1:A:272:GLN:CA   | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.57     | 2.52        | 29     | 4     |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.57     | 2.35        | 2      | 17    |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.57     | 2.87        | 7      | 4     |
| 1:A:236:ARG:O    | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.57     | 2.23        | 35     | 5     |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.57     | 2.87        | 32     | 3     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:320:GLU:O    | 0.57     | 2.23        | 7      | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:O    | 0.57     | 2.23        | 32     | 7     |
| 1:A:77:ARG:CB    | 1:A:359:ASN:O    | 0.57     | 2.52        | 12     | 1     |
| 1:A:358:GLN:HB3  | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.57     | 2.35        | 41     | 7     |
| 1:A:70:ILE:HD12  | 1:A:70:ILE:H     | 0.57     | 1.59        | 26     | 1     |
| 1:A:63:ILE:CG2   | 1:A:343:ALA:O    | 0.57     | 2.53        | 38     | 5     |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:HD2  | 0.57     | 1.58        | 33     | 1     |
| 1:A:338:ILE:HG23 | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.57     | 2.34        | 35     | 2     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:284:LEU:HG   | 0.57     | 2.29        | 45     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG22 | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.57     | 2.29        | 52     | 1     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.56     | 2.22        | 12     | 9     |
| 1:A:231:PRO:CG   | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.56     | 2.68        | 23     | 5     |
| 1:A:18:TRP:CH2   | 1:A:22:LEU:HD22  | 0.56     | 2.35        | 27     | 5     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.56     | 2.30        | 25     | 4     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:CG    | 0.56     | 2.52        | 18     | 5     |
| 1:A:26:LEU:HD12  | 1:A:61:ILE:HG12  | 0.56     | 1.77        | 40     | 1     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.56     | 2.15        | 41     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:67:LEU:HB3   | 0.56     | 2.35        | 17     | 11    |
| 1:A:250:GLN:OE1  | 1:A:250:GLN:O    | 0.56     | 2.23        | 1      | 2     |
| 1:A:341:TYR:O    | 1:A:344:CYS:SG   | 0.56     | 2.63        | 25     | 9     |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:60:ILE:CG2   | 0.56     | 2.53        | 10     | 7     |
| 1:A:274:SER:O    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.56     | 2.39        | 6      | 2     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:354:PHE:HB3  | 0.56     | 2.34        | 41     | 8     |
| 1:A:240:GLN:CA   | 1:A:243:ASN:OD1  | 0.56     | 2.54        | 43     | 10    |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:68:LEU:CD2   | 0.56     | 2.52        | 49     | 2     |
| 1:A:30:ALA:CB    | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.56     | 2.29        | 41     | 1     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:359:ASN:CG   | 0.56     | 2.48        | 43     | 2     |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.56     | 2.35        | 10     | 19    |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:341:TYR:CB   | 0.56     | 2.31        | 33     | 7     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:49:THR:OG1   | 0.56     | 2.38        | 19     | 4     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:CG1  | 0.56     | 2.51        | 31     | 5     |
| 1:A:37:ILE:HD12  | 1:A:38:TRP:H     | 0.56     | 1.61        | 22     | 3     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:347:ASN:N    | 0.56     | 2.39        | 55     | 21    |
| 1:A:244:MET:CG   | 1:A:245:ARG:N    | 0.56     | 2.68        | 39     | 17    |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:273:ILE:HG23 | 0.56     | 2.35        | 13     | 1     |
| 1:A:74:ILE:HG21  | 1:A:360:PHE:HD2  | 0.56     | 1.59        | 14     | 1     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:HG2  | 0.56     | 2.36        | 14     | 7     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.56     | 1.99        | 17     | 1     |
| 1:A:64:LEU:HD23  | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.56     | 2.31        | 21     | 1     |
| 1:A:259:LEU:CD2  | 1:A:270:LEU:HD11 | 0.56     | 2.30        | 44     | 2     |
| 1:A:327:LEU:CB   | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.56     | 2.30        | 25     | 2     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.56     | 2.73        | 25     | 3     |
| 1:A:75:GLY:O     | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.56     | 2.24        | 27     | 3     |
| 1:A:277:GLN:CD   | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.56     | 2.26        | 28     | 1     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.56     | 2.53        | 31     | 1     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.56     | 2.84        | 40     | 3     |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:246:GLN:OE1  | 0.56     | 2.24        | 50     | 2     |
| 1:A:236:ARG:HB3  | 1:A:283:MET:HE1  | 0.56     | 1.78        | 43     | 1     |
| 1:A:354:PHE:C    | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.56     | 2.63        | 48     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:61:ILE:HD11  | 0.56     | 1.75        | 51     | 1     |
| 1:A:238:GLN:CD   | 1:A:241:PHE:CB   | 0.56     | 2.78        | 53     | 2     |
| 1:A:253:ALA:C    | 1:A:254:LEU:HD22 | 0.56     | 2.25        | 40     | 8     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:232:LEU:CG   | 0.56     | 2.54        | 34     | 8     |
| 1:A:322:GLU:CG   | 1:A:323:ALA:N    | 0.56     | 2.68        | 4      | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:73:ARG:N     | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.56     | 2.65        | 44     | 8     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:29:GLU:C     | 0.56     | 2.49        | 16     | 4     |
| 1:A:72:PHE:CZ    | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.56     | 2.34        | 10     | 3     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:HD13  | 0.56     | 2.35        | 53     | 3     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:CD   | 0.56     | 2.52        | 25     | 7     |
| 1:A:360:PHE:CD2  | 1:A:360:PHE:C    | 0.56     | 2.82        | 42     | 3     |
| 1:A:72:PHE:CD2   | 1:A:248:ILE:HD11 | 0.56     | 2.36        | 55     | 1     |
| 1:A:33:HIS:O     | 1:A:34:PHE:CD2   | 0.56     | 2.58        | 11     | 4     |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CD2  | 0.56     | 2.36        | 25     | 11    |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.56     | 2.35        | 46     | 4     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:287:PRO:C    | 0.56     | 2.63        | 19     | 3     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:240:GLN:NE2  | 0.56     | 2.39        | 14     | 1     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:315:GLN:HA   | 0.56     | 2.15        | 24     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HA    | 1:A:39:LEU:HD21  | 0.56     | 1.77        | 40     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:255:LEU:HD11 | 0.56     | 2.36        | 43     | 2     |
| 1:A:30:ALA:CB    | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.56     | 2.30        | 4      | 1     |
| 1:A:50:TYR:O     | 1:A:53:THR:OG1   | 0.56     | 2.24        | 49     | 26    |
| 1:A:67:LEU:CD1   | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.56     | 2.88        | 5      | 2     |
| 1:A:341:TYR:OH   | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.56     | 2.24        | 5      | 2     |
| 1:A:77:ARG:CB    | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.56     | 2.68        | 27     | 6     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.56     | 2.24        | 9      | 4     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:CD   | 0.56     | 2.83        | 14     | 6     |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.56     | 2.31        | 22     | 5     |
| 1:A:73:ARG:O     | 1:A:252:PRO:O    | 0.56     | 2.24        | 42     | 5     |
| 1:A:246:GLN:CD   | 1:A:246:GLN:C    | 0.56     | 2.74        | 25     | 2     |
| 1:A:350:LEU:CD1  | 1:A:350:LEU:O    | 0.56     | 2.53        | 25     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG23 | 1:A:280:PHE:CD2  | 0.56     | 2.35        | 36     | 3     |
| 1:A:251:ASN:N    | 1:A:252:PRO:CD   | 0.56     | 2.68        | 42     | 1     |
| 1:A:70:ILE:CG2   | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.56     | 2.88        | 48     | 1     |
| 1:A:270:LEU:CD1  | 1:A:270:LEU:O    | 0.56     | 2.53        | 51     | 1     |
| 1:A:238:GLN:CD   | 1:A:241:PHE:HB3  | 0.56     | 2.26        | 53     | 1     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:CD1   | 0.56     | 2.52        | 51     | 7     |
| 1:A:347:ASN:OD1  | 1:A:349:ASN:OD1  | 0.56     | 2.24        | 1      | 2     |
| 1:A:273:ILE:HG13 | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.56     | 2.35        | 45     | 2     |
| 1:A:19:THR:OG1   | 1:A:61:ILE:HD12  | 0.56     | 2.01        | 4      | 4     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:19:THR:CB    | 0.56     | 2.54        | 48     | 21    |
| 1:A:26:LEU:CD1   | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.56     | 2.54        | 30     | 2     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:O    | 0.56     | 2.24        | 34     | 6     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:21:GLU:CG    | 0.56     | 2.53        | 8      | 5     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:29:GLU:O     | 0.56     | 2.24        | 8      | 2     |
| 1:A:48:GLU:O     | 1:A:48:GLU:OE1   | 0.56     | 2.24        | 20     | 4     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:HB3  | 0.56     | 2.36        | 48     | 8     |
| 1:A:345:GLU:CA   | 1:A:345:GLU:OE1  | 0.56     | 2.51        | 17     | 1     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:OE1  | 0.56     | 2.24        | 23     | 3     |
| 1:A:345:GLU:OE1  | 1:A:345:GLU:CA   | 0.56     | 2.52        | 24     | 3     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.56     | 2.24        | 39     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CD2   | 1:A:248:ILE:HD13 | 0.56     | 2.36        | 46     | 1     |
| 1:A:14:PRO:C     | 1:A:16:ASN:N     | 0.56     | 2.63        | 26     | 38    |
| 1:A:74:ILE:N     | 1:A:74:ILE:CD1   | 0.56     | 2.69        | 29     | 11    |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:250:GLN:HB3  | 0.56     | 2.01        | 31     | 16    |
| 1:A:349:ASN:O    | 1:A:353:ASN:OD1  | 0.56     | 2.24        | 19     | 7     |
| 1:A:269:LEU:CG   | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.56     | 2.30        | 35     | 5     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:282:GLN:OE1  | 0.56     | 2.23        | 21     | 1     |
| 1:A:240:GLN:HB3  | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.56     | 1.78        | 55     | 2     |
| 1:A:245:ARG:C    | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.56     | 2.49        | 22     | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:CD2  | 0.56     | 2.49        | 30     | 3     |
| 1:A:27:LYS:C     | 1:A:27:LYS:HE2   | 0.56     | 2.26        | 31     | 1     |
| 1:A:275:ARG:NE   | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.56     | 2.74        | 38     | 1     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:21:GLU:OE1   | 0.56     | 2.24        | 46     | 1     |
| 1:A:347:ASN:OD1  | 1:A:347:ASN:O    | 0.56     | 2.23        | 47     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:61:ILE:CG1   | 0.56     | 2.31        | 51     | 1     |
| 1:A:238:GLN:NE2  | 1:A:241:PHE:HB3  | 0.56     | 2.16        | 53     | 2     |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:357:SER:OG   | 0.56     | 2.24        | 45     | 15    |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.56     | 1.59        | 14     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:CD   | 0.56     | 2.25        | 18     | 1     |
| 1:A:270:LEU:HD23 | 1:A:270:LEU:C    | 0.56     | 2.26        | 19     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HD21 | 1:A:356:LEU:HD12 | 0.56     | 1.78        | 22     | 1     |
| 1:A:273:ILE:O    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.56     | 2.24        | 24     | 3     |
| 1:A:344:CYS:CB   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.56     | 2.30        | 24     | 2     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:275:ARG:O    | 0.56     | 2.24        | 49     | 3     |
| 1:A:270:LEU:CD1  | 1:A:270:LEU:C    | 0.56     | 2.79        | 31     | 1     |
| 1:A:61:ILE:O     | 1:A:65:GLN:OE1   | 0.56     | 2.24        | 40     | 1     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:321:LYS:HD2  | 0.56     | 2.26        | 40     | 2     |
| 1:A:347:ASN:ND2  | 1:A:350:LEU:CB   | 0.56     | 2.69        | 47     | 1     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.56     | 2.24        | 55     | 5     |
| 1:A:327:LEU:CB   | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.56     | 2.84        | 31     | 2     |
| 1:A:322:GLU:OE1  | 1:A:322:GLU:O    | 0.56     | 2.23        | 21     | 1     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.56     | 2.54        | 29     | 1     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:327:LEU:HD21 | 0.56     | 2.00        | 46     | 2     |
| 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:269:LEU:HD21 | 0.56     | 1.77        | 45     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:69:PHE:O     | 0.55     | 2.59        | 5      | 4     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:22:LEU:CD1   | 0.55     | 2.52        | 41     | 3     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:60:ILE:HG22  | 0.55     | 2.02        | 3      | 5     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:C    | 0.55     | 2.84        | 54     | 2     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:358:GLN:CD   | 0.55     | 2.48        | 5      | 2     |
| 1:A:78:HIS:O     | 1:A:79:SER:CB    | 0.55     | 2.53        | 13     | 1     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.55     | 2.24        | 39     | 3     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:CD    | 0.55     | 2.54        | 39     | 2     |
| 1:A:326:ARG:HD2  | 1:A:327:LEU:HD22 | 0.55     | 1.78        | 48     | 1     |
| 1:A:20:LEU:HD11  | 1:A:54:TRP:CH2   | 0.55     | 2.36        | 39     | 4     |
| 1:A:26:LEU:C     | 1:A:26:LEU:CD1   | 0.55     | 2.76        | 28     | 7     |
| 1:A:25:GLU:OE2   | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.55     | 2.24        | 27     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:HG12 | 0.55     | 2.01        | 30     | 2     |
| 1:A:255:LEU:HG   | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.55     | 1.78        | 39     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:CD   | 0.55     | 2.49        | 53     | 1     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:323:ALA:N    | 0.55     | 2.63        | 45     | 34    |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.55     | 2.94        | 14     | 2     |
| 1:A:35:PRO:C     | 1:A:37:ILE:N     | 0.55     | 2.64        | 25     | 8     |
| 1:A:42:LEU:HD22  | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.55     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:HG23 | 0.55     | 2.01        | 21     | 4     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:CD1   | 0.55     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:328:LYS:N    | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.55     | 2.63        | 12     | 1     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:47:TYR:N     | 0.55     | 2.39        | 18     | 2     |
| 1:A:262:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:HB3  | 0.55     | 1.78        | 21     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:HG3  | 0.55     | 2.35        | 55     | 3     |
| 1:A:251:ASN:N    | 1:A:252:PRO:HD3  | 0.55     | 2.16        | 42     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CD1  | 0.55     | 2.36        | 19     | 13    |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:261:GLN:N    | 0.55     | 2.40        | 16     | 16    |
| 1:A:321:LYS:CD   | 1:A:321:LYS:O    | 0.55     | 2.55        | 35     | 6     |
| 1:A:348:GLU:OE2  | 1:A:348:GLU:O    | 0.55     | 2.24        | 6      | 1     |
| 1:A:38:TRP:CE2   | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.55     | 2.37        | 14     | 1     |
| 1:A:350:LEU:CD1  | 1:A:350:LEU:C    | 0.55     | 2.79        | 25     | 1     |
| 1:A:244:MET:C    | 1:A:248:ILE:HD12 | 0.55     | 2.26        | 52     | 2     |
| 1:A:255:LEU:N    | 1:A:256:PRO:HD2  | 0.55     | 2.16        | 53     | 51    |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.55     | 2.39        | 2      | 2     |
| 1:A:14:PRO:O     | 1:A:16:ASN:OD1   | 0.55     | 2.24        | 25     | 2     |
| 1:A:274:SER:O    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.55     | 2.24        | 11     | 1     |
| 1:A:342:PHE:CE1  | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.55     | 2.37        | 19     | 4     |
| 1:A:282:GLN:N    | 1:A:282:GLN:CD   | 0.55     | 2.64        | 23     | 2     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:70:ILE:CD1   | 0.55     | 2.55        | 26     | 1     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:58:GLU:CG    | 0.55     | 2.55        | 28     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:354:PHE:CD2  | 0.55     | 2.36        | 30     | 3     |
| 1:A:331:GLY:O    | 1:A:332:PHE:CD1  | 0.55     | 2.59        | 54     | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:258:LEU:HD22 | 0.55     | 1.78        | 52     | 2     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:20:LEU:CD2   | 0.55     | 2.55        | 21     | 9     |
| 1:A:74:ILE:N     | 1:A:74:ILE:HD12  | 0.55     | 2.17        | 49     | 6     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:N    | 0.55     | 2.39        | 13     | 5     |
| 1:A:330:LEU:CD2  | 1:A:356:LEU:HD11 | 0.55     | 2.31        | 39     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HA   | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.55     | 2.17        | 51     | 1     |
| 1:A:328:LYS:C    | 1:A:330:LEU:N    | 0.55     | 2.64        | 36     | 15    |
| 1:A:273:ILE:HG13 | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.55     | 2.37        | 2      | 4     |
| 1:A:41:ASN:CB    | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.55     | 2.85        | 27     | 13    |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:CG   | 0.55     | 2.55        | 19     | 5     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:325:GLU:CG   | 0.55     | 2.70        | 15     | 8     |
| 1:A:74:ILE:CG2   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.55     | 2.55        | 20     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HD2  | 1:A:321:LYS:C    | 0.55     | 2.27        | 31     | 3     |
| 1:A:270:LEU:HD12 | 1:A:270:LEU:O    | 0.55     | 2.02        | 27     | 1     |
| 1:A:58:GLU:O     | 1:A:62:ARG:NH1   | 0.55     | 2.38        | 38     | 1     |
| 1:A:15:TYR:CD2   | 1:A:18:TRP:CE3   | 0.55     | 2.94        | 42     | 1     |
| 1:A:259:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:HG21 | 0.55     | 1.79        | 45     | 1     |
| 1:A:28:SER:O     | 1:A:32:ARG:NH2   | 0.55     | 2.39        | 49     | 1     |
| 1:A:45:HIS:HD1   | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.55     | 2.00        | 53     | 1     |
| 1:A:74:ILE:HG22  | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.55     | 2.17        | 54     | 1     |
| 1:A:232:LEU:CD2  | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.55     | 2.90        | 35     | 4     |
| 1:A:315:GLN:HB2  | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.55     | 2.37        | 52     | 10    |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:OE2  | 0.55     | 2.24        | 4      | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:323:ALA:N    | 0.55     | 2.40        | 23     | 3     |
| 1:A:23:LEU:HD13  | 1:A:61:ILE:CG1   | 0.55     | 2.32        | 53     | 5     |
| 1:A:42:LEU:HA    | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.55     | 1.78        | 29     | 3     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.55     | 2.75        | 46     | 3     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:19:THR:OG1   | 0.55     | 2.24        | 48     | 2     |
| 1:A:315:GLN:HA   | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.55     | 2.35        | 24     | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.55     | 2.25        | 35     | 1     |
| 1:A:244:MET:SD   | 1:A:284:LEU:HD21 | 0.55     | 2.41        | 55     | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HD13 | 0.55     | 2.02        | 52     | 5     |
| 1:A:358:GLN:OE1  | 1:A:358:GLN:O    | 0.55     | 2.24        | 5      | 1     |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:346:LYS:CD   | 0.55     | 2.80        | 33     | 4     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:NE   | 0.55     | 2.40        | 24     | 5     |
| 1:A:316:VAL:HG21 | 1:A:321:LYS:CA   | 0.55     | 2.32        | 30     | 2     |
| 1:A:314:ILE:CG2  | 1:A:316:VAL:CG2  | 0.55     | 2.84        | 39     | 1     |
| 1:A:265:GLU:OE2  | 1:A:265:GLU:O    | 0.55     | 2.24        | 42     | 1     |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:346:LYS:HG2  | 0.55     | 2.27        | 13     | 17    |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:347:ASN:N    | 0.55     | 2.65        | 19     | 28    |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.55     | 1.61        | 41     | 2     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:77:ARG:HG2   | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.55     | 2.37        | 31     | 1     |
| 1:A:42:LEU:CD2   | 1:A:60:ILE:HD12  | 0.55     | 2.32        | 38     | 1     |
| 1:A:272:GLN:C    | 1:A:272:GLN:CD   | 0.55     | 2.75        | 38     | 1     |
| 1:A:20:LEU:HD21  | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.55     | 2.37        | 39     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:56:GLY:HA2   | 0.55     | 2.37        | 46     | 1     |
| 1:A:242:GLN:N    | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.54     | 2.54        | 34     | 5     |
| 1:A:69:PHE:O     | 1:A:73:ARG:CD    | 0.54     | 2.55        | 9      | 1     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:358:GLN:HE22 | 0.54     | 1.45        | 34     | 4     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:24:GLU:OE1   | 0.54     | 2.25        | 39     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:HD11 | 0.54     | 1.79        | 8      | 2     |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:241:PHE:O    | 0.54     | 2.60        | 9      | 7     |
| 1:A:244:MET:HE3  | 1:A:258:LEU:HB3  | 0.54     | 1.79        | 51     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HB1  | 1:A:348:GLU:CD   | 0.54     | 2.28        | 23     | 1     |
| 1:A:57:VAL:HG12  | 1:A:58:GLU:N     | 0.54     | 2.17        | 25     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:245:ARG:HD3  | 0.54     | 2.37        | 27     | 2     |
| 1:A:69:PHE:HE1   | 1:A:259:LEU:HD21 | 0.54     | 1.60        | 29     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD21 | 1:A:348:GLU:HA   | 0.54     | 1.80        | 47     | 1     |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:272:GLN:N    | 0.54     | 2.40        | 33     | 24    |
| 1:A:54:TRP:CH2   | 1:A:57:VAL:HG11  | 0.54     | 2.37        | 44     | 9     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:26:LEU:CD1   | 0.54     | 2.52        | 23     | 4     |
| 1:A:280:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.54     | 2.37        | 28     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:350:LEU:O    | 0.54     | 2.61        | 29     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.54     | 2.91        | 45     | 2     |
| 1:A:345:GLU:OE2  | 1:A:345:GLU:O    | 0.54     | 2.25        | 44     | 3     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:30:ALA:CB    | 0.54     | 2.54        | 54     | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:CD1   | 0.54     | 2.31        | 55     | 1     |
| 1:A:240:GLN:CB   | 1:A:262:LEU:CD1  | 0.54     | 2.85        | 55     | 1     |
| 1:A:320:GLU:N    | 1:A:320:GLU:CD   | 0.54     | 2.65        | 1      | 3     |
| 1:A:33:HIS:HA    | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.54     | 2.38        | 35     | 27    |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.54     | 2.27        | 23     | 6     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:HB2  | 0.54     | 1.79        | 11     | 11    |
| 1:A:27:LYS:HB3   | 1:A:64:LEU:HD11  | 0.54     | 1.78        | 7      | 1     |
| 1:A:77:ARG:HB3   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.54     | 2.27        | 7      | 9     |
| 1:A:346:LYS:N    | 1:A:346:LYS:HD2  | 0.54     | 2.17        | 48     | 17    |
| 1:A:273:ILE:CD1  | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.54     | 2.90        | 22     | 4     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:33:HIS:NE2   | 0.54     | 2.41        | 30     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:245:ARG:HG3  | 0.54     | 2.38        | 41     | 1     |
| 1:A:347:ASN:ND2  | 1:A:350:LEU:HB2  | 0.54     | 2.18        | 47     | 1     |
| 1:A:20:LEU:HD22  | 1:A:20:LEU:H     | 0.54     | 1.63        | 16     | 6     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:241:PHE:C    | 0.54     | 2.83        | 35     | 5     |
| 1:A:70:ILE:HG21  | 1:A:354:PHE:HE2  | 0.54     | 1.61        | 4      | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:344:CYS:O    | 0.54     | 2.65        | 40     | 6     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:49:THR:HG1   | 0.54     | 2.21        | 19     | 3     |
| 1:A:263:GLY:HA2  | 1:A:270:LEU:HD23 | 0.54     | 1.79        | 8      | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD22  | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.54     | 2.38        | 24     | 1     |
| 1:A:315:GLN:N    | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.54     | 2.75        | 24     | 1     |
| 1:A:33:HIS:NE2   | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.54     | 2.17        | 33     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HD12  | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.54     | 1.77        | 37     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HG13  | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.54     | 1.79        | 46     | 1     |
| 1:A:61:ILE:CG2   | 1:A:62:ARG:N     | 0.54     | 2.69        | 51     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CG    | 1:A:56:GLY:HA2   | 0.54     | 2.38        | 53     | 1     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:237:ASP:N    | 0.54     | 2.64        | 51     | 13    |
| 1:A:28:SER:OG    | 1:A:29:GLU:N     | 0.54     | 2.40        | 44     | 2     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:326:ARG:CB   | 0.54     | 2.56        | 10     | 2     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:CB   | 0.54     | 2.56        | 14     | 3     |
| 1:A:31:VAL:CG2   | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.54     | 2.86        | 39     | 3     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.54     | 2.25        | 10     | 2     |
| 1:A:326:ARG:O    | 1:A:329:ALA:N    | 0.54     | 2.41        | 42     | 7     |
| 1:A:315:GLN:HB2  | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.54     | 2.37        | 32     | 4     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.54     | 2.26        | 14     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD13  | 1:A:278:GLU:CD   | 0.54     | 2.28        | 31     | 2     |
| 1:A:358:GLN:N    | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.54     | 2.76        | 18     | 3     |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.54     | 2.37        | 42     | 3     |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:60:ILE:CG2   | 0.54     | 2.56        | 23     | 3     |
| 1:A:238:GLN:N    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.54     | 2.55        | 26     | 1     |
| 1:A:26:LEU:CD1   | 1:A:278:GLU:CD   | 0.54     | 2.81        | 30     | 2     |
| 1:A:232:LEU:HD11 | 1:A:283:MET:SD   | 0.54     | 2.42        | 45     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.54     | 1.79        | 51     | 1     |
| 1:A:58:GLU:CD    | 1:A:58:GLU:O     | 0.54     | 2.50        | 52     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HG3   | 1:A:357:SER:O    | 0.54     | 2.03        | 50     | 26    |
| 1:A:339:GLN:O    | 1:A:343:ALA:N    | 0.54     | 2.39        | 19     | 9     |
| 1:A:358:GLN:OE1  | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.54     | 2.26        | 11     | 2     |
| 1:A:15:TYR:N     | 1:A:15:TYR:CD1   | 0.54     | 2.75        | 13     | 3     |
| 1:A:60:ILE:HG22  | 1:A:61:ILE:N     | 0.54     | 2.18        | 7      | 3     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:HD22  | 0.54     | 2.38        | 19     | 2     |
| 1:A:69:PHE:N     | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.54     | 2.55        | 17     | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:33:HIS:CD2   | 0.54     | 2.61        | 31     | 2     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.54     | 2.26        | 37     | 2     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:56:GLY:CA    | 0.54     | 2.91        | 32     | 1     |
| 1:A:29:GLU:CB    | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.54     | 2.55        | 39     | 2     |
| 1:A:278:GLU:C    | 1:A:278:GLU:CD   | 0.54     | 2.75        | 42     | 1     |
| 1:A:330:LEU:N    | 1:A:330:LEU:HD23 | 0.54     | 2.18        | 1      | 5     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:319:GLN:O    | 1:A:322:GLU:CD   | 0.54     | 2.51        | 2      | 1     |
| 1:A:319:GLN:C    | 1:A:322:GLU:HG2  | 0.54     | 2.28        | 2      | 3     |
| 1:A:273:ILE:HA   | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.54     | 2.37        | 46     | 12    |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:48:GLU:N     | 0.54     | 2.40        | 18     | 7     |
| 1:A:48:GLU:CG    | 1:A:49:THR:N     | 0.54     | 2.71        | 19     | 2     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:OE1  | 0.54     | 2.26        | 6      | 2     |
| 1:A:317:THR:HB   | 1:A:319:GLN:CD   | 0.54     | 2.28        | 45     | 2     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:CD1  | 0.54     | 2.79        | 39     | 5     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:CG   | 0.54     | 2.85        | 16     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:HG    | 0.54     | 2.38        | 22     | 6     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.54     | 2.38        | 35     | 2     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:25:GLU:N     | 0.54     | 2.41        | 45     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:64:LEU:HD22  | 0.54     | 1.79        | 50     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CA   | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.54     | 2.71        | 51     | 1     |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:21:GLU:N     | 0.54     | 2.41        | 38     | 31    |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:319:GLN:HG2  | 0.54     | 2.03        | 13     | 30    |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:HB2  | 0.54     | 2.33        | 47     | 26    |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:351:ALA:HA   | 0.54     | 2.43        | 33     | 4     |
| 1:A:248:ILE:HG12 | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.54     | 1.78        | 8      | 1     |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:262:LEU:N    | 0.54     | 2.41        | 10     | 1     |
| 1:A:78:HIS:NE2   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.54     | 2.40        | 14     | 2     |
| 1:A:20:LEU:HD21  | 1:A:54:TRP:HH2   | 0.54     | 1.63        | 50     | 4     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:233:GLU:CB   | 0.54     | 2.71        | 39     | 2     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.54     | 2.18        | 43     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HG    | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.54     | 1.78        | 35     | 3     |
| 1:A:318:PRO:HD2  | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.54     | 2.18        | 50     | 4     |
| 1:A:19:THR:HG23  | 1:A:61:ILE:HD11  | 0.54     | 1.79        | 19     | 2     |
| 1:A:342:PHE:CZ   | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.54     | 2.38        | 24     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:CD1   | 0.54     | 2.90        | 30     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG21 | 1:A:324:ILE:CD1  | 0.54     | 2.32        | 32     | 2     |
| 1:A:258:LEU:N    | 1:A:258:LEU:CD2  | 0.54     | 2.71        | 43     | 2     |
| 1:A:66:GLN:CD    | 1:A:66:GLN:C     | 0.54     | 2.76        | 47     | 1     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.54     | 2.17        | 53     | 1     |
| 1:A:236:ARG:O    | 1:A:242:GLN:CG   | 0.54     | 2.57        | 55     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:CB   | 0.53     | 2.56        | 1      | 1     |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:355:LEU:CB   | 0.53     | 2.56        | 52     | 5     |
| 1:A:316:VAL:HG12 | 1:A:320:GLU:HG2  | 0.53     | 1.80        | 22     | 2     |
| 1:A:19:THR:O     | 1:A:23:LEU:N     | 0.53     | 2.41        | 9      | 1     |
| 1:A:77:ARG:CG    | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.53     | 2.56        | 10     | 1     |
| 1:A:57:VAL:CG1   | 1:A:58:GLU:N     | 0.53     | 2.71        | 41     | 5     |
| 1:A:360:PHE:CD2  | 1:A:360:PHE:N    | 0.53     | 2.75        | 45     | 3     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:47:TYR:CE1   | 1:A:51:GLY:O     | 0.53     | 2.61        | 21     | 2     |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:42:LEU:HD22  | 0.53     | 2.03        | 26     | 2     |
| 1:A:314:ILE:CG1  | 1:A:315:GLN:N    | 0.53     | 2.72        | 43     | 3     |
| 1:A:42:LEU:HD13  | 1:A:42:LEU:O     | 0.53     | 2.03        | 36     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HD22 | 1:A:356:LEU:HD11 | 0.53     | 1.81        | 54     | 1     |
| 1:A:280:PHE:C    | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.53     | 2.28        | 33     | 40    |
| 1:A:342:PHE:CD2  | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.53     | 2.38        | 3      | 4     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:276:HIS:N    | 0.53     | 2.41        | 47     | 10    |
| 1:A:332:PHE:CD2  | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.53     | 2.38        | 19     | 2     |
| 1:A:278:GLU:N    | 1:A:278:GLU:CD   | 0.53     | 2.65        | 26     | 2     |
| 1:A:60:ILE:C     | 1:A:60:ILE:CD1   | 0.53     | 2.81        | 37     | 3     |
| 1:A:358:GLN:NE2  | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.53     | 2.42        | 34     | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HD22 | 0.53     | 2.03        | 42     | 4     |
| 1:A:30:ALA:O     | 1:A:33:HIS:N     | 0.53     | 2.41        | 36     | 15    |
| 1:A:323:ALA:HB1  | 1:A:348:GLU:HG3  | 0.53     | 1.80        | 4      | 1     |
| 1:A:336:LEU:C    | 1:A:336:LEU:HD23 | 0.53     | 2.29        | 19     | 4     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:354:PHE:CB   | 0.53     | 2.71        | 22     | 1     |
| 1:A:68:LEU:HD22  | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.53     | 2.03        | 26     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD13  | 1:A:345:GLU:CD   | 0.53     | 2.29        | 29     | 1     |
| 1:A:259:LEU:CD1  | 1:A:270:LEU:CD2  | 0.53     | 2.84        | 35     | 1     |
| 1:A:66:GLN:C     | 1:A:66:GLN:CD    | 0.53     | 2.75        | 44     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CB   | 1:A:256:PRO:CD   | 0.53     | 2.86        | 36     | 7     |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:260:GLN:N    | 0.53     | 2.41        | 54     | 6     |
| 1:A:358:GLN:NE2  | 1:A:358:GLN:CA   | 0.53     | 2.71        | 49     | 8     |
| 1:A:19:THR:HG23  | 1:A:20:LEU:HD13  | 0.53     | 1.79        | 4      | 15    |
| 1:A:278:GLU:C    | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.53     | 2.66        | 30     | 6     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:HG3  | 0.53     | 2.04        | 42     | 21    |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:50:TYR:C     | 0.53     | 2.87        | 46     | 2     |
| 1:A:317:THR:HG22 | 1:A:318:PRO:HD2  | 0.53     | 1.81        | 42     | 3     |
| 1:A:68:LEU:O     | 1:A:71:HIS:N     | 0.53     | 2.40        | 15     | 4     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:283:MET:N    | 0.53     | 2.41        | 23     | 3     |
| 1:A:32:ARG:CG    | 1:A:33:HIS:N     | 0.53     | 2.71        | 52     | 2     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:56:GLY:HA2   | 0.53     | 2.38        | 32     | 1     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:315:GLN:CD   | 0.53     | 2.51        | 35     | 1     |
| 1:A:266:ASN:CG   | 1:A:269:LEU:HB3  | 0.53     | 2.27        | 53     | 2     |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:HG2  | 0.53     | 2.03        | 32     | 6     |
| 1:A:322:GLU:HG3  | 1:A:323:ALA:N    | 0.53     | 2.19        | 4      | 2     |
| 1:A:35:PRO:O     | 1:A:37:ILE:N     | 0.53     | 2.42        | 30     | 7     |
| 1:A:77:ARG:NE    | 1:A:78:HIS:CD2   | 0.53     | 2.76        | 6      | 1     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:26:LEU:CB    | 0.53     | 2.56        | 7      | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:HD2  | 0.53     | 2.39        | 19     | 5     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:HD12  | 0.53     | 1.79        | 9      | 1     |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:67:LEU:CB    | 0.53     | 2.92        | 17     | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:33:HIS:NE2   | 0.53     | 2.41        | 29     | 1     |
| 1:A:285:ASN:ND2  | 1:A:286:GLU:N    | 0.53     | 2.56        | 39     | 2     |
| 1:A:356:LEU:H    | 1:A:356:LEU:HD22 | 0.53     | 1.64        | 34     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD22  | 1:A:65:GLN:NE2   | 0.53     | 2.18        | 37     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:74:ILE:N     | 0.53     | 2.19        | 39     | 1     |
| 1:A:74:ILE:HD11  | 1:A:336:LEU:CD1  | 0.53     | 2.34        | 44     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:67:LEU:HB3   | 0.53     | 2.38        | 43     | 3     |
| 1:A:241:PHE:CG   | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.53     | 2.77        | 52     | 4     |
| 1:A:232:LEU:HD23 | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.53     | 2.39        | 8      | 1     |
| 1:A:49:THR:CG2   | 1:A:50:TYR:N     | 0.53     | 2.72        | 47     | 5     |
| 1:A:275:ARG:HD3  | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.53     | 2.38        | 12     | 4     |
| 1:A:319:GLN:NE2  | 1:A:319:GLN:N    | 0.53     | 2.57        | 52     | 2     |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:319:GLN:HG3  | 0.53     | 2.04        | 14     | 3     |
| 1:A:315:GLN:HG2  | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.53     | 2.38        | 17     | 1     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:28:SER:CB    | 0.53     | 2.57        | 18     | 5     |
| 1:A:318:PRO:HA   | 1:A:321:LYS:CE   | 0.53     | 2.33        | 40     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:CD2  | 0.53     | 2.80        | 6      | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG23  | 1:A:50:TYR:CE2   | 0.53     | 2.39        | 11     | 1     |
| 1:A:324:ILE:N    | 1:A:324:ILE:HD12 | 0.53     | 2.19        | 35     | 7     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:CG1  | 0.53     | 2.50        | 20     | 1     |
| 1:A:341:TYR:HA   | 1:A:344:CYS:SG   | 0.53     | 2.43        | 24     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:346:LYS:HZ1  | 0.53     | 1.64        | 50     | 1     |
| 1:A:73:ARG:NH2   | 1:A:339:GLN:OE1  | 0.53     | 2.42        | 52     | 1     |
| 1:A:254:LEU:C    | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.53     | 2.76        | 54     | 1     |
| 1:A:342:PHE:CE1  | 1:A:346:LYS:HG3  | 0.53     | 2.39        | 2      | 2     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:345:GLU:OE1  | 0.53     | 2.27        | 5      | 1     |
| 1:A:272:GLN:HB3  | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.53     | 2.39        | 34     | 18    |
| 1:A:68:LEU:CB    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.53     | 2.57        | 8      | 1     |
| 1:A:50:TYR:CZ    | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.53     | 2.39        | 32     | 4     |
| 1:A:240:GLN:C    | 1:A:244:MET:HE3  | 0.53     | 2.28        | 20     | 1     |
| 1:A:326:ARG:O    | 1:A:329:ALA:CB   | 0.53     | 2.56        | 24     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD12 | 1:A:284:LEU:HD21 | 0.53     | 1.81        | 35     | 3     |
| 1:A:66:GLN:O     | 1:A:66:GLN:OE1   | 0.53     | 2.27        | 44     | 1     |
| 1:A:74:ILE:CD1   | 1:A:336:LEU:HD11 | 0.53     | 2.32        | 54     | 4     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:CB   | 0.53     | 2.57        | 41     | 27    |
| 1:A:16:ASN:HA    | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.53     | 2.39        | 6      | 25    |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:334:GLU:N    | 0.53     | 2.18        | 23     | 14    |
| 1:A:342:PHE:CE2  | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.53     | 2.39        | 36     | 5     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:26:LEU:N     | 0.53     | 2.42        | 14     | 4     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:339:GLN:O    | 1:A:343:ALA:HB2  | 0.53     | 2.04        | 28     | 2     |
| 1:A:233:GLU:HG2  | 1:A:234:PHE:N    | 0.53     | 2.19        | 43     | 2     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.53     | 2.72        | 20     | 1     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:316:VAL:HG12 | 0.53     | 2.04        | 24     | 1     |
| 1:A:63:ILE:CG1   | 1:A:343:ALA:O    | 0.53     | 2.56        | 30     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HB1  | 1:A:348:GLU:CG   | 0.53     | 2.34        | 37     | 1     |
| 1:A:254:LEU:O    | 1:A:255:LEU:C    | 0.53     | 2.51        | 42     | 1     |
| 1:A:77:ARG:N     | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.53     | 2.42        | 48     | 2     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:356:LEU:CD1  | 0.53     | 2.78        | 47     | 1     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:238:GLN:C    | 0.53     | 2.51        | 53     | 1     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:HB2  | 0.53     | 2.03        | 44     | 17    |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:286:GLU:O    | 0.53     | 2.42        | 19     | 6     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:HG2  | 0.53     | 2.04        | 12     | 22    |
| 1:A:315:GLN:HG2  | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.53     | 2.39        | 42     | 10    |
| 1:A:38:TRP:CG    | 1:A:354:PHE:HB2  | 0.53     | 2.39        | 41     | 8     |
| 1:A:42:LEU:CD2   | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.53     | 2.34        | 8      | 1     |
| 1:A:322:GLU:CB   | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.53     | 2.72        | 14     | 1     |
| 1:A:333:PRO:CD   | 1:A:336:LEU:HD13 | 0.53     | 2.34        | 14     | 3     |
| 1:A:255:LEU:HD23 | 1:A:259:LEU:HB2  | 0.53     | 1.80        | 16     | 1     |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:344:CYS:O    | 0.53     | 2.43        | 21     | 2     |
| 1:A:258:LEU:C    | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.53     | 2.74        | 26     | 1     |
| 1:A:30:ALA:HA    | 1:A:68:LEU:HD11  | 0.53     | 1.80        | 27     | 1     |
| 1:A:47:TYR:CE2   | 1:A:52:ASP:OD1   | 0.53     | 2.62        | 44     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HE2   | 1:A:64:LEU:HD13  | 0.53     | 1.64        | 46     | 1     |
| 1:A:26:LEU:CD2   | 1:A:64:LEU:HD22  | 0.53     | 2.34        | 50     | 1     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:275:ARG:N    | 0.52     | 2.42        | 24     | 15    |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.52     | 2.40        | 22     | 25    |
| 1:A:269:LEU:HD23 | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.52     | 2.35        | 45     | 4     |
| 1:A:46:ILE:HG23  | 1:A:50:TYR:OH    | 0.52     | 2.04        | 32     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CD2  | 1:A:332:PHE:N    | 0.52     | 2.77        | 15     | 2     |
| 1:A:20:LEU:N     | 1:A:20:LEU:HD13  | 0.52     | 2.18        | 19     | 3     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:243:ASN:ND2  | 0.52     | 2.42        | 21     | 2     |
| 1:A:26:LEU:CD1   | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.52     | 2.57        | 31     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CB   | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.52     | 2.81        | 54     | 2     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.52     | 2.97        | 49     | 1     |
| 1:A:238:GLN:NE2  | 1:A:238:GLN:H    | 0.52     | 2.02        | 51     | 2     |
| 1:A:65:GLN:CB    | 1:A:274:SER:O    | 0.52     | 2.57        | 52     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:327:LEU:H    | 0.52     | 1.65        | 5      | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:HB2  | 0.52     | 2.39        | 21     | 7     |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:340:ALA:N    | 0.52     | 2.42        | 41     | 8     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.52     | 2.03        | 18     | 7     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:347:ASN:O    | 1:A:350:LEU:N    | 0.52     | 2.42        | 13     | 5     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:HG2  | 0.52     | 1.79        | 10     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG12 | 1:A:280:PHE:CG   | 0.52     | 2.38        | 12     | 9     |
| 1:A:248:ILE:HG13 | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.52     | 2.35        | 15     | 1     |
| 1:A:254:LEU:HD12 | 1:A:255:LEU:N    | 0.52     | 2.18        | 53     | 3     |
| 1:A:58:GLU:OE2   | 1:A:59:ALA:N     | 0.52     | 2.42        | 19     | 2     |
| 1:A:249:GLN:HG2  | 1:A:284:LEU:O    | 0.52     | 2.05        | 22     | 3     |
| 1:A:235:LEU:CG   | 1:A:240:GLN:OE1  | 0.52     | 2.57        | 25     | 1     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.52     | 2.19        | 48     | 4     |
| 1:A:327:LEU:HB3  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.52     | 2.35        | 31     | 1     |
| 1:A:77:ARG:C     | 1:A:77:ARG:HD3   | 0.52     | 2.29        | 33     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HG22 | 1:A:249:GLN:N    | 0.52     | 2.19        | 46     | 2     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:CB   | 0.52     | 2.57        | 49     | 2     |
| 1:A:322:GLU:HB2  | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.52     | 2.18        | 14     | 8     |
| 1:A:319:GLN:O    | 1:A:322:GLU:HG2  | 0.52     | 2.05        | 26     | 5     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:322:GLU:C    | 0.52     | 2.52        | 24     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.52     | 2.57        | 7      | 4     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:HB3  | 0.52     | 2.04        | 49     | 10    |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.52     | 2.40        | 25     | 1     |
| 1:A:339:GLN:CG   | 1:A:340:ALA:N    | 0.52     | 2.73        | 36     | 6     |
| 1:A:255:LEU:HA   | 1:A:258:LEU:HD12 | 0.52     | 1.81        | 37     | 4     |
| 1:A:269:LEU:C    | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.52     | 2.29        | 27     | 1     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:350:LEU:CD2  | 0.52     | 2.97        | 33     | 1     |
| 1:A:66:GLN:C     | 1:A:66:GLN:OE1   | 0.52     | 2.51        | 44     | 1     |
| 1:A:272:GLN:N    | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.52     | 2.42        | 48     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HA   | 1:A:330:LEU:HD13 | 0.52     | 1.81        | 53     | 1     |
| 1:A:19:THR:HG21  | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.52     | 2.40        | 25     | 12    |
| 1:A:272:GLN:HA   | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.52     | 2.40        | 2      | 3     |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:51:GLY:O     | 0.52     | 2.28        | 19     | 3     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:251:ASN:N    | 0.52     | 2.43        | 16     | 2     |
| 1:A:18:TRP:NE1   | 1:A:22:LEU:CD1   | 0.52     | 2.71        | 7      | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:O    | 0.52     | 2.26        | 13     | 1     |
| 1:A:235:LEU:CD1  | 1:A:269:LEU:HD21 | 0.52     | 2.20        | 23     | 1     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:CB   | 0.52     | 2.58        | 48     | 5     |
| 1:A:314:ILE:HA   | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.52     | 1.82        | 38     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.52     | 2.34        | 48     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HG2  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.52     | 2.35        | 53     | 4     |
| 1:A:324:ILE:HG22 | 1:A:325:GLU:N    | 0.52     | 2.18        | 2      | 3     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:283:MET:HE2  | 0.52     | 1.65        | 11     | 1     |
| 1:A:268:GLN:C    | 1:A:268:GLN:CD   | 0.52     | 2.78        | 11     | 1     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:N    | 0.52     | 2.42        | 26     | 6     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:30:ALA:HB2   | 1:A:68:LEU:CG    | 0.52     | 2.35        | 20     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG12 | 1:A:341:TYR:CD1  | 0.52     | 2.40        | 43     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:346:LYS:CE   | 0.52     | 2.35        | 50     | 1     |
| 1:A:286:GLU:CB   | 1:A:287:PRO:CD   | 0.52     | 2.87        | 51     | 19    |
| 1:A:321:LYS:HE2  | 1:A:322:GLU:N    | 0.52     | 2.19        | 25     | 4     |
| 1:A:248:ILE:HG12 | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.52     | 2.35        | 40     | 2     |
| 1:A:244:MET:HG3  | 1:A:245:ARG:N    | 0.52     | 2.19        | 39     | 6     |
| 1:A:77:ARG:NH1   | 1:A:78:HIS:CD2   | 0.52     | 2.78        | 15     | 1     |
| 1:A:331:GLY:C    | 1:A:332:PHE:CG   | 0.52     | 2.88        | 28     | 5     |
| 1:A:354:PHE:CE2  | 1:A:358:GLN:HG2  | 0.52     | 2.40        | 33     | 5     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:20:LEU:HD22  | 0.52     | 2.04        | 21     | 6     |
| 1:A:18:TRP:CE2   | 1:A:22:LEU:HD22  | 0.52     | 2.40        | 50     | 1     |
| 1:A:342:PHE:CD1  | 1:A:346:LYS:HG3  | 0.52     | 2.40        | 42     | 7     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:CB    | 0.52     | 2.58        | 3      | 5     |
| 1:A:327:LEU:N    | 1:A:327:LEU:CD1  | 0.52     | 2.71        | 21     | 4     |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:321:LYS:HB2  | 0.52     | 2.35        | 47     | 4     |
| 1:A:31:VAL:CG2   | 1:A:39:LEU:HD11  | 0.52     | 2.34        | 33     | 4     |
| 1:A:273:ILE:HD13 | 1:A:273:ILE:N    | 0.52     | 2.20        | 23     | 1     |
| 1:A:277:GLN:NE2  | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.52     | 2.20        | 26     | 2     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:315:GLN:OE1  | 0.52     | 2.27        | 34     | 2     |
| 1:A:342:PHE:N    | 1:A:342:PHE:CD2  | 0.52     | 2.74        | 34     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:68:LEU:HD22  | 0.52     | 2.39        | 42     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.52     | 2.39        | 52     | 1     |
| 1:A:250:GLN:HE21 | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.52     | 2.00        | 54     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.52     | 2.39        | 5      | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:338:ILE:N    | 0.52     | 2.20        | 15     | 4     |
| 1:A:342:PHE:CE1  | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.52     | 2.40        | 6      | 5     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:HG13 | 0.52     | 2.05        | 51     | 7     |
| 1:A:328:LYS:HE2  | 1:A:333:PRO:C    | 0.52     | 2.30        | 23     | 3     |
| 1:A:280:PHE:HA   | 1:A:283:MET:SD   | 0.52     | 2.45        | 35     | 12    |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:338:ILE:CA   | 0.52     | 2.34        | 15     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:46:ILE:HG12  | 0.52     | 2.40        | 52     | 3     |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:354:PHE:N    | 0.52     | 2.43        | 25     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD13  | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.52     | 2.05        | 29     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HD22 | 1:A:355:LEU:CD1  | 0.52     | 2.34        | 33     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HG12 | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.52     | 1.80        | 43     | 2     |
| 1:A:41:ASN:OD1   | 1:A:353:ASN:OD1  | 0.52     | 2.28        | 49     | 1     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.52     | 2.04        | 49     | 1     |
| 1:A:42:LEU:CA    | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.52     | 2.34        | 52     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:235:LEU:HD23 | 0.52     | 1.81        | 55     | 1     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:CA    | 0.52     | 2.58        | 1      | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:77:ARG:HB3   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.52     | 2.19        | 7      | 3     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:241:PHE:CE2  | 0.52     | 2.40        | 32     | 2     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.52     | 2.27        | 31     | 2     |
| 1:A:64:LEU:CD2   | 1:A:68:LEU:HD11  | 0.52     | 2.35        | 21     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG23 | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.52     | 2.39        | 36     | 1     |
| 1:A:75:GLY:HA2   | 1:A:252:PRO:CB   | 0.52     | 2.35        | 2      | 34    |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:HA   | 0.52     | 2.40        | 6      | 7     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:354:PHE:CD1  | 0.52     | 2.98        | 4      | 1     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:73:ARG:HD3   | 0.52     | 2.40        | 5      | 1     |
| 1:A:19:THR:OG1   | 1:A:61:ILE:HD13  | 0.52     | 2.05        | 9      | 3     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:325:GLU:HG3  | 0.52     | 2.19        | 15     | 5     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:22:LEU:HD12  | 0.52     | 2.05        | 16     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:245:ARG:CZ   | 0.52     | 2.92        | 52     | 2     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:CG   | 0.52     | 2.58        | 17     | 1     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:HB3  | 0.52     | 2.05        | 24     | 5     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.52     | 2.19        | 27     | 3     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:274:SER:CB   | 0.52     | 2.93        | 52     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.52     | 2.40        | 52     | 1     |
| 1:A:14:PRO:O     | 1:A:18:TRP:HB3   | 0.51     | 2.05        | 29     | 53    |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:19:THR:HB    | 0.51     | 2.05        | 42     | 54    |
| 1:A:273:ILE:HG13 | 1:A:280:PHE:CD2  | 0.51     | 2.40        | 5      | 4     |
| 1:A:72:PHE:C     | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.51     | 2.81        | 8      | 2     |
| 1:A:19:THR:HG22  | 1:A:20:LEU:CD1   | 0.51     | 2.36        | 50     | 6     |
| 1:A:236:ARG:HA   | 1:A:241:PHE:CD2  | 0.51     | 2.40        | 38     | 8     |
| 1:A:327:LEU:HG   | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.51     | 1.82        | 46     | 2     |
| 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:269:LEU:HD21 | 0.51     | 1.83        | 22     | 2     |
| 1:A:244:MET:HE2  | 1:A:284:LEU:HD11 | 0.51     | 1.83        | 30     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HA   | 1:A:245:ARG:CZ   | 0.51     | 2.34        | 45     | 1     |
| 1:A:14:PRO:C     | 1:A:16:ASN:H     | 0.51     | 2.13        | 41     | 37    |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:GLU:CG   | 0.51     | 2.58        | 34     | 4     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:332:PHE:O    | 0.51     | 2.05        | 1      | 8     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:235:LEU:HB2  | 0.51     | 2.05        | 54     | 35    |
| 1:A:321:LYS:HE2  | 1:A:322:GLU:CA   | 0.51     | 2.35        | 4      | 3     |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:21:GLU:HG3   | 0.51     | 2.06        | 28     | 5     |
| 1:A:244:MET:CG   | 1:A:248:ILE:CD1  | 0.51     | 2.88        | 9      | 1     |
| 1:A:348:GLU:O    | 1:A:351:ALA:N    | 0.51     | 2.42        | 12     | 4     |
| 1:A:77:ARG:CD    | 1:A:77:ARG:O     | 0.51     | 2.58        | 26     | 4     |
| 1:A:348:GLU:OE1  | 1:A:348:GLU:CA   | 0.51     | 2.59        | 17     | 1     |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:HG3  | 0.51     | 2.05        | 30     | 7     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:286:GLU:O    | 0.51     | 2.43        | 19     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CD2  | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.51     | 2.40        | 20     | 2     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:58:GLU:CA    | 1:A:58:GLU:OE2   | 0.51     | 2.57        | 42     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HA   | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.51     | 2.41        | 46     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HZ   | 1:A:283:MET:HE3  | 0.51     | 1.54        | 51     | 1     |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:243:ASN:HB3  | 0.51     | 2.05        | 33     | 44    |
| 1:A:72:PHE:O     | 1:A:252:PRO:HB3  | 0.51     | 2.04        | 25     | 22    |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:358:GLN:HG2  | 0.51     | 2.41        | 47     | 6     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:66:GLN:N     | 0.51     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG13 | 1:A:280:PHE:CD1  | 0.51     | 2.39        | 4      | 4     |
| 1:A:64:LEU:O     | 1:A:68:LEU:HD13  | 0.51     | 2.04        | 13     | 2     |
| 1:A:315:GLN:HB2  | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.51     | 2.40        | 33     | 3     |
| 1:A:281:ILE:HD13 | 1:A:281:ILE:H    | 0.51     | 1.66        | 28     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HB   | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.51     | 1.82        | 43     | 1     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:232:LEU:CB   | 0.51     | 2.73        | 49     | 1     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.51     | 2.58        | 55     | 1     |
| 1:A:19:THR:HG22  | 1:A:20:LEU:HD13  | 0.51     | 1.80        | 5      | 9     |
| 1:A:22:LEU:CD2   | 1:A:23:LEU:N     | 0.51     | 2.64        | 1      | 1     |
| 1:A:251:ASN:C    | 1:A:253:ALA:N    | 0.51     | 2.68        | 41     | 55    |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:282:GLN:C    | 0.51     | 2.52        | 45     | 48    |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:241:PHE:CD2  | 0.51     | 2.41        | 4      | 9     |
| 1:A:65:GLN:HG3   | 1:A:66:GLN:N     | 0.51     | 2.18        | 31     | 3     |
| 1:A:342:PHE:CD1  | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.51     | 2.41        | 11     | 9     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:CD   | 0.51     | 2.93        | 19     | 3     |
| 1:A:332:PHE:CD1  | 1:A:355:LEU:HG   | 0.51     | 2.41        | 43     | 2     |
| 1:A:349:ASN:O    | 1:A:353:ASN:ND2  | 0.51     | 2.44        | 40     | 3     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:345:GLU:HB3  | 0.51     | 2.40        | 49     | 7     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:338:ILE:HA   | 0.51     | 1.82        | 15     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:259:LEU:HG   | 0.51     | 2.40        | 35     | 4     |
| 1:A:30:ALA:CA    | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.51     | 2.93        | 19     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.51     | 2.64        | 44     | 2     |
| 1:A:283:MET:C    | 1:A:285:ASN:N    | 0.51     | 2.68        | 28     | 3     |
| 1:A:275:ARG:CD   | 1:A:275:ARG:O    | 0.51     | 2.59        | 32     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:255:LEU:C    | 0.51     | 2.74        | 38     | 1     |
| 1:A:269:LEU:HD12 | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.51     | 2.19        | 38     | 1     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:54:TRP:CD1   | 0.51     | 2.64        | 39     | 1     |
| 1:A:354:PHE:CD2  | 1:A:354:PHE:C    | 0.51     | 2.89        | 47     | 3     |
| 1:A:345:GLU:OE1  | 1:A:345:GLU:O    | 0.51     | 2.28        | 54     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CG    | 1:A:248:ILE:HD11 | 0.51     | 2.40        | 55     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:HB3  | 0.51     | 2.05        | 9      | 22    |
| 1:A:258:LEU:C    | 1:A:260:GLN:N    | 0.51     | 2.66        | 54     | 9     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.51     | 2.06        | 32     | 19    |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:322:GLU:C    | 0.51     | 2.52        | 17     | 43    |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:246:GLN:O    | 1:A:250:GLN:HB2  | 0.51     | 2.05        | 40     | 21    |
| 1:A:30:ALA:HA    | 1:A:33:HIS:CD2   | 0.51     | 2.41        | 53     | 17    |
| 1:A:324:ILE:HD11 | 1:A:341:TYR:CE2  | 0.51     | 2.41        | 7      | 1     |
| 1:A:231:PRO:HG2  | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.51     | 2.19        | 11     | 1     |
| 1:A:58:GLU:HA    | 1:A:61:ILE:HD12  | 0.51     | 1.81        | 19     | 1     |
| 1:A:44:GLN:O     | 1:A:48:GLU:OE2   | 0.51     | 2.27        | 24     | 1     |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.51     | 2.05        | 55     | 3     |
| 1:A:23:LEU:HD11  | 1:A:60:ILE:HD13  | 0.51     | 1.82        | 28     | 1     |
| 1:A:259:LEU:CD2  | 1:A:262:LEU:HD23 | 0.51     | 2.35        | 36     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD13 | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.51     | 1.79        | 38     | 1     |
| 1:A:325:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:HB2  | 0.51     | 2.30        | 47     | 1     |
| 1:A:355:LEU:N    | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.51     | 2.21        | 49     | 1     |
| 1:A:244:MET:HG2  | 1:A:245:ARG:N    | 0.51     | 2.20        | 50     | 20    |
| 1:A:321:LYS:HG3  | 1:A:322:GLU:N    | 0.51     | 2.21        | 42     | 5     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:235:LEU:HB3  | 0.51     | 2.06        | 17     | 5     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:HD21 | 0.51     | 2.24        | 19     | 6     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:337:VAL:HG23 | 0.51     | 2.06        | 33     | 4     |
| 1:A:23:LEU:HD13  | 1:A:61:ILE:HD11  | 0.51     | 1.81        | 18     | 2     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:358:GLN:CG   | 0.51     | 2.18        | 7      | 1     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.51     | 2.06        | 9      | 2     |
| 1:A:78:HIS:NE2   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.51     | 2.68        | 26     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CB    | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.51     | 2.88        | 14     | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD12  | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.51     | 1.83        | 23     | 1     |
| 1:A:38:TRP:O     | 1:A:42:LEU:N     | 0.51     | 2.42        | 47     | 6     |
| 1:A:252:PRO:O    | 1:A:256:PRO:HD3  | 0.51     | 2.05        | 55     | 3     |
| 1:A:29:GLU:C     | 1:A:29:GLU:OE2   | 0.51     | 2.54        | 33     | 1     |
| 1:A:356:LEU:HD22 | 1:A:356:LEU:N    | 0.51     | 2.20        | 34     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:26:LEU:C     | 0.51     | 2.30        | 40     | 2     |
| 1:A:348:GLU:OE1  | 1:A:349:ASN:N    | 0.51     | 2.44        | 41     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:HB    | 0.51     | 1.82        | 45     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.51     | 2.79        | 54     | 1     |
| 1:A:33:HIS:HB3   | 1:A:71:HIS:CD2   | 0.51     | 2.41        | 41     | 11    |
| 1:A:234:PHE:CD1  | 1:A:234:PHE:N    | 0.51     | 2.79        | 46     | 6     |
| 1:A:249:GLN:HG3  | 1:A:284:LEU:O    | 0.51     | 2.06        | 15     | 19    |
| 1:A:337:VAL:C    | 1:A:339:GLN:N    | 0.51     | 2.68        | 15     | 10    |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.51     | 2.20        | 3      | 1     |
| 1:A:273:ILE:HA   | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.51     | 2.21        | 3      | 8     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:HG   | 0.51     | 1.81        | 48     | 6     |
| 1:A:276:HIS:O    | 1:A:277:GLN:C    | 0.51     | 2.54        | 52     | 14    |
| 1:A:281:ILE:HG23 | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.51     | 2.21        | 15     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:HD21  | 0.51     | 2.41        | 16     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:342:PHE:CZ   | 1:A:346:LYS:CE   | 0.51     | 2.94        | 24     | 1     |
| 1:A:62:ARG:CZ    | 1:A:62:ARG:HB2   | 0.51     | 2.35        | 25     | 1     |
| 1:A:278:GLU:O    | 1:A:282:GLN:CD   | 0.51     | 2.54        | 25     | 1     |
| 1:A:77:ARG:C     | 1:A:77:ARG:HD2   | 0.51     | 2.31        | 29     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG11 | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.51     | 2.36        | 31     | 1     |
| 1:A:237:ASP:OD2  | 1:A:237:ASP:C    | 0.51     | 2.53        | 53     | 1     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:321:LYS:HD3  | 0.51     | 2.05        | 55     | 11    |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:47:TYR:CD1   | 0.51     | 2.63        | 3      | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG23 | 1:A:280:PHE:CD1  | 0.51     | 2.41        | 23     | 2     |
| 1:A:342:PHE:CD2  | 1:A:346:LYS:HG3  | 0.51     | 2.40        | 36     | 3     |
| 1:A:248:ILE:O    | 1:A:252:PRO:CG   | 0.51     | 2.59        | 18     | 8     |
| 1:A:246:GLN:C    | 1:A:246:GLN:OE1  | 0.51     | 2.54        | 13     | 1     |
| 1:A:317:THR:OG1  | 1:A:319:GLN:CG   | 0.51     | 2.59        | 52     | 3     |
| 1:A:20:LEU:HD22  | 1:A:20:LEU:N     | 0.51     | 2.20        | 16     | 1     |
| 1:A:281:ILE:N    | 1:A:282:GLN:HE21 | 0.51     | 2.03        | 23     | 2     |
| 1:A:18:TRP:HZ2   | 1:A:22:LEU:HD13  | 0.51     | 1.61        | 37     | 2     |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:346:LYS:HD2  | 0.51     | 2.31        | 33     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG12 | 1:A:341:TYR:CD2  | 0.51     | 2.40        | 34     | 2     |
| 1:A:358:GLN:HB2  | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.51     | 2.40        | 40     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HB2   | 1:A:357:SER:OG   | 0.51     | 2.06        | 44     | 2     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:64:LEU:HD13  | 0.51     | 2.41        | 46     | 1     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:64:LEU:HD22  | 0.51     | 1.81        | 47     | 1     |
| 1:A:43:GLY:O     | 1:A:47:TYR:HB2   | 0.51     | 2.06        | 50     | 32    |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:273:ILE:HG22 | 0.51     | 2.40        | 1      | 5     |
| 1:A:232:LEU:HD12 | 1:A:232:LEU:C    | 0.51     | 2.29        | 1      | 3     |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:241:PHE:CG   | 0.51     | 2.41        | 31     | 12    |
| 1:A:332:PHE:CD1  | 1:A:332:PHE:N    | 0.51     | 2.79        | 47     | 2     |
| 1:A:35:PRO:HG2   | 1:A:357:SER:O    | 0.51     | 2.05        | 21     | 8     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.51     | 2.33        | 31     | 4     |
| 1:A:54:TRP:C     | 1:A:56:GLY:N     | 0.51     | 2.69        | 23     | 4     |
| 1:A:284:LEU:O    | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.51     | 2.06        | 12     | 3     |
| 1:A:342:PHE:CD1  | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.51     | 2.41        | 13     | 2     |
| 1:A:14:PRO:CB    | 1:A:18:TRP:HB3   | 0.51     | 2.36        | 37     | 3     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:339:GLN:HG2  | 0.51     | 2.06        | 48     | 7     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:284:LEU:N    | 0.51     | 2.44        | 28     | 1     |
| 1:A:246:GLN:OE1  | 1:A:246:GLN:CA   | 0.51     | 2.58        | 35     | 3     |
| 1:A:68:LEU:CD1   | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.51     | 2.54        | 41     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD12  | 1:A:345:GLU:CG   | 0.51     | 2.36        | 50     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:274:SER:HB3  | 0.51     | 2.41        | 52     | 1     |
| 1:A:281:ILE:N    | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.51     | 2.20        | 55     | 1     |
| 1:A:358:GLN:NE2  | 1:A:358:GLN:HA   | 0.51     | 2.21        | 10     | 16    |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:35:PRO:HB3   | 1:A:357:SER:OG   | 0.51     | 2.06        | 10     | 11    |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:354:PHE:HB2  | 0.51     | 2.20        | 22     | 8     |
| 1:A:43:GLY:O     | 1:A:47:TYR:HB3   | 0.51     | 2.06        | 43     | 34    |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:251:ASN:CB   | 0.51     | 2.74        | 40     | 12    |
| 1:A:34:PHE:CD2   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.51     | 2.99        | 4      | 1     |
| 1:A:45:HIS:C     | 1:A:47:TYR:N     | 0.51     | 2.65        | 18     | 11    |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.51     | 2.35        | 51     | 12    |
| 1:A:281:ILE:C    | 1:A:283:MET:N    | 0.51     | 2.69        | 23     | 7     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:245:ARG:HD3  | 0.51     | 2.40        | 49     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.51     | 2.41        | 14     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HD11 | 1:A:280:PHE:CZ   | 0.51     | 2.41        | 22     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:341:TYR:CB   | 0.51     | 2.36        | 45     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:354:PHE:CG   | 0.51     | 2.41        | 46     | 2     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:HB2  | 0.51     | 2.36        | 49     | 2     |
| 1:A:26:LEU:HD23  | 1:A:61:ILE:HG13  | 0.51     | 1.83        | 51     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:241:PHE:CD1  | 0.50     | 2.41        | 35     | 10    |
| 1:A:321:LYS:CD   | 1:A:325:GLU:HG3  | 0.50     | 2.36        | 39     | 5     |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:247:VAL:CG2  | 0.50     | 2.36        | 9      | 9     |
| 1:A:275:ARG:HD2  | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.50     | 2.41        | 4      | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.50     | 2.33        | 23     | 6     |
| 1:A:341:TYR:OH   | 1:A:346:LYS:O    | 0.50     | 2.29        | 21     | 6     |
| 1:A:341:TYR:CD1  | 1:A:346:LYS:HA   | 0.50     | 2.41        | 39     | 13    |
| 1:A:233:GLU:OE1  | 1:A:234:PHE:N    | 0.50     | 2.43        | 31     | 2     |
| 1:A:24:GLU:CD    | 1:A:25:GLU:N     | 0.50     | 2.68        | 15     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HG    | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.50     | 1.82        | 17     | 1     |
| 1:A:249:GLN:HE21 | 1:A:284:LEU:C    | 0.50     | 2.14        | 30     | 2     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:346:LYS:HB3  | 0.50     | 2.41        | 34     | 6     |
| 1:A:48:GLU:N     | 1:A:48:GLU:CD    | 0.50     | 2.69        | 24     | 1     |
| 1:A:285:ASN:ND2  | 1:A:285:ASN:C    | 0.50     | 2.70        | 38     | 3     |
| 1:A:22:LEU:C     | 1:A:22:LEU:CD2   | 0.50     | 2.81        | 40     | 1     |
| 1:A:250:GLN:HG3  | 1:A:251:ASN:CG   | 0.50     | 2.30        | 44     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HD11 | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.50     | 1.82        | 45     | 1     |
| 1:A:74:ILE:CG1   | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.50     | 2.59        | 55     | 1     |
| 1:A:328:LYS:C    | 1:A:328:LYS:HD3  | 0.50     | 2.30        | 55     | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:343:ALA:N    | 0.50     | 2.44        | 20     | 3     |
| 1:A:75:GLY:HA2   | 1:A:252:PRO:CG   | 0.50     | 2.36        | 51     | 30    |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:288:PRO:HB3  | 0.50     | 2.06        | 34     | 11    |
| 1:A:326:ARG:N    | 1:A:326:ARG:HD3  | 0.50     | 2.21        | 4      | 5     |
| 1:A:327:LEU:H    | 1:A:327:LEU:CD2  | 0.50     | 2.19        | 5      | 1     |
| 1:A:328:LYS:HE2  | 1:A:332:PHE:O    | 0.50     | 2.06        | 10     | 6     |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:332:PHE:O    | 0.50     | 2.07        | 12     | 7     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:316:VAL:CG2  | 0.50     | 2.52        | 48     | 4     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:HB2  | 0.50     | 2.37        | 12     | 8     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:360:PHE:N    | 0.50     | 2.45        | 45     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:HA   | 0.50     | 1.83        | 22     | 3     |
| 1:A:29:GLU:HB3   | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.50     | 2.06        | 39     | 3     |
| 1:A:262:LEU:HD21 | 1:A:269:LEU:CD2  | 0.50     | 2.37        | 25     | 2     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:HG3  | 0.50     | 2.07        | 51     | 4     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HB3  | 0.50     | 2.07        | 45     | 2     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:251:ASN:HB2  | 0.50     | 2.06        | 42     | 1     |
| 1:A:70:ILE:HG22  | 1:A:71:HIS:N     | 0.50     | 2.20        | 48     | 1     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:315:GLN:HG3  | 0.50     | 2.32        | 1      | 3     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:359:ASN:HB2  | 0.50     | 2.06        | 1      | 12    |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:339:GLN:N    | 0.50     | 2.44        | 15     | 9     |
| 1:A:286:GLU:HG3  | 1:A:287:PRO:N    | 0.50     | 2.22        | 3      | 24    |
| 1:A:16:ASN:OD1   | 1:A:16:ASN:N     | 0.50     | 2.44        | 25     | 2     |
| 1:A:358:GLN:CD   | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.50     | 2.89        | 12     | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:CA   | 0.50     | 2.59        | 13     | 1     |
| 1:A:317:THR:CG2  | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.50     | 2.74        | 14     | 2     |
| 1:A:14:PRO:O     | 1:A:18:TRP:N     | 0.50     | 2.45        | 43     | 9     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:266:ASN:OD1  | 0.50     | 2.29        | 17     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG12 | 1:A:341:TYR:CG   | 0.50     | 2.42        | 21     | 5     |
| 1:A:234:PHE:O    | 1:A:238:GLN:OE1  | 0.50     | 2.29        | 47     | 2     |
| 1:A:45:HIS:HB3   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.50     | 1.82        | 25     | 1     |
| 1:A:339:GLN:HG3  | 1:A:340:ALA:N    | 0.50     | 2.22        | 25     | 3     |
| 1:A:78:HIS:CD2   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.50     | 2.65        | 26     | 1     |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:46:ILE:CG2   | 0.50     | 2.60        | 50     | 2     |
| 1:A:45:HIS:CB    | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.50     | 2.60        | 52     | 2     |
| 1:A:250:GLN:HG3  | 1:A:251:ASN:N    | 0.50     | 2.22        | 42     | 7     |
| 1:A:265:GLU:C    | 1:A:267:PRO:HD3  | 0.50     | 2.32        | 6      | 3     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:HD3  | 0.50     | 2.07        | 25     | 13    |
| 1:A:327:LEU:CG   | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.50     | 2.90        | 15     | 1     |
| 1:A:250:GLN:HE21 | 1:A:251:ASN:CG   | 0.50     | 2.12        | 42     | 7     |
| 1:A:314:ILE:HG22 | 1:A:315:GLN:H    | 0.50     | 1.65        | 16     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:284:LEU:HG   | 0.50     | 2.42        | 20     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:281:ILE:HG23 | 0.50     | 2.41        | 28     | 4     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:328:LYS:C    | 0.50     | 2.31        | 30     | 4     |
| 1:A:358:GLN:CA   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.50     | 2.74        | 28     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD22  | 1:A:343:ALA:CB   | 0.50     | 2.37        | 32     | 2     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:235:LEU:HD22 | 0.50     | 2.37        | 33     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG12 | 1:A:315:GLN:N    | 0.50     | 2.20        | 43     | 3     |
| 1:A:337:VAL:HG22 | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.50     | 2.36        | 47     | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:241:PHE:CD1  | 0.50     | 2.40        | 51     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD13  | 1:A:43:GLY:CA    | 0.50     | 2.36        | 55     | 1     |
| 1:A:276:HIS:O    | 1:A:280:PHE:HB2  | 0.50     | 2.07        | 17     | 12    |
| 1:A:328:LYS:O    | 1:A:331:GLY:N    | 0.50     | 2.44        | 37     | 4     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:316:VAL:H    | 0.50     | 2.14        | 37     | 25    |
| 1:A:346:LYS:HD2  | 1:A:346:LYS:N    | 0.50     | 2.21        | 21     | 10    |
| 1:A:70:ILE:C     | 1:A:72:PHE:N     | 0.50     | 2.69        | 52     | 4     |
| 1:A:280:PHE:CD1  | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.50     | 2.42        | 13     | 3     |
| 1:A:317:THR:CG2  | 1:A:318:PRO:HD2  | 0.50     | 2.37        | 42     | 3     |
| 1:A:327:LEU:C    | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.50     | 2.84        | 12     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.50     | 1.84        | 18     | 1     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HG12 | 0.50     | 2.07        | 22     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:354:PHE:CE2  | 0.50     | 2.42        | 29     | 1     |
| 1:A:360:PHE:CD1  | 1:A:360:PHE:O    | 0.50     | 2.65        | 55     | 2     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:341:TYR:OH   | 0.50     | 2.26        | 33     | 1     |
| 1:A:360:PHE:CD2  | 1:A:360:PHE:O    | 0.50     | 2.65        | 45     | 1     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:232:LEU:HB3  | 0.50     | 2.22        | 49     | 1     |
| 1:A:75:GLY:C     | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.50     | 2.69        | 54     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:HD22 | 0.50     | 2.24        | 46     | 3     |
| 1:A:321:LYS:CE   | 1:A:322:GLU:HA   | 0.50     | 2.37        | 36     | 3     |
| 1:A:356:LEU:N    | 1:A:356:LEU:CD2  | 0.50     | 2.74        | 4      | 2     |
| 1:A:33:HIS:HB2   | 1:A:78:HIS:CB    | 0.50     | 2.37        | 9      | 20    |
| 1:A:232:LEU:HD23 | 1:A:232:LEU:H    | 0.50     | 1.66        | 52     | 13    |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:346:LYS:CG   | 0.50     | 2.85        | 28     | 5     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:HG3  | 0.50     | 1.84        | 10     | 1     |
| 1:A:47:TYR:HA    | 1:A:50:TYR:CZ    | 0.50     | 2.42        | 11     | 1     |
| 1:A:266:ASN:N    | 1:A:267:PRO:HD3  | 0.50     | 2.22        | 53     | 5     |
| 1:A:68:LEU:HB3   | 1:A:277:GLN:CG   | 0.50     | 2.36        | 30     | 4     |
| 1:A:68:LEU:HD22  | 1:A:278:GLU:CD   | 0.50     | 2.32        | 26     | 1     |
| 1:A:65:GLN:HB3   | 1:A:274:SER:O    | 0.50     | 2.06        | 52     | 2     |
| 1:A:326:ARG:HD2  | 1:A:326:ARG:C    | 0.50     | 2.31        | 29     | 4     |
| 1:A:60:ILE:HG23  | 1:A:61:ILE:N     | 0.50     | 2.22        | 34     | 4     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:288:PRO:HB2  | 0.50     | 2.22        | 38     | 2     |
| 1:A:41:ASN:HB3   | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.50     | 1.81        | 2      | 1     |
| 1:A:341:TYR:CZ   | 1:A:346:LYS:C    | 0.50     | 2.90        | 39     | 4     |
| 1:A:41:ASN:HB2   | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.50     | 2.37        | 49     | 5     |
| 1:A:33:HIS:HB2   | 1:A:78:HIS:CG    | 0.50     | 2.42        | 28     | 18    |
| 1:A:77:ARG:HG3   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.50     | 2.07        | 10     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.50     | 2.90        | 16     | 1     |
| 1:A:350:LEU:O    | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.50     | 2.07        | 25     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:273:ILE:HG23 | 0.50     | 2.42        | 31     | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:328:LYS:CD   | 1:A:337:VAL:HB   | 0.50     | 2.37        | 36     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG22  | 1:A:50:TYR:CE2   | 0.50     | 2.42        | 46     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.50     | 1.61        | 55     | 1     |
| 1:A:33:HIS:C     | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.50     | 2.90        | 2      | 1     |
| 1:A:46:ILE:CD1   | 1:A:345:GLU:HG3  | 0.50     | 2.37        | 20     | 21    |
| 1:A:233:GLU:CD   | 1:A:233:GLU:O    | 0.50     | 2.55        | 5      | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HB2  | 0.50     | 2.07        | 37     | 18    |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HD2  | 0.50     | 2.07        | 39     | 13    |
| 1:A:77:ARG:CB    | 1:A:359:ASN:CG   | 0.50     | 2.85        | 48     | 5     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.50     | 2.07        | 12     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CZ    | 1:A:68:LEU:HG    | 0.50     | 2.42        | 21     | 4     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.50     | 2.42        | 14     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:338:ILE:CA   | 0.50     | 2.90        | 15     | 1     |
| 1:A:14:PRO:HB3   | 1:A:18:TRP:CB    | 0.50     | 2.37        | 43     | 5     |
| 1:A:50:TYR:OH    | 1:A:345:GLU:OE1  | 0.50     | 2.30        | 16     | 1     |
| 1:A:250:GLN:O    | 1:A:250:GLN:NE2  | 0.50     | 2.44        | 16     | 1     |
| 1:A:360:PHE:C    | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.50     | 2.89        | 45     | 3     |
| 1:A:244:MET:HE1  | 1:A:262:LEU:CD2  | 0.50     | 2.32        | 17     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:288:PRO:N    | 0.50     | 2.60        | 19     | 1     |
| 1:A:280:PHE:CZ   | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.50     | 2.42        | 20     | 1     |
| 1:A:278:GLU:O    | 1:A:282:GLN:HG3  | 0.50     | 2.07        | 35     | 4     |
| 1:A:279:GLN:HA   | 1:A:282:GLN:CD   | 0.50     | 2.32        | 44     | 2     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:325:GLU:HG2  | 0.50     | 2.22        | 26     | 2     |
| 1:A:245:ARG:CB   | 1:A:288:PRO:HG3  | 0.50     | 2.36        | 31     | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:CG   | 0.50     | 2.60        | 42     | 2     |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:74:ILE:CD1   | 0.50     | 2.37        | 39     | 1     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:HG12  | 0.50     | 2.07        | 50     | 3     |
| 1:A:356:LEU:HD13 | 1:A:357:SER:H    | 0.50     | 1.64        | 47     | 1     |
| 1:A:320:GLU:N    | 1:A:320:GLU:OE2  | 0.50     | 2.45        | 1      | 1     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:49:THR:OG1   | 0.50     | 2.30        | 14     | 4     |
| 1:A:324:ILE:C    | 1:A:326:ARG:N    | 0.50     | 2.70        | 42     | 7     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:48:GLU:HG3   | 0.50     | 2.06        | 32     | 8     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:HG13  | 0.50     | 2.07        | 7      | 3     |
| 1:A:25:GLU:C     | 1:A:28:SER:OG    | 0.50     | 2.55        | 7      | 1     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.50     | 2.22        | 9      | 2     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.50     | 2.80        | 35     | 4     |
| 1:A:232:LEU:CD2  | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.50     | 2.92        | 46     | 3     |
| 1:A:243:ASN:HD22 | 1:A:244:MET:N    | 0.50     | 2.05        | 20     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.50     | 2.42        | 25     | 2     |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:CD2   | 0.50     | 2.94        | 30     | 3     |
| 1:A:38:TRP:O     | 1:A:42:LEU:HB3   | 0.50     | 2.06        | 50     | 4     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:235:LEU:CD2  | 1:A:269:LEU:HD21 | 0.50     | 2.36        | 55     | 3     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.50     | 1.84        | 50     | 2     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:251:ASN:HB2  | 0.50     | 1.83        | 42     | 1     |
| 1:A:44:GLN:O     | 1:A:48:GLU:HG2   | 0.49     | 2.06        | 10     | 4     |
| 1:A:72:PHE:O     | 1:A:252:PRO:HB2  | 0.49     | 2.06        | 1      | 2     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:232:LEU:HG   | 0.49     | 2.07        | 2      | 7     |
| 1:A:233:GLU:C    | 1:A:235:LEU:N    | 0.49     | 2.70        | 25     | 15    |
| 1:A:342:PHE:CG   | 1:A:346:LYS:HE3  | 0.49     | 2.42        | 24     | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HB3  | 0.49     | 2.06        | 40     | 3     |
| 1:A:27:LYS:CE    | 1:A:27:LYS:O     | 0.49     | 2.60        | 31     | 1     |
| 1:A:24:GLU:OE1   | 1:A:24:GLU:C     | 0.49     | 2.55        | 39     | 1     |
| 1:A:20:LEU:N     | 1:A:20:LEU:CD1   | 0.49     | 2.73        | 43     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:284:LEU:CG   | 0.49     | 2.75        | 45     | 1     |
| 1:A:41:ASN:OD1   | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.49     | 2.07        | 46     | 1     |
| 1:A:69:PHE:O     | 1:A:72:PHE:HB2   | 0.49     | 2.07        | 18     | 24    |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HB   | 0.49     | 2.06        | 41     | 32    |
| 1:A:283:MET:HG3  | 1:A:284:LEU:N    | 0.49     | 2.22        | 25     | 10    |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.49     | 2.36        | 24     | 25    |
| 1:A:276:HIS:CE1  | 1:A:280:PHE:HB2  | 0.49     | 2.42        | 41     | 8     |
| 1:A:27:LYS:C     | 1:A:29:GLU:N     | 0.49     | 2.70        | 38     | 10    |
| 1:A:316:VAL:HG11 | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.49     | 2.42        | 7      | 1     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:21:GLU:HG2   | 0.49     | 2.06        | 8      | 4     |
| 1:A:327:LEU:HD22 | 1:A:327:LEU:H    | 0.49     | 1.66        | 8      | 2     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:N     | 0.49     | 2.45        | 54     | 4     |
| 1:A:358:GLN:CB   | 1:A:360:PHE:HZ   | 0.49     | 2.20        | 49     | 7     |
| 1:A:57:VAL:C     | 1:A:60:ILE:HG22  | 0.49     | 2.31        | 10     | 3     |
| 1:A:255:LEU:C    | 1:A:257:ALA:N    | 0.49     | 2.70        | 54     | 3     |
| 1:A:256:PRO:O    | 1:A:260:GLN:OE1  | 0.49     | 2.31        | 10     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.49     | 2.36        | 12     | 1     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.49     | 2.07        | 20     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HB3   | 1:A:359:ASN:OD1  | 0.49     | 2.06        | 21     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.49     | 2.32        | 38     | 4     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:272:GLN:HG3  | 0.49     | 2.07        | 23     | 5     |
| 1:A:37:ILE:O     | 1:A:40:HIS:N     | 0.49     | 2.45        | 28     | 2     |
| 1:A:317:THR:HB   | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.49     | 2.22        | 45     | 1     |
| 1:A:23:LEU:HD23  | 1:A:27:LYS:NZ    | 0.49     | 2.21        | 48     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:259:LEU:CD1  | 0.49     | 2.80        | 49     | 1     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:24:GLU:C     | 0.49     | 2.55        | 17     | 14    |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:HG3   | 0.49     | 2.07        | 18     | 4     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HD3  | 0.49     | 2.07        | 11     | 9     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:284:LEU:HB2  | 0.49     | 2.07        | 2      | 43    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:34:PHE:HB2   | 1:A:39:LEU:HD23  | 0.49     | 1.84        | 3      | 2     |
| 1:A:35:PRO:CB    | 1:A:357:SER:HB3  | 0.49     | 2.38        | 24     | 15    |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:248:ILE:HG13 | 0.49     | 2.08        | 11     | 35    |
| 1:A:332:PHE:CZ   | 1:A:355:LEU:HG   | 0.49     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:68:LEU:HB3   | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.49     | 1.84        | 49     | 2     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:CD2   | 0.49     | 2.59        | 11     | 2     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:232:LEU:HG   | 0.49     | 2.22        | 32     | 9     |
| 1:A:68:LEU:CD2   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.49     | 2.37        | 15     | 2     |
| 1:A:249:GLN:CD   | 1:A:284:LEU:C    | 0.49     | 2.80        | 20     | 1     |
| 1:A:315:GLN:CA   | 1:A:315:GLN:NE2  | 0.49     | 2.76        | 24     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.49     | 2.42        | 30     | 3     |
| 1:A:316:VAL:HG22 | 1:A:321:LYS:HB2  | 0.49     | 1.84        | 41     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HB   | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.49     | 1.84        | 42     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:HG   | 0.49     | 2.41        | 43     | 1     |
| 1:A:337:VAL:HG13 | 1:A:355:LEU:HD22 | 0.49     | 1.84        | 47     | 1     |
| 1:A:359:ASN:N    | 1:A:359:ASN:HD22 | 0.49     | 2.04        | 44     | 5     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:337:VAL:C    | 0.49     | 2.31        | 22     | 3     |
| 1:A:74:ILE:CG2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.49     | 2.75        | 6      | 1     |
| 1:A:237:ASP:O    | 1:A:238:GLN:OE1  | 0.49     | 2.30        | 9      | 3     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:246:GLN:HG3  | 0.49     | 2.08        | 19     | 1     |
| 1:A:38:TRP:HZ3   | 1:A:42:LEU:HD22  | 0.49     | 1.60        | 25     | 1     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:HD2  | 0.49     | 2.06        | 42     | 2     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:HD2  | 0.49     | 2.07        | 44     | 1     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:HG2  | 0.49     | 2.06        | 45     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HB3   | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.49     | 1.84        | 55     | 1     |
| 1:A:14:PRO:C     | 1:A:18:TRP:HB3   | 0.49     | 2.33        | 33     | 16    |
| 1:A:334:GLU:HG2  | 1:A:335:SER:N    | 0.49     | 2.22        | 2      | 4     |
| 1:A:236:ARG:HA   | 1:A:241:PHE:CD1  | 0.49     | 2.43        | 21     | 4     |
| 1:A:72:PHE:CD2   | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.49     | 2.42        | 5      | 1     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:276:HIS:CG   | 0.49     | 2.65        | 7      | 6     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:HG3  | 0.49     | 2.43        | 10     | 2     |
| 1:A:354:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:CD1  | 0.49     | 2.95        | 10     | 1     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:343:ALA:HB2  | 0.49     | 2.08        | 34     | 4     |
| 1:A:70:ILE:O     | 1:A:73:ARG:HG3   | 0.49     | 2.08        | 48     | 5     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:HD23 | 0.49     | 2.08        | 48     | 2     |
| 1:A:283:MET:O    | 1:A:286:GLU:N    | 0.49     | 2.46        | 43     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.49     | 2.23        | 51     | 4     |
| 1:A:38:TRP:HH2   | 1:A:63:ILE:HD12  | 0.49     | 1.66        | 40     | 1     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:244:MET:HG2  | 0.49     | 2.07        | 47     | 3     |
| 1:A:339:GLN:HG2  | 1:A:340:ALA:N    | 0.49     | 2.23        | 42     | 1     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:339:GLN:CG   | 0.49     | 2.60        | 48     | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:315:GLN:CB   | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.49     | 2.95        | 53     | 2     |
| 1:A:251:ASN:C    | 1:A:251:ASN:HD22 | 0.49     | 2.16        | 37     | 18    |
| 1:A:336:LEU:C    | 1:A:336:LEU:CD2  | 0.49     | 2.82        | 3      | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:347:ASN:HB2  | 0.49     | 2.07        | 38     | 13    |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:357:SER:HB2  | 0.49     | 2.06        | 22     | 16    |
| 1:A:242:GLN:CD   | 1:A:242:GLN:H    | 0.49     | 2.14        | 43     | 5     |
| 1:A:261:GLN:OE1  | 1:A:261:GLN:O    | 0.49     | 2.30        | 7      | 1     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:HB2   | 0.49     | 2.06        | 50     | 4     |
| 1:A:19:THR:O     | 1:A:23:LEU:HB2   | 0.49     | 2.07        | 26     | 9     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:HG   | 0.49     | 2.22        | 50     | 2     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:341:TYR:HB3  | 0.49     | 2.38        | 15     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.49     | 2.65        | 16     | 1     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:HD23  | 0.49     | 2.08        | 21     | 3     |
| 1:A:283:MET:O    | 1:A:285:ASN:N    | 0.49     | 2.45        | 28     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG13 | 1:A:254:LEU:HB3  | 0.49     | 1.83        | 31     | 1     |
| 1:A:15:TYR:CD2   | 1:A:19:THR:OG1   | 0.49     | 2.64        | 34     | 1     |
| 1:A:33:HIS:CA    | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.49     | 2.96        | 35     | 1     |
| 1:A:250:GLN:HG3  | 1:A:251:ASN:OD1  | 0.49     | 2.08        | 44     | 2     |
| 1:A:27:LYS:NZ    | 1:A:27:LYS:HB3   | 0.49     | 2.22        | 45     | 1     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:HB3  | 0.49     | 2.06        | 17     | 8     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:284:LEU:CB   | 0.49     | 2.61        | 20     | 2     |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:345:GLU:HB3  | 0.49     | 2.23        | 13     | 8     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:HG3  | 0.49     | 2.08        | 55     | 5     |
| 1:A:274:SER:C    | 1:A:277:GLN:HE22 | 0.49     | 2.16        | 6      | 1     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:HG2   | 0.49     | 2.08        | 22     | 5     |
| 1:A:26:LEU:HD13  | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.49     | 2.06        | 31     | 2     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:274:SER:O    | 0.49     | 2.31        | 18     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HB3   | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.49     | 2.38        | 50     | 5     |
| 1:A:61:ILE:O     | 1:A:65:GLN:CD    | 0.49     | 2.56        | 40     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD13 | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.49     | 2.23        | 41     | 2     |
| 1:A:250:GLN:C    | 1:A:250:GLN:HE21 | 0.49     | 2.15        | 42     | 2     |
| 1:A:322:GLU:CD   | 1:A:326:ARG:HH21 | 0.49     | 2.14        | 42     | 1     |
| 1:A:354:PHE:CZ   | 1:A:358:GLN:HG3  | 0.49     | 2.41        | 47     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG11 | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.49     | 2.38        | 49     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.49     | 3.00        | 51     | 1     |
| 1:A:250:GLN:NE2  | 1:A:251:ASN:HB3  | 0.49     | 2.23        | 40     | 19    |
| 1:A:68:LEU:CB    | 1:A:277:GLN:HG2  | 0.49     | 2.38        | 14     | 6     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.49     | 2.38        | 5      | 10    |
| 1:A:48:GLU:OE1   | 1:A:48:GLU:O     | 0.49     | 2.30        | 4      | 1     |
| 1:A:282:GLN:HA   | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.49     | 2.22        | 30     | 5     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:350:LEU:HG   | 0.49     | 2.23        | 6      | 7     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:244:MET:HG3  | 1:A:248:ILE:CD1  | 0.49     | 2.38        | 9      | 2     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:63:ILE:HD11  | 0.49     | 1.84        | 11     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:CG   | 0.49     | 2.60        | 53     | 2     |
| 1:A:66:GLN:HE21  | 1:A:343:ALA:HB2  | 0.49     | 1.68        | 41     | 1     |
| 1:A:315:GLN:C    | 1:A:315:GLN:CD   | 0.49     | 2.81        | 43     | 1     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:GLU:HG3  | 0.49     | 2.08        | 1      | 3     |
| 1:A:75:GLY:CA    | 1:A:252:PRO:HG2  | 0.49     | 2.38        | 8      | 28    |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:HG2  | 0.49     | 2.07        | 4      | 6     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:235:LEU:HD12 | 0.49     | 2.08        | 53     | 8     |
| 1:A:47:TYR:CD2   | 1:A:47:TYR:O     | 0.49     | 2.66        | 12     | 2     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:242:GLN:HA   | 0.49     | 2.23        | 18     | 3     |
| 1:A:317:THR:HB   | 1:A:318:PRO:CD   | 0.49     | 2.38        | 45     | 4     |
| 1:A:70:ILE:O     | 1:A:72:PHE:N     | 0.49     | 2.46        | 19     | 2     |
| 1:A:231:PRO:HG3  | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.49     | 2.23        | 23     | 3     |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:341:TYR:HB2  | 0.49     | 2.08        | 25     | 4     |
| 1:A:50:TYR:CZ    | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.49     | 2.65        | 29     | 1     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:27:LYS:HE3   | 0.49     | 2.08        | 31     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:341:TYR:CE1  | 0.49     | 2.66        | 33     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:354:PHE:CE1  | 0.49     | 3.01        | 34     | 1     |
| 1:A:24:GLU:C     | 1:A:24:GLU:CD    | 0.49     | 2.81        | 39     | 1     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:346:LYS:HE2  | 0.49     | 2.23        | 43     | 1     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:26:LEU:CD2   | 0.49     | 2.60        | 46     | 1     |
| 1:A:44:GLN:HG3   | 1:A:45:HIS:N     | 0.49     | 2.23        | 1      | 25    |
| 1:A:282:GLN:C    | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.49     | 2.71        | 2      | 3     |
| 1:A:275:ARG:HG3  | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.49     | 2.43        | 4      | 1     |
| 1:A:232:LEU:O    | 1:A:232:LEU:HG   | 0.49     | 2.08        | 33     | 6     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:328:LYS:HB2  | 0.49     | 2.07        | 5      | 3     |
| 1:A:350:LEU:O    | 1:A:353:ASN:N    | 0.49     | 2.45        | 5      | 6     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:350:LEU:HG   | 0.49     | 2.43        | 47     | 7     |
| 1:A:26:LEU:HD12  | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.49     | 2.08        | 8      | 1     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:347:ASN:N    | 0.49     | 2.85        | 31     | 4     |
| 1:A:73:ARG:NH1   | 1:A:339:GLN:OE1  | 0.49     | 2.45        | 23     | 1     |
| 1:A:262:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:CB   | 0.49     | 2.38        | 27     | 1     |
| 1:A:338:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CD2  | 0.49     | 2.65        | 29     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:245:ARG:HG3  | 0.49     | 2.23        | 31     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD11 | 1:A:235:LEU:HD23 | 0.49     | 1.85        | 49     | 1     |
| 1:A:258:LEU:HD12 | 1:A:258:LEU:H    | 0.49     | 1.66        | 55     | 1     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HG2  | 0.48     | 2.08        | 37     | 2     |
| 1:A:269:LEU:HD11 | 1:A:273:ILE:HD12 | 0.48     | 1.84        | 2      | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:HB3  | 0.48     | 2.37        | 36     | 3     |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:343:ALA:O    | 0.48     | 2.08        | 4      | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:281:ILE:HG21 | 0.48     | 2.08        | 8      | 1     |
| 1:A:54:TRP:CZ2   | 1:A:57:VAL:HG11  | 0.48     | 2.42        | 44     | 7     |
| 1:A:68:LEU:HD23  | 1:A:281:ILE:CG1  | 0.48     | 2.38        | 17     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:333:PRO:C    | 0.48     | 2.33        | 43     | 2     |
| 1:A:245:ARG:HH21 | 1:A:287:PRO:C    | 0.48     | 2.16        | 19     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CB    | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.48     | 2.37        | 25     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD22 | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.48     | 2.37        | 26     | 1     |
| 1:A:68:LEU:O     | 1:A:71:HIS:HB2   | 0.48     | 2.07        | 29     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.48     | 2.43        | 30     | 3     |
| 1:A:247:VAL:HG12 | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.48     | 1.83        | 30     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:259:LEU:HG   | 0.48     | 2.38        | 51     | 3     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:245:ARG:HD2  | 0.48     | 2.43        | 34     | 1     |
| 1:A:23:LEU:C     | 1:A:25:GLU:N     | 0.48     | 2.69        | 45     | 1     |
| 1:A:17:GLU:C     | 1:A:21:GLU:OE1   | 0.48     | 2.56        | 46     | 1     |
| 1:A:327:LEU:CD1  | 1:A:352:ALA:HB2  | 0.48     | 2.38        | 52     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:283:MET:SD   | 0.48     | 2.31        | 53     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:68:LEU:HG    | 0.48     | 2.43        | 38     | 4     |
| 1:A:341:TYR:CD2  | 1:A:346:LYS:HA   | 0.48     | 2.44        | 18     | 10    |
| 1:A:342:PHE:CE1  | 1:A:346:LYS:CG   | 0.48     | 2.96        | 2      | 1     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:48:GLU:HG2   | 0.48     | 2.09        | 48     | 15    |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:CD    | 0.48     | 2.61        | 10     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:284:LEU:HB3  | 0.48     | 2.43        | 12     | 4     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:350:LEU:C    | 0.48     | 2.96        | 12     | 2     |
| 1:A:17:GLU:HA    | 1:A:20:LEU:CD2   | 0.48     | 2.39        | 13     | 8     |
| 1:A:341:TYR:O    | 1:A:346:LYS:HA   | 0.48     | 2.08        | 13     | 14    |
| 1:A:326:ARG:C    | 1:A:328:LYS:N    | 0.48     | 2.69        | 33     | 5     |
| 1:A:233:GLU:OE1  | 1:A:236:ARG:NH1  | 0.48     | 2.47        | 51     | 2     |
| 1:A:238:GLN:N    | 1:A:238:GLN:CD   | 0.48     | 2.71        | 21     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:245:ARG:HD3  | 0.48     | 2.43        | 31     | 3     |
| 1:A:35:PRO:CG    | 1:A:357:SER:HB2  | 0.48     | 2.38        | 41     | 3     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:357:SER:N    | 0.48     | 2.45        | 32     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:42:LEU:HG    | 0.48     | 2.43        | 35     | 1     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:277:GLN:N    | 0.48     | 2.46        | 36     | 1     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.48     | 2.05        | 55     | 2     |
| 1:A:17:GLU:HG2   | 1:A:18:TRP:N     | 0.48     | 2.23        | 49     | 1     |
| 1:A:353:ASN:N    | 1:A:353:ASN:ND2  | 0.48     | 2.60        | 53     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:348:GLU:CD   | 0.48     | 2.91        | 54     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:HG22 | 0.48     | 1.85        | 55     | 1     |
| 1:A:360:PHE:C    | 1:A:360:PHE:CD1  | 0.48     | 2.91        | 55     | 1     |
| 1:A:19:THR:O     | 1:A:23:LEU:HB3   | 0.48     | 2.09        | 1      | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.48     | 1.84        | 46     | 3     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:319:GLN:NE2  | 1:A:319:GLN:CA   | 0.48     | 2.76        | 9      | 5     |
| 1:A:22:LEU:HG    | 1:A:23:LEU:N     | 0.48     | 2.24        | 26     | 4     |
| 1:A:269:LEU:C    | 1:A:271:GLN:N    | 0.48     | 2.69        | 23     | 7     |
| 1:A:358:GLN:HA   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.48     | 2.22        | 35     | 4     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:230:ASN:N    | 0.48     | 2.45        | 7      | 3     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:237:ASP:H    | 0.48     | 2.16        | 51     | 4     |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.48     | 2.95        | 45     | 3     |
| 1:A:342:PHE:CE1  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.48     | 2.96        | 19     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:245:ARG:HB3  | 0.48     | 2.24        | 41     | 4     |
| 1:A:271:GLN:HB2  | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.48     | 2.08        | 36     | 1     |
| 1:A:41:ASN:HB3   | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.48     | 1.84        | 38     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:74:ILE:HD13  | 0.48     | 1.85        | 39     | 1     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:247:VAL:HG12 | 0.48     | 2.07        | 53     | 1     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:28:SER:OG    | 0.48     | 2.29        | 10     | 5     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:259:LEU:HG   | 0.48     | 2.43        | 40     | 5     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:245:ARG:NH1  | 0.48     | 2.81        | 2      | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB2  | 1:A:332:PHE:O    | 0.48     | 2.08        | 48     | 30    |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:HB2  | 0.48     | 2.08        | 46     | 14    |
| 1:A:332:PHE:CE2  | 1:A:355:LEU:HB3  | 0.48     | 2.43        | 4      | 1     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:HG3  | 0.48     | 2.09        | 49     | 3     |
| 1:A:72:PHE:CZ    | 1:A:284:LEU:HB3  | 0.48     | 2.44        | 51     | 4     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:338:ILE:CG1  | 0.48     | 2.38        | 16     | 1     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:HD22 | 0.48     | 2.26        | 20     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HG   | 1:A:259:LEU:HD23 | 0.48     | 1.84        | 21     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HD2  | 1:A:322:GLU:N    | 0.48     | 2.23        | 31     | 4     |
| 1:A:325:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:CD   | 0.48     | 2.81        | 23     | 3     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:28:SER:N     | 0.48     | 2.46        | 28     | 2     |
| 1:A:345:GLU:CD   | 1:A:345:GLU:O    | 0.48     | 2.57        | 35     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD22  | 1:A:64:LEU:HD13  | 0.48     | 1.84        | 40     | 1     |
| 1:A:236:ARG:O    | 1:A:242:GLN:HG3  | 0.48     | 2.08        | 55     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:HB2  | 0.48     | 2.08        | 50     | 4     |
| 1:A:245:ARG:CD   | 1:A:284:LEU:HA   | 0.48     | 2.38        | 2      | 2     |
| 1:A:38:TRP:HE1   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.48     | 1.68        | 5      | 1     |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:357:SER:HB3  | 0.48     | 2.07        | 47     | 2     |
| 1:A:44:GLN:CD    | 1:A:44:GLN:C     | 0.48     | 2.82        | 44     | 5     |
| 1:A:320:GLU:CD   | 1:A:320:GLU:C    | 0.48     | 2.81        | 7      | 1     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:283:MET:SD   | 0.48     | 2.48        | 18     | 1     |
| 1:A:68:LEU:HD22  | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.48     | 2.08        | 26     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE1  | 1:A:324:ILE:HD11 | 0.48     | 2.09        | 28     | 1     |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:359:ASN:HD22 | 0.48     | 2.16        | 30     | 4     |
| 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:269:LEU:HD22 | 0.48     | 1.85        | 34     | 2     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:271:GLN:HB3  | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.48     | 2.23        | 42     | 2     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:HD2   | 0.48     | 2.08        | 48     | 2     |
| 1:A:234:PHE:CD2  | 1:A:234:PHE:N    | 0.48     | 2.82        | 45     | 1     |
| 1:A:41:ASN:ND2   | 1:A:41:ASN:H     | 0.48     | 2.06        | 51     | 2     |
| 1:A:23:LEU:CD2   | 1:A:27:LYS:NZ    | 0.48     | 2.76        | 53     | 1     |
| 1:A:248:ILE:O    | 1:A:252:PRO:N    | 0.48     | 2.47        | 54     | 1     |
| 1:A:240:GLN:HB2  | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.48     | 1.83        | 55     | 1     |
| 1:A:26:LEU:CD1   | 1:A:65:GLN:OE1   | 0.48     | 2.61        | 2      | 1     |
| 1:A:322:GLU:CD   | 1:A:323:ALA:N    | 0.48     | 2.72        | 23     | 3     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:283:MET:HG2  | 0.48     | 2.08        | 11     | 4     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:HG3  | 0.48     | 2.08        | 19     | 14    |
| 1:A:247:VAL:HG21 | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.48     | 1.85        | 10     | 2     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:58:GLU:N     | 0.48     | 2.46        | 45     | 3     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:359:ASN:O    | 0.48     | 2.09        | 12     | 1     |
| 1:A:244:MET:HB2  | 1:A:248:ILE:CD1  | 0.48     | 2.38        | 43     | 3     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:350:LEU:HB3  | 0.48     | 2.48        | 17     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:67:LEU:CG    | 0.48     | 2.97        | 22     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:HG    | 0.48     | 2.44        | 26     | 1     |
| 1:A:252:PRO:O    | 1:A:256:PRO:HD2  | 0.48     | 2.08        | 41     | 3     |
| 1:A:349:ASN:O    | 1:A:353:ASN:CG   | 0.48     | 2.56        | 40     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HB2   | 0.48     | 2.44        | 54     | 1     |
| 1:A:286:GLU:CB   | 1:A:287:PRO:HD2  | 0.48     | 2.39        | 29     | 30    |
| 1:A:328:LYS:HG3  | 1:A:329:ALA:N    | 0.48     | 2.24        | 16     | 26    |
| 1:A:341:TYR:O    | 1:A:346:LYS:CA   | 0.48     | 2.62        | 46     | 14    |
| 1:A:262:LEU:HD23 | 1:A:270:LEU:HD12 | 0.48     | 1.86        | 16     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CG2  | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.48     | 2.39        | 17     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:283:MET:HB2  | 0.48     | 2.24        | 25     | 1     |
| 1:A:70:ILE:HG12  | 1:A:339:GLN:OE1  | 0.48     | 2.08        | 26     | 4     |
| 1:A:70:ILE:CG1   | 1:A:339:GLN:OE1  | 0.48     | 2.62        | 26     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CD2   | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.48     | 2.44        | 38     | 2     |
| 1:A:248:ILE:CG1  | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.48     | 2.39        | 40     | 1     |
| 1:A:236:ARG:NH1  | 1:A:288:PRO:HA   | 0.48     | 2.23        | 45     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:288:PRO:O    | 0.48     | 2.08        | 47     | 1     |
| 1:A:353:ASN:O    | 1:A:356:LEU:HD13 | 0.48     | 2.08        | 47     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:HG3  | 0.48     | 2.08        | 53     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:359:ASN:CB   | 0.48     | 2.39        | 54     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HA   | 1:A:248:ILE:CG2  | 0.48     | 2.39        | 55     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:HG13 | 0.48     | 1.85        | 20     | 4     |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:HB3  | 0.48     | 2.09        | 34     | 11    |
| 1:A:344:CYS:CB   | 1:A:350:LEU:HB3  | 0.48     | 2.39        | 17     | 3     |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:345:GLU:OE1  | 0.48     | 2.66        | 3      | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:235:LEU:CD2  | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.48     | 2.39        | 53     | 5     |
| 1:A:317:THR:C    | 1:A:319:GLN:N    | 0.48     | 2.72        | 55     | 6     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:62:ARG:N     | 0.48     | 2.45        | 10     | 4     |
| 1:A:240:GLN:NE2  | 1:A:262:LEU:CD1  | 0.48     | 2.75        | 8      | 1     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:57:VAL:N     | 0.48     | 2.47        | 10     | 3     |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:249:GLN:HE22 | 0.48     | 2.06        | 51     | 8     |
| 1:A:25:GLU:OE2   | 1:A:278:GLU:CD   | 0.48     | 2.57        | 27     | 1     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:350:LEU:CG   | 0.48     | 3.01        | 33     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD11 | 1:A:348:GLU:HB3  | 0.48     | 1.84        | 47     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CZ   | 1:A:356:LEU:HA   | 0.48     | 2.43        | 47     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CZ    | 1:A:281:ILE:CG2  | 0.48     | 2.96        | 55     | 1     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:HZ   | 0.48     | 2.17        | 47     | 34    |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:241:PHE:CB   | 0.48     | 2.39        | 15     | 7     |
| 1:A:19:THR:CG2   | 1:A:20:LEU:HD13  | 0.48     | 2.38        | 27     | 14    |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:284:LEU:HB3  | 0.48     | 2.44        | 8      | 3     |
| 1:A:328:LYS:CG   | 1:A:332:PHE:O    | 0.48     | 2.62        | 15     | 6     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.48     | 2.36        | 8      | 2     |
| 1:A:321:LYS:HE2  | 1:A:334:GLU:OE1  | 0.48     | 2.09        | 13     | 1     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:321:LYS:HE2  | 0.48     | 2.08        | 19     | 3     |
| 1:A:338:ILE:HG12 | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.48     | 2.43        | 34     | 1     |
| 1:A:317:THR:CB   | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.48     | 2.76        | 45     | 2     |
| 1:A:49:THR:CG2   | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.48     | 2.59        | 43     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HE2   | 1:A:255:LEU:HD11 | 0.48     | 1.66        | 43     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HG3   | 1:A:357:SER:OG   | 0.48     | 2.08        | 1      | 3     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:HA    | 0.48     | 2.09        | 1      | 1     |
| 1:A:235:LEU:CD1  | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.48     | 2.38        | 55     | 10    |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:N    | 0.48     | 2.45        | 32     | 5     |
| 1:A:251:ASN:C    | 1:A:253:ALA:H    | 0.48     | 2.17        | 37     | 54    |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:288:PRO:HD3  | 0.48     | 2.24        | 3      | 2     |
| 1:A:272:GLN:C    | 1:A:276:HIS:HD2  | 0.48     | 2.17        | 35     | 7     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:HB2  | 0.48     | 2.09        | 6      | 2     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:282:GLN:OE1  | 0.48     | 2.32        | 14     | 2     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:328:LYS:HD2  | 0.48     | 2.09        | 26     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CA   | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.48     | 2.38        | 27     | 1     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:285:ASN:C    | 0.48     | 2.72        | 28     | 1     |
| 1:A:254:LEU:C    | 1:A:256:PRO:HD2  | 0.48     | 2.33        | 42     | 1     |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:61:ILE:CD1   | 0.48     | 2.59        | 47     | 1     |
| 1:A:38:TRP:HZ3   | 1:A:64:LEU:HD11  | 0.48     | 1.69        | 49     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD12  | 1:A:345:GLU:CB   | 0.48     | 2.39        | 50     | 1     |
| 1:A:78:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.48     | 2.81        | 52     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.47     | 2.38        | 3      | 14    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:359:ASN:HD22 | 0.47     | 2.16        | 50     | 4     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:249:GLN:N    | 0.47     | 2.46        | 3      | 2     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:337:VAL:HB   | 0.47     | 2.39        | 55     | 4     |
| 1:A:42:LEU:HG    | 1:A:43:GLY:N     | 0.47     | 2.24        | 6      | 3     |
| 1:A:25:GLU:O     | 1:A:28:SER:OG    | 0.47     | 2.32        | 7      | 1     |
| 1:A:317:THR:HB   | 1:A:318:PRO:HD2  | 0.47     | 1.85        | 11     | 5     |
| 1:A:332:PHE:CB   | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.47     | 2.39        | 16     | 1     |
| 1:A:236:ARG:NH2  | 1:A:283:MET:HE2  | 0.47     | 2.24        | 17     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD12  | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.47     | 1.85        | 20     | 2     |
| 1:A:240:GLN:CD   | 1:A:241:PHE:N    | 0.47     | 2.71        | 25     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD22 | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.47     | 1.84        | 26     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HZ3  | 1:A:325:GLU:HG2  | 0.47     | 1.69        | 26     | 2     |
| 1:A:330:LEU:O    | 1:A:332:PHE:CE2  | 0.47     | 2.67        | 28     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CG    | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.47     | 2.44        | 38     | 1     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:21:GLU:CD    | 0.47     | 2.57        | 46     | 1     |
| 1:A:23:LEU:HD23  | 1:A:27:LYS:HZ2   | 0.47     | 1.69        | 48     | 1     |
| 1:A:78:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.47     | 2.26        | 52     | 2     |
| 1:A:44:GLN:O     | 1:A:48:GLU:HG3   | 0.47     | 2.09        | 10     | 3     |
| 1:A:252:PRO:O    | 1:A:255:LEU:HB3  | 0.47     | 2.09        | 37     | 7     |
| 1:A:77:ARG:CZ    | 1:A:78:HIS:CD2   | 0.47     | 2.97        | 6      | 1     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:HG   | 0.47     | 2.39        | 6      | 9     |
| 1:A:328:LYS:HE2  | 1:A:334:GLU:N    | 0.47     | 2.23        | 9      | 5     |
| 1:A:14:PRO:CA    | 1:A:18:TRP:HB3   | 0.47     | 2.40        | 39     | 4     |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:341:TYR:CB   | 0.47     | 2.62        | 25     | 4     |
| 1:A:327:LEU:CD1  | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.47     | 2.92        | 15     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:CA   | 0.47     | 2.39        | 22     | 1     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.47     | 2.77        | 25     | 1     |
| 1:A:275:ARG:NH1  | 1:A:275:ARG:HG2  | 0.47     | 2.24        | 25     | 1     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:284:LEU:HG   | 0.47     | 2.09        | 31     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CE   | 1:A:328:LYS:HA   | 0.47     | 2.39        | 36     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CE1   | 1:A:259:LEU:HG   | 0.47     | 2.44        | 41     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HB   | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.47     | 2.09        | 41     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HB3   | 1:A:39:LEU:HD13  | 0.47     | 1.86        | 53     | 1     |
| 1:A:20:LEU:N     | 1:A:20:LEU:HD22  | 0.47     | 2.25        | 1      | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:245:ARG:HD2  | 0.47     | 2.44        | 1      | 2     |
| 1:A:75:GLY:CA    | 1:A:252:PRO:CG   | 0.47     | 2.92        | 15     | 11    |
| 1:A:349:ASN:ND2  | 1:A:349:ASN:C    | 0.47     | 2.72        | 42     | 7     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:68:LEU:N     | 0.47     | 2.45        | 30     | 5     |
| 1:A:284:LEU:O    | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.47     | 2.09        | 51     | 4     |
| 1:A:74:ILE:N     | 1:A:74:ILE:HD13  | 0.47     | 2.23        | 50     | 3     |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:240:GLN:OE1  | 0.47     | 2.09        | 25     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:HB3  | 0.47     | 2.10        | 43     | 1     |
| 1:A:240:GLN:HB3  | 1:A:262:LEU:CD1  | 0.47     | 2.38        | 55     | 1     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:232:LEU:C    | 0.47     | 2.86        | 1      | 5     |
| 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.47     | 1.87        | 1      | 3     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:346:LYS:HA   | 0.47     | 2.44        | 5      | 4     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:31:VAL:HB    | 0.47     | 2.09        | 47     | 20    |
| 1:A:30:ALA:C     | 1:A:32:ARG:N     | 0.47     | 2.71        | 22     | 18    |
| 1:A:325:GLU:HG2  | 1:A:334:GLU:CD   | 0.47     | 2.34        | 13     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.47     | 2.39        | 14     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:HD21 | 0.47     | 2.39        | 37     | 2     |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:236:ARG:HG2  | 0.47     | 2.08        | 53     | 4     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:268:GLN:NE2  | 0.47     | 2.47        | 23     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:53:THR:O     | 0.47     | 2.68        | 38     | 2     |
| 1:A:50:TYR:OH    | 1:A:345:GLU:OE2  | 0.47     | 2.31        | 29     | 2     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:HD13  | 0.47     | 2.10        | 29     | 1     |
| 1:A:262:LEU:C    | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.47     | 2.33        | 29     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.47     | 2.44        | 35     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CD2   | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.47     | 2.44        | 35     | 1     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.47     | 2.25        | 41     | 1     |
| 1:A:275:ARG:C    | 1:A:276:HIS:ND1  | 0.47     | 2.72        | 42     | 1     |
| 1:A:44:GLN:OE1   | 1:A:48:GLU:OE1   | 0.47     | 2.32        | 52     | 1     |
| 1:A:44:GLN:OE1   | 1:A:48:GLU:HG3   | 0.47     | 2.09        | 52     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG23 | 1:A:315:GLN:H    | 0.47     | 1.69        | 53     | 1     |
| 1:A:235:LEU:CG   | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.47     | 2.39        | 45     | 7     |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:HG    | 0.47     | 2.45        | 13     | 2     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:HD3  | 0.47     | 2.10        | 4      | 10    |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:286:GLU:HG2  | 0.47     | 2.24        | 12     | 2     |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:CG    | 0.47     | 2.97        | 13     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HE3  | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.47     | 1.86        | 13     | 1     |
| 1:A:21:GLU:O     | 1:A:24:GLU:OE1   | 0.47     | 2.32        | 15     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CD1   | 1:A:58:GLU:CG    | 0.47     | 2.97        | 22     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:CG1  | 0.47     | 2.38        | 23     | 1     |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:337:VAL:HB   | 0.47     | 2.10        | 37     | 3     |
| 1:A:279:GLN:OE1  | 1:A:279:GLN:CA   | 0.47     | 2.62        | 30     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:269:LEU:HD11 | 0.47     | 1.86        | 36     | 3     |
| 1:A:36:ARG:HG3   | 1:A:37:ILE:N     | 0.47     | 2.24        | 52     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ3   | 1:A:42:LEU:HB2   | 0.47     | 2.45        | 54     | 1     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:272:GLN:HG2  | 0.47     | 2.10        | 36     | 19    |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:355:LEU:HD23 | 0.47     | 2.09        | 4      | 2     |
| 1:A:17:GLU:O     | 1:A:21:GLU:HG3   | 0.47     | 2.10        | 42     | 4     |
| 1:A:38:TRP:O     | 1:A:42:LEU:HB2   | 0.47     | 2.09        | 7      | 3     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HG   | 0.47     | 2.09        | 42     | 9     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:29:GLU:N     | 0.47     | 2.48        | 38     | 6     |
| 1:A:32:ARG:HG2   | 1:A:33:HIS:N     | 0.47     | 2.24        | 10     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HA   | 1:A:332:PHE:O    | 0.47     | 2.09        | 39     | 4     |
| 1:A:246:GLN:HG3  | 1:A:247:VAL:N    | 0.47     | 2.24        | 19     | 3     |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:HG3   | 0.47     | 2.09        | 46     | 6     |
| 1:A:69:PHE:HA    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.47     | 2.25        | 26     | 3     |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:259:LEU:N    | 0.47     | 2.46        | 19     | 1     |
| 1:A:65:GLN:HG3   | 1:A:274:SER:O    | 0.47     | 2.10        | 20     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD12 | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.47     | 1.86        | 26     | 1     |
| 1:A:279:GLN:HA   | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.47     | 2.24        | 33     | 4     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:58:GLU:HG3   | 0.47     | 2.09        | 32     | 1     |
| 1:A:29:GLU:CD    | 1:A:68:LEU:HD21  | 0.47     | 2.34        | 36     | 1     |
| 1:A:249:GLN:CD   | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.47     | 2.34        | 41     | 1     |
| 1:A:47:TYR:O     | 1:A:51:GLY:HA2   | 0.47     | 2.10        | 17     | 34    |
| 1:A:52:ASP:OD2   | 1:A:53:THR:N     | 0.47     | 2.47        | 11     | 4     |
| 1:A:234:PHE:O    | 1:A:237:ASP:HB2  | 0.47     | 2.10        | 12     | 11    |
| 1:A:245:ARG:HG3  | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.47     | 2.25        | 3      | 4     |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:347:ASN:H    | 0.47     | 2.18        | 38     | 23    |
| 1:A:250:GLN:CD   | 1:A:251:ASN:OD1  | 0.47     | 2.58        | 14     | 2     |
| 1:A:15:TYR:HA    | 1:A:19:THR:OG1   | 0.47     | 2.09        | 48     | 15    |
| 1:A:336:LEU:HD12 | 1:A:355:LEU:CD1  | 0.47     | 2.40        | 5      | 1     |
| 1:A:242:GLN:N    | 1:A:242:GLN:HE21 | 0.47     | 2.08        | 41     | 3     |
| 1:A:35:PRO:CG    | 1:A:357:SER:HB3  | 0.47     | 2.39        | 7      | 1     |
| 1:A:68:LEU:C     | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.47     | 2.58        | 7      | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG23 | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.47     | 2.45        | 7      | 2     |
| 1:A:239:PRO:C    | 1:A:241:PHE:N    | 0.47     | 2.72        | 9      | 2     |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.47     | 2.39        | 40     | 7     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:315:GLN:HG2  | 0.47     | 2.09        | 25     | 2     |
| 1:A:18:TRP:CE2   | 1:A:22:LEU:HB2   | 0.47     | 2.45        | 13     | 1     |
| 1:A:347:ASN:C    | 1:A:349:ASN:N    | 0.47     | 2.73        | 13     | 3     |
| 1:A:34:PHE:CB    | 1:A:39:LEU:HD12  | 0.47     | 2.40        | 14     | 1     |
| 1:A:279:GLN:HA   | 1:A:279:GLN:NE2  | 0.47     | 2.24        | 19     | 1     |
| 1:A:283:MET:O    | 1:A:286:GLU:HG2  | 0.47     | 2.09        | 45     | 3     |
| 1:A:47:TYR:CE1   | 1:A:52:ASP:HA    | 0.47     | 2.44        | 21     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CD1   | 1:A:69:PHE:C     | 0.47     | 2.92        | 32     | 2     |
| 1:A:27:LYS:HG2   | 1:A:28:SER:N     | 0.47     | 2.22        | 23     | 2     |
| 1:A:62:ARG:HB3   | 1:A:62:ARG:NH1   | 0.47     | 2.24        | 46     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:NH1  | 0.47     | 2.25        | 27     | 2     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:283:MET:SD   | 0.47     | 2.31        | 28     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HG2  | 1:A:249:GLN:CD   | 0.47     | 2.35        | 30     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:278:GLU:C    | 1:A:282:GLN:HE22 | 0.47     | 2.17        | 30     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.47     | 2.44        | 31     | 1     |
| 1:A:278:GLU:CG   | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.47     | 2.77        | 37     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.47     | 2.45        | 38     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HB3  | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.47     | 2.25        | 38     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CG1  | 1:A:255:LEU:HG   | 0.47     | 2.39        | 40     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:333:PRO:O    | 0.47     | 2.09        | 51     | 5     |
| 1:A:344:CYS:CB   | 1:A:351:ALA:CA   | 0.47     | 2.92        | 40     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:HG    | 0.47     | 2.45        | 50     | 2     |
| 1:A:262:LEU:O    | 1:A:262:LEU:HD12 | 0.47     | 2.10        | 42     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.47     | 3.03        | 43     | 1     |
| 1:A:41:ASN:OD1   | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.47     | 2.62        | 46     | 1     |
| 1:A:67:LEU:CD2   | 1:A:343:ALA:O    | 0.47     | 2.63        | 52     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CZ   | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.47     | 2.68        | 54     | 1     |
| 1:A:282:GLN:C    | 1:A:282:GLN:HE21 | 0.47     | 2.17        | 55     | 1     |
| 1:A:40:HIS:O     | 1:A:44:GLN:HB3   | 0.47     | 2.09        | 2      | 8     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:242:GLN:H    | 0.47     | 2.08        | 41     | 3     |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:334:GLU:CA   | 0.47     | 2.40        | 23     | 8     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:HB3  | 0.47     | 2.08        | 10     | 5     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:360:PHE:HZ   | 0.47     | 2.27        | 12     | 1     |
| 1:A:328:LYS:NZ   | 1:A:334:GLU:HA   | 0.47     | 2.24        | 14     | 1     |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:288:PRO:CB   | 0.47     | 2.63        | 47     | 3     |
| 1:A:37:ILE:HG13  | 1:A:357:SER:CB   | 0.47     | 2.40        | 18     | 1     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:OE2  | 0.47     | 2.33        | 19     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:352:ALA:N    | 0.47     | 2.25        | 21     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CD   | 1:A:334:GLU:HA   | 0.47     | 2.40        | 24     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HG13 | 1:A:316:VAL:CG2  | 0.47     | 2.40        | 34     | 1     |
| 1:A:71:HIS:CE1   | 1:A:76:CYS:CA    | 0.47     | 2.98        | 35     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HA   | 1:A:339:GLN:CD   | 0.47     | 2.35        | 55     | 1     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:247:VAL:HB   | 0.47     | 2.10        | 54     | 8     |
| 1:A:249:GLN:OE1  | 1:A:285:ASN:O    | 0.47     | 2.33        | 2      | 1     |
| 1:A:282:GLN:C    | 1:A:285:ASN:HD22 | 0.47     | 2.18        | 5      | 9     |
| 1:A:349:ASN:ND2  | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.47     | 2.25        | 2      | 1     |
| 1:A:336:LEU:HD22 | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.47     | 1.87        | 25     | 2     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.47     | 2.40        | 25     | 9     |
| 1:A:317:THR:HB   | 1:A:319:GLN:OE1  | 0.47     | 2.10        | 11     | 1     |
| 1:A:356:LEU:N    | 1:A:356:LEU:CD1  | 0.47     | 2.78        | 14     | 4     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:288:PRO:HB3  | 0.47     | 2.25        | 13     | 3     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:285:ASN:HB3  | 0.47     | 2.09        | 28     | 6     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:338:ILE:N    | 0.47     | 2.78        | 15     | 2     |
| 1:A:69:PHE:O     | 1:A:72:PHE:N     | 0.47     | 2.48        | 40     | 4     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:HB2  | 0.47     | 2.10        | 17     | 2     |
| 1:A:259:LEU:O    | 1:A:262:LEU:N    | 0.47     | 2.48        | 34     | 4     |
| 1:A:267:PRO:O    | 1:A:271:GLN:OE1  | 0.47     | 2.33        | 22     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:346:LYS:C    | 0.47     | 2.93        | 24     | 2     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:233:GLU:H    | 0.47     | 2.08        | 26     | 2     |
| 1:A:259:LEU:HD22 | 1:A:270:LEU:CD1  | 0.47     | 2.40        | 28     | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:356:LEU:N    | 0.47     | 2.47        | 54     | 2     |
| 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:273:ILE:HD11 | 0.47     | 1.87        | 31     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HG2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.47     | 2.25        | 33     | 1     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:351:ALA:CA   | 0.47     | 3.03        | 33     | 1     |
| 1:A:77:ARG:CA    | 1:A:359:ASN:HB2  | 0.47     | 2.39        | 54     | 1     |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:46:ILE:HB    | 0.47     | 2.10        | 9      | 21    |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:N     | 0.47     | 2.48        | 1      | 1     |
| 1:A:272:GLN:HA   | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.47     | 2.10        | 34     | 2     |
| 1:A:328:LYS:N    | 1:A:337:VAL:HG13 | 0.47     | 2.25        | 5      | 1     |
| 1:A:328:LYS:HG2  | 1:A:332:PHE:O    | 0.47     | 2.09        | 27     | 8     |
| 1:A:252:PRO:O    | 1:A:255:LEU:HB2  | 0.47     | 2.09        | 28     | 8     |
| 1:A:340:ALA:CB   | 1:A:355:LEU:HD21 | 0.47     | 2.40        | 9      | 1     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:46:ILE:HG12  | 0.47     | 2.45        | 46     | 9     |
| 1:A:54:TRP:HA    | 1:A:54:TRP:CE3   | 0.47     | 2.44        | 29     | 6     |
| 1:A:274:SER:HA   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.47     | 2.10        | 35     | 5     |
| 1:A:321:LYS:HD3  | 1:A:322:GLU:N    | 0.47     | 2.25        | 32     | 2     |
| 1:A:45:HIS:NE2   | 1:A:347:ASN:HB2  | 0.47     | 2.25        | 38     | 2     |
| 1:A:280:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD11 | 0.47     | 2.44        | 24     | 1     |
| 1:A:321:LYS:CE   | 1:A:322:GLU:N    | 0.47     | 2.78        | 40     | 2     |
| 1:A:281:ILE:HG22 | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.47     | 2.24        | 27     | 2     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:334:GLU:CD   | 0.47     | 2.73        | 28     | 1     |
| 1:A:326:ARG:HD2  | 1:A:327:LEU:N    | 0.47     | 2.25        | 29     | 2     |
| 1:A:255:LEU:HB3  | 1:A:256:PRO:CD   | 0.47     | 2.40        | 43     | 2     |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:273:ILE:N    | 0.47     | 2.48        | 38     | 1     |
| 1:A:73:ARG:CB    | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.47     | 2.40        | 45     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.47     | 2.24        | 45     | 1     |
| 1:A:67:LEU:N     | 1:A:67:LEU:CD2   | 0.47     | 2.78        | 46     | 1     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:59:ALA:CB    | 0.47     | 2.63        | 47     | 1     |
| 1:A:26:LEU:CD2   | 1:A:61:ILE:HG13  | 0.47     | 2.40        | 51     | 1     |
| 1:A:42:LEU:CD1   | 1:A:60:ILE:CD1   | 0.47     | 2.92        | 51     | 1     |
| 1:A:323:ALA:HB1  | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.47     | 2.10        | 54     | 1     |
| 1:A:278:GLU:CA   | 1:A:281:ILE:HG12 | 0.47     | 2.39        | 55     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.46     | 2.98        | 5      | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:241:PHE:HB3  | 0.46     | 2.10        | 13     | 3     |
| 1:A:70:ILE:CG2   | 1:A:354:PHE:CZ   | 0.46     | 2.97        | 43     | 2     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:280:PHE:C    | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.46     | 2.73        | 23     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HB2  | 1:A:332:PHE:CE1  | 0.46     | 2.45        | 27     | 1     |
| 1:A:281:ILE:CD1  | 1:A:281:ILE:H    | 0.46     | 2.23        | 28     | 1     |
| 1:A:240:GLN:OE1  | 1:A:244:MET:HB3  | 0.46     | 2.10        | 34     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.46     | 2.45        | 37     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:249:GLN:HE21 | 0.46     | 2.06        | 41     | 1     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:HD12  | 0.46     | 2.09        | 47     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD21 | 1:A:348:GLU:CA   | 0.46     | 2.40        | 47     | 1     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:278:GLU:C    | 0.46     | 2.56        | 35     | 44    |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:271:GLN:N    | 0.46     | 2.48        | 23     | 5     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:285:ASN:CB   | 0.46     | 2.64        | 30     | 2     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:HB3  | 0.46     | 2.11        | 14     | 10    |
| 1:A:314:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.46     | 2.39        | 2      | 1     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:326:ARG:HB2  | 0.46     | 2.09        | 45     | 18    |
| 1:A:342:PHE:C    | 1:A:344:CYS:N    | 0.46     | 2.70        | 4      | 1     |
| 1:A:338:ILE:HG22 | 1:A:339:GLN:OE1  | 0.46     | 2.10        | 34     | 2     |
| 1:A:345:GLU:C    | 1:A:346:LYS:HD3  | 0.46     | 2.36        | 9      | 1     |
| 1:A:71:HIS:HB2   | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.46     | 2.10        | 52     | 4     |
| 1:A:36:ARG:N     | 1:A:36:ARG:HD3   | 0.46     | 2.25        | 11     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:320:GLU:CA   | 0.46     | 2.62        | 51     | 2     |
| 1:A:327:LEU:C    | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.46     | 2.35        | 25     | 2     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:HG2  | 0.46     | 2.09        | 23     | 1     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:350:LEU:HD12 | 0.46     | 2.24        | 25     | 1     |
| 1:A:78:HIS:C     | 1:A:79:SER:OG    | 0.46     | 2.59        | 33     | 1     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:324:ILE:HG13 | 0.46     | 2.10        | 34     | 1     |
| 1:A:58:GLU:OE2   | 1:A:58:GLU:HA    | 0.46     | 2.11        | 42     | 1     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:316:VAL:HG13 | 0.46     | 2.26        | 43     | 1     |
| 1:A:74:ILE:CG2   | 1:A:358:GLN:O    | 0.46     | 2.56        | 44     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HA    | 1:A:277:GLN:CD   | 0.46     | 2.35        | 45     | 1     |
| 1:A:48:GLU:HG3   | 1:A:49:THR:N     | 0.46     | 2.26        | 47     | 10    |
| 1:A:250:GLN:C    | 1:A:250:GLN:OE1  | 0.46     | 2.57        | 9      | 1     |
| 1:A:63:ILE:HG22  | 1:A:64:LEU:N     | 0.46     | 2.24        | 53     | 6     |
| 1:A:249:GLN:HG2  | 1:A:285:ASN:C    | 0.46     | 2.35        | 20     | 1     |
| 1:A:278:GLU:HG2  | 1:A:282:GLN:NE2  | 0.46     | 2.26        | 37     | 2     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:341:TYR:HB2  | 0.46     | 1.87        | 34     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HB2  | 1:A:269:LEU:CD1  | 0.46     | 2.40        | 41     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:241:PHE:CE1  | 0.46     | 2.45        | 46     | 1     |
| 1:A:326:ARG:CD   | 1:A:327:LEU:HD22 | 0.46     | 2.40        | 48     | 1     |
| 1:A:254:LEU:CD2  | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.46     | 2.91        | 54     | 1     |
| 1:A:272:GLN:CA   | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.46     | 2.99        | 19     | 3     |
| 1:A:276:HIS:ND1  | 1:A:280:PHE:HB2  | 0.46     | 2.25        | 55     | 10    |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:242:GLN:HA   | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.46     | 2.25        | 23     | 3     |
| 1:A:250:GLN:HE22 | 1:A:251:ASN:ND2  | 0.46     | 2.08        | 21     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HD12 | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.46     | 2.40        | 26     | 3     |
| 1:A:280:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:HD11 | 0.46     | 2.46        | 48     | 2     |
| 1:A:69:PHE:N     | 1:A:277:GLN:HG3  | 0.46     | 2.25        | 10     | 2     |
| 1:A:234:PHE:O    | 1:A:237:ASP:N    | 0.46     | 2.47        | 31     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:337:VAL:HG13 | 0.46     | 1.87        | 12     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:337:VAL:HG12 | 0.46     | 2.41        | 14     | 3     |
| 1:A:356:LEU:N    | 1:A:356:LEU:HD13 | 0.46     | 2.24        | 41     | 9     |
| 1:A:244:MET:HB2  | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.46     | 2.38        | 18     | 1     |
| 1:A:231:PRO:CG   | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.46     | 2.78        | 23     | 1     |
| 1:A:282:GLN:CD   | 1:A:283:MET:H    | 0.46     | 2.18        | 23     | 1     |
| 1:A:255:LEU:HD22 | 1:A:255:LEU:O    | 0.46     | 2.09        | 26     | 1     |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:59:ALA:N     | 0.46     | 2.49        | 28     | 2     |
| 1:A:77:ARG:CG    | 1:A:78:HIS:CE1   | 0.46     | 2.98        | 31     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HB   | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.46     | 2.39        | 31     | 2     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.46     | 1.70        | 36     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:329:ALA:N    | 0.46     | 2.26        | 55     | 2     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:347:ASN:HD22 | 0.46     | 2.28        | 47     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:HB2  | 0.46     | 2.11        | 52     | 2     |
| 1:A:74:ILE:HB    | 1:A:358:GLN:CG   | 0.46     | 2.41        | 54     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD1  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.46     | 2.43        | 55     | 1     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:231:PRO:HD2  | 0.46     | 2.11        | 20     | 14    |
| 1:A:282:GLN:NE2  | 1:A:283:MET:H    | 0.46     | 2.07        | 11     | 8     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:HG2  | 0.46     | 2.11        | 47     | 7     |
| 1:A:323:ALA:CA   | 1:A:326:ARG:HG2  | 0.46     | 2.40        | 4      | 1     |
| 1:A:233:GLU:HG3  | 1:A:234:PHE:N    | 0.46     | 2.25        | 5      | 2     |
| 1:A:320:GLU:HG3  | 1:A:321:LYS:N    | 0.46     | 2.25        | 7      | 1     |
| 1:A:248:ILE:HG12 | 1:A:255:LEU:CG   | 0.46     | 2.40        | 8      | 1     |
| 1:A:71:HIS:HB2   | 1:A:358:GLN:NE2  | 0.46     | 2.26        | 53     | 3     |
| 1:A:27:LYS:C     | 1:A:31:VAL:HB    | 0.46     | 2.36        | 21     | 5     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:26:LEU:HB3   | 0.46     | 2.09        | 14     | 3     |
| 1:A:72:PHE:CD2   | 1:A:248:ILE:HG21 | 0.46     | 2.45        | 30     | 2     |
| 1:A:314:ILE:CD1  | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.46     | 2.39        | 29     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HA   | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.46     | 2.10        | 31     | 2     |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:56:GLY:HA2   | 0.46     | 2.46        | 32     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HD2   | 1:A:78:HIS:CD2   | 0.46     | 2.45        | 33     | 1     |
| 1:A:275:ARG:CZ   | 1:A:276:HIS:CE1  | 0.46     | 2.99        | 38     | 1     |
| 1:A:29:GLU:HB3   | 1:A:278:GLU:CD   | 0.46     | 2.36        | 48     | 2     |
| 1:A:275:ARG:CD   | 1:A:275:ARG:C    | 0.46     | 2.89        | 41     | 1     |
| 1:A:62:ARG:NH1   | 1:A:62:ARG:HG2   | 0.46     | 2.25        | 42     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:21:GLU:N     | 1:A:21:GLU:CD    | 0.46     | 2.73        | 44     | 2     |
| 1:A:26:LEU:HG    | 1:A:27:LYS:N     | 0.46     | 2.26        | 47     | 1     |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:42:LEU:C     | 0.46     | 2.59        | 43     | 10    |
| 1:A:41:ASN:HB3   | 1:A:350:LEU:CD1  | 0.46     | 2.41        | 27     | 2     |
| 1:A:269:LEU:CD2  | 1:A:273:ILE:HD13 | 0.46     | 2.41        | 2      | 2     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:324:ILE:HB   | 0.46     | 2.11        | 17     | 9     |
| 1:A:38:TRP:NE1   | 1:A:344:CYS:SG   | 0.46     | 2.89        | 5      | 2     |
| 1:A:32:ARG:HD2   | 1:A:32:ARG:O     | 0.46     | 2.10        | 6      | 1     |
| 1:A:333:PRO:HG2  | 1:A:336:LEU:CB   | 0.46     | 2.41        | 38     | 17    |
| 1:A:248:ILE:O    | 1:A:252:PRO:HG3  | 0.46     | 2.11        | 18     | 18    |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:238:GLN:HG2  | 0.46     | 2.11        | 19     | 10    |
| 1:A:72:PHE:HB2   | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.46     | 2.40        | 14     | 1     |
| 1:A:254:LEU:CD1  | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.46     | 2.94        | 17     | 1     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:321:LYS:CE   | 0.46     | 2.63        | 32     | 2     |
| 1:A:266:ASN:ND2  | 1:A:269:LEU:HD13 | 0.46     | 2.25        | 23     | 1     |
| 1:A:234:PHE:C    | 1:A:234:PHE:HD1  | 0.46     | 2.19        | 31     | 2     |
| 1:A:279:GLN:C    | 1:A:282:GLN:HE22 | 0.46     | 2.16        | 31     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HG23  | 1:A:61:ILE:H     | 0.46     | 1.70        | 54     | 2     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:HE2  | 0.46     | 2.11        | 40     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HG    | 1:A:64:LEU:CD2   | 0.46     | 2.40        | 50     | 1     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:241:PHE:CB   | 0.46     | 2.63        | 53     | 1     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:250:GLN:HG3  | 0.46     | 2.10        | 18     | 2     |
| 1:A:45:HIS:ND1   | 1:A:45:HIS:C     | 0.46     | 2.70        | 19     | 2     |
| 1:A:358:GLN:HB3  | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.46     | 2.26        | 11     | 5     |
| 1:A:46:ILE:HA    | 1:A:49:THR:HG22  | 0.46     | 1.86        | 10     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CZ3   | 1:A:57:VAL:HG21  | 0.46     | 2.46        | 11     | 1     |
| 1:A:36:ARG:O     | 1:A:40:HIS:N     | 0.46     | 2.49        | 52     | 2     |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:HD3   | 0.46     | 2.11        | 18     | 3     |
| 1:A:236:ARG:CD   | 1:A:236:ARG:H    | 0.46     | 2.23        | 51     | 3     |
| 1:A:270:LEU:C    | 1:A:270:LEU:CD2  | 0.46     | 2.89        | 19     | 1     |
| 1:A:326:ARG:HD3  | 1:A:326:ARG:N    | 0.46     | 2.25        | 40     | 5     |
| 1:A:19:THR:CG2   | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.46     | 2.99        | 28     | 6     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:CG1  | 0.46     | 2.41        | 27     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE2   | 1:A:51:GLY:O     | 0.46     | 2.68        | 32     | 1     |
| 1:A:259:LEU:HD12 | 1:A:270:LEU:HD21 | 0.46     | 1.87        | 35     | 1     |
| 1:A:275:ARG:HD3  | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.46     | 2.26        | 38     | 1     |
| 1:A:20:LEU:CD1   | 1:A:54:TRP:CZ2   | 0.46     | 2.97        | 39     | 1     |
| 1:A:330:LEU:O    | 1:A:332:PHE:CE1  | 0.46     | 2.69        | 47     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CD2   | 1:A:38:TRP:CE3   | 0.46     | 3.04        | 49     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CD2   | 1:A:350:LEU:HD22 | 0.46     | 2.46        | 53     | 1     |
| 1:A:66:GLN:O     | 1:A:69:PHE:HB2   | 0.46     | 2.11        | 55     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.46     | 2.93        | 55     | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE1  | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.46     | 2.11        | 3      | 1     |
| 1:A:321:LYS:HE2  | 1:A:322:GLU:HA   | 0.46     | 1.88        | 36     | 3     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:CG   | 0.46     | 2.64        | 54     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:HG2  | 0.46     | 1.88        | 4      | 1     |
| 1:A:230:ASN:CG   | 1:A:232:LEU:H    | 0.46     | 2.19        | 43     | 12    |
| 1:A:328:LYS:NZ   | 1:A:337:VAL:HB   | 0.46     | 2.25        | 14     | 1     |
| 1:A:230:ASN:HD21 | 1:A:233:GLU:N    | 0.46     | 2.08        | 16     | 2     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:320:GLU:HA   | 0.46     | 2.10        | 16     | 2     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:HB2  | 0.46     | 2.11        | 19     | 2     |
| 1:A:278:GLU:CD   | 1:A:278:GLU:H    | 0.46     | 2.18        | 25     | 1     |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:356:LEU:HG   | 0.46     | 2.10        | 27     | 2     |
| 1:A:74:ILE:HB    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.46     | 2.11        | 55     | 3     |
| 1:A:26:LEU:CD2   | 1:A:64:LEU:HD13  | 0.46     | 2.41        | 40     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:333:PRO:C    | 0.46     | 2.36        | 41     | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:344:CYS:CB   | 0.46     | 2.64        | 46     | 2     |
| 1:A:35:PRO:CB    | 1:A:357:SER:HB2  | 0.46     | 2.41        | 38     | 5     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:HB    | 0.46     | 2.11        | 24     | 10    |
| 1:A:67:LEU:HD11  | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.46     | 1.88        | 2      | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:280:PHE:HE1  | 0.46     | 2.29        | 2      | 1     |
| 1:A:249:GLN:CG   | 1:A:285:ASN:HA   | 0.46     | 2.41        | 2      | 1     |
| 1:A:77:ARG:HD2   | 1:A:77:ARG:O     | 0.46     | 2.11        | 55     | 2     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CZ   | 0.46     | 2.84        | 7      | 1     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:55:ALA:C     | 0.46     | 2.59        | 8      | 8     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:N     | 0.46     | 2.47        | 8      | 2     |
| 1:A:246:GLN:OE1  | 1:A:247:VAL:HA   | 0.46     | 2.11        | 13     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HA   | 1:A:328:LYS:CE   | 0.46     | 2.40        | 14     | 1     |
| 1:A:322:GLU:CD   | 1:A:326:ARG:HH22 | 0.46     | 2.19        | 17     | 3     |
| 1:A:325:GLU:C    | 1:A:327:LEU:N    | 0.46     | 2.72        | 19     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HG12  | 1:A:64:LEU:HD12  | 0.46     | 1.86        | 26     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.46     | 2.35        | 30     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HB3  | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.46     | 1.85        | 31     | 1     |
| 1:A:358:GLN:HE21 | 1:A:358:GLN:C    | 0.46     | 2.19        | 35     | 2     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:244:MET:H    | 0.46     | 2.08        | 36     | 1     |
| 1:A:234:PHE:C    | 1:A:234:PHE:HD2  | 0.46     | 2.19        | 39     | 2     |
| 1:A:322:GLU:HB3  | 1:A:326:ARG:NH2  | 0.46     | 2.25        | 50     | 3     |
| 1:A:274:SER:HA   | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.46     | 2.26        | 48     | 1     |
| 1:A:72:PHE:C     | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.46     | 2.84        | 51     | 1     |
| 1:A:71:HIS:HE1   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.46     | 2.18        | 55     | 1     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:286:GLU:C    | 0.46     | 2.74        | 55     | 1     |
| 1:A:238:GLN:OE1  | 1:A:238:GLN:HA   | 0.46     | 2.11        | 42     | 4     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:355:LEU:HB2  | 0.46     | 2.11        | 2      | 3     |
| 1:A:246:GLN:OE1  | 1:A:246:GLN:HA   | 0.46     | 2.11        | 3      | 3     |
| 1:A:250:GLN:HE21 | 1:A:250:GLN:C    | 0.46     | 2.20        | 20     | 7     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:68:LEU:HG    | 0.46     | 2.45        | 7      | 5     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:233:GLU:HA   | 0.46     | 2.24        | 42     | 5     |
| 1:A:323:ALA:O    | 1:A:326:ARG:N    | 0.46     | 2.46        | 10     | 2     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:HG2  | 0.46     | 2.11        | 12     | 5     |
| 1:A:233:GLU:CD   | 1:A:233:GLU:C    | 0.46     | 2.81        | 13     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CZ   | 1:A:283:MET:HB2  | 0.46     | 2.46        | 14     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HG   | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.46     | 2.41        | 15     | 1     |
| 1:A:354:PHE:O    | 1:A:358:GLN:CA   | 0.46     | 2.64        | 15     | 2     |
| 1:A:277:GLN:OE1  | 1:A:277:GLN:HA   | 0.46     | 2.11        | 21     | 2     |
| 1:A:63:ILE:HG13  | 1:A:343:ALA:O    | 0.46     | 2.10        | 29     | 1     |
| 1:A:73:ARG:NH2   | 1:A:260:GLN:NE2  | 0.46     | 2.64        | 29     | 1     |
| 1:A:358:GLN:O    | 1:A:358:GLN:HG3  | 0.46     | 2.11        | 42     | 4     |
| 1:A:333:PRO:O    | 1:A:336:LEU:N    | 0.46     | 2.46        | 36     | 1     |
| 1:A:321:LYS:CA   | 1:A:321:LYS:HE3  | 0.46     | 2.40        | 42     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:344:CYS:SG   | 0.46     | 3.03        | 43     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:284:LEU:O    | 0.46     | 2.49        | 45     | 1     |
| 1:A:354:PHE:HA   | 1:A:357:SER:OG   | 0.46     | 2.11        | 45     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HD1   | 1:A:248:ILE:HG21 | 0.46     | 1.70        | 47     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HE2   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.46     | 2.29        | 49     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.46     | 2.64        | 54     | 1     |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:256:PRO:C    | 0.45     | 2.59        | 15     | 22    |
| 1:A:319:GLN:C    | 1:A:320:GLU:OE2  | 0.45     | 2.59        | 1      | 2     |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:288:PRO:HB2  | 0.45     | 2.10        | 21     | 2     |
| 1:A:286:GLU:HG3  | 1:A:287:PRO:CD   | 0.45     | 2.42        | 29     | 7     |
| 1:A:282:GLN:O    | 1:A:286:GLU:HG2  | 0.45     | 2.11        | 34     | 10    |
| 1:A:355:LEU:N    | 1:A:355:LEU:HD22 | 0.45     | 2.26        | 4      | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:288:PRO:HD3  | 0.45     | 2.26        | 51     | 8     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:232:LEU:CD2  | 0.45     | 2.79        | 11     | 2     |
| 1:A:332:PHE:CZ   | 1:A:355:LEU:HB3  | 0.45     | 2.46        | 12     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HG3  | 1:A:246:GLN:N    | 0.45     | 2.25        | 18     | 1     |
| 1:A:277:GLN:C    | 1:A:281:ILE:HG12 | 0.45     | 2.36        | 52     | 4     |
| 1:A:248:ILE:HG21 | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.45     | 1.87        | 39     | 2     |
| 1:A:236:ARG:HD3  | 1:A:236:ARG:N    | 0.45     | 2.26        | 26     | 1     |
| 1:A:63:ILE:CG2   | 1:A:67:LEU:HD12  | 0.45     | 2.41        | 35     | 1     |
| 1:A:19:THR:HG22  | 1:A:20:LEU:HD22  | 0.45     | 1.87        | 40     | 3     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:245:ARG:HG3  | 0.45     | 2.12        | 41     | 1     |
| 1:A:258:LEU:N    | 1:A:258:LEU:HD22 | 0.45     | 2.25        | 43     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:HG2  | 0.45     | 2.11        | 52     | 7     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:332:PHE:CD1  | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.45     | 2.47        | 14     | 2     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:323:ALA:CB   | 0.45     | 2.64        | 43     | 4     |
| 1:A:266:ASN:N    | 1:A:267:PRO:CD   | 0.45     | 2.80        | 53     | 4     |
| 1:A:18:TRP:CZ2   | 1:A:22:LEU:HB2   | 0.45     | 2.46        | 13     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CZ2   | 1:A:350:LEU:CD2  | 0.45     | 2.99        | 14     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CE   | 1:A:334:GLU:HA   | 0.45     | 2.41        | 52     | 2     |
| 1:A:69:PHE:HB2   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.45     | 2.11        | 39     | 5     |
| 1:A:44:GLN:NE2   | 1:A:44:GLN:CA    | 0.45     | 2.78        | 41     | 4     |
| 1:A:360:PHE:C    | 1:A:360:PHE:HD2  | 0.45     | 2.20        | 45     | 2     |
| 1:A:64:LEU:HD23  | 1:A:64:LEU:C     | 0.45     | 2.36        | 21     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD12 | 1:A:327:LEU:N    | 0.45     | 2.27        | 22     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HA   | 1:A:339:GLN:NE2  | 0.45     | 2.26        | 41     | 1     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:CE1  | 0.45     | 2.94        | 41     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:241:PHE:CB   | 0.45     | 2.64        | 43     | 1     |
| 1:A:73:ARG:O     | 1:A:252:PRO:C    | 0.45     | 2.59        | 48     | 1     |
| 1:A:328:LYS:C    | 1:A:330:LEU:H    | 0.45     | 2.18        | 36     | 7     |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:45:HIS:HB3   | 0.45     | 2.11        | 46     | 25    |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:21:GLU:HG2   | 0.45     | 2.11        | 22     | 3     |
| 1:A:30:ALA:O     | 1:A:32:ARG:N     | 0.45     | 2.50        | 22     | 9     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:HG    | 0.45     | 2.12        | 8      | 1     |
| 1:A:34:PHE:HB2   | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.45     | 2.42        | 14     | 2     |
| 1:A:28:SER:O     | 1:A:32:ARG:HB2   | 0.45     | 2.11        | 42     | 3     |
| 1:A:21:GLU:HA    | 1:A:21:GLU:OE1   | 0.45     | 2.12        | 43     | 2     |
| 1:A:318:PRO:O    | 1:A:322:GLU:CB   | 0.45     | 2.64        | 17     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HG21 | 1:A:284:LEU:HD22 | 0.45     | 1.87        | 24     | 2     |
| 1:A:23:LEU:HD23  | 1:A:27:LYS:HD2   | 0.45     | 1.89        | 41     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CZ3   | 1:A:57:VAL:HG11  | 0.45     | 2.46        | 44     | 3     |
| 1:A:354:PHE:CE2  | 1:A:358:GLN:CG   | 0.45     | 2.99        | 50     | 1     |
| 1:A:71:HIS:CG    | 1:A:358:GLN:HE22 | 0.45     | 2.30        | 53     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CD1   | 1:A:248:ILE:HG21 | 0.45     | 2.46        | 54     | 1     |
| 1:A:248:ILE:O    | 1:A:252:PRO:HD3  | 0.45     | 2.11        | 28     | 28    |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.45     | 2.30        | 2      | 2     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:64:LEU:C     | 0.45     | 2.60        | 10     | 8     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:278:GLU:HG2  | 0.45     | 2.12        | 51     | 2     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:242:GLN:CA   | 0.45     | 2.78        | 23     | 2     |
| 1:A:231:PRO:HB2  | 1:A:272:GLN:CG   | 0.45     | 2.42        | 6      | 1     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:CG   | 0.45     | 2.99        | 6      | 1     |
| 1:A:327:LEU:CB   | 1:A:337:VAL:HG22 | 0.45     | 2.41        | 12     | 1     |
| 1:A:24:GLU:OE1   | 1:A:25:GLU:N     | 0.45     | 2.50        | 15     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD13  | 1:A:345:GLU:HG3  | 0.45     | 1.87        | 15     | 2     |
| 1:A:315:GLN:CG   | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.45     | 2.99        | 17     | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:316:VAL:HG11 | 1:A:324:ILE:HD12 | 0.45     | 1.87        | 19     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:CG   | 0.45     | 2.41        | 23     | 2     |
| 1:A:68:LEU:CB    | 1:A:277:GLN:CG   | 0.45     | 2.94        | 30     | 1     |
| 1:A:46:ILE:O     | 1:A:50:TYR:CZ    | 0.45     | 2.70        | 32     | 1     |
| 1:A:240:GLN:C    | 1:A:240:GLN:CD   | 0.45     | 2.84        | 34     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HG2  | 1:A:284:LEU:HD23 | 0.45     | 1.87        | 34     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG13 | 1:A:316:VAL:H    | 0.45     | 1.71        | 43     | 3     |
| 1:A:250:GLN:CG   | 1:A:251:ASN:OD1  | 0.45     | 2.64        | 44     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HE2  | 1:A:321:LYS:C    | 0.45     | 2.36        | 47     | 1     |
| 1:A:36:ARG:O     | 1:A:40:HIS:HB2   | 0.45     | 2.12        | 7      | 17    |
| 1:A:268:GLN:OE1  | 1:A:268:GLN:O    | 0.45     | 2.35        | 4      | 1     |
| 1:A:279:GLN:O    | 1:A:283:MET:HG3  | 0.45     | 2.10        | 8      | 1     |
| 1:A:77:ARG:HD2   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.45     | 2.36        | 9      | 1     |
| 1:A:235:LEU:HA   | 1:A:238:GLN:CG   | 0.45     | 2.42        | 18     | 6     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:HB2  | 0.45     | 2.41        | 16     | 1     |
| 1:A:348:GLU:OE1  | 1:A:348:GLU:O    | 0.45     | 2.34        | 17     | 2     |
| 1:A:77:ARG:CB    | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.45     | 2.25        | 18     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:249:GLN:HE22 | 0.45     | 2.25        | 18     | 4     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:CG   | 0.45     | 2.64        | 23     | 1     |
| 1:A:257:ALA:O    | 1:A:260:GLN:HB2  | 0.45     | 2.11        | 35     | 5     |
| 1:A:330:LEU:HD21 | 1:A:332:PHE:CB   | 0.45     | 2.42        | 30     | 2     |
| 1:A:77:ARG:HB3   | 1:A:359:ASN:CB   | 0.45     | 2.41        | 31     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.45     | 2.12        | 31     | 1     |
| 1:A:261:GLN:OE1  | 1:A:262:LEU:HA   | 0.45     | 2.12        | 37     | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:347:ASN:CB   | 0.45     | 2.65        | 38     | 1     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:235:LEU:HB3  | 0.45     | 2.40        | 43     | 1     |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:60:ILE:CB    | 0.45     | 2.65        | 51     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HG3   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.45     | 2.26        | 51     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HZ    | 1:A:68:LEU:HD12  | 0.45     | 1.65        | 54     | 1     |
| 1:A:18:TRP:C     | 1:A:20:LEU:N     | 0.45     | 2.74        | 17     | 12    |
| 1:A:348:GLU:HG2  | 1:A:349:ASN:N    | 0.45     | 2.27        | 3      | 2     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:OE1  | 0.45     | 2.35        | 4      | 1     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:342:PHE:CG   | 0.45     | 2.85        | 47     | 3     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:CB   | 0.45     | 2.65        | 6      | 1     |
| 1:A:320:GLU:CD   | 1:A:341:TYR:HE2  | 0.45     | 2.19        | 7      | 1     |
| 1:A:21:GLU:N     | 1:A:21:GLU:OE2   | 0.45     | 2.49        | 12     | 1     |
| 1:A:231:PRO:HB2  | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.45     | 2.12        | 17     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:341:TYR:CB   | 0.45     | 2.40        | 14     | 1     |
| 1:A:244:MET:HE1  | 1:A:262:LEU:HB2  | 0.45     | 1.89        | 15     | 1     |
| 1:A:232:LEU:CD2  | 1:A:276:HIS:HB2  | 0.45     | 2.42        | 16     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HE2   | 1:A:31:VAL:HG21  | 0.45     | 1.89        | 18     | 1     |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:327:LEU:CB   | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.45     | 2.94        | 25     | 2     |
| 1:A:275:ARG:HG3  | 1:A:276:HIS:N    | 0.45     | 2.26        | 41     | 1     |
| 1:A:260:GLN:HA   | 1:A:260:GLN:NE2  | 0.45     | 2.25        | 45     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HB3   | 1:A:31:VAL:CG2   | 0.45     | 2.41        | 49     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:346:LYS:CB   | 0.45     | 3.00        | 54     | 1     |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:261:GLN:HG3  | 0.45     | 2.11        | 2      | 1     |
| 1:A:328:LYS:NZ   | 1:A:334:GLU:HB2  | 0.45     | 2.27        | 49     | 2     |
| 1:A:26:LEU:HD12  | 1:A:64:LEU:CD2   | 0.45     | 2.42        | 4      | 1     |
| 1:A:15:TYR:CA    | 1:A:19:THR:HB    | 0.45     | 2.42        | 7      | 18    |
| 1:A:257:ALA:O    | 1:A:261:GLN:HG3  | 0.45     | 2.11        | 44     | 2     |
| 1:A:264:GLN:O    | 1:A:264:GLN:HG3  | 0.45     | 2.12        | 18     | 3     |
| 1:A:78:HIS:O     | 1:A:79:SER:OG    | 0.45     | 2.28        | 8      | 1     |
| 1:A:46:ILE:CG2   | 1:A:47:TYR:N     | 0.45     | 2.78        | 27     | 3     |
| 1:A:68:LEU:CB    | 1:A:277:GLN:HB3  | 0.45     | 2.42        | 17     | 1     |
| 1:A:254:LEU:CD1  | 1:A:258:LEU:HD11 | 0.45     | 2.41        | 17     | 2     |
| 1:A:243:ASN:O    | 1:A:246:GLN:HG2  | 0.45     | 2.11        | 19     | 1     |
| 1:A:279:GLN:HA   | 1:A:282:GLN:OE1  | 0.45     | 2.12        | 25     | 1     |
| 1:A:38:TRP:O     | 1:A:41:ASN:N     | 0.45     | 2.50        | 31     | 4     |
| 1:A:35:PRO:HB3   | 1:A:357:SER:CB   | 0.45     | 2.40        | 28     | 2     |
| 1:A:282:GLN:N    | 1:A:282:GLN:HE21 | 0.45     | 2.09        | 31     | 2     |
| 1:A:336:LEU:HD22 | 1:A:355:LEU:HD13 | 0.45     | 1.89        | 33     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HD3  | 1:A:321:LYS:O    | 0.45     | 2.11        | 42     | 1     |
| 1:A:236:ARG:NH2  | 1:A:288:PRO:O    | 0.45     | 2.49        | 46     | 1     |
| 1:A:344:CYS:HB2  | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.45     | 2.11        | 47     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:287:PRO:HA   | 0.45     | 2.26        | 51     | 1     |
| 1:A:269:LEU:CG   | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.45     | 2.95        | 2      | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG21  | 1:A:60:ILE:HD12  | 0.45     | 1.88        | 5      | 2     |
| 1:A:275:ARG:C    | 1:A:276:HIS:CG   | 0.45     | 2.95        | 6      | 2     |
| 1:A:65:GLN:NE2   | 1:A:277:GLN:HB2  | 0.45     | 2.26        | 11     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HB2   | 1:A:360:PHE:O    | 0.45     | 2.12        | 15     | 1     |
| 1:A:348:GLU:HG3  | 1:A:349:ASN:N    | 0.45     | 2.25        | 28     | 1     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:30:ALA:N     | 0.45     | 2.49        | 53     | 2     |
| 1:A:77:ARG:HD2   | 1:A:360:PHE:O    | 0.45     | 2.11        | 46     | 1     |
| 1:A:247:VAL:HG21 | 1:A:258:LEU:HD13 | 0.45     | 1.88        | 55     | 1     |
| 1:A:337:VAL:O    | 1:A:338:ILE:C    | 0.45     | 2.60        | 11     | 19    |
| 1:A:70:ILE:HG21  | 1:A:354:PHE:HE1  | 0.45     | 1.72        | 46     | 2     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:326:ARG:C    | 0.45     | 2.60        | 19     | 17    |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:247:VAL:HG22 | 0.45     | 2.11        | 6      | 4     |
| 1:A:30:ALA:HA    | 1:A:33:HIS:NE2   | 0.45     | 2.27        | 10     | 15    |
| 1:A:73:ARG:HG2   | 1:A:255:LEU:CD1  | 0.45     | 2.42        | 7      | 1     |
| 1:A:38:TRP:C     | 1:A:40:HIS:N     | 0.45     | 2.75        | 31     | 6     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:235:LEU:CD2  | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.45     | 2.42        | 25     | 7     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:60:ILE:HD13  | 0.45     | 1.87        | 10     | 1     |
| 1:A:358:GLN:OE1  | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.45     | 2.70        | 12     | 1     |
| 1:A:236:ARG:NH2  | 1:A:283:MET:HE3  | 0.45     | 2.27        | 13     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG22 | 1:A:316:VAL:H    | 0.45     | 1.72        | 16     | 1     |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:CG    | 0.45     | 2.64        | 17     | 3     |
| 1:A:30:ALA:HA    | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.45     | 2.47        | 19     | 1     |
| 1:A:260:GLN:O    | 1:A:264:GLN:HB2  | 0.45     | 2.12        | 36     | 6     |
| 1:A:263:GLY:CA   | 1:A:270:LEU:HB2  | 0.45     | 2.42        | 23     | 1     |
| 1:A:278:GLU:N    | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.45     | 2.50        | 26     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HE   | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.45     | 2.07        | 29     | 3     |
| 1:A:14:PRO:HB2   | 1:A:18:TRP:CB    | 0.45     | 2.41        | 31     | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE1  | 1:A:326:ARG:CZ   | 0.45     | 2.65        | 31     | 1     |
| 1:A:256:PRO:O    | 1:A:260:GLN:HB2  | 0.45     | 2.12        | 39     | 3     |
| 1:A:337:VAL:HG12 | 1:A:338:ILE:N    | 0.45     | 2.27        | 36     | 1     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:24:GLU:CD    | 0.45     | 2.59        | 39     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:334:GLU:CG   | 0.45     | 2.42        | 44     | 1     |
| 1:A:73:ARG:CG    | 1:A:256:PRO:HG3  | 0.45     | 2.42        | 5      | 5     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:288:PRO:HA   | 0.45     | 2.27        | 49     | 9     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:HG3  | 0.45     | 2.12        | 6      | 1     |
| 1:A:62:ARG:O     | 1:A:65:GLN:CG    | 0.45     | 2.65        | 9      | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:283:MET:HE2  | 0.45     | 1.68        | 10     | 1     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:56:GLY:N     | 0.45     | 2.49        | 11     | 3     |
| 1:A:277:GLN:O    | 1:A:281:ILE:HD13 | 0.45     | 2.12        | 11     | 2     |
| 1:A:68:LEU:HD22  | 1:A:281:ILE:CG1  | 0.45     | 2.42        | 12     | 1     |
| 1:A:37:ILE:C     | 1:A:41:ASN:HD22  | 0.45     | 2.20        | 13     | 2     |
| 1:A:233:GLU:OE1  | 1:A:234:PHE:CA   | 0.45     | 2.64        | 13     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HG3   | 1:A:28:SER:N     | 0.45     | 2.27        | 47     | 6     |
| 1:A:315:GLN:CD   | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.45     | 2.95        | 17     | 1     |
| 1:A:21:GLU:HG3   | 1:A:22:LEU:N     | 0.45     | 2.26        | 19     | 2     |
| 1:A:272:GLN:OE1  | 1:A:272:GLN:HA   | 0.45     | 2.12        | 40     | 4     |
| 1:A:75:GLY:C     | 1:A:77:ARG:HE    | 0.45     | 2.19        | 22     | 1     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:NE   | 0.45     | 2.27        | 51     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:343:ALA:CB   | 0.45     | 2.42        | 30     | 1     |
| 1:A:338:ILE:HG23 | 1:A:342:PHE:CD1  | 0.45     | 2.47        | 35     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:56:GLY:HA3   | 0.45     | 2.47        | 38     | 1     |
| 1:A:271:GLN:C    | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.45     | 2.75        | 42     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HB2   | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.45     | 2.27        | 49     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.45     | 1.89        | 49     | 1     |
| 1:A:25:GLU:O     | 1:A:28:SER:HB2   | 0.45     | 2.12        | 52     | 1     |
| 1:A:22:LEU:HD23  | 1:A:23:LEU:CA    | 0.44     | 2.40        | 1      | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:OE1   | 0.44     | 2.34        | 1      | 1     |
| 1:A:71:HIS:HA    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.44     | 2.12        | 27     | 10    |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:332:PHE:O    | 0.44     | 2.12        | 27     | 2     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:348:GLU:HG3  | 0.44     | 2.47        | 5      | 1     |
| 1:A:320:GLU:HA   | 1:A:320:GLU:OE1  | 0.44     | 2.12        | 6      | 1     |
| 1:A:348:GLU:OE2  | 1:A:348:GLU:C    | 0.44     | 2.59        | 6      | 1     |
| 1:A:63:ILE:HB    | 1:A:343:ALA:O    | 0.44     | 2.12        | 11     | 4     |
| 1:A:358:GLN:CA   | 1:A:358:GLN:HE21 | 0.44     | 2.24        | 10     | 3     |
| 1:A:68:LEU:HB2   | 1:A:277:GLN:CG   | 0.44     | 2.42        | 11     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HA   | 1:A:324:ILE:CD1  | 0.44     | 2.43        | 23     | 2     |
| 1:A:316:VAL:HG22 | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.44     | 1.70        | 26     | 1     |
| 1:A:55:ALA:C     | 1:A:58:GLU:HG2   | 0.44     | 2.37        | 28     | 1     |
| 1:A:18:TRP:CE2   | 1:A:22:LEU:HD23  | 0.44     | 2.48        | 30     | 1     |
| 1:A:244:MET:HE2  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.44     | 2.42        | 30     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:254:LEU:HD12 | 0.44     | 2.35        | 34     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CD1   | 1:A:248:ILE:CG2  | 0.44     | 3.00        | 54     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HA    | 1:A:255:LEU:CB   | 0.44     | 2.43        | 1      | 3     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:315:GLN:CG   | 0.44     | 2.90        | 39     | 3     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:283:MET:CG   | 0.44     | 2.80        | 2      | 1     |
| 1:A:315:GLN:C    | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.44     | 2.21        | 22     | 5     |
| 1:A:252:PRO:C    | 1:A:254:LEU:N    | 0.44     | 2.75        | 27     | 11    |
| 1:A:342:PHE:O    | 1:A:345:GLU:N    | 0.44     | 2.49        | 4      | 1     |
| 1:A:19:THR:HG22  | 1:A:20:LEU:N     | 0.44     | 2.26        | 8      | 3     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:16:ASN:C     | 0.44     | 2.60        | 42     | 10    |
| 1:A:63:ILE:HG13  | 1:A:64:LEU:N     | 0.44     | 2.27        | 8      | 1     |
| 1:A:71:HIS:CB    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.44     | 2.66        | 52     | 2     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:342:PHE:HE2  | 0.44     | 1.95        | 11     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:CB   | 0.44     | 2.42        | 12     | 1     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:258:LEU:HD21 | 0.44     | 2.27        | 15     | 1     |
| 1:A:347:ASN:HB3  | 1:A:350:LEU:CB   | 0.44     | 2.42        | 25     | 2     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:328:LYS:O    | 0.44     | 2.12        | 16     | 3     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:58:GLU:HG2   | 0.44     | 2.13        | 18     | 1     |
| 1:A:68:LEU:O     | 1:A:71:HIS:HB3   | 0.44     | 2.12        | 43     | 2     |
| 1:A:61:ILE:O     | 1:A:65:GLN:HG2   | 0.44     | 2.12        | 21     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:283:MET:HG2  | 0.44     | 2.28        | 23     | 1     |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:360:PHE:HE1  | 0.44     | 1.95        | 43     | 5     |
| 1:A:244:MET:CA   | 1:A:248:ILE:HG13 | 0.44     | 2.42        | 31     | 1     |
| 1:A:77:ARG:CG    | 1:A:359:ASN:CG   | 0.44     | 2.91        | 33     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HD3   | 1:A:77:ARG:C     | 0.44     | 2.36        | 36     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CD1   | 1:A:57:VAL:CG1   | 0.44     | 3.00        | 39     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HH12 | 1:A:288:PRO:C    | 0.44     | 2.19        | 45     | 1     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:315:GLN:CG   | 0.44     | 2.65        | 47     | 2     |
| 1:A:279:GLN:O    | 1:A:283:MET:HG2  | 0.44     | 2.12        | 49     | 1     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:321:LYS:C    | 0.44     | 2.60        | 51     | 23    |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:249:GLN:HB2  | 0.44     | 2.13        | 49     | 7     |
| 1:A:68:LEU:CB    | 1:A:277:GLN:HG3  | 0.44     | 2.42        | 3      | 3     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:281:ILE:HD12 | 0.44     | 2.11        | 8      | 1     |
| 1:A:266:ASN:C    | 1:A:266:ASN:HD22 | 0.44     | 2.21        | 8      | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE2  | 1:A:335:SER:OG   | 0.44     | 2.30        | 9      | 1     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:346:LYS:HB2  | 0.44     | 2.13        | 17     | 12    |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:346:LYS:HG2  | 0.44     | 2.12        | 48     | 4     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:328:LYS:N    | 0.44     | 2.26        | 14     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CA    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.44     | 2.65        | 15     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HB   | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.44     | 2.42        | 18     | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HB3  | 0.44     | 2.13        | 22     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CD1   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.44     | 3.06        | 23     | 3     |
| 1:A:77:ARG:NH1   | 1:A:77:ARG:CG    | 0.44     | 2.80        | 26     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HG   | 1:A:355:LEU:HD11 | 0.44     | 1.88        | 27     | 1     |
| 1:A:262:LEU:HD12 | 1:A:262:LEU:O    | 0.44     | 2.13        | 29     | 1     |
| 1:A:33:HIS:HA    | 1:A:78:HIS:ND1   | 0.44     | 2.27        | 35     | 1     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:HB2  | 0.44     | 2.12        | 35     | 3     |
| 1:A:275:ARG:O    | 1:A:275:ARG:HG2  | 0.44     | 2.13        | 47     | 2     |
| 1:A:232:LEU:CD1  | 1:A:232:LEU:O    | 0.44     | 2.65        | 49     | 1     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.44     | 2.65        | 49     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CZ   | 1:A:346:LYS:HB3  | 0.44     | 2.48        | 54     | 2     |
| 1:A:242:GLN:O    | 1:A:245:ARG:HB2  | 0.44     | 2.12        | 55     | 1     |
| 1:A:78:HIS:O     | 1:A:79:SER:O     | 0.44     | 2.35        | 1      | 1     |
| 1:A:35:PRO:C     | 1:A:37:ILE:H     | 0.44     | 2.20        | 25     | 7     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:245:ARG:CG   | 0.44     | 2.80        | 5      | 1     |
| 1:A:68:LEU:HB2   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.44     | 2.11        | 8      | 1     |
| 1:A:77:ARG:HE    | 1:A:78:HIS:CD2   | 0.44     | 2.29        | 9      | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:63:ILE:HD13  | 0.44     | 1.90        | 10     | 1     |
| 1:A:242:GLN:O    | 1:A:246:GLN:NE2  | 0.44     | 2.50        | 12     | 1     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:276:HIS:HB2  | 0.44     | 2.12        | 13     | 3     |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:CB   | 0.44     | 2.43        | 36     | 3     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:288:PRO:HG3  | 0.44     | 2.28        | 50     | 2     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:235:LEU:HG   | 0.44     | 2.12        | 52     | 2     |
| 1:A:234:PHE:HD1  | 1:A:235:LEU:N    | 0.44     | 2.10        | 36     | 4     |
| 1:A:32:ARG:NH2   | 1:A:79:SER:O     | 0.44     | 2.51        | 29     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HA   | 1:A:324:ILE:CG1  | 0.44     | 2.43        | 31     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:343:ALA:O    | 0.44     | 2.13        | 32     | 1     |
| 1:A:275:ARG:O    | 1:A:275:ARG:HD2  | 0.44     | 2.13        | 32     | 1     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:236:ARG:HB3  | 1:A:236:ARG:NH1  | 0.44     | 2.28        | 35     | 1     |
| 1:A:271:GLN:CB   | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.44     | 2.66        | 36     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:254:LEU:N    | 0.44     | 2.49        | 42     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HD23 | 1:A:356:LEU:HD21 | 0.44     | 1.88        | 43     | 1     |
| 1:A:77:ARG:NH1   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.44     | 2.66        | 46     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:CG   | 0.44     | 2.43        | 48     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD13  | 1:A:60:ILE:HD11  | 0.44     | 1.87        | 51     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.44     | 2.31        | 51     | 1     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.44     | 2.80        | 53     | 1     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:251:ASN:C    | 0.44     | 2.74        | 49     | 3     |
| 1:A:359:ASN:C    | 1:A:360:PHE:O    | 0.44     | 2.61        | 1      | 6     |
| 1:A:321:LYS:O    | 1:A:321:LYS:HG2  | 0.44     | 2.13        | 36     | 4     |
| 1:A:315:GLN:CG   | 1:A:315:GLN:O    | 0.44     | 2.65        | 47     | 2     |
| 1:A:342:PHE:CE2  | 1:A:346:LYS:HG3  | 0.44     | 2.48        | 17     | 1     |
| 1:A:78:HIS:O     | 1:A:79:SER:HB2   | 0.44     | 2.11        | 23     | 2     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:HE1  | 0.44     | 2.20        | 41     | 2     |
| 1:A:244:MET:SD   | 1:A:262:LEU:HD22 | 0.44     | 2.52        | 31     | 1     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:316:VAL:HG13 | 0.44     | 2.38        | 31     | 1     |
| 1:A:344:CYS:HB2  | 1:A:351:ALA:HB2  | 0.44     | 1.88        | 33     | 1     |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:346:LYS:HZ1  | 0.44     | 2.25        | 34     | 2     |
| 1:A:268:GLN:OE1  | 1:A:268:GLN:HA   | 0.44     | 2.11        | 39     | 2     |
| 1:A:73:ARG:CA    | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.44     | 2.92        | 44     | 1     |
| 1:A:256:PRO:O    | 1:A:260:GLN:HG3  | 0.44     | 2.13        | 47     | 1     |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:21:GLU:HB2   | 0.44     | 2.13        | 50     | 2     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:238:GLN:HE21 | 0.44     | 2.17        | 51     | 1     |
| 1:A:33:HIS:C     | 1:A:34:PHE:HD1   | 0.44     | 2.20        | 2      | 3     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:272:GLN:OE1  | 0.44     | 2.35        | 1      | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:330:LEU:HB2  | 0.44     | 2.13        | 38     | 7     |
| 1:A:38:TRP:CD1   | 1:A:354:PHE:HD1  | 0.44     | 2.29        | 4      | 1     |
| 1:A:275:ARG:NE   | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.44     | 2.65        | 4      | 1     |
| 1:A:253:ALA:O    | 1:A:256:PRO:HD2  | 0.44     | 2.13        | 17     | 7     |
| 1:A:77:ARG:NH1   | 1:A:77:ARG:HG2   | 0.44     | 2.27        | 26     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HB3   | 1:A:357:SER:HB3  | 0.44     | 1.88        | 52     | 2     |
| 1:A:46:ILE:HG23  | 1:A:50:TYR:CZ    | 0.44     | 2.47        | 32     | 1     |
| 1:A:230:ASN:HB3  | 1:A:233:GLU:CG   | 0.44     | 2.43        | 51     | 2     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:254:LEU:HG   | 0.44     | 2.12        | 34     | 2     |
| 1:A:275:ARG:CG   | 1:A:275:ARG:NH1  | 0.44     | 2.80        | 35     | 2     |
| 1:A:240:GLN:NE2  | 1:A:262:LEU:HG   | 0.44     | 2.27        | 37     | 1     |
| 1:A:26:LEU:C     | 1:A:26:LEU:CD2   | 0.44     | 2.90        | 40     | 1     |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:44:GLN:HB3   | 0.44     | 2.13        | 40     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:CG    | 0.44     | 2.38        | 41     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:231:PRO:HG2  | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.44     | 2.48        | 42     | 1     |
| 1:A:262:LEU:HD12 | 1:A:262:LEU:C    | 0.44     | 2.37        | 42     | 1     |
| 1:A:21:GLU:OE2   | 1:A:21:GLU:HA    | 0.44     | 2.11        | 45     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:284:LEU:CG   | 0.44     | 2.95        | 45     | 1     |
| 1:A:61:ILE:O     | 1:A:65:GLN:HG3   | 0.44     | 2.13        | 46     | 1     |
| 1:A:266:ASN:CG   | 1:A:269:LEU:HB2  | 0.44     | 2.37        | 53     | 1     |
| 1:A:323:ALA:C    | 1:A:326:ARG:HG2  | 0.44     | 2.36        | 4      | 1     |
| 1:A:75:GLY:HA2   | 1:A:252:PRO:HG2  | 0.44     | 1.90        | 38     | 11    |
| 1:A:25:GLU:O     | 1:A:28:SER:HB3   | 0.44     | 2.12        | 39     | 5     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:57:VAL:HB    | 0.44     | 2.12        | 10     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CE1  | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.44     | 2.47        | 14     | 1     |
| 1:A:244:MET:CA   | 1:A:258:LEU:HD13 | 0.44     | 2.42        | 15     | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:345:GLU:HB2  | 0.44     | 2.12        | 18     | 1     |
| 1:A:29:GLU:CB    | 1:A:278:GLU:HG3  | 0.44     | 2.43        | 21     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CD2  | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.44     | 2.70        | 22     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HG   | 1:A:330:LEU:O    | 0.44     | 2.12        | 22     | 1     |
| 1:A:359:ASN:HD22 | 1:A:360:PHE:N    | 0.44     | 2.09        | 48     | 3     |
| 1:A:348:GLU:C    | 1:A:348:GLU:OE2  | 0.44     | 2.61        | 31     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:67:LEU:HB3   | 0.44     | 2.48        | 32     | 1     |
| 1:A:338:ILE:O    | 1:A:342:PHE:CE1  | 0.44     | 2.71        | 34     | 1     |
| 1:A:275:ARG:CG   | 1:A:275:ARG:HH11 | 0.44     | 2.26        | 35     | 2     |
| 1:A:74:ILE:HG22  | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.44     | 1.73        | 36     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HA   | 1:A:328:LYS:HE3  | 0.44     | 1.89        | 36     | 1     |
| 1:A:250:GLN:C    | 1:A:252:PRO:HD3  | 0.44     | 2.38        | 42     | 1     |
| 1:A:231:PRO:HG2  | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.44     | 2.28        | 45     | 1     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:328:LYS:CD   | 0.44     | 2.66        | 47     | 1     |
| 1:A:344:CYS:CB   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.44     | 2.66        | 47     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CA   | 1:A:238:GLN:HE21 | 0.44     | 2.26        | 51     | 1     |
| 1:A:326:ARG:NH1  | 1:A:326:ARG:CG   | 0.44     | 2.80        | 55     | 1     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:CG   | 0.44     | 2.43        | 2      | 1     |
| 1:A:46:ILE:CG2   | 1:A:60:ILE:HD12  | 0.44     | 2.43        | 7      | 1     |
| 1:A:36:ARG:H     | 1:A:36:ARG:NE    | 0.44     | 2.11        | 10     | 1     |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:CD1  | 0.44     | 2.41        | 43     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HA   | 1:A:330:LEU:CD1  | 0.44     | 2.43        | 53     | 5     |
| 1:A:255:LEU:CD2  | 1:A:259:LEU:HG   | 0.44     | 2.43        | 16     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HD11 | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.44     | 1.89        | 20     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CG    | 1:A:70:ILE:N     | 0.44     | 2.81        | 21     | 1     |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:242:GLN:N    | 0.44     | 2.51        | 21     | 1     |
| 1:A:328:LYS:C    | 1:A:328:LYS:CD   | 0.44     | 2.91        | 25     | 3     |
| 1:A:245:ARG:HG2  | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.44     | 2.13        | 30     | 2     |
| 1:A:47:TYR:HA    | 1:A:50:TYR:CE2   | 0.44     | 2.48        | 38     | 1     |

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:HB2  | 0.44     | 2.10        | 40     | 3     |
| 1:A:324:ILE:HG12 | 1:A:341:TYR:CB   | 0.44     | 2.43        | 40     | 1     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:30:ALA:HB3   | 0.44     | 2.12        | 54     | 1     |
| 1:A:277:GLN:C    | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.44     | 2.91        | 55     | 1     |
| 1:A:30:ALA:O     | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.44     | 2.70        | 19     | 3     |
| 1:A:73:ARG:HD2   | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.44     | 2.43        | 3      | 1     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:288:PRO:HD3  | 0.44     | 2.43        | 30     | 15    |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:327:LEU:HG   | 0.44     | 2.13        | 49     | 6     |
| 1:A:334:GLU:CD   | 1:A:335:SER:N    | 0.44     | 2.75        | 6      | 1     |
| 1:A:14:PRO:O     | 1:A:15:TYR:C     | 0.44     | 2.61        | 34     | 15    |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.44     | 2.12        | 9      | 1     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:HG3  | 0.44     | 2.13        | 17     | 1     |
| 1:A:69:PHE:O     | 1:A:72:PHE:CB    | 0.44     | 2.66        | 18     | 2     |
| 1:A:325:GLU:OE2  | 1:A:328:LYS:CD   | 0.44     | 2.66        | 26     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CD2   | 1:A:51:GLY:N     | 0.44     | 2.86        | 32     | 1     |
| 1:A:71:HIS:ND1   | 1:A:358:GLN:HG3  | 0.44     | 2.28        | 38     | 1     |
| 1:A:275:ARG:HD2  | 1:A:275:ARG:O    | 0.44     | 2.13        | 41     | 1     |
| 1:A:38:TRP:HA    | 1:A:41:ASN:OD1   | 0.44     | 2.12        | 51     | 2     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:233:GLU:CA   | 0.44     | 2.66        | 49     | 2     |
| 1:A:230:ASN:HD21 | 1:A:232:LEU:C    | 0.44     | 2.21        | 49     | 1     |
| 1:A:244:MET:SD   | 1:A:255:LEU:HD23 | 0.44     | 2.53        | 55     | 1     |
| 1:A:277:GLN:NE2  | 1:A:277:GLN:N    | 0.43     | 2.66        | 1      | 2     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:323:ALA:N    | 0.43     | 2.49        | 28     | 4     |
| 1:A:240:GLN:CG   | 1:A:241:PHE:N    | 0.43     | 2.81        | 5      | 1     |
| 1:A:230:ASN:O    | 1:A:233:GLU:HG2  | 0.43     | 2.13        | 53     | 2     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:245:ARG:CD   | 0.43     | 3.00        | 27     | 2     |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:242:GLN:HA   | 0.43     | 2.12        | 14     | 1     |
| 1:A:22:LEU:O     | 1:A:22:LEU:HG    | 0.43     | 2.13        | 47     | 3     |
| 1:A:281:ILE:HG22 | 1:A:285:ASN:CG   | 0.43     | 2.38        | 18     | 1     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:28:SER:HB2   | 0.43     | 2.13        | 55     | 3     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:347:ASN:CB   | 0.43     | 3.00        | 21     | 1     |
| 1:A:280:PHE:C    | 1:A:282:GLN:HE22 | 0.43     | 2.21        | 23     | 1     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:247:VAL:N    | 0.43     | 2.50        | 50     | 2     |
| 1:A:316:VAL:HG23 | 1:A:317:THR:O    | 0.43     | 2.13        | 41     | 2     |
| 1:A:338:ILE:H    | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.43     | 1.72        | 33     | 1     |
| 1:A:346:LYS:CD   | 1:A:346:LYS:N    | 0.43     | 2.81        | 33     | 1     |
| 1:A:75:GLY:HA2   | 1:A:252:PRO:HB2  | 0.43     | 1.90        | 54     | 3     |
| 1:A:67:LEU:CG    | 1:A:343:ALA:HB1  | 0.43     | 2.42        | 2      | 1     |
| 1:A:284:LEU:C    | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.43     | 2.91        | 2      | 1     |
| 1:A:279:GLN:O    | 1:A:283:MET:CG   | 0.43     | 2.66        | 8      | 1     |
| 1:A:68:LEU:HB3   | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.43     | 2.12        | 12     | 1     |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:76:CYS:SG    | 1:A:78:HIS:HB2   | 0.43     | 2.52        | 15     | 7     |
| 1:A:230:ASN:C    | 1:A:232:LEU:N    | 0.43     | 2.76        | 51     | 4     |
| 1:A:336:LEU:CD2  | 1:A:355:LEU:HD11 | 0.43     | 2.43        | 14     | 2     |
| 1:A:45:HIS:O     | 1:A:46:ILE:C     | 0.43     | 2.62        | 18     | 2     |
| 1:A:325:GLU:O    | 1:A:327:LEU:N    | 0.43     | 2.51        | 19     | 1     |
| 1:A:71:HIS:HA    | 1:A:358:GLN:CD   | 0.43     | 2.38        | 21     | 2     |
| 1:A:245:ARG:CD   | 1:A:288:PRO:HD3  | 0.43     | 2.43        | 25     | 2     |
| 1:A:327:LEU:HB3  | 1:A:337:VAL:CG1  | 0.43     | 2.43        | 25     | 1     |
| 1:A:333:PRO:HD2  | 1:A:336:LEU:CD2  | 0.43     | 2.40        | 27     | 1     |
| 1:A:283:MET:C    | 1:A:285:ASN:H    | 0.43     | 2.21        | 51     | 2     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:249:GLN:HE22 | 0.43     | 2.11        | 33     | 2     |
| 1:A:315:GLN:NE2  | 1:A:346:LYS:HZ1  | 0.43     | 2.11        | 34     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD13 | 1:A:351:ALA:HB1  | 0.43     | 1.90        | 37     | 1     |
| 1:A:326:ARG:O    | 1:A:327:LEU:C    | 0.43     | 2.61        | 42     | 1     |
| 1:A:238:GLN:C    | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.43     | 2.61        | 43     | 1     |
| 1:A:275:ARG:NH1  | 1:A:275:ARG:HG3  | 0.43     | 2.28        | 46     | 1     |
| 1:A:29:GLU:HB2   | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.43     | 2.12        | 49     | 1     |
| 1:A:260:GLN:HA   | 1:A:260:GLN:OE1  | 0.43     | 2.12        | 54     | 1     |
| 1:A:277:GLN:C    | 1:A:281:ILE:HD11 | 0.43     | 2.38        | 55     | 1     |
| 1:A:235:LEU:O    | 1:A:236:ARG:C    | 0.43     | 2.61        | 12     | 4     |
| 1:A:42:LEU:HD11  | 1:A:63:ILE:CD1   | 0.43     | 2.43        | 15     | 4     |
| 1:A:28:SER:O     | 1:A:32:ARG:CB    | 0.43     | 2.66        | 13     | 1     |
| 1:A:347:ASN:O    | 1:A:349:ASN:N    | 0.43     | 2.51        | 13     | 2     |
| 1:A:266:ASN:C    | 1:A:268:GLN:N    | 0.43     | 2.75        | 19     | 3     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:283:MET:CG   | 0.43     | 2.66        | 19     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:283:MET:CE   | 0.43     | 2.42        | 26     | 1     |
| 1:A:285:ASN:ND2  | 1:A:286:GLU:HB3  | 0.43     | 2.27        | 39     | 2     |
| 1:A:244:MET:CB   | 1:A:258:LEU:HD22 | 0.43     | 2.43        | 37     | 1     |
| 1:A:263:GLY:CA   | 1:A:270:LEU:HG   | 0.43     | 2.43        | 40     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HB2  | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.43     | 2.29        | 51     | 1     |
| 1:A:36:ARG:CG    | 1:A:37:ILE:N     | 0.43     | 2.79        | 52     | 1     |
| 1:A:34:PHE:N     | 1:A:34:PHE:CD1   | 0.43     | 2.87        | 17     | 2     |
| 1:A:35:PRO:HG2   | 1:A:38:TRP:CB    | 0.43     | 2.43        | 6      | 12    |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:341:TYR:HB3  | 0.43     | 1.89        | 1      | 1     |
| 1:A:269:LEU:HG   | 1:A:273:ILE:HD13 | 0.43     | 1.89        | 2      | 1     |
| 1:A:344:CYS:O    | 1:A:345:GLU:CB   | 0.43     | 2.67        | 47     | 20    |
| 1:A:26:LEU:HA    | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.43     | 2.12        | 20     | 3     |
| 1:A:245:ARG:CG   | 1:A:245:ARG:HH11 | 0.43     | 2.26        | 5      | 1     |
| 1:A:357:SER:C    | 1:A:359:ASN:H    | 0.43     | 2.21        | 8      | 13    |
| 1:A:232:LEU:HD13 | 1:A:273:ILE:HG13 | 0.43     | 1.90        | 6      | 1     |
| 1:A:30:ALA:O     | 1:A:34:PHE:HB2   | 0.43     | 2.13        | 9      | 13    |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:241:PHE:CB   | 0.43     | 2.42        | 23     | 4     |
| 1:A:42:LEU:CD2   | 1:A:60:ILE:HG13  | 0.43     | 2.43        | 13     | 1     |
| 1:A:231:PRO:HB2  | 1:A:272:GLN:NE2  | 0.43     | 2.27        | 16     | 1     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:242:GLN:N    | 0.43     | 2.66        | 17     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD3  | 1:A:334:GLU:N    | 0.43     | 2.28        | 43     | 2     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:344:CYS:HB3  | 0.43     | 2.12        | 23     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:GLN:HG2  | 0.43     | 1.90        | 26     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD23 | 1:A:232:LEU:N    | 0.43     | 2.28        | 27     | 1     |
| 1:A:282:GLN:CA   | 1:A:285:ASN:ND2  | 0.43     | 2.81        | 30     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HB2  | 1:A:337:VAL:HG21 | 0.43     | 1.87        | 31     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HA    | 1:A:63:ILE:HD12  | 0.43     | 1.90        | 33     | 1     |
| 1:A:71:HIS:CG    | 1:A:358:GLN:HE21 | 0.43     | 2.31        | 33     | 2     |
| 1:A:328:LYS:HG3  | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.43     | 2.41        | 37     | 1     |
| 1:A:345:GLU:OE1  | 1:A:345:GLU:HA   | 0.43     | 2.14        | 37     | 1     |
| 1:A:234:PHE:C    | 1:A:236:ARG:N    | 0.43     | 2.76        | 52     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HH21 | 1:A:286:GLU:C    | 0.43     | 2.21        | 54     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HG3   | 1:A:357:SER:CB   | 0.43     | 2.44        | 6      | 7     |
| 1:A:238:GLN:O    | 1:A:242:GLN:HG2  | 0.43     | 2.14        | 36     | 4     |
| 1:A:63:ILE:O     | 1:A:67:LEU:HB2   | 0.43     | 2.13        | 22     | 6     |
| 1:A:349:ASN:CG   | 1:A:350:LEU:N    | 0.43     | 2.75        | 5      | 1     |
| 1:A:29:GLU:HB2   | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.43     | 2.13        | 7      | 1     |
| 1:A:252:PRO:C    | 1:A:254:LEU:H    | 0.43     | 2.22        | 25     | 5     |
| 1:A:241:PHE:CE1  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.43     | 2.94        | 55     | 2     |
| 1:A:15:TYR:CD1   | 1:A:58:GLU:OE2   | 0.43     | 2.72        | 12     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HA   | 1:A:328:LYS:HE2  | 0.43     | 1.90        | 14     | 1     |
| 1:A:22:LEU:HD12  | 1:A:22:LEU:C     | 0.43     | 2.38        | 16     | 1     |
| 1:A:58:GLU:O     | 1:A:61:ILE:N     | 0.43     | 2.50        | 18     | 1     |
| 1:A:67:LEU:C     | 1:A:69:PHE:N     | 0.43     | 2.76        | 39     | 3     |
| 1:A:328:LYS:HG2  | 1:A:333:PRO:C    | 0.43     | 2.38        | 22     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HG2  | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.43     | 2.13        | 23     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HD11 | 1:A:338:ILE:HD11 | 0.43     | 1.91        | 25     | 1     |
| 1:A:65:GLN:C     | 1:A:67:LEU:N     | 0.43     | 2.75        | 53     | 4     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:29:GLU:HA    | 0.43     | 2.14        | 34     | 2     |
| 1:A:285:ASN:HD22 | 1:A:286:GLU:N    | 0.43     | 2.10        | 39     | 1     |
| 1:A:56:GLY:O     | 1:A:60:ILE:HB    | 0.43     | 2.14        | 51     | 3     |
| 1:A:341:TYR:CE1  | 1:A:346:LYS:CA   | 0.43     | 3.01        | 48     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CD1   | 1:A:58:GLU:OE2   | 0.43     | 2.72        | 49     | 1     |
| 1:A:78:HIS:HE2   | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.43     | 1.52        | 53     | 1     |
| 1:A:234:PHE:O    | 1:A:237:ASP:CG   | 0.43     | 2.61        | 53     | 1     |
| 1:A:266:ASN:OD1  | 1:A:269:LEU:HB2  | 0.43     | 2.14        | 53     | 1     |
| 1:A:286:GLU:HB2  | 1:A:287:PRO:HD2  | 0.43     | 1.91        | 51     | 6     |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:328:LYS:CB   | 1:A:337:VAL:HG11 | 0.43     | 2.39        | 5      | 3     |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:360:PHE:HZ   | 0.43     | 1.96        | 45     | 10    |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:277:GLN:HG2  | 0.43     | 2.13        | 40     | 2     |
| 1:A:25:GLU:HA    | 1:A:28:SER:OG    | 0.43     | 2.14        | 7      | 1     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:HG    | 0.43     | 2.13        | 13     | 1     |
| 1:A:74:ILE:O     | 1:A:252:PRO:HB2  | 0.43     | 2.14        | 30     | 2     |
| 1:A:65:GLN:HA    | 1:A:68:LEU:CD1   | 0.43     | 2.44        | 16     | 1     |
| 1:A:77:ARG:CG    | 1:A:77:ARG:HH11  | 0.43     | 2.26        | 26     | 1     |
| 1:A:42:LEU:HD21  | 1:A:63:ILE:HG21  | 0.43     | 1.90        | 27     | 1     |
| 1:A:44:GLN:CD    | 1:A:44:GLN:O     | 0.43     | 2.61        | 35     | 2     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:42:LEU:HG    | 0.43     | 2.49        | 36     | 1     |
| 1:A:342:PHE:CD2  | 1:A:346:LYS:CG   | 0.43     | 3.02        | 47     | 2     |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:337:VAL:CB   | 0.43     | 2.67        | 37     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HB3  | 1:A:245:ARG:CZ   | 0.43     | 2.43        | 41     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HH21 | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.43     | 2.11        | 45     | 1     |
| 1:A:38:TRP:HE3   | 1:A:39:LEU:HD22  | 0.43     | 1.73        | 46     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:352:ALA:HB2  | 0.43     | 1.89        | 47     | 1     |
| 1:A:234:PHE:N    | 1:A:234:PHE:HD1  | 0.43     | 2.12        | 46     | 4     |
| 1:A:350:LEU:O    | 1:A:353:ASN:HB2  | 0.43     | 2.14        | 5      | 2     |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:355:LEU:HB3  | 0.43     | 2.14        | 5      | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG13 | 1:A:342:PHE:HE2  | 0.43     | 1.73        | 6      | 1     |
| 1:A:280:PHE:CD2  | 1:A:284:LEU:HD13 | 0.43     | 2.49        | 33     | 2     |
| 1:A:73:ARG:HB2   | 1:A:255:LEU:HD22 | 0.43     | 1.89        | 39     | 3     |
| 1:A:26:LEU:HD21  | 1:A:65:GLN:HG3   | 0.43     | 1.88        | 15     | 1     |
| 1:A:314:ILE:O    | 1:A:342:PHE:HE1  | 0.43     | 1.95        | 27     | 3     |
| 1:A:34:PHE:CD2   | 1:A:35:PRO:HD2   | 0.43     | 2.48        | 20     | 1     |
| 1:A:347:ASN:O    | 1:A:351:ALA:N    | 0.43     | 2.51        | 23     | 2     |
| 1:A:73:ARG:CB    | 1:A:256:PRO:HD3  | 0.43     | 2.43        | 25     | 1     |
| 1:A:255:LEU:O    | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.43     | 2.67        | 26     | 1     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:HB3   | 0.43     | 2.13        | 28     | 3     |
| 1:A:41:ASN:O     | 1:A:350:LEU:HD11 | 0.43     | 2.14        | 29     | 1     |
| 1:A:42:LEU:C     | 1:A:42:LEU:CD2   | 0.43     | 2.87        | 55     | 2     |
| 1:A:45:HIS:HD2   | 1:A:350:LEU:HD22 | 0.43     | 1.74        | 31     | 1     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:324:ILE:HG13 | 0.43     | 2.14        | 36     | 1     |
| 1:A:314:ILE:C    | 1:A:315:GLN:CD   | 0.43     | 2.86        | 39     | 1     |
| 1:A:234:PHE:N    | 1:A:234:PHE:HD2  | 0.43     | 2.12        | 45     | 1     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:328:LYS:HD2  | 0.43     | 2.13        | 47     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CG   | 1:A:236:ARG:HH11 | 0.43     | 2.26        | 48     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:320:GLU:N    | 0.43     | 2.52        | 51     | 1     |
| 1:A:15:TYR:CZ    | 1:A:18:TRP:HZ3   | 0.43     | 2.32        | 11     | 3     |
| 1:A:49:THR:HG23  | 1:A:50:TYR:CD1   | 0.43     | 2.49        | 10     | 1     |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:321:LYS:HZ1  | 1:A:334:GLU:CD   | 0.43     | 2.22        | 15     | 1     |
| 1:A:230:ASN:HD22 | 1:A:233:GLU:CG   | 0.43     | 2.27        | 16     | 1     |
| 1:A:59:ALA:C     | 1:A:61:ILE:N     | 0.43     | 2.76        | 33     | 2     |
| 1:A:249:GLN:HG2  | 1:A:285:ASN:CA   | 0.43     | 2.44        | 20     | 1     |
| 1:A:270:LEU:O    | 1:A:270:LEU:HG   | 0.43     | 2.14        | 28     | 2     |
| 1:A:263:GLY:O    | 1:A:267:PRO:HG3  | 0.43     | 2.14        | 46     | 2     |
| 1:A:326:ARG:CG   | 1:A:326:ARG:HH11 | 0.43     | 2.26        | 55     | 2     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:336:LEU:HG   | 0.43     | 2.14        | 32     | 3     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:277:GLN:HB2  | 0.43     | 2.13        | 36     | 1     |
| 1:A:334:GLU:O    | 1:A:334:GLU:HG2  | 0.43     | 2.13        | 41     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:251:ASN:HB2  | 0.43     | 2.43        | 42     | 1     |
| 1:A:240:GLN:HA   | 1:A:243:ASN:ND2  | 0.43     | 2.29        | 46     | 1     |
| 1:A:358:GLN:CG   | 1:A:360:PHE:CE2  | 0.43     | 3.02        | 46     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CZ   | 1:A:283:MET:HE2  | 0.43     | 2.44        | 48     | 1     |
| 1:A:336:LEU:C    | 1:A:339:GLN:HG2  | 0.43     | 2.39        | 48     | 2     |
| 1:A:323:ALA:HA   | 1:A:326:ARG:CZ   | 0.43     | 2.44        | 51     | 1     |
| 1:A:29:GLU:O     | 1:A:32:ARG:HG2   | 0.43     | 2.14        | 52     | 1     |
| 1:A:77:ARG:CZ    | 1:A:78:HIS:HA    | 0.43     | 2.44        | 8      | 1     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:34:PHE:CE2   | 0.43     | 2.48        | 53     | 2     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:334:GLU:CA   | 0.43     | 2.44        | 10     | 3     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:279:GLN:HE21 | 0.43     | 2.11        | 12     | 1     |
| 1:A:244:MET:O    | 1:A:245:ARG:C    | 0.43     | 2.62        | 22     | 3     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:354:PHE:CG   | 0.43     | 2.48        | 27     | 2     |
| 1:A:29:GLU:O     | 1:A:33:HIS:HB2   | 0.43     | 2.14        | 29     | 1     |
| 1:A:63:ILE:CG2   | 1:A:64:LEU:N     | 0.43     | 2.82        | 30     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG21  | 1:A:60:ILE:CG1   | 0.43     | 2.40        | 43     | 1     |
| 1:A:272:GLN:OE1  | 1:A:275:ARG:HD3  | 0.43     | 2.13        | 48     | 1     |
| 1:A:278:GLU:OE2  | 1:A:282:GLN:OE1  | 0.43     | 2.37        | 51     | 1     |
| 1:A:15:TYR:HB3   | 1:A:54:TRP:NE1   | 0.43     | 2.29        | 53     | 1     |
| 1:A:319:GLN:O    | 1:A:322:GLU:HG3  | 0.43     | 2.14        | 53     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CG   | 1:A:329:ALA:N    | 0.43     | 2.82        | 54     | 1     |
| 1:A:15:TYR:N     | 1:A:15:TYR:HD2   | 0.43     | 2.10        | 55     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HA    | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.43     | 1.90        | 55     | 1     |
| 1:A:258:LEU:O    | 1:A:259:LEU:C    | 0.43     | 2.62        | 36     | 21    |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:283:MET:HG2  | 0.43     | 2.44        | 2      | 1     |
| 1:A:342:PHE:HD2  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.43     | 2.26        | 3      | 3     |
| 1:A:272:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HG3  | 0.43     | 2.14        | 4      | 1     |
| 1:A:16:ASN:HA    | 1:A:54:TRP:CH2   | 0.43     | 2.48        | 6      | 2     |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:273:ILE:HG12 | 0.43     | 2.14        | 23     | 2     |
| 1:A:283:MET:CG   | 1:A:284:LEU:N    | 0.43     | 2.82        | 36     | 6     |
| 1:A:27:LYS:CA    | 1:A:31:VAL:HB    | 0.43     | 2.44        | 13     | 2     |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:321:LYS:CD   | 1:A:321:LYS:C    | 0.43     | 2.92        | 21     | 1     |
| 1:A:42:LEU:CD1   | 1:A:60:ILE:CG1   | 0.43     | 2.95        | 29     | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:CA   | 0.43     | 2.65        | 29     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.43     | 2.80        | 30     | 1     |
| 1:A:230:ASN:C    | 1:A:232:LEU:H    | 0.43     | 2.22        | 51     | 3     |
| 1:A:259:LEU:HD11 | 1:A:273:ILE:HG21 | 0.43     | 1.91        | 33     | 1     |
| 1:A:14:PRO:CB    | 1:A:18:TRP:CB    | 0.43     | 2.96        | 37     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE1  | 1:A:283:MET:HE3  | 0.43     | 1.66        | 43     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CG1  | 1:A:255:LEU:HB2  | 0.43     | 2.44        | 52     | 2     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:278:GLU:CD   | 0.43     | 2.62        | 48     | 1     |
| 1:A:65:GLN:NE2   | 1:A:275:ARG:HA   | 0.43     | 2.29        | 49     | 1     |
| 1:A:345:GLU:OE1  | 1:A:346:LYS:HD3  | 0.42     | 2.14        | 1      | 1     |
| 1:A:242:GLN:N    | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.42     | 2.52        | 15     | 1     |
| 1:A:58:GLU:OE2   | 1:A:58:GLU:C     | 0.42     | 2.62        | 19     | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:323:ALA:HB2  | 0.42     | 2.13        | 23     | 1     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:58:GLU:HG2   | 0.42     | 2.14        | 28     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:270:LEU:HD12 | 0.42     | 2.49        | 28     | 1     |
| 1:A:33:HIS:HB3   | 1:A:71:HIS:CE1   | 0.42     | 2.48        | 29     | 1     |
| 1:A:326:ARG:C    | 1:A:326:ARG:CD   | 0.42     | 2.92        | 44     | 2     |
| 1:A:233:GLU:OE1  | 1:A:234:PHE:HB3  | 0.42     | 2.14        | 31     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.42     | 1.91        | 31     | 1     |
| 1:A:60:ILE:HG13  | 1:A:61:ILE:N     | 0.42     | 2.28        | 37     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH1  | 1:A:246:GLN:HA   | 0.42     | 2.28        | 38     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:334:GLU:CB   | 0.42     | 2.44        | 39     | 2     |
| 1:A:314:ILE:HG12 | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.42     | 2.43        | 47     | 1     |
| 1:A:251:ASN:OD1  | 1:A:251:ASN:O    | 0.42     | 2.36        | 52     | 1     |
| 1:A:281:ILE:O    | 1:A:285:ASN:HB2  | 0.42     | 2.14        | 27     | 6     |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:341:TYR:HB2  | 0.42     | 1.91        | 33     | 2     |
| 1:A:15:TYR:O     | 1:A:54:TRP:HZ2   | 0.42     | 1.95        | 19     | 4     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:58:GLU:HG3   | 0.42     | 2.14        | 5      | 1     |
| 1:A:244:MET:CB   | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.42     | 2.97        | 6      | 1     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:275:ARG:HA   | 0.42     | 2.14        | 8      | 1     |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:355:LEU:HG   | 0.42     | 2.14        | 9      | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.42     | 3.02        | 11     | 1     |
| 1:A:314:ILE:CG1  | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.42     | 2.43        | 14     | 1     |
| 1:A:239:PRO:HD2  | 1:A:240:GLN:OE1  | 0.42     | 2.13        | 18     | 1     |
| 1:A:239:PRO:HG2  | 1:A:240:GLN:OE1  | 0.42     | 2.14        | 18     | 1     |
| 1:A:284:LEU:C    | 1:A:285:ASN:HD22 | 0.42     | 2.22        | 18     | 1     |
| 1:A:62:ARG:O     | 1:A:65:GLN:HG3   | 0.42     | 2.15        | 21     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE1  | 1:A:346:LYS:CG   | 0.42     | 2.67        | 22     | 1     |
| 1:A:45:HIS:HB2   | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.42     | 2.14        | 23     | 3     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:233:GLU:O    | 1:A:235:LEU:N    | 0.42     | 2.52        | 25     | 3     |
| 1:A:238:GLN:HB3  | 1:A:240:GLN:OE1  | 0.42     | 2.14        | 29     | 1     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:241:PHE:CD2  | 0.42     | 2.72        | 29     | 1     |
| 1:A:317:THR:O    | 1:A:321:LYS:HE3  | 0.42     | 2.13        | 31     | 1     |
| 1:A:272:GLN:OE1  | 1:A:272:GLN:CA   | 0.42     | 2.66        | 34     | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:322:GLU:HA   | 0.42     | 2.13        | 36     | 1     |
| 1:A:266:ASN:ND2  | 1:A:269:LEU:HB2  | 0.42     | 2.28        | 37     | 1     |
| 1:A:317:THR:CG2  | 1:A:318:PRO:HD3  | 0.42     | 2.43        | 45     | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:344:CYS:HB2  | 0.42     | 2.13        | 46     | 1     |
| 1:A:335:SER:O    | 1:A:338:ILE:HG22 | 0.42     | 2.15        | 50     | 1     |
| 1:A:271:GLN:O    | 1:A:275:ARG:HB2  | 0.42     | 2.14        | 2      | 7     |
| 1:A:268:GLN:OE1  | 1:A:268:GLN:C    | 0.42     | 2.62        | 4      | 1     |
| 1:A:274:SER:O    | 1:A:277:GLN:HG2  | 0.42     | 2.13        | 12     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CD2   | 1:A:277:GLN:CD   | 0.42     | 2.98        | 13     | 1     |
| 1:A:266:ASN:O    | 1:A:268:GLN:N    | 0.42     | 2.52        | 19     | 1     |
| 1:A:249:GLN:NE2  | 1:A:286:GLU:O    | 0.42     | 2.53        | 20     | 1     |
| 1:A:282:GLN:OE1  | 1:A:283:MET:N    | 0.42     | 2.52        | 23     | 1     |
| 1:A:351:ALA:O    | 1:A:352:ALA:C    | 0.42     | 2.60        | 25     | 1     |
| 1:A:66:GLN:OE1   | 1:A:66:GLN:O     | 0.42     | 2.37        | 26     | 1     |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:288:PRO:CG   | 0.42     | 2.66        | 28     | 1     |
| 1:A:77:ARG:O     | 1:A:77:ARG:HG2   | 0.42     | 2.14        | 54     | 2     |
| 1:A:248:ILE:HD13 | 1:A:255:LEU:CD2  | 0.42     | 2.43        | 31     | 1     |
| 1:A:66:GLN:C     | 1:A:68:LEU:N     | 0.42     | 2.74        | 32     | 1     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:62:ARG:HG3   | 0.42     | 2.14        | 33     | 1     |
| 1:A:325:GLU:CD   | 1:A:334:GLU:OE1  | 0.42     | 2.62        | 36     | 1     |
| 1:A:344:CYS:SG   | 1:A:347:ASN:C    | 0.42     | 3.02        | 40     | 1     |
| 1:A:344:CYS:CB   | 1:A:351:ALA:N    | 0.42     | 2.82        | 40     | 1     |
| 1:A:326:ARG:HG3  | 1:A:326:ARG:HH11 | 0.42     | 1.75        | 51     | 1     |
| 1:A:352:ALA:O    | 1:A:355:LEU:N    | 0.42     | 2.52        | 51     | 1     |
| 1:A:16:ASN:HA    | 1:A:54:TRP:CE2   | 0.42     | 2.49        | 5      | 3     |
| 1:A:23:LEU:HD13  | 1:A:61:ILE:CD1   | 0.42     | 2.44        | 7      | 1     |
| 1:A:316:VAL:CG1  | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.42     | 2.27        | 16     | 6     |
| 1:A:280:PHE:CE2  | 1:A:284:LEU:HD12 | 0.42     | 2.50        | 8      | 1     |
| 1:A:348:GLU:O    | 1:A:349:ASN:C    | 0.42     | 2.63        | 22     | 11    |
| 1:A:68:LEU:HB2   | 1:A:277:GLN:CB   | 0.42     | 2.44        | 10     | 1     |
| 1:A:75:GLY:O     | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.42     | 2.73        | 12     | 1     |
| 1:A:259:LEU:O    | 1:A:262:LEU:HB3  | 0.42     | 2.14        | 13     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HZ2  | 1:A:325:GLU:CG   | 0.42     | 2.27        | 15     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:CD2   | 0.42     | 3.02        | 19     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HD1   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.42     | 2.32        | 23     | 1     |
| 1:A:315:GLN:O    | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.42     | 1.98        | 36     | 2     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:328:LYS:CB   | 1:A:332:PHE:O    | 0.42     | 2.67        | 46     | 2     |
| 1:A:46:ILE:HD12  | 1:A:345:GLU:HB2  | 0.42     | 1.92        | 50     | 1     |
| 1:A:315:GLN:HG2  | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.42     | 2.49        | 54     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HD3  | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.42     | 2.14        | 55     | 1     |
| 1:A:278:GLU:HA   | 1:A:281:ILE:HG12 | 0.42     | 1.92        | 55     | 1     |
| 1:A:286:GLU:O    | 1:A:286:GLU:CG   | 0.42     | 2.68        | 55     | 1     |
| 1:A:360:PHE:C    | 1:A:360:PHE:HD1  | 0.42     | 2.21        | 55     | 1     |
| 1:A:317:THR:C    | 1:A:319:GLN:H    | 0.42     | 2.23        | 55     | 2     |
| 1:A:26:LEU:CD1   | 1:A:65:GLN:NE2   | 0.42     | 2.83        | 11     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HA   | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.42     | 2.49        | 12     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HD2  | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.42     | 2.12        | 14     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CD1  | 1:A:338:ILE:HA   | 0.42     | 2.45        | 16     | 1     |
| 1:A:54:TRP:C     | 1:A:56:GLY:H     | 0.42     | 2.22        | 23     | 2     |
| 1:A:251:ASN:ND2  | 1:A:251:ASN:N    | 0.42     | 2.67        | 23     | 1     |
| 1:A:251:ASN:CG   | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.42     | 2.91        | 23     | 1     |
| 1:A:38:TRP:HZ3   | 1:A:64:LEU:HD21  | 0.42     | 1.73        | 25     | 2     |
| 1:A:267:PRO:O    | 1:A:271:GLN:HB2  | 0.42     | 2.13        | 27     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:344:CYS:SG   | 0.42     | 2.55        | 28     | 1     |
| 1:A:69:PHE:N     | 1:A:277:GLN:HG2  | 0.42     | 2.29        | 30     | 1     |
| 1:A:356:LEU:C    | 1:A:360:PHE:HE2  | 0.42     | 2.22        | 31     | 3     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:68:LEU:HB2   | 0.42     | 2.15        | 36     | 2     |
| 1:A:242:GLN:NE2  | 1:A:288:PRO:CB   | 0.42     | 2.82        | 40     | 1     |
| 1:A:350:LEU:HA   | 1:A:353:ASN:OD1  | 0.42     | 2.14        | 40     | 1     |
| 1:A:30:ALA:HB1   | 1:A:64:LEU:HD23  | 0.42     | 1.90        | 41     | 1     |
| 1:A:73:ARG:NH2   | 1:A:339:GLN:HE22 | 0.42     | 2.11        | 41     | 1     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:243:ASN:C    | 0.42     | 2.77        | 46     | 1     |
| 1:A:54:TRP:O     | 1:A:58:GLU:CG    | 0.42     | 2.67        | 48     | 1     |
| 1:A:58:GLU:O     | 1:A:58:GLU:OE1   | 0.42     | 2.38        | 52     | 1     |
| 1:A:74:ILE:CB    | 1:A:358:GLN:OE1  | 0.42     | 2.67        | 55     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CD   | 1:A:249:GLN:HE22 | 0.42     | 2.27        | 55     | 1     |
| 1:A:22:LEU:CD2   | 1:A:22:LEU:C     | 0.42     | 2.92        | 1      | 1     |
| 1:A:269:LEU:CG   | 1:A:273:ILE:HD13 | 0.42     | 2.44        | 2      | 1     |
| 1:A:357:SER:C    | 1:A:359:ASN:N    | 0.42     | 2.78        | 8      | 5     |
| 1:A:58:GLU:O     | 1:A:58:GLU:CG    | 0.42     | 2.68        | 27     | 2     |
| 1:A:68:LEU:HB2   | 1:A:277:GLN:HB3  | 0.42     | 1.91        | 10     | 1     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:26:LEU:HB3   | 0.42     | 2.15        | 12     | 1     |
| 1:A:243:ASN:OD1  | 1:A:243:ASN:C    | 0.42     | 2.61        | 15     | 1     |
| 1:A:233:GLU:C    | 1:A:236:ARG:HE   | 0.42     | 2.23        | 16     | 1     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:268:GLN:OE1  | 0.42     | 2.37        | 17     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HD23 | 1:A:336:LEU:O    | 0.42     | 2.15        | 19     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CD   | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.42     | 2.67        | 30     | 1     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:36:ARG:O     | 1:A:37:ILE:C     | 0.42     | 2.63        | 32     | 1     |
| 1:A:335:SER:C    | 1:A:337:VAL:N    | 0.42     | 2.76        | 35     | 1     |
| 1:A:273:ILE:HG13 | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.42     | 2.49        | 45     | 1     |
| 1:A:333:PRO:HB2  | 1:A:336:LEU:CB   | 0.42     | 2.45        | 46     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HG2  | 1:A:328:LYS:NZ   | 0.42     | 2.29        | 52     | 1     |
| 1:A:323:ALA:CB   | 1:A:348:GLU:OE1  | 0.42     | 2.68        | 54     | 1     |
| 1:A:37:ILE:CD1   | 1:A:38:TRP:H     | 0.42     | 2.28        | 3      | 3     |
| 1:A:264:GLN:O    | 1:A:267:PRO:HD3  | 0.42     | 2.15        | 36     | 3     |
| 1:A:328:LYS:O    | 1:A:328:LYS:HE2  | 0.42     | 2.14        | 35     | 3     |
| 1:A:244:MET:CG   | 1:A:248:ILE:HD12 | 0.42     | 2.45        | 9      | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:68:LEU:CD2   | 0.42     | 2.64        | 12     | 1     |
| 1:A:49:THR:HG22  | 1:A:50:TYR:CD1   | 0.42     | 2.50        | 15     | 1     |
| 1:A:16:ASN:OD1   | 1:A:16:ASN:C     | 0.42     | 2.61        | 20     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HG3   | 1:A:360:PHE:O    | 0.42     | 2.15        | 26     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG22  | 1:A:50:TYR:HE2   | 0.42     | 1.74        | 28     | 2     |
| 1:A:58:GLU:HG3   | 1:A:59:ALA:N     | 0.42     | 2.29        | 28     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CB   | 1:A:256:PRO:HD3  | 0.42     | 2.45        | 36     | 1     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:27:LYS:HG2   | 0.42     | 2.15        | 37     | 1     |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:326:ARG:N    | 0.42     | 2.52        | 42     | 1     |
| 1:A:323:ALA:CB   | 1:A:326:ARG:HH21 | 0.42     | 2.28        | 48     | 2     |
| 1:A:50:TYR:HD1   | 1:A:51:GLY:N     | 0.42     | 2.10        | 46     | 1     |
| 1:A:62:ARG:NH1   | 1:A:62:ARG:CB    | 0.42     | 2.83        | 46     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:334:GLU:CB   | 0.42     | 2.45        | 46     | 1     |
| 1:A:243:ASN:ND2  | 1:A:258:LEU:CD2  | 0.42     | 2.83        | 52     | 1     |
| 1:A:319:GLN:CD   | 1:A:319:GLN:N    | 0.42     | 2.78        | 52     | 1     |
| 1:A:52:ASP:O     | 1:A:53:THR:O     | 0.42     | 2.38        | 54     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HG   | 1:A:241:PHE:HB2  | 0.42     | 1.90        | 15     | 7     |
| 1:A:36:ARG:CZ    | 1:A:36:ARG:HB3   | 0.42     | 2.44        | 6      | 1     |
| 1:A:74:ILE:CG2   | 1:A:359:ASN:HD21 | 0.42     | 2.26        | 6      | 1     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:346:LYS:C    | 0.42     | 2.63        | 13     | 4     |
| 1:A:69:PHE:HE1   | 1:A:273:ILE:CG2  | 0.42     | 2.28        | 9      | 1     |
| 1:A:36:ARG:N     | 1:A:36:ARG:CD    | 0.42     | 2.83        | 11     | 2     |
| 1:A:321:LYS:HZ3  | 1:A:325:GLU:CG   | 0.42     | 2.28        | 12     | 1     |
| 1:A:33:HIS:O     | 1:A:71:HIS:ND1   | 0.42     | 2.53        | 34     | 2     |
| 1:A:69:PHE:CB    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.42     | 2.82        | 19     | 1     |
| 1:A:270:LEU:HD23 | 1:A:271:GLN:N    | 0.42     | 2.29        | 19     | 1     |
| 1:A:241:PHE:CE2  | 1:A:280:PHE:CE1  | 0.42     | 3.08        | 20     | 1     |
| 1:A:18:TRP:HA    | 1:A:21:GLU:OE2   | 0.42     | 2.15        | 22     | 1     |
| 1:A:74:ILE:CG2   | 1:A:359:ASN:O    | 0.42     | 2.68        | 35     | 1     |
| 1:A:244:MET:HA   | 1:A:258:LEU:CD2  | 0.42     | 2.45        | 35     | 1     |
| 1:A:242:GLN:O    | 1:A:246:GLN:HB2  | 0.42     | 2.15        | 37     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:73:ARG:CG    | 1:A:74:ILE:CD1   | 0.42     | 2.97        | 39     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:280:PHE:CE2  | 0.42     | 2.27        | 43     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HH12 | 1:A:284:LEU:CD2  | 0.42     | 2.26        | 45     | 1     |
| 1:A:67:LEU:N     | 1:A:67:LEU:HD22  | 0.42     | 2.30        | 46     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HB2   | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.42     | 2.15        | 47     | 1     |
| 1:A:233:GLU:CD   | 1:A:236:ARG:HH21 | 0.42     | 2.22        | 54     | 1     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:238:GLN:HG2  | 0.42     | 2.40        | 55     | 1     |
| 1:A:233:GLU:C    | 1:A:235:LEU:H    | 0.42     | 2.22        | 16     | 11    |
| 1:A:77:ARG:HH11  | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.42     | 2.13        | 9      | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:269:LEU:CD1  | 0.42     | 2.43        | 27     | 2     |
| 1:A:347:ASN:O    | 1:A:348:GLU:C    | 0.42     | 2.63        | 13     | 4     |
| 1:A:245:ARG:HD2  | 1:A:245:ARG:O    | 0.42     | 2.15        | 18     | 1     |
| 1:A:257:ALA:O    | 1:A:260:GLN:HB3  | 0.42     | 2.15        | 21     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:334:GLU:HA   | 0.42     | 1.92        | 24     | 1     |
| 1:A:73:ARG:HH22  | 1:A:260:GLN:NE2  | 0.42     | 2.13        | 29     | 1     |
| 1:A:242:GLN:HE21 | 1:A:242:GLN:N    | 0.42     | 2.13        | 30     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CB   | 1:A:288:PRO:CG   | 0.42     | 2.97        | 31     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HZ    | 1:A:259:LEU:CG   | 0.42     | 2.27        | 35     | 1     |
| 1:A:26:LEU:CD2   | 1:A:26:LEU:C     | 0.42     | 2.93        | 46     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CD   | 1:A:288:PRO:O    | 0.42     | 2.67        | 47     | 1     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:278:GLU:OE1  | 0.42     | 2.38        | 48     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD12  | 1:A:345:GLU:HG3  | 0.42     | 1.91        | 50     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CA   | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.42     | 2.67        | 51     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG21 | 1:A:338:ILE:HD13 | 0.42     | 1.92        | 51     | 1     |
| 1:A:238:GLN:NE2  | 1:A:238:GLN:O    | 0.42     | 2.53        | 53     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE1  | 1:A:341:TYR:OH   | 0.42     | 2.33        | 54     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HD3  | 1:A:249:GLN:NE2  | 0.42     | 2.30        | 55     | 1     |
| 1:A:341:TYR:CE2  | 1:A:348:GLU:HG2  | 0.42     | 2.49        | 55     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HG2  | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.42     | 2.15        | 3      | 2     |
| 1:A:327:LEU:HD23 | 1:A:352:ALA:HA   | 0.42     | 1.92        | 3      | 2     |
| 1:A:278:GLU:C    | 1:A:282:GLN:HE21 | 0.42     | 2.23        | 8      | 1     |
| 1:A:321:LYS:CD   | 1:A:324:ILE:HB   | 0.42     | 2.45        | 15     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HB2   | 1:A:31:VAL:CG2   | 0.42     | 2.45        | 16     | 1     |
| 1:A:322:GLU:O    | 1:A:326:ARG:HB2  | 0.42     | 2.15        | 16     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HD2  | 1:A:325:GLU:HG3  | 0.42     | 1.92        | 17     | 1     |
| 1:A:65:GLN:HG2   | 1:A:274:SER:O    | 0.42     | 2.15        | 20     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HD23 | 1:A:276:HIS:HB2  | 0.42     | 1.91        | 20     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HE2  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.42     | 2.28        | 23     | 1     |
| 1:A:349:ASN:HD22 | 1:A:350:LEU:N    | 0.42     | 2.13        | 28     | 1     |
| 1:A:356:LEU:HD13 | 1:A:356:LEU:HA   | 0.42     | 1.76        | 32     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HD11  | 1:A:345:GLU:HG2  | 0.42     | 1.91        | 34     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:38:TRP:HE1   | 1:A:350:LEU:CD2  | 0.42     | 2.28        | 42     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CG   | 1:A:355:LEU:HD12 | 0.42     | 2.50        | 46     | 1     |
| 1:A:27:LYS:O     | 1:A:28:SER:C     | 0.41     | 2.63        | 36     | 13    |
| 1:A:358:GLN:CD   | 1:A:358:GLN:C    | 0.41     | 2.87        | 5      | 1     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:231:PRO:CD   | 0.41     | 2.68        | 24     | 2     |
| 1:A:328:LYS:O    | 1:A:328:LYS:HD3  | 0.41     | 2.14        | 46     | 2     |
| 1:A:24:GLU:O     | 1:A:27:LYS:HG3   | 0.41     | 2.15        | 10     | 1     |
| 1:A:23:LEU:CD1   | 1:A:61:ILE:HG13  | 0.41     | 2.45        | 11     | 1     |
| 1:A:242:GLN:OE1  | 1:A:288:PRO:HG3  | 0.41     | 2.15        | 28     | 2     |
| 1:A:259:LEU:HD23 | 1:A:259:LEU:HA   | 0.41     | 1.75        | 14     | 1     |
| 1:A:277:GLN:C    | 1:A:281:ILE:HG13 | 0.41     | 2.40        | 15     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CD2   | 1:A:67:LEU:HD22  | 0.41     | 2.50        | 16     | 1     |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:20:LEU:N     | 0.41     | 2.53        | 29     | 4     |
| 1:A:273:ILE:CG1  | 1:A:280:PHE:CG   | 0.41     | 3.03        | 17     | 1     |
| 1:A:57:VAL:O     | 1:A:61:ILE:HG12  | 0.41     | 2.15        | 18     | 1     |
| 1:A:70:ILE:O     | 1:A:71:HIS:C     | 0.41     | 2.63        | 52     | 3     |
| 1:A:244:MET:CA   | 1:A:247:VAL:HG22 | 0.41     | 2.42        | 20     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HG3  | 1:A:249:GLN:OE1  | 0.41     | 2.15        | 20     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:288:PRO:HG3  | 0.41     | 2.45        | 20     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HG2  | 1:A:334:GLU:OE1  | 0.41     | 2.15        | 29     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HG23 | 1:A:317:THR:H    | 0.41     | 1.71        | 41     | 2     |
| 1:A:348:GLU:OE1  | 1:A:349:ASN:HA   | 0.41     | 2.15        | 30     | 1     |
| 1:A:273:ILE:O    | 1:A:277:GLN:CD   | 0.41     | 2.63        | 35     | 1     |
| 1:A:15:TYR:CD2   | 1:A:15:TYR:N     | 0.41     | 2.87        | 42     | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:281:ILE:HB   | 0.41     | 2.15        | 42     | 1     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:HD1  | 0.41     | 1.98        | 55     | 1     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:235:LEU:HD12 | 0.41     | 2.40        | 8      | 1     |
| 1:A:319:GLN:NE2  | 1:A:319:GLN:HA   | 0.41     | 2.30        | 9      | 1     |
| 1:A:65:GLN:OE1   | 1:A:276:HIS:HA   | 0.41     | 2.15        | 10     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:338:ILE:HA   | 0.41     | 2.46        | 15     | 1     |
| 1:A:58:GLU:O     | 1:A:61:ILE:HB    | 0.41     | 2.15        | 18     | 2     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:321:LYS:CE   | 0.41     | 2.93        | 19     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HD3  | 1:A:321:LYS:C    | 0.41     | 2.40        | 21     | 1     |
| 1:A:262:LEU:HD21 | 1:A:269:LEU:HB3  | 0.41     | 1.92        | 23     | 1     |
| 1:A:78:HIS:CD2   | 1:A:359:ASN:ND2  | 0.41     | 2.87        | 26     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE1   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.41     | 3.08        | 33     | 1     |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:355:LEU:HG   | 0.41     | 2.14        | 33     | 1     |
| 1:A:321:LYS:C    | 1:A:323:ALA:H    | 0.41     | 2.23        | 34     | 3     |
| 1:A:19:THR:HG23  | 1:A:61:ILE:CD1   | 0.41     | 2.44        | 37     | 1     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:N     | 0.41     | 2.49        | 37     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HD13 | 1:A:341:TYR:CG   | 0.41     | 2.49        | 37     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:269:LEU:HG   | 1:A:273:ILE:CD1  | 0.41     | 2.45        | 46     | 2     |
| 1:A:236:ARG:NH1  | 1:A:236:ARG:HG2  | 0.41     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:51:GLY:O     | 0.41     | 2.73        | 11     | 1     |
| 1:A:322:GLU:HA   | 1:A:326:ARG:NH1  | 0.41     | 2.30        | 14     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HA   | 1:A:241:PHE:CE1  | 0.41     | 2.50        | 21     | 1     |
| 1:A:321:LYS:HA   | 1:A:324:ILE:HD12 | 0.41     | 1.92        | 21     | 2     |
| 1:A:244:MET:HG3  | 1:A:248:ILE:CG1  | 0.41     | 2.45        | 22     | 1     |
| 1:A:324:ILE:CG2  | 1:A:337:VAL:C    | 0.41     | 2.93        | 22     | 1     |
| 1:A:316:VAL:HB   | 1:A:321:LYS:CB   | 0.41     | 2.45        | 23     | 2     |
| 1:A:23:LEU:O     | 1:A:27:LYS:CB    | 0.41     | 2.69        | 26     | 1     |
| 1:A:34:PHE:CE2   | 1:A:68:LEU:HD12  | 0.41     | 2.51        | 27     | 1     |
| 1:A:348:GLU:OE2  | 1:A:349:ASN:HA   | 0.41     | 2.15        | 31     | 1     |
| 1:A:67:LEU:O     | 1:A:68:LEU:C     | 0.41     | 2.63        | 39     | 3     |
| 1:A:255:LEU:HB3  | 1:A:256:PRO:HD3  | 0.41     | 1.91        | 36     | 1     |
| 1:A:236:ARG:NH1  | 1:A:288:PRO:C    | 0.41     | 2.78        | 45     | 1     |
| 1:A:236:ARG:CG   | 1:A:236:ARG:NH1  | 0.41     | 2.80        | 48     | 1     |
| 1:A:251:ASN:O    | 1:A:254:LEU:HG   | 0.41     | 2.15        | 53     | 1     |
| 1:A:66:GLN:O     | 1:A:66:GLN:HG3   | 0.41     | 2.15        | 55     | 1     |
| 1:A:327:LEU:HD21 | 1:A:348:GLU:HG2  | 0.41     | 1.91        | 1      | 1     |
| 1:A:245:ARG:HD2  | 1:A:284:LEU:HA   | 0.41     | 1.92        | 2      | 1     |
| 1:A:15:TYR:C     | 1:A:54:TRP:HE1   | 0.41     | 2.24        | 5      | 1     |
| 1:A:35:PRO:O     | 1:A:36:ARG:C     | 0.41     | 2.63        | 30     | 5     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:248:ILE:CG2  | 0.41     | 2.44        | 11     | 1     |
| 1:A:258:LEU:HD23 | 1:A:261:GLN:NE2  | 0.41     | 2.30        | 13     | 1     |
| 1:A:68:LEU:HB3   | 1:A:277:GLN:HG2  | 0.41     | 1.93        | 14     | 2     |
| 1:A:72:PHE:CE2   | 1:A:248:ILE:HG21 | 0.41     | 2.51        | 15     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HD12 | 1:A:341:TYR:HB3  | 0.41     | 1.92        | 15     | 1     |
| 1:A:332:PHE:CE1  | 1:A:356:LEU:HD12 | 0.41     | 2.50        | 16     | 1     |
| 1:A:319:GLN:CA   | 1:A:319:GLN:NE2  | 0.41     | 2.82        | 20     | 1     |
| 1:A:269:LEU:HD12 | 1:A:269:LEU:HA   | 0.41     | 1.75        | 21     | 1     |
| 1:A:319:GLN:HB2  | 1:A:320:GLU:OE1  | 0.41     | 2.16        | 24     | 1     |
| 1:A:322:GLU:OE2  | 1:A:326:ARG:CZ   | 0.41     | 2.69        | 24     | 1     |
| 1:A:332:PHE:HB3  | 1:A:333:PRO:CD   | 0.41     | 2.45        | 24     | 1     |
| 1:A:37:ILE:HG22  | 1:A:353:ASN:HB3  | 0.41     | 1.93        | 26     | 1     |
| 1:A:25:GLU:OE2   | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.41     | 2.39        | 27     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HA   | 1:A:337:VAL:CG2  | 0.41     | 2.46        | 28     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CE3   | 1:A:54:TRP:HA    | 0.41     | 2.51        | 30     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CG    | 1:A:347:ASN:ND2  | 0.41     | 2.89        | 32     | 1     |
| 1:A:356:LEU:O    | 1:A:360:PHE:HE2  | 0.41     | 1.97        | 51     | 2     |
| 1:A:282:GLN:OE1  | 1:A:286:GLU:OE1  | 0.41     | 2.37        | 36     | 1     |
| 1:A:337:VAL:HG23 | 1:A:355:LEU:CD2  | 0.41     | 2.45        | 36     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:249:GLN:CD   | 0.41     | 2.79        | 38     | 1     |
| 1:A:324:ILE:HG23 | 1:A:337:VAL:HB   | 0.41     | 1.91        | 55     | 2     |
| 1:A:270:LEU:O    | 1:A:274:SER:HB2  | 0.41     | 2.16        | 39     | 1     |
| 1:A:260:GLN:O    | 1:A:264:GLN:CB   | 0.41     | 2.68        | 47     | 2     |
| 1:A:275:ARG:NH1  | 1:A:275:ARG:CG   | 0.41     | 2.83        | 40     | 1     |
| 1:A:41:ASN:HA    | 1:A:44:GLN:HB3   | 0.41     | 1.92        | 46     | 1     |
| 1:A:40:HIS:O     | 1:A:44:GLN:CB    | 0.41     | 2.68        | 49     | 1     |
| 1:A:247:VAL:CG1  | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.41     | 2.85        | 52     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CG    | 1:A:56:GLY:CA    | 0.41     | 3.03        | 53     | 1     |
| 1:A:64:LEU:O     | 1:A:67:LEU:HB2   | 0.41     | 2.16        | 54     | 1     |
| 1:A:324:ILE:O    | 1:A:325:GLU:C    | 0.41     | 2.64        | 54     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB2  | 1:A:333:PRO:C    | 0.41     | 2.40        | 46     | 3     |
| 1:A:342:PHE:HE2  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.41     | 2.28        | 3      | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:343:ALA:HB3  | 0.41     | 2.15        | 5      | 1     |
| 1:A:245:ARG:NE   | 1:A:288:PRO:HD3  | 0.41     | 2.31        | 7      | 2     |
| 1:A:242:GLN:O    | 1:A:245:ARG:HB3  | 0.41     | 2.16        | 13     | 1     |
| 1:A:248:ILE:HG13 | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.41     | 1.93        | 15     | 1     |
| 1:A:45:HIS:C     | 1:A:47:TYR:H     | 0.41     | 2.22        | 18     | 1     |
| 1:A:270:LEU:O    | 1:A:274:SER:HB3  | 0.41     | 2.16        | 29     | 2     |
| 1:A:329:ALA:C    | 1:A:331:GLY:H    | 0.41     | 2.24        | 25     | 2     |
| 1:A:73:ARG:HG3   | 1:A:259:LEU:HD12 | 0.41     | 1.91        | 28     | 1     |
| 1:A:261:GLN:O    | 1:A:265:GLU:HB3  | 0.41     | 2.15        | 42     | 1     |
| 1:A:69:PHE:HE2   | 1:A:273:ILE:CG2  | 0.41     | 2.29        | 48     | 1     |
| 1:A:238:GLN:O    | 1:A:238:GLN:NE2  | 0.41     | 2.53        | 51     | 1     |
| 1:A:272:GLN:HB3  | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.41     | 2.31        | 53     | 1     |
| 1:A:258:LEU:C    | 1:A:260:GLN:H    | 0.41     | 2.23        | 54     | 1     |
| 1:A:276:HIS:ND1  | 1:A:276:HIS:C    | 0.41     | 2.78        | 55     | 1     |
| 1:A:50:TYR:CD1   | 1:A:50:TYR:N     | 0.41     | 2.89        | 4      | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD21  | 1:A:343:ALA:O    | 0.41     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:247:VAL:HB   | 1:A:254:LEU:CD1  | 0.41     | 2.45        | 6      | 1     |
| 1:A:64:LEU:C     | 1:A:64:LEU:CD2   | 0.41     | 2.93        | 7      | 2     |
| 1:A:46:ILE:O     | 1:A:50:TYR:HB2   | 0.41     | 2.15        | 10     | 1     |
| 1:A:334:GLU:CG   | 1:A:335:SER:N    | 0.41     | 2.81        | 10     | 1     |
| 1:A:36:ARG:HH11  | 1:A:36:ARG:CG    | 0.41     | 2.29        | 12     | 1     |
| 1:A:245:ARG:CZ   | 1:A:288:PRO:HA   | 0.41     | 2.45        | 12     | 2     |
| 1:A:246:GLN:OE1  | 1:A:247:VAL:CA   | 0.41     | 2.68        | 13     | 1     |
| 1:A:272:GLN:C    | 1:A:276:HIS:NE2  | 0.41     | 2.78        | 15     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CA    | 1:A:277:GLN:NE2  | 0.41     | 2.83        | 19     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HD23 | 1:A:332:PHE:CE1  | 0.41     | 2.50        | 22     | 1     |
| 1:A:39:LEU:HD13  | 1:A:42:LEU:HD23  | 0.41     | 1.93        | 25     | 1     |
| 1:A:265:GLU:C    | 1:A:265:GLU:OE2  | 0.41     | 2.63        | 28     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:266:ASN:OD1  | 1:A:268:GLN:HB3  | 0.41     | 2.16        | 45     | 1     |
| 1:A:283:MET:C    | 1:A:286:GLU:HG2  | 0.41     | 2.41        | 45     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG22  | 1:A:50:TYR:CZ    | 0.41     | 2.49        | 46     | 1     |
| 1:A:44:GLN:OE1   | 1:A:48:GLU:CG    | 0.41     | 2.69        | 52     | 1     |
| 1:A:261:GLN:O    | 1:A:261:GLN:HG3  | 0.41     | 2.14        | 54     | 1     |
| 1:A:315:GLN:OE1  | 1:A:346:LYS:CE   | 0.41     | 2.69        | 54     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG22  | 1:A:39:LEU:CG    | 0.41     | 2.43        | 55     | 1     |
| 1:A:37:ILE:HG13  | 1:A:357:SER:OG   | 0.41     | 2.16        | 55     | 1     |
| 1:A:319:GLN:HB2  | 1:A:320:GLU:OE2  | 0.41     | 2.15        | 1      | 1     |
| 1:A:342:PHE:O    | 1:A:344:CYS:N    | 0.41     | 2.54        | 4      | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG12  | 1:A:32:ARG:N     | 0.41     | 2.31        | 5      | 1     |
| 1:A:69:PHE:O     | 1:A:73:ARG:HD2   | 0.41     | 2.14        | 9      | 1     |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:241:PHE:N    | 0.41     | 2.54        | 9      | 1     |
| 1:A:69:PHE:HA    | 1:A:277:GLN:OE1  | 0.41     | 2.14        | 14     | 2     |
| 1:A:70:ILE:O     | 1:A:73:ARG:N     | 0.41     | 2.54        | 14     | 2     |
| 1:A:50:TYR:CE1   | 1:A:345:GLU:CD   | 0.41     | 2.99        | 16     | 1     |
| 1:A:359:ASN:O    | 1:A:360:PHE:HD2  | 0.41     | 1.98        | 16     | 1     |
| 1:A:67:LEU:HD13  | 1:A:67:LEU:HA    | 0.41     | 1.76        | 21     | 1     |
| 1:A:359:ASN:ND2  | 1:A:360:PHE:H    | 0.41     | 2.14        | 32     | 3     |
| 1:A:230:ASN:OD1  | 1:A:231:PRO:N    | 0.41     | 2.54        | 24     | 1     |
| 1:A:348:GLU:O    | 1:A:348:GLU:HG2  | 0.41     | 2.15        | 25     | 1     |
| 1:A:333:PRO:HG2  | 1:A:336:LEU:HD13 | 0.41     | 1.92        | 29     | 1     |
| 1:A:245:ARG:HB3  | 1:A:288:PRO:CG   | 0.41     | 2.45        | 31     | 1     |
| 1:A:261:GLN:O    | 1:A:265:GLU:N    | 0.41     | 2.53        | 37     | 1     |
| 1:A:244:MET:CB   | 1:A:248:ILE:CD1  | 0.41     | 2.99        | 43     | 1     |
| 1:A:23:LEU:HG    | 1:A:27:LYS:CD    | 0.41     | 2.46        | 53     | 1     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:244:MET:HG3  | 0.41     | 2.15        | 55     | 1     |
| 1:A:327:LEU:O    | 1:A:332:PHE:HB2  | 0.41     | 2.16        | 5      | 1     |
| 1:A:336:LEU:O    | 1:A:337:VAL:C    | 0.41     | 2.64        | 5      | 2     |
| 1:A:325:GLU:CA   | 1:A:328:LYS:HG2  | 0.41     | 2.45        | 13     | 2     |
| 1:A:280:PHE:CD1  | 1:A:284:LEU:CD1  | 0.41     | 3.04        | 9      | 1     |
| 1:A:230:ASN:HD22 | 1:A:279:GLN:NE2  | 0.41     | 2.13        | 12     | 1     |
| 1:A:41:ASN:C     | 1:A:350:LEU:HD13 | 0.41     | 2.40        | 49     | 2     |
| 1:A:58:GLU:C     | 1:A:58:GLU:CD    | 0.41     | 2.88        | 19     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CZ    | 1:A:273:ILE:HG22 | 0.41     | 2.49        | 19     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HD2  | 1:A:334:GLU:N    | 0.41     | 2.30        | 24     | 1     |
| 1:A:265:GLU:OE1  | 1:A:265:GLU:HA   | 0.41     | 2.14        | 27     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:244:MET:HG3  | 0.41     | 2.16        | 31     | 1     |
| 1:A:246:GLN:OE1  | 1:A:250:GLN:HB2  | 0.41     | 2.15        | 35     | 1     |
| 1:A:276:HIS:CG   | 1:A:276:HIS:O    | 0.41     | 2.72        | 35     | 1     |
| 1:A:325:GLU:HA   | 1:A:328:LYS:HG2  | 0.41     | 1.91        | 36     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:266:ASN:OD1  | 1:A:266:ASN:C    | 0.41     | 2.61        | 45     | 1     |
| 1:A:238:GLN:HE22 | 1:A:241:PHE:HB3  | 0.41     | 1.76        | 51     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:49:THR:HG21  | 0.41     | 2.50        | 53     | 1     |
| 1:A:16:ASN:O     | 1:A:54:TRP:HZ2   | 0.41     | 1.98        | 4      | 4     |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:245:ARG:HG2  | 0.41     | 2.15        | 17     | 2     |
| 1:A:358:GLN:HB3  | 1:A:360:PHE:CD2  | 0.41     | 2.50        | 8      | 1     |
| 1:A:268:GLN:O    | 1:A:268:GLN:HG2  | 0.41     | 2.15        | 15     | 2     |
| 1:A:36:ARG:CD    | 1:A:36:ARG:H     | 0.41     | 2.29        | 11     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HE2   | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.41     | 2.29        | 11     | 2     |
| 1:A:241:PHE:O    | 1:A:241:PHE:HD2  | 0.41     | 1.98        | 11     | 1     |
| 1:A:319:GLN:OE1  | 1:A:320:GLU:HG3  | 0.41     | 2.15        | 14     | 1     |
| 1:A:241:PHE:HB3  | 1:A:242:GLN:OE1  | 0.41     | 2.16        | 15     | 1     |
| 1:A:21:GLU:OE1   | 1:A:21:GLU:CA    | 0.41     | 2.68        | 16     | 1     |
| 1:A:65:GLN:C     | 1:A:277:GLN:HG3  | 0.41     | 2.41        | 16     | 1     |
| 1:A:345:GLU:HB2  | 1:A:347:ASN:OD1  | 0.41     | 2.16        | 18     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HA    | 1:A:278:GLU:OE2  | 0.41     | 2.16        | 20     | 2     |
| 1:A:66:GLN:HG2   | 1:A:67:LEU:N     | 0.41     | 2.30        | 20     | 1     |
| 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:269:LEU:HD21 | 0.41     | 1.92        | 20     | 2     |
| 1:A:249:GLN:HG2  | 1:A:285:ASN:HA   | 0.41     | 1.93        | 20     | 1     |
| 1:A:249:GLN:HE21 | 1:A:286:GLU:C    | 0.41     | 2.23        | 20     | 1     |
| 1:A:241:PHE:C    | 1:A:241:PHE:HD2  | 0.41     | 2.23        | 24     | 1     |
| 1:A:315:GLN:N    | 1:A:342:PHE:HZ   | 0.41     | 2.12        | 24     | 1     |
| 1:A:325:GLU:C    | 1:A:328:LYS:HG3  | 0.41     | 2.41        | 29     | 1     |
| 1:A:27:LYS:C     | 1:A:27:LYS:HE3   | 0.41     | 2.41        | 31     | 1     |
| 1:A:317:THR:C    | 1:A:321:LYS:HE3  | 0.41     | 2.40        | 31     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HD2  | 1:A:236:ARG:N    | 0.41     | 2.30        | 32     | 1     |
| 1:A:321:LYS:CE   | 1:A:325:GLU:HG3  | 0.41     | 2.46        | 32     | 1     |
| 1:A:77:ARG:HD3   | 1:A:77:ARG:O     | 0.41     | 2.16        | 33     | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE1   | 1:A:68:LEU:HD11  | 0.41     | 2.16        | 36     | 1     |
| 1:A:263:GLY:O    | 1:A:267:PRO:CA   | 0.41     | 2.69        | 36     | 1     |
| 1:A:234:PHE:HD2  | 1:A:235:LEU:N    | 0.41     | 2.14        | 38     | 1     |
| 1:A:317:THR:C    | 1:A:321:LYS:HZ3  | 0.41     | 2.23        | 40     | 1     |
| 1:A:245:ARG:O    | 1:A:249:GLN:N    | 0.41     | 2.50        | 47     | 1     |
| 1:A:326:ARG:HE   | 1:A:327:LEU:CD2  | 0.41     | 2.29        | 48     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HB3   | 1:A:31:VAL:HG21  | 0.41     | 1.92        | 49     | 1     |
| 1:A:45:HIS:CE1   | 1:A:345:GLU:CB   | 0.41     | 3.03        | 50     | 1     |
| 1:A:269:LEU:O    | 1:A:269:LEU:HG   | 0.41     | 2.15        | 50     | 1     |
| 1:A:27:LYS:HE2   | 1:A:28:SER:N     | 0.41     | 2.31        | 52     | 1     |
| 1:A:23:LEU:HD21  | 1:A:27:LYS:HZ2   | 0.41     | 1.73        | 53     | 1     |
| 1:A:247:VAL:O    | 1:A:254:LEU:HD11 | 0.41     | 2.16        | 53     | 1     |
| 1:A:280:PHE:O    | 1:A:283:MET:HG3  | 0.41     | 2.15        | 53     | 1     |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:16:ASN:HB3   | 1:A:17:GLU:OE1   | 0.41     | 2.14        | 55     | 1     |
| 1:A:55:ALA:O     | 1:A:58:GLU:OE2   | 0.41     | 2.39        | 55     | 1     |
| 1:A:282:GLN:HE21 | 1:A:283:MET:N    | 0.41     | 2.13        | 55     | 1     |
| 1:A:322:GLU:CG   | 1:A:323:ALA:H    | 0.41     | 2.28        | 4      | 1     |
| 1:A:62:ARG:O     | 1:A:65:GLN:HG2   | 0.41     | 2.16        | 9      | 2     |
| 1:A:47:TYR:CE2   | 1:A:51:GLY:O     | 0.41     | 2.74        | 7      | 1     |
| 1:A:38:TRP:CH2   | 1:A:67:LEU:HD11  | 0.41     | 2.50        | 11     | 1     |
| 1:A:258:LEU:HD23 | 1:A:258:LEU:HA   | 0.41     | 1.74        | 40     | 2     |
| 1:A:344:CYS:HB3  | 1:A:350:LEU:HB3  | 0.41     | 1.93        | 17     | 1     |
| 1:A:255:LEU:CD1  | 1:A:256:PRO:N    | 0.41     | 2.80        | 23     | 1     |
| 1:A:240:GLN:OE1  | 1:A:262:LEU:HA   | 0.41     | 2.16        | 26     | 1     |
| 1:A:330:LEU:C    | 1:A:332:PHE:CE2  | 0.41     | 2.99        | 28     | 1     |
| 1:A:345:GLU:OE2  | 1:A:345:GLU:HA   | 0.41     | 2.16        | 34     | 1     |
| 1:A:270:LEU:HD22 | 1:A:270:LEU:HA   | 0.41     | 1.76        | 41     | 1     |
| 1:A:242:GLN:O    | 1:A:245:ARG:N    | 0.41     | 2.54        | 43     | 1     |
| 1:A:243:ASN:C    | 1:A:245:ARG:N    | 0.41     | 2.77        | 45     | 1     |
| 1:A:34:PHE:HB3   | 1:A:39:LEU:CD2   | 0.41     | 2.45        | 46     | 1     |
| 1:A:243:ASN:HD21 | 1:A:258:LEU:CD1  | 0.41     | 2.29        | 46     | 1     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:241:PHE:HD2  | 0.41     | 2.24        | 47     | 1     |
| 1:A:251:ASN:CG   | 1:A:254:LEU:CD2  | 0.40     | 2.92        | 1      | 1     |
| 1:A:34:PHE:HD2   | 1:A:38:TRP:CZ3   | 0.40     | 2.32        | 4      | 1     |
| 1:A:28:SER:O     | 1:A:31:VAL:HG12  | 0.40     | 2.15        | 6      | 1     |
| 1:A:277:GLN:N    | 1:A:277:GLN:CD   | 0.40     | 2.75        | 6      | 1     |
| 1:A:355:LEU:O    | 1:A:360:PHE:HE2  | 0.40     | 1.97        | 7      | 1     |
| 1:A:354:PHE:HD2  | 1:A:355:LEU:N    | 0.40     | 2.13        | 8      | 1     |
| 1:A:345:GLU:O    | 1:A:345:GLU:CD   | 0.40     | 2.64        | 13     | 1     |
| 1:A:263:GLY:HA3  | 1:A:270:LEU:HB2  | 0.40     | 1.93        | 23     | 1     |
| 1:A:35:PRO:HG3   | 1:A:357:SER:HB2  | 0.40     | 1.93        | 24     | 2     |
| 1:A:67:LEU:HD23  | 1:A:70:ILE:CD1   | 0.40     | 2.46        | 24     | 1     |
| 1:A:338:ILE:O    | 1:A:342:PHE:HB2  | 0.40     | 2.16        | 24     | 1     |
| 1:A:26:LEU:O     | 1:A:27:LYS:C     | 0.40     | 2.64        | 25     | 1     |
| 1:A:18:TRP:HA    | 1:A:21:GLU:HG2   | 0.40     | 1.93        | 28     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB2  | 1:A:333:PRO:O    | 0.40     | 2.16        | 30     | 1     |
| 1:A:318:PRO:HA   | 1:A:321:LYS:HE3  | 0.40     | 1.92        | 40     | 1     |
| 1:A:70:ILE:HD11  | 1:A:339:GLN:HG3  | 0.40     | 1.93        | 42     | 1     |
| 1:A:251:ASN:CB   | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.40     | 2.46        | 42     | 1     |
| 1:A:65:GLN:O     | 1:A:66:GLN:C     | 0.40     | 2.64        | 48     | 3     |
| 1:A:42:LEU:HD23  | 1:A:350:LEU:HD21 | 0.40     | 1.92        | 51     | 1     |
| 1:A:78:HIS:CE1   | 1:A:359:ASN:CG   | 0.40     | 2.99        | 52     | 1     |
| 1:A:335:SER:O    | 1:A:339:GLN:HB2  | 0.40     | 2.17        | 5      | 1     |
| 1:A:315:GLN:CD   | 1:A:342:PHE:CE2  | 0.40     | 2.99        | 8      | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:54:TRP:CE2   | 1:A:57:VAL:CG1   | 0.40     | 3.02        | 10     | 1     |
| 1:A:335:SER:HA   | 1:A:338:ILE:HD12 | 0.40     | 1.93        | 11     | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE2  | 1:A:334:GLU:HA   | 0.40     | 2.15        | 13     | 1     |
| 1:A:245:ARG:NH2  | 1:A:288:PRO:CA   | 0.40     | 2.84        | 19     | 1     |
| 1:A:272:GLN:N    | 1:A:272:GLN:HE21 | 0.40     | 2.14        | 19     | 1     |
| 1:A:327:LEU:CD2  | 1:A:327:LEU:H    | 0.40     | 2.29        | 20     | 1     |
| 1:A:73:ARG:NH2   | 1:A:336:LEU:HG   | 0.40     | 2.31        | 22     | 1     |
| 1:A:344:CYS:CA   | 1:A:350:LEU:HD23 | 0.40     | 2.46        | 24     | 1     |
| 1:A:241:PHE:C    | 1:A:241:PHE:HD1  | 0.40     | 2.23        | 25     | 2     |
| 1:A:321:LYS:HZ3  | 1:A:334:GLU:CD   | 0.40     | 2.24        | 28     | 1     |
| 1:A:249:GLN:HE21 | 1:A:285:ASN:CA   | 0.40     | 2.29        | 30     | 1     |
| 1:A:248:ILE:CD1  | 1:A:255:LEU:CG   | 0.40     | 2.99        | 35     | 1     |
| 1:A:231:PRO:O    | 1:A:234:PHE:HE1  | 0.40     | 1.98        | 37     | 1     |
| 1:A:42:LEU:O     | 1:A:46:ILE:N     | 0.40     | 2.53        | 38     | 1     |
| 1:A:22:LEU:N     | 1:A:22:LEU:HD22  | 0.40     | 2.31        | 49     | 1     |
| 1:A:234:PHE:CD1  | 1:A:234:PHE:O    | 0.40     | 2.74        | 51     | 1     |
| 1:A:325:GLU:OE1  | 1:A:328:LYS:HD3  | 0.40     | 2.15        | 54     | 1     |
| 1:A:26:LEU:HD13  | 1:A:65:GLN:OE1   | 0.40     | 2.17        | 2      | 1     |
| 1:A:353:ASN:N    | 1:A:353:ASN:HD22 | 0.40     | 2.14        | 53     | 2     |
| 1:A:65:GLN:CG    | 1:A:66:GLN:H     | 0.40     | 2.30        | 5      | 1     |
| 1:A:358:GLN:C    | 1:A:360:PHE:H    | 0.40     | 2.23        | 12     | 1     |
| 1:A:253:ALA:C    | 1:A:254:LEU:HD23 | 0.40     | 2.42        | 15     | 1     |
| 1:A:29:GLU:CG    | 1:A:278:GLU:HG3  | 0.40     | 2.47        | 21     | 1     |
| 1:A:259:LEU:CD1  | 1:A:262:LEU:HD23 | 0.40     | 2.45        | 27     | 1     |
| 1:A:336:LEU:HD12 | 1:A:336:LEU:C    | 0.40     | 2.42        | 27     | 1     |
| 1:A:277:GLN:HG3  | 1:A:281:ILE:CD1  | 0.40     | 2.41        | 28     | 1     |
| 1:A:30:ALA:CA    | 1:A:34:PHE:CD2   | 0.40     | 3.05        | 29     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HE3  | 1:A:328:LYS:CA   | 0.40     | 2.44        | 36     | 1     |
| 1:A:321:LYS:NZ   | 1:A:321:LYS:HB3  | 0.40     | 2.31        | 40     | 1     |
| 1:A:239:PRO:HA   | 1:A:242:GLN:HG2  | 0.40     | 1.92        | 43     | 1     |
| 1:A:236:ARG:HH12 | 1:A:288:PRO:HA   | 0.40     | 1.76        | 45     | 1     |
| 1:A:239:PRO:O    | 1:A:243:ASN:CG   | 0.40     | 2.65        | 47     | 1     |
| 1:A:232:LEU:HB2  | 1:A:276:HIS:CD2  | 0.40     | 2.51        | 51     | 1     |
| 1:A:240:GLN:HB2  | 1:A:262:LEU:CD1  | 0.40     | 2.44        | 55     | 1     |
| 1:A:72:PHE:HB3   | 1:A:255:LEU:HD12 | 0.40     | 1.91        | 3      | 1     |
| 1:A:230:ASN:ND2  | 1:A:279:GLN:NE2  | 0.40     | 2.70        | 12     | 1     |
| 1:A:314:ILE:HG13 | 1:A:338:ILE:CD1  | 0.40     | 2.47        | 12     | 1     |
| 1:A:328:LYS:HB3  | 1:A:337:VAL:HB   | 0.40     | 1.93        | 12     | 1     |
| 1:A:63:ILE:CD1   | 1:A:343:ALA:O    | 0.40     | 2.69        | 18     | 1     |
| 1:A:235:LEU:C    | 1:A:241:PHE:HD1  | 0.40     | 2.25        | 23     | 1     |
| 1:A:68:LEU:HB3   | 1:A:277:GLN:HG3  | 0.40     | 1.93        | 30     | 1     |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1           | Atom-2           | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
|                  |                  |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:230:ASN:HD21 | 1:A:232:LEU:CB   | 0.40     | 2.30        | 34     | 1     |
| 1:A:355:LEU:C    | 1:A:360:PHE:CZ   | 0.40     | 2.98        | 38     | 1     |
| 1:A:54:TRP:CG    | 1:A:57:VAL:CG1   | 0.40     | 3.04        | 39     | 1     |
| 1:A:316:VAL:CG2  | 1:A:321:LYS:CB   | 0.40     | 2.99        | 41     | 1     |
| 1:A:278:GLU:OE1  | 1:A:279:GLN:N    | 0.40     | 2.54        | 42     | 1     |
| 1:A:242:GLN:H    | 1:A:242:GLN:NE2  | 0.40     | 2.15        | 43     | 1     |
| 1:A:72:PHE:CE1   | 1:A:281:ILE:HG23 | 0.40     | 2.50        | 46     | 2     |
| 1:A:59:ALA:O     | 1:A:63:ILE:CB    | 0.40     | 2.70        | 49     | 1     |
| 1:A:334:GLU:OE1  | 1:A:334:GLU:HA   | 0.40     | 2.17        | 50     | 1     |
| 1:A:358:GLN:CB   | 1:A:360:PHE:HE1  | 0.40     | 2.26        | 50     | 1     |
| 1:A:238:GLN:NE2  | 1:A:241:PHE:CB   | 0.40     | 2.83        | 51     | 1     |
| 1:A:71:HIS:HD1   | 1:A:358:GLN:CD   | 0.40     | 2.21        | 53     | 1     |
| 1:A:38:TRP:CE3   | 1:A:38:TRP:C     | 0.40     | 2.99        | 3      | 1     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:63:ILE:HG13  | 0.40     | 2.16        | 3      | 1     |
| 1:A:77:ARG:CA    | 1:A:77:ARG:HE    | 0.40     | 2.28        | 10     | 1     |
| 1:A:29:GLU:OE2   | 1:A:68:LEU:HD11  | 0.40     | 2.16        | 12     | 1     |
| 1:A:60:ILE:O     | 1:A:64:LEU:N     | 0.40     | 2.54        | 13     | 1     |
| 1:A:46:ILE:HG21  | 1:A:60:ILE:CD1   | 0.40     | 2.46        | 15     | 1     |
| 1:A:30:ALA:HA    | 1:A:34:PHE:CE1   | 0.40     | 2.52        | 19     | 1     |
| 1:A:75:GLY:O     | 1:A:77:ARG:NE    | 0.40     | 2.53        | 22     | 1     |
| 1:A:17:GLU:N     | 1:A:17:GLU:OE1   | 0.40     | 2.55        | 25     | 1     |
| 1:A:258:LEU:C    | 1:A:258:LEU:CD2  | 0.40     | 2.69        | 26     | 1     |
| 1:A:18:TRP:O     | 1:A:19:THR:C     | 0.40     | 2.64        | 31     | 1     |
| 1:A:240:GLN:O    | 1:A:243:ASN:CB   | 0.40     | 2.69        | 31     | 1     |
| 1:A:320:GLU:OE2  | 1:A:346:LYS:HB3  | 0.40     | 2.16        | 33     | 1     |
| 1:A:330:LEU:HB2  | 1:A:332:PHE:CE2  | 0.40     | 2.51        | 34     | 1     |
| 1:A:320:GLU:O    | 1:A:324:ILE:HG12 | 0.40     | 2.16        | 38     | 1     |
| 1:A:31:VAL:HG23  | 1:A:39:LEU:CD1   | 0.40     | 2.47        | 39     | 1     |
| 1:A:73:ARG:CG    | 1:A:74:ILE:HD12  | 0.40     | 2.46        | 39     | 1     |
| 1:A:328:LYS:CD   | 1:A:334:GLU:OE2  | 0.40     | 2.70        | 44     | 1     |
| 1:A:340:ALA:O    | 1:A:341:TYR:C    | 0.40     | 2.64        | 44     | 1     |
| 1:A:326:ARG:CD   | 1:A:326:ARG:C    | 0.40     | 2.95        | 48     | 1     |
| 1:A:232:LEU:CD2  | 1:A:276:HIS:ND1  | 0.40     | 2.63        | 49     | 1     |
| 1:A:69:PHE:CE2   | 1:A:274:SER:HB3  | 0.40     | 2.52        | 52     | 1     |
| 1:A:68:LEU:CD2   | 1:A:281:ILE:HG13 | 0.40     | 2.47        | 55     | 1     |

## 6.3 Torsion angles

### 6.3.1 Protein backbone

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

| Mol | Chain | Analysed         | Favoured      | Allowed      | Outliers   | Percentiles |    |
|-----|-------|------------------|---------------|--------------|------------|-------------|----|
| 1   | A     | 167/234 (71%)    | 137±4 (82±2%) | 25±4 (15±2%) | 5±1 (3±1%) | 5           | 39 |
| All | All   | 9185/12870 (71%) | 7533 (82%)    | 1385 (15%)   | 267 (3%)   | 5           | 39 |

All 26 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     | 359 | ASN  | 51             |
| 1   | A     | 15  | TYR  | 37             |
| 1   | A     | 252 | PRO  | 37             |
| 1   | A     | 315 | GLN  | 26             |
| 1   | A     | 322 | GLU  | 24             |
| 1   | A     | 346 | LYS  | 20             |
| 1   | A     | 53  | THR  | 13             |
| 1   | A     | 236 | ARG  | 7              |
| 1   | A     | 31  | VAL  | 6              |
| 1   | A     | 329 | ALA  | 5              |
| 1   | A     | 256 | PRO  | 5              |
| 1   | A     | 16  | ASN  | 5              |
| 1   | A     | 36  | ARG  | 5              |
| 1   | A     | 338 | ILE  | 4              |
| 1   | A     | 270 | LEU  | 3              |
| 1   | A     | 28  | SER  | 3              |
| 1   | A     | 14  | PRO  | 3              |
| 1   | A     | 259 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 71  | HIS  | 2              |
| 1   | A     | 358 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 282 | GLN  | 2              |
| 1   | A     | 55  | ALA  | 1              |
| 1   | A     | 78  | HIS  | 1              |
| 1   | A     | 46  | ILE  | 1              |
| 1   | A     | 284 | LEU  | 1              |
| 1   | A     | 24  | GLU  | 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     | 155/200 (78%)    | 91±13 (59±9%) | 61±10 (39±6%) | 0 6         |
| All | All   | 8370/11000 (76%) | 5014 (60%)    | 3356 (40%)    | 0 5         |

All 131 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 45  | HIS  | 54             |
| 1   | A     | 281 | ILE  | 54             |
| 1   | A     | 321 | LYS  | 54             |
| 1   | A     | 19  | THR  | 53             |
| 1   | A     | 284 | LEU  | 53             |
| 1   | A     | 317 | THR  | 53             |
| 1   | A     | 349 | ASN  | 53             |
| 1   | A     | 44  | GLN  | 52             |
| 1   | A     | 53  | THR  | 50             |
| 1   | A     | 22  | LEU  | 49             |
| 1   | A     | 282 | GLN  | 49             |
| 1   | A     | 251 | ASN  | 48             |
| 1   | A     | 273 | ILE  | 48             |
| 1   | A     | 360 | PHE  | 47             |
| 1   | A     | 250 | GLN  | 46             |
| 1   | A     | 328 | LYS  | 46             |
| 1   | A     | 338 | ILE  | 45             |
| 1   | A     | 39  | LEU  | 44             |
| 1   | A     | 67  | LEU  | 44             |
| 1   | A     | 57  | VAL  | 43             |
| 1   | A     | 68  | LEU  | 43             |
| 1   | A     | 285 | ASN  | 43             |
| 1   | A     | 315 | GLN  | 43             |
| 1   | A     | 233 | GLU  | 42             |
| 1   | A     | 37  | ILE  | 41             |
| 1   | A     | 74  | ILE  | 40             |
| 1   | A     | 346 | LYS  | 39             |
| 1   | A     | 348 | GLU  | 38             |
| 1   | A     | 20  | LEU  | 37             |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 270 | LEU  | 36             |
| 1   | A     | 345 | GLU  | 36             |
| 1   | A     | 358 | GLN  | 36             |
| 1   | A     | 232 | LEU  | 35             |
| 1   | A     | 314 | ILE  | 35             |
| 1   | A     | 326 | ARG  | 35             |
| 1   | A     | 248 | ILE  | 34             |
| 1   | A     | 27  | LYS  | 34             |
| 1   | A     | 31  | VAL  | 33             |
| 1   | A     | 265 | GLU  | 33             |
| 1   | A     | 359 | ASN  | 33             |
| 1   | A     | 63  | ILE  | 32             |
| 1   | A     | 60  | ILE  | 31             |
| 1   | A     | 237 | ASP  | 31             |
| 1   | A     | 316 | VAL  | 30             |
| 1   | A     | 350 | LEU  | 30             |
| 1   | A     | 279 | GLN  | 30             |
| 1   | A     | 77  | ARG  | 29             |
| 1   | A     | 28  | SER  | 28             |
| 1   | A     | 64  | LEU  | 28             |
| 1   | A     | 356 | LEU  | 28             |
| 1   | A     | 322 | GLU  | 28             |
| 1   | A     | 240 | GLN  | 28             |
| 1   | A     | 238 | GLN  | 27             |
| 1   | A     | 243 | ASN  | 27             |
| 1   | A     | 274 | SER  | 27             |
| 1   | A     | 278 | GLU  | 27             |
| 1   | A     | 32  | ARG  | 27             |
| 1   | A     | 260 | GLN  | 27             |
| 1   | A     | 246 | GLN  | 26             |
| 1   | A     | 247 | VAL  | 26             |
| 1   | A     | 61  | ILE  | 26             |
| 1   | A     | 236 | ARG  | 26             |
| 1   | A     | 16  | ASN  | 25             |
| 1   | A     | 62  | ARG  | 25             |
| 1   | A     | 255 | LEU  | 25             |
| 1   | A     | 259 | LEU  | 25             |
| 1   | A     | 261 | GLN  | 25             |
| 1   | A     | 275 | ARG  | 25             |
| 1   | A     | 17  | GLU  | 24             |
| 1   | A     | 25  | GLU  | 23             |
| 1   | A     | 347 | ASN  | 23             |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 79  | SER  | 23             |
| 1   | A     | 24  | GLU  | 22             |
| 1   | A     | 271 | GLN  | 22             |
| 1   | A     | 324 | ILE  | 22             |
| 1   | A     | 49  | THR  | 22             |
| 1   | A     | 339 | GLN  | 21             |
| 1   | A     | 337 | VAL  | 20             |
| 1   | A     | 266 | ASN  | 20             |
| 1   | A     | 334 | GLU  | 20             |
| 1   | A     | 235 | LEU  | 19             |
| 1   | A     | 66  | GLN  | 19             |
| 1   | A     | 34  | PHE  | 19             |
| 1   | A     | 355 | LEU  | 19             |
| 1   | A     | 36  | ARG  | 18             |
| 1   | A     | 21  | GLU  | 18             |
| 1   | A     | 286 | GLU  | 18             |
| 1   | A     | 320 | GLU  | 17             |
| 1   | A     | 42  | LEU  | 17             |
| 1   | A     | 234 | PHE  | 17             |
| 1   | A     | 26  | LEU  | 17             |
| 1   | A     | 336 | LEU  | 16             |
| 1   | A     | 46  | ILE  | 16             |
| 1   | A     | 73  | ARG  | 16             |
| 1   | A     | 48  | GLU  | 15             |
| 1   | A     | 29  | GLU  | 15             |
| 1   | A     | 52  | ASP  | 15             |
| 1   | A     | 230 | ASN  | 15             |
| 1   | A     | 244 | MET  | 15             |
| 1   | A     | 242 | GLN  | 15             |
| 1   | A     | 65  | GLN  | 14             |
| 1   | A     | 268 | GLN  | 14             |
| 1   | A     | 58  | GLU  | 13             |
| 1   | A     | 269 | LEU  | 13             |
| 1   | A     | 354 | PHE  | 13             |
| 1   | A     | 40  | HIS  | 13             |
| 1   | A     | 70  | ILE  | 12             |
| 1   | A     | 277 | GLN  | 12             |
| 1   | A     | 335 | SER  | 12             |
| 1   | A     | 327 | LEU  | 12             |
| 1   | A     | 72  | PHE  | 11             |
| 1   | A     | 319 | GLN  | 10             |
| 1   | A     | 245 | ARG  | 9              |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 262 | LEU  | 9              |
| 1   | A     | 264 | GLN  | 9              |
| 1   | A     | 357 | SER  | 9              |
| 1   | A     | 23  | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 272 | GLN  | 8              |
| 1   | A     | 283 | MET  | 8              |
| 1   | A     | 330 | LEU  | 8              |
| 1   | A     | 69  | PHE  | 7              |
| 1   | A     | 258 | LEU  | 7              |
| 1   | A     | 344 | CYS  | 5              |
| 1   | A     | 47  | TYR  | 4              |
| 1   | A     | 353 | ASN  | 4              |
| 1   | A     | 249 | GLN  | 4              |
| 1   | A     | 276 | HIS  | 3              |
| 1   | A     | 342 | PHE  | 2              |
| 1   | A     | 254 | LEU  | 2              |
| 1   | A     | 41  | ASN  | 2              |
| 1   | A     | 71  | HIS  | 1              |

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 82% for the well-defined parts and 82% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *BMRB\_PDBdep\_temp.txt*

#### 7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

|                                         |      |
|-----------------------------------------|------|
| Total number of shifts                  | 2569 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 2067 |
| Number of unparsed shifts               | 0    |
| Number of shifts with mapping errors    | 502  |
| Number of shifts with mapping warnings  | 0    |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 3    |

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 502 occurrences are reported below.

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 1   | MET  | HA   | 4.003      | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 1   | MET  | HE1  | 2.109      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 1   | MET  | HE2  | 2.109      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 1   | MET  | HE3  | 2.109      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 1   | MET  | CA   | 55.482     | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 1   | MET  | CE   | 16.793     | 0.032       | 1         |
| 1       | A     | 2   | GLU  | HA   | 4.385      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 2   | GLU  | CA   | 56.543     | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | H    | 8.53       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HA   | 4.355      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HB2  | 2.088      | 0.016       | 2         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HB3  | 1.992      | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HE21 | 7.534      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HE22 | 6.85       | 0.014       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 3   | GLN  | HG3  | 2.37       | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | CA   | 55.586     | 0.048       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | CB   | 29.382     | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | CG   | 33.859     | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | N    | 121.976    | 0.095       | 1         |
| 1       | A     | 3   | GLN  | NE2  | 112.599    | 0.039       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | H    | 8.557      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | HA   | 4.599      | 0.013       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | HB1  | 1.39       | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | HB2  | 1.39       | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | HB3  | 1.39       | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | CA   | 50.568     | 0.033       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | CB   | 18.101     | 0.071       | 1         |
| 1       | A     | 4   | ALA  | N    | 127.823    | 0.031       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HA   | 4.412      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HB2  | 1.936      | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HB3  | 2.312      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HD2  | 3.821      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HD3  | 3.673      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | HG2  | 2.029      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | CA   | 63.402     | 0.023       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | CB   | 32.064     | 0.066       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | CD   | 50.349     | 0.040       | 1         |
| 1       | A     | 5   | PRO  | CG   | 27.07      | 0.019       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | H    | 8.669      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | HA   | 4.243      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | HB2  | 1.95       | 0.001       | 2         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | HB3  | 2.052      | 0.001       | 2         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | HG3  | 2.303      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | CA   | 56.942     | 0.110       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | CB   | 30.128     | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | CG   | 36.309     | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 6   | GLU  | N    | 120.519    | 0.075       | 1         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | H    | 8.314      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | HA   | 4.614      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | HB2  | 2.72       | 0.001       | 2         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | HB3  | 2.676      | 0.012       | 2         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | CA   | 54.529     | 0.049       | 1         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | CB   | 41.224     | 0.087       | 1         |
| 1       | A     | 7   | ASP  | N    | 121.175    | 0.038       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | H    | 8.296      | 0.005       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HA   | 4.374      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HB2  | 2.207      | 0.002       | 2         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HB3  | 1.977      | 0.012       | 2         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HE21 | 7.536      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HE22 | 6.834      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | HG3  | 2.389      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | CA   | 55.855     | 0.024       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | CB   | 29.458     | 0.031       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | CG   | 33.891     | 0.076       | 1         |
| 1       | A     | 8   | GLN  | N    | 120.802    | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 9   | GLY  | H    | 8.33       | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 9   | GLY  | HA3  | 4.099      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 9   | GLY  | CA   | 44.79      | 0.047       | 1         |
| 1       | A     | 9   | GLY  | N    | 109.856    | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | HA   | 4.428      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | HB3  | 2.274      | 0.001       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | HD3  | 3.624      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | HG2  | 1.994      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | CA   | 63.461     | 0.076       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | CB   | 31.973     | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | CD   | 49.843     | 0.080       | 1         |
| 1       | A     | 10  | PRO  | CG   | 27.318     | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | H    | 8.536      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HA   | 4.314      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HB2  | 1.99       | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HB3  | 2.115      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HE21 | 7.482      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HE22 | 6.827      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | HG3  | 2.365      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | CA   | 55.886     | 0.037       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | CB   | 29.52      | 0.021       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | CG   | 33.816     | 0.022       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | N    | 120.468    | 0.048       | 1         |
| 1       | A     | 11  | GLN  | NE2  | 112.749    | 0.067       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | H    | 8.365      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HA   | 4.371      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HB2  | 1.748      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HB3  | 1.848      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HD2  | 3.177      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HE   | 7.273      | 0.013       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HG2  | 1.639      | 0.011       | 2         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 12  | ARG  | HG3  | 1.599      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | CA   | 55.811     | 0.038       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | CB   | 31.098     | 0.106       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | CD   | 43.294     | 0.036       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | CG   | 27.192     | 0.094       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | N    | 122.095    | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 12  | ARG  | NE   | 84.664     | 0.078       | 1         |
| 1       | A     | 80  | GLY  | H    | 8.636      | 0.013       | 1         |
| 1       | A     | 80  | GLY  | HA3  | 4.04       | 0.013       | 1         |
| 1       | A     | 80  | GLY  | CA   | 45.498     | 0.025       | 1         |
| 1       | A     | 80  | GLY  | N    | 111.087    | 0.051       | 1         |
| 1       | A     | 81  | GLY  | H    | 8.435      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 81  | GLY  | HA3  | 4.077      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 81  | GLY  | CA   | 45.398     | 0.083       | 1         |
| 1       | A     | 81  | GLY  | N    | 109.033    | 0.066       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | H    | 8.528      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | HA   | 4.524      | 0.019       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | HB3  | 3.913      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | CA   | 58.779     | 0.037       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | CB   | 63.857     | 0.024       | 1         |
| 1       | A     | 82  | SER  | N    | 116.142    | 0.092       | 1         |
| 1       | A     | 83  | GLY  | H    | 8.624      | 0.014       | 1         |
| 1       | A     | 83  | GLY  | HA3  | 4.044      | 0.012       | 1         |
| 1       | A     | 83  | GLY  | CA   | 45.443     | 0.050       | 1         |
| 1       | A     | 83  | GLY  | N    | 111.107    | 0.032       | 1         |
| 1       | A     | 84  | GLY  | H    | 8.308      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 84  | GLY  | HA3  | 4.028      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 84  | GLY  | CA   | 45.218     | 0.075       | 1         |
| 1       | A     | 84  | GLY  | N    | 108.993    | 0.090       | 1         |
| 1       | A     | 85  | SER  | H    | 8.302      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 85  | SER  | HA   | 4.506      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 85  | SER  | HB2  | 3.94       | 0.011       | 2         |
| 1       | A     | 85  | SER  | HB3  | 3.892      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 85  | SER  | CA   | 58.413     | 0.063       | 1         |
| 1       | A     | 85  | SER  | CB   | 63.981     | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 85  | SER  | N    | 115.914    | 0.058       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | H    | 8.502      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | HA   | 4.412      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | HB1  | 1.454      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | HB2  | 1.454      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | HB3  | 1.454      | 0.006       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 223 | ALA  | CA   | 53.06      | 0.049       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | CB   | 19.135     | 0.076       | 1         |
| 1       | A     | 223 | ALA  | N    | 125.912    | 0.035       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | H    | 8.079      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | HA   | 4.324      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | HB   | 4.278      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | HG21 | 1.216      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | HG22 | 1.216      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | HG23 | 1.216      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | CA   | 62.135     | 0.084       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | CB   | 69.717     | 0.092       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | CG2  | 21.664     | 0.085       | 1         |
| 1       | A     | 224 | THR  | N    | 112.12     | 0.092       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | H    | 8.266      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | HA   | 4.305      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | HB2  | 1.97       | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | HB3  | 2.09       | 0.011       | 2         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | HG3  | 2.28       | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | CA   | 56.71      | 0.072       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | CB   | 29.723     | 0.020       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | CG   | 36.229     | 0.065       | 1         |
| 1       | A     | 225 | GLU  | N    | 122.872    | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | H    | 8.292      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | HA   | 4.312      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | HB1  | 1.4        | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | HB2  | 1.4        | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | HB3  | 1.4        | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | CA   | 52.516     | 0.023       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | CB   | 19.126     | 0.096       | 1         |
| 1       | A     | 226 | ALA  | N    | 124.925    | 0.045       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | H    | 8.268      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | HA   | 4.322      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | HB1  | 1.429      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | HB2  | 1.429      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | HB3  | 1.429      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | CA   | 52.684     | 0.039       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | CB   | 19.124     | 0.084       | 1         |
| 1       | A     | 227 | ALA  | N    | 123.458    | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 228 | GLY  | H    | 8.307      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 228 | GLY  | HA2  | 3.995      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 228 | GLY  | HA3  | 3.958      | 0.002       | 2         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 228 | GLY  | CA   | 45.167     | 0.063       | 1         |
| 1       | A     | 228 | GLY  | N    | 108.136    | 0.081       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | H    | 8.166      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | HA   | 4.258      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | HB2  | 1.905      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | HB3  | 1.989      | 0.011       | 2         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | HG2  | 2.214      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | HG3  | 2.176      | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | CA   | 56.127     | 0.044       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | CB   | 30.536     | 0.065       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | CG   | 36.127     | 0.035       | 1         |
| 1       | A     | 229 | GLU  | N    | 120.238    | 0.064       | 1         |
| 1       | A     | 289 | GLY  | H    | 8.311      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 289 | GLY  | HA2  | 4.012      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 289 | GLY  | HA3  | 3.87       | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 289 | GLY  | CA   | 45.171     | 0.122       | 1         |
| 1       | A     | 289 | GLY  | N    | 108.612    | 0.090       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | H    | 8.347      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | HA   | 4.283      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | HB2  | 1.937      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | HB3  | 2.049      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | HG3  | 2.256      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | CA   | 56.447     | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | CB   | 30.116     | 0.013       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | CG   | 36.119     | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 290 | GLU  | N    | 120.469    | 0.069       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | H    | 8.321      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HA   | 4.351      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HB2  | 1.595      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HB3  | 1.642      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD11 | 0.932      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD12 | 0.932      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD13 | 0.932      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD21 | 0.876      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD22 | 0.876      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HD23 | 0.876      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | HG   | 1.636      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | CA   | 55.005     | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | CB   | 42.287     | 0.098       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | CD1  | 25.227     | 0.067       | 2         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | CD2  | 23.529     | 0.086       | 2         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 291 | LEU  | CG   | 27.037     | 0.089       | 1         |
| 1       | A     | 291 | LEU  | N    | 123.417    | 0.056       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | H    | 8.234      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | HA   | 4.31       | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | HB1  | 1.383      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | HB2  | 1.383      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | HB3  | 1.383      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | CA   | 52.573     | 0.039       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | CB   | 19.393     | 0.083       | 1         |
| 1       | A     | 292 | ALA  | N    | 124.714    | 0.035       | 1         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | H    | 8.287      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | HA   | 4.614      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | HB2  | 2.729      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | HB3  | 2.593      | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | CA   | 54.435     | 0.057       | 1         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | CB   | 41.269     | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 293 | ASP  | N    | 119.673    | 0.064       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | H    | 8.067      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HA   | 4.259      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HB   | 1.93       | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HD11 | 0.867      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HD12 | 0.867      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HD13 | 0.867      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HG12 | 1.192      | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HG13 | 1.437      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HG21 | 0.915      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HG22 | 0.915      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | HG23 | 0.915      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | CA   | 61.127     | 0.078       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | CB   | 38.788     | 0.054       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | CD1  | 13.244     | 0.041       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | CG1  | 27.1       | 0.048       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | CG2  | 17.752     | 0.040       | 1         |
| 1       | A     | 294 | ILE  | N    | 120.83     | 0.075       | 1         |
| 1       | A     | 295 | SER  | H    | 8.414      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 295 | SER  | HA   | 4.462      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 295 | SER  | HB2  | 3.881      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 295 | SER  | HB3  | 3.852      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 295 | SER  | CA   | 58.591     | 0.061       | 1         |
| 1       | A     | 295 | SER  | CB   | 63.968     | 0.081       | 1         |
| 1       | A     | 295 | SER  | N    | 119.705    | 0.104       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 296 | ASP  | H    | 8.38       | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | HA   | 4.66       | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | HB2  | 2.715      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | HB3  | 2.652      | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | CA   | 54.366     | 0.091       | 1         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | CB   | 41.196     | 0.064       | 1         |
| 1       | A     | 296 | ASP  | N    | 122.752    | 0.045       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | H    | 8.03       | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HA   | 4.123      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HB   | 2.1        | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG11 | 0.923      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG12 | 0.923      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG13 | 0.923      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG21 | 0.931      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG22 | 0.931      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | HG23 | 0.931      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | CA   | 62.46      | 0.050       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | CB   | 32.677     | 0.101       | 1         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | CG1  | 21.222     | 0.086       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | CG2  | 20.488     | 0.032       | 2         |
| 1       | A     | 297 | VAL  | N    | 119.747    | 0.071       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | H    | 8.456      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | HA   | 4.285      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | HB2  | 2.067      | 0.002       | 2         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | HB3  | 1.977      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | HG3  | 2.277      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | CA   | 56.869     | 0.025       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | CB   | 30.013     | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 298 | GLU  | N    | 124.397    | 0.039       | 1         |
| 1       | A     | 299 | GLY  | H    | 8.35       | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 299 | GLY  | HA3  | 3.971      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 299 | GLY  | CA   | 45.156     | 0.031       | 1         |
| 1       | A     | 299 | GLY  | N    | 110.105    | 0.042       | 1         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | H    | 8.261      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | HA   | 4.352      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | HB2  | 1.944      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | HB3  | 2.071      | 0.011       | 2         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | HG2  | 2.257      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | HG3  | 2.243      | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | CA   | 56.366     | 0.043       | 1         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | CB   | 30.205     | 0.088       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 300 | GLU  | CG   | 36.099     | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 300 | GLU  | N    | 120.81     | 0.050       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | H    | 8.287      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HA   | 4.114      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HB   | 2.1        | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG11 | 0.952      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG12 | 0.952      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG13 | 0.952      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG21 | 0.965      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG22 | 0.965      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | HG23 | 0.965      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | CA   | 62.65      | 0.123       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | CB   | 32.533     | 0.113       | 1         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | CG1  | 20.765     | 0.081       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | CG2  | 21.128     | 0.085       | 2         |
| 1       | A     | 301 | VAL  | N    | 121.553    | 0.082       | 1         |
| 1       | A     | 302 | GLY  | H    | 8.491      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 302 | GLY  | HA2  | 3.914      | 0.002       | 2         |
| 1       | A     | 302 | GLY  | HA3  | 3.972      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 302 | GLY  | CA   | 45.17      | 0.065       | 1         |
| 1       | A     | 302 | GLY  | N    | 112.473    | 0.032       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | H    | 8.13       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | HA   | 4.368      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | HB1  | 1.37       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | HB2  | 1.37       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | HB3  | 1.37       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | CA   | 52.302     | 0.056       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | CB   | 19.371     | 0.052       | 1         |
| 1       | A     | 303 | ALA  | N    | 123.987    | 0.049       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | H    | 8.198      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HA   | 4.18       | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HB   | 1.882      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HD11 | 0.885      | 0.017       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HD12 | 0.885      | 0.017       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HD13 | 0.885      | 0.017       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HG12 | 1.205      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HG13 | 1.503      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HG21 | 0.926      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HG22 | 0.926      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | HG23 | 0.926      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | CA   | 61.313     | 0.065       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 304 | ILE  | CB   | 38.76      | 0.053       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | CD1  | 13.11      | 0.099       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | CG1  | 27.351     | 0.091       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | CG2  | 17.478     | 0.076       | 1         |
| 1       | A     | 304 | ILE  | N    | 120.301    | 0.112       | 1         |
| 1       | A     | 305 | GLY  | H    | 8.482      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 305 | GLY  | HA3  | 3.979      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 305 | GLY  | CA   | 45.23      | 0.063       | 1         |
| 1       | A     | 305 | GLY  | N    | 112.991    | 0.037       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | H    | 8.26       | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | HA   | 4.312      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | HB2  | 2.063      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | HB3  | 1.931      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | HG3  | 2.258      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | CA   | 56.429     | 0.073       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | CB   | 30.413     | 0.046       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | CG   | 36.024     | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 306 | GLU  | N    | 120.758    | 0.088       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | H    | 8.495      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | HA   | 4.292      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | HB2  | 1.941      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | HB3  | 2.065      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | HG3  | 2.257      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | CA   | 56.321     | 0.037       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | CB   | 30.088     | 0.041       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | CG   | 36.276     | 0.043       | 1         |
| 1       | A     | 307 | GLU  | N    | 121.947    | 0.048       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | H    | 8.341      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | HA   | 4.594      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | HB1  | 1.368      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | HB2  | 1.368      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | HB3  | 1.368      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | CA   | 50.597     | 0.088       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | CB   | 18.197     | 0.056       | 1         |
| 1       | A     | 308 | ALA  | N    | 126.559    | 0.051       | 1         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HA   | 4.421      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HB2  | 1.894      | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HB3  | 2.293      | 0.012       | 2         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HD2  | 3.807      | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HD3  | 3.646      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | HG2  | 2.03       | 0.008       | 1         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 309 | PRO  | CA   | 63.215     | 0.038       | 1         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | CB   | 32.023     | 0.083       | 1         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | CD   | 50.443     | 0.066       | 1         |
| 1       | A     | 309 | PRO  | CG   | 27.364     | 0.124       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | H    | 8.51       | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HA   | 4.281      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HB2  | 2.108      | 0.013       | 2         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HB3  | 1.98       | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HE21 | 7.535      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HE22 | 6.849      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | HG3  | 2.388      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | CA   | 55.985     | 0.091       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | CB   | 29.108     | 0.038       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | CG   | 33.798     | 0.076       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | N    | 120.298    | 0.049       | 1         |
| 1       | A     | 310 | GLN  | NE2  | 111.84     | 0.073       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | H    | 8.401      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | HA   | 4.412      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | HB2  | 1.964      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | HG2  | 2.474      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 311 | MET  | HG3  | 2.527      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 311 | MET  | CA   | 55.668     | 0.054       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | CB   | 32.422     | 0.082       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | CG   | 32.127     | 0.092       | 1         |
| 1       | A     | 311 | MET  | N    | 121.119    | 0.103       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | H    | 8.333      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | HA   | 4.633      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | HB2  | 2.704      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | HB3  | 2.654      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | HD21 | 7.534      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | HD22 | 6.864      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | CA   | 53.383     | 0.039       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | CB   | 38.724     | 0.075       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | N    | 119.069    | 0.074       | 1         |
| 1       | A     | 312 | ASN  | ND2  | 112.552    | 0.104       | 1         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | H    | 8.011      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HA   | 4.531      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HB2  | 2.928      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HB3  | 3.021      | 0.009       | 2         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HD1  | 7.046      | 0.007       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HD2  | 7.046      | 0.007       | 3         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HE1  | 6.815      | 0.009       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | HE2  | 6.815      | 0.009       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CA   | 57.803     | 0.060       | 1         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CB   | 38.671     | 0.068       | 1         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CD1  | 133.107    | 0.025       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CD2  | 133.107    | 0.025       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CE1  | 118.271    | 0.025       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | CE2  | 118.271    | 0.025       | 3         |
| 1       | A     | 313 | TYR  | N    | 119.9      | 0.108       | 1         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | H    | 8.415      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | HA   | 4.609      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | HB2  | 2.744      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | HB3  | 2.63       | 0.002       | 2         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | CA   | 54.637     | 0.101       | 1         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | CB   | 41.357     | 0.089       | 1         |
| 1       | A     | 361 | ASP  | N    | 122.236    | 0.065       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | H    | 8.292      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | HA   | 4.561      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | HB3  | 2.697      | 0.006       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | CA   | 54.702     | 0.070       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | CB   | 41.208     | 0.107       | 1         |
| 1       | A     | 362 | ASP  | N    | 121.037    | 0.044       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | H    | 8.437      | 0.010       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | HA   | 4.209      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | HB2  | 2.088      | 0.001       | 2         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | HB3  | 2.0        | 0.010       | 2         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | HG2  | 2.304      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | HG3  | 2.259      | 0.006       | 2         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | CA   | 57.253     | 0.072       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | CB   | 29.669     | 0.118       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | CG   | 36.186     | 0.028       | 1         |
| 1       | A     | 363 | GLU  | N    | 120.617    | 0.043       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | H    | 8.145      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HA   | 4.212      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HB2  | 1.654      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HB3  | 1.503      | 0.005       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD11 | 0.82       | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD12 | 0.82       | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD13 | 0.82       | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD21 | 0.873      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD22 | 0.873      | 0.007       | 2         |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| List ID | Chain | Res | Type | Atom | Shift Data |             |           |
|---------|-------|-----|------|------|------------|-------------|-----------|
|         |       |     |      |      | Value      | Uncertainty | Ambiguity |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HD23 | 0.873      | 0.007       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | HG   | 1.6        | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | CA   | 55.855     | 0.075       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | CB   | 42.129     | 0.069       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | CD1  | 23.43      | 0.022       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | CD2  | 25.057     | 0.049       | 2         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | CG   | 27.09      | 0.016       | 1         |
| 1       | A     | 364 | LEU  | N    | 121.475    | 0.098       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | H    | 8.191      | 0.011       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | HA   | 4.153      | 0.004       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | HB2  | 1.908      | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | HG3  | 2.168      | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | CA   | 57.019     | 0.040       | 1         |
| 1       | A     | 365 | GLU  | N    | 119.612    | 0.110       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | H    | 8.173      | 0.008       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | HA   | 4.563      | 0.012       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | HB2  | 3.054      | 0.008       | 2         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | HB3  | 2.996      | 0.003       | 2         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | HD2  | 6.978      | 0.016       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | HE1  | 7.941      | 0.003       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | CA   | 56.172     | 0.047       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | CB   | 30.495     | 0.037       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | CE1  | 138.021    | 0.005       | 1         |
| 1       | A     | 366 | HIS  | N    | 118.845    | 0.040       | 1         |
| 1       | A     | 367 | HIS  | H    | 7.958      | 0.015       | 1         |
| 1       | A     | 370 | HIS  | HA   | 4.607      | 0.007       | 1         |
| 1       | A     | 370 | HIS  | HB2  | 3.175      | 0.004       | 2         |
| 1       | A     | 370 | HIS  | HB3  | 3.073      | 0.000       | 2         |
| 1       | A     | 370 | HIS  | HD2  | 7.003      | 0.000       | 1         |
| 1       | A     | 370 | HIS  | CA   | 56.047     | 0.059       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | H    | 8.064      | 0.009       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | HA   | 4.438      | 0.012       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | HB2  | 3.063      | 0.002       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | HD2  | 7.024      | 0.024       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | CA   | 57.398     | 0.040       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | CB   | 30.415     | 0.165       | 1         |
| 1       | A     | 371 | HIS  | N    | 125.52     | 0.060       | 1         |

### 7.1.2 Chemical shift referencing ⓘ

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus                | # values | Correction $\pm$ precision, ppm | Suggested action           |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 231      | $-0.48 \pm 0.14$                | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$  | 209      | $0.47 \pm 0.05$                 | None needed ( $< 0.5$ ppm) |
| $^{13}\text{C}'$       | 0        | —                               | None (insufficient data)   |
| $^{15}\text{N}$        | 206      | $0.54 \pm 0.30$                 | None needed (imprecise)    |

### 7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 82%, i.e. 2056 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2514. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$    | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 661/844 (78%)   | 336/339 (99%)   | 172/344 (50%)   | 153/161 (95%)   |
| Sidechain | 1217/1459 (83%) | 833/945 (88%)   | 350/450 (78%)   | 34/64 (53%)     |
| Aromatic  | 178/211 (84%)   | 90/108 (83%)    | 85/97 (88%)     | 3/6 (50%)       |
| Overall   | 2056/2514 (82%) | 1259/1392 (90%) | 607/891 (68%)   | 190/231 (82%)   |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 82%, i.e. 2065 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2526. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total           | $^1\text{H}$    | $^{13}\text{C}$ | $^{15}\text{N}$ |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 665/849 (78%)   | 338/341 (99%)   | 173/346 (50%)   | 154/162 (95%)   |
| Sidechain | 1222/1466 (83%) | 836/949 (88%)   | 352/453 (78%)   | 34/64 (53%)     |
| Aromatic  | 178/211 (84%)   | 90/108 (83%)    | 85/97 (88%)     | 3/6 (50%)       |
| Overall   | 2065/2526 (82%) | 1264/1398 (90%) | 610/896 (68%)   | 191/232 (82%)   |

### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1       | A     | 317 | THR  | HG1  | 5.69       | 0.08 – 2.19         | 21.6    |
| 1       | A     | 53  | THR  | HG1  | 5.35       | 0.08 – 2.19         | 19.9    |
| 1       | A     | 346 | LYS  | HA   | 1.71       | 2.15 – 6.37         | -6.0    |

### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:

