Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Oct 23, 2021 – 05:45 PM EDT

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

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

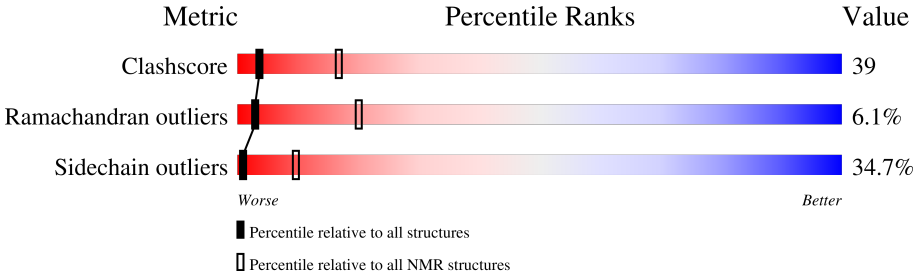
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.23.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.23.2

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	370	29% 61% 7% •

2 Ensemble composition and analysis (i)

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:4-A:231, A:241-A:370 (358)	1.08	9

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

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

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

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

3 Entry composition (i)

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

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

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

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

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

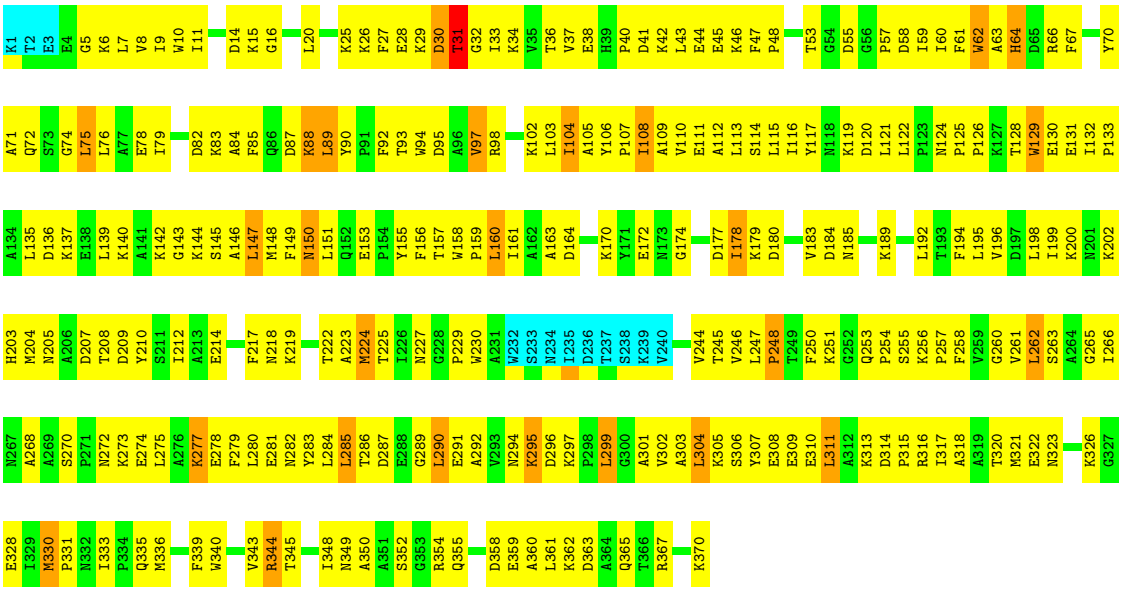
4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 29% 61% 7% •



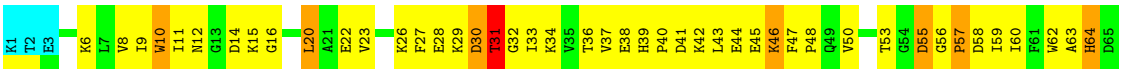
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

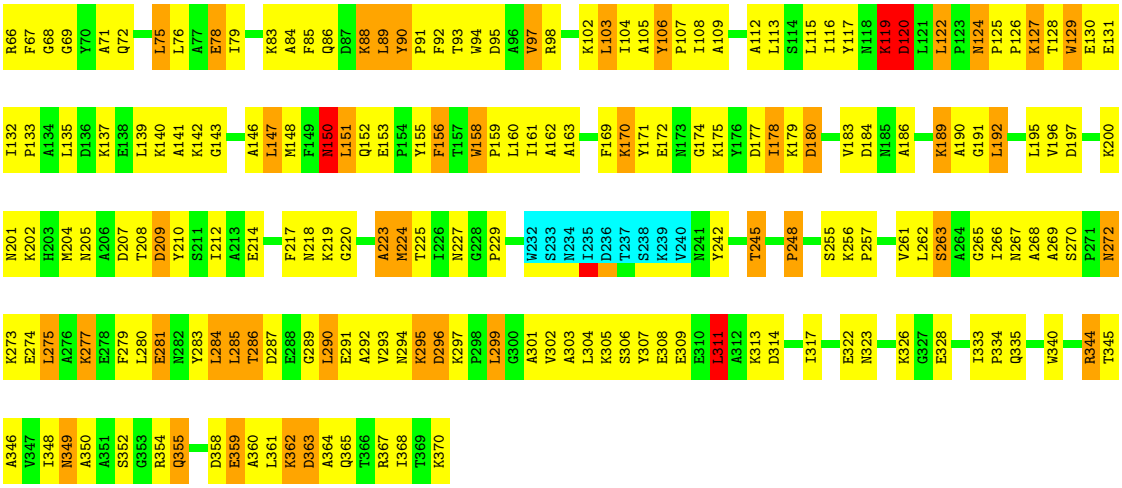
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 33% 49% 14% • •

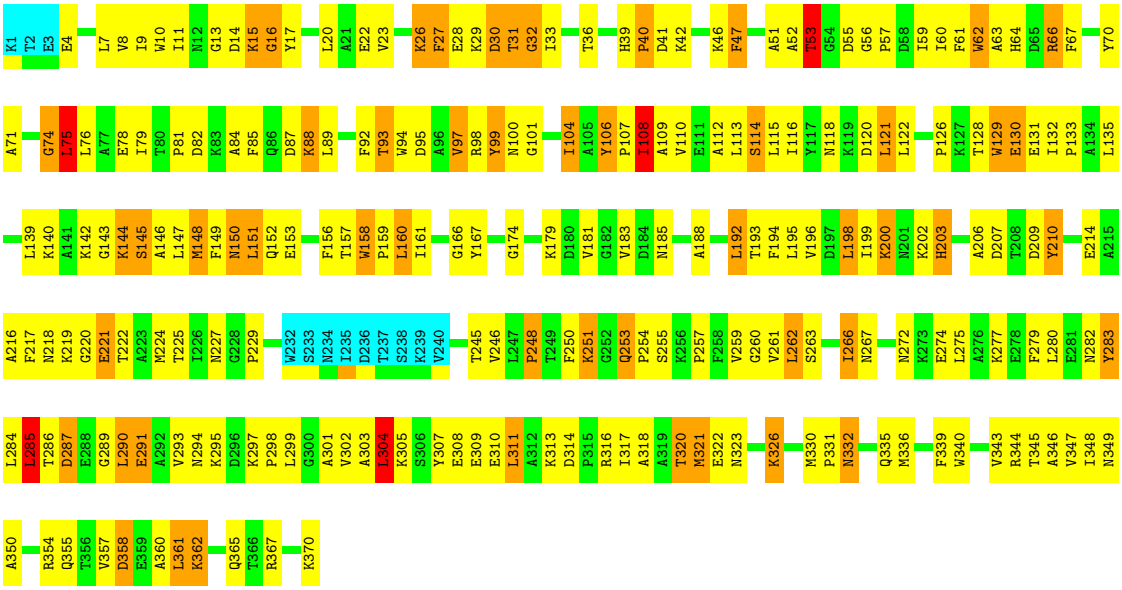




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

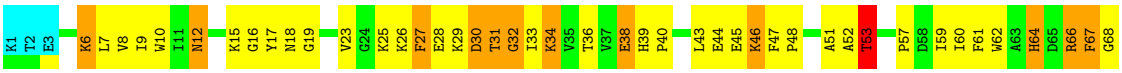
Chain A: 36% 45% 14%

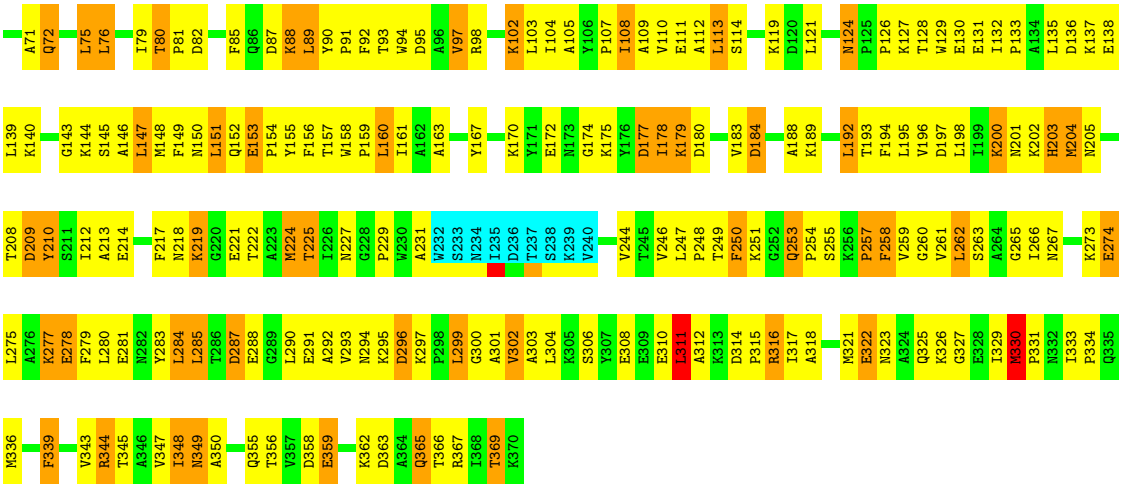


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 31% 48% 17%

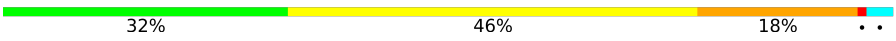


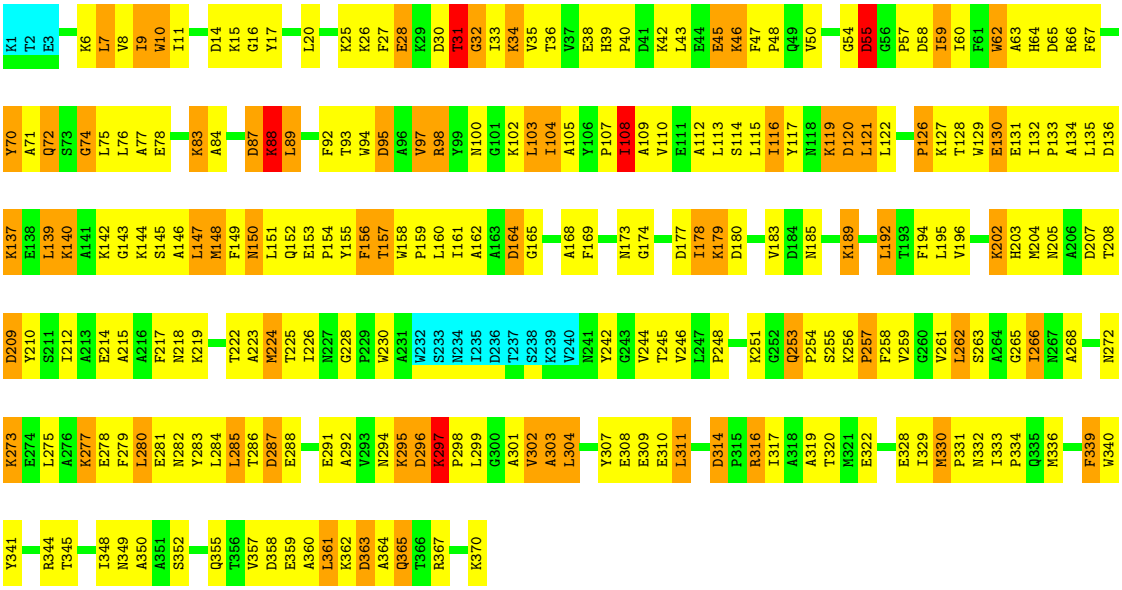


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A:

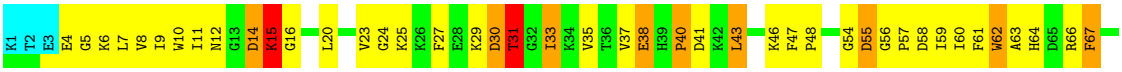


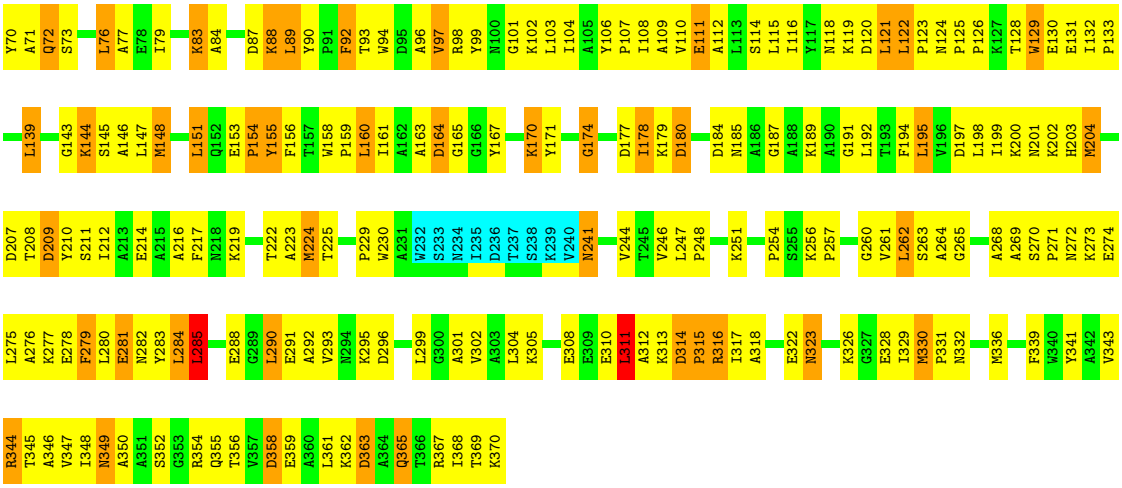


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A:

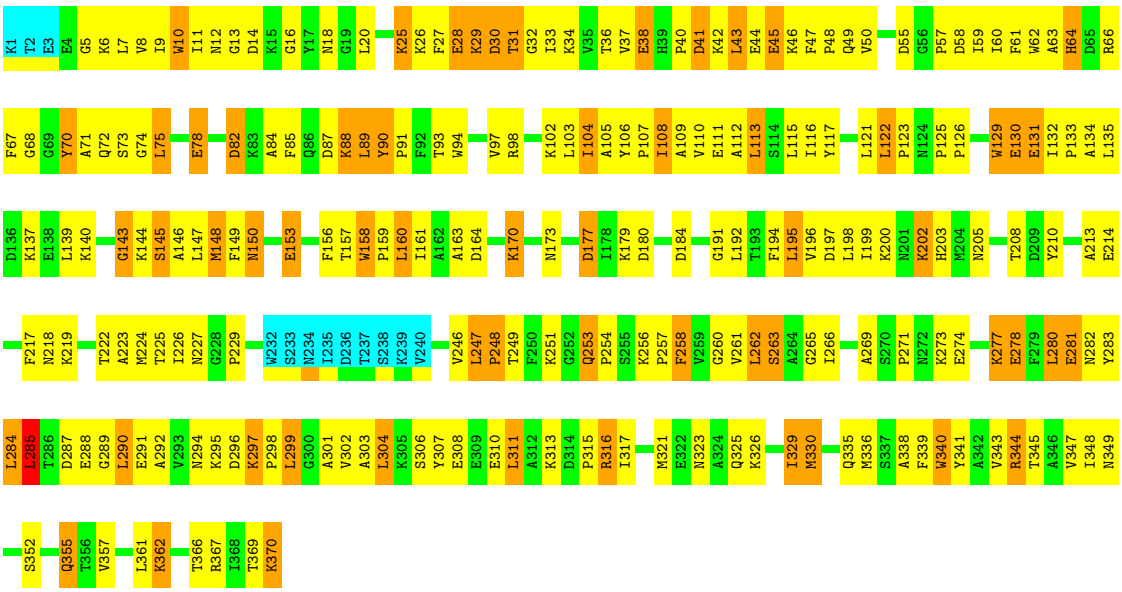




4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

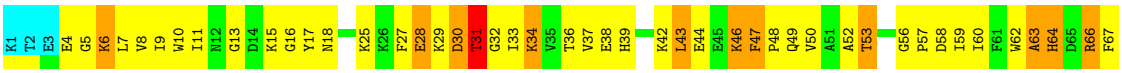
Chain A: 35% 45% 16%

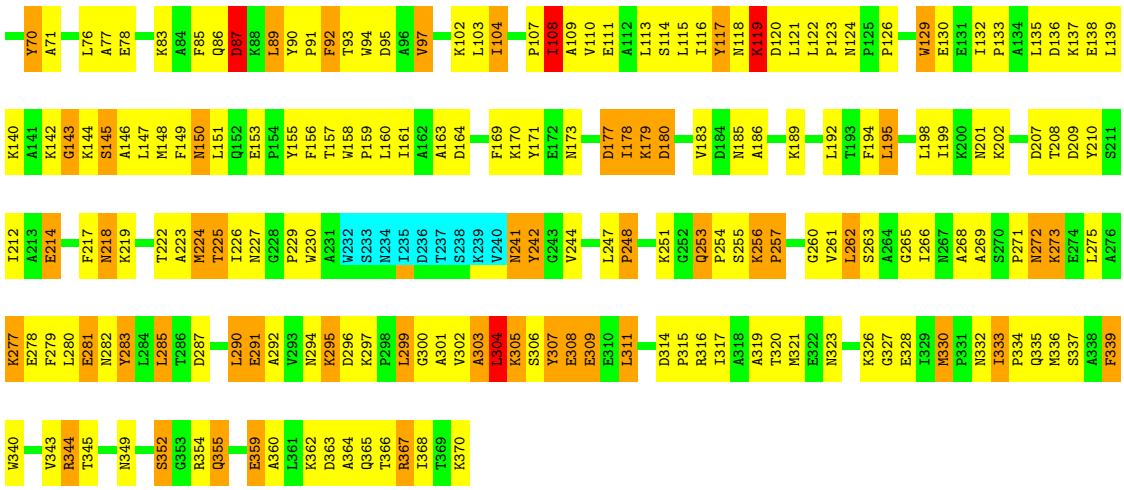


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 32% 46% 16%

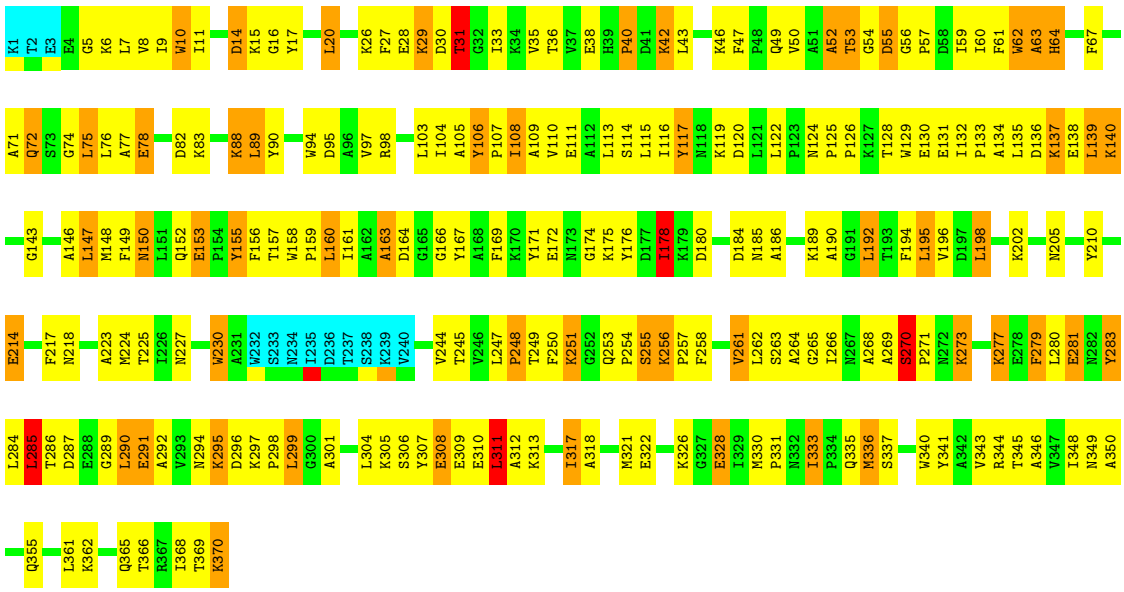




4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

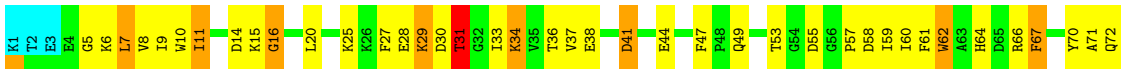
Chain A: 37% 44% 15%

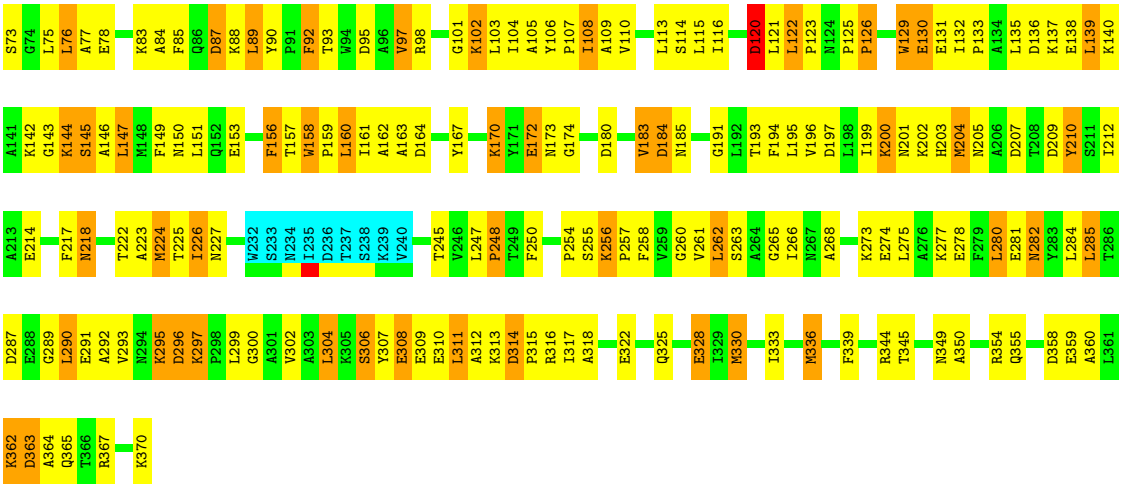


4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A: 38% 43% 15%

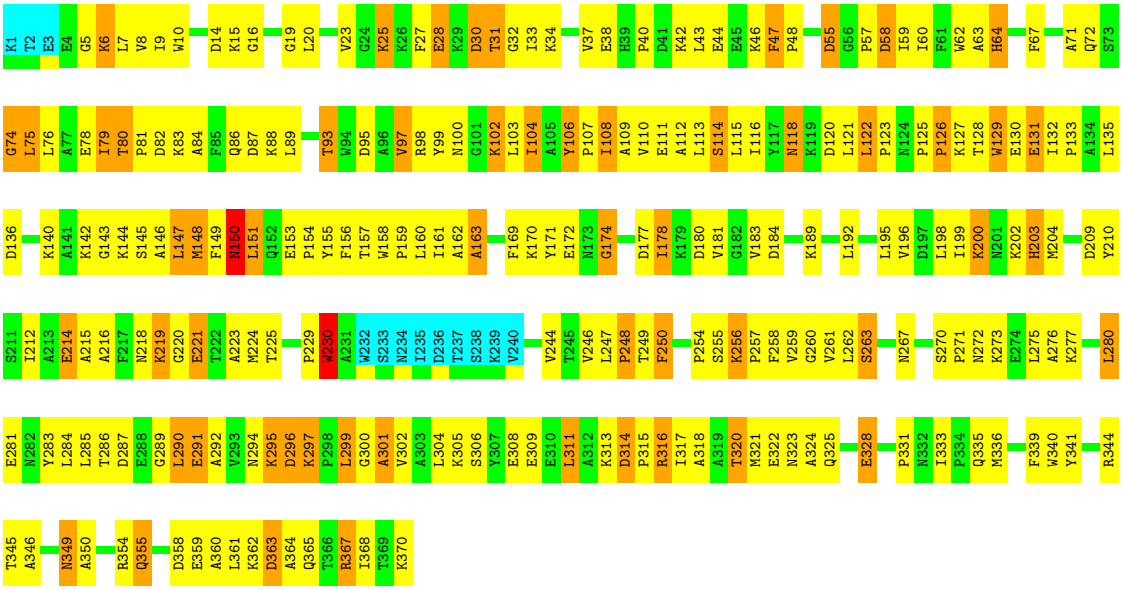




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MALTODEXTRIN BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.5
CNS	refinement	0.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2779	2760	2757	217±16
All	All	27790	27600	27570	2171

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 39.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HG21	1.10	1.23	7	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HG2	1.05	1.20	4	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:HG23	1.05	1.26	8	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	1.05	1.25	7	4
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	1.04	1.27	7	8
1:A:111:GLU:HG2	1:A:229:PRO:HG2	1.04	1.26	10	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:HD3	1.01	1.29	5	2
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:HB2	1.00	1.33	8	4
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HB3	1.00	1.34	9	7
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:HA	0.98	1.30	8	5
1:A:367:ARG:HD2	1:A:368:ILE:HG13	0.98	1.35	7	1
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:HG23	0.98	1.35	2	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB2	0.97	1.59	7	6
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB2	0.96	1.33	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD13	0.96	1.35	3	2
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:HG21	0.96	1.33	9	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB2	0.95	1.38	5	6
1:A:253:GLN:HG2	1:A:254:PRO:HD2	0.93	1.39	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HB2	0.92	1.39	2	7
1:A:253:GLN:HG3	1:A:254:PRO:HD2	0.92	1.38	2	2
1:A:148:MET:H	1:A:224:MET:HB3	0.91	1.25	2	4
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG21	0.91	1.41	6	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:HB3	0.91	1.43	5	4
1:A:259:VAL:HG12	1:A:329:ILE:HA	0.91	1.42	4	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HG3	0.91	1.43	9	2
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:HG2	0.90	1.42	1	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG23	0.89	1.40	10	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:208:THR:HB	0.88	1.43	1	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:HB2	0.88	1.46	8	4
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:HA3	0.88	1.43	9	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD23	0.86	1.46	9	3
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG23	0.86	2.05	9	2
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.86	2.06	8	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG12	0.86	1.45	1	2
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB3	0.86	1.45	9	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HG23	0.85	1.46	4	1
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:HB2	0.85	1.47	10	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.84	1.47	8	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:HA2	0.84	2.07	8	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:284:LEU:HD22	0.83	1.49	5	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:195:LEU:HD22	0.83	1.49	8	1
1:A:136:ASP:HB3	1:A:140:LYS:HD2	0.83	1.49	10	1
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:HD3	0.83	1.49	8	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HG	0.83	1.49	2	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD13	0.83	1.49	4	2
1:A:119:LYS:HD2	1:A:121:LEU:HD22	0.83	1.50	4	1
1:A:88:LYS:HD3	1:A:306:SER:HB2	0.83	1.51	3	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:60:ILE:HD12	0.82	1.34	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA2	0.82	2.09	7	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD21	0.82	1.48	5	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD12	0.82	1.51	5	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.82	1.49	1	2
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:HD3	0.81	1.51	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HB	0.81	1.53	4	7
1:A:149:PHE:CD2	1:A:226:ILE:HD12	0.81	2.11	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:HB2	0.81	1.51	9	4
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG12	0.80	1.76	5	2
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	2.07	1	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HB	0.80	1.54	3	1
1:A:285:LEU:HD21	1:A:304:LEU:HD11	0.80	1.54	6	2
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:HB2	0.80	1.54	5	2
1:A:210:TYR:O	1:A:214:GLU:HB2	0.80	1.75	2	10
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HG23	0.79	2.12	5	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD2	0.79	2.07	6	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:HG22	0.79	1.37	7	1
1:A:67:PHE:HE2	1:A:105:ALA:HA	0.79	1.35	8	1
1:A:150:ASN:HB2	1:A:153:GLU:HB2	0.79	1.54	3	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:226:ILE:HG22	0.79	1.51	4	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.79	1.54	7	5
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:HD21	0.79	1.51	2	2
1:A:65:ASP:HB3	1:A:331:PRO:HG3	0.79	1.55	4	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:HE1	0.79	1.36	6	1
1:A:217:PHE:HD2	1:A:225:THR:HA	0.79	1.37	2	1
1:A:130:GLU:O	1:A:133:PRO:HD2	0.79	1.77	7	9
1:A:9:ILE:HG13	1:A:37:VAL:HA	0.79	1.50	9	2
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:HB3	0.78	1.77	6	3
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD13	0.78	1.51	7	2
1:A:176:TYR:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.78	2.13	8	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB3	0.78	1.52	6	1
1:A:311:LEU:CD2	1:A:317:ILE:HG21	0.78	2.08	9	2
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:HG23	0.78	1.56	1	2
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HD12	0.77	1.53	1	1
1:A:311:LEU:CB	1:A:317:ILE:HG21	0.77	2.05	7	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:37:VAL:HA	0.77	2.10	9	2
1:A:109:ALA:N	1:A:302:VAL:HG11	0.77	1.94	7	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD12	0.77	1.79	3	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD13	0.77	1.55	2	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.77	1.79	3	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG13	0.76	1.54	9	2
1:A:67:PHE:HE2	1:A:265:GLY:HA3	0.76	1.39	4	3
1:A:62:TRP:O	1:A:262:LEU:HG	0.76	1.81	3	3
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HG2	0.76	2.15	2	3
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG22	0.76	1.82	9	2
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:HD11	0.76	1.57	3	1
1:A:90:TYR:CD2	1:A:92:PHE:HB2	0.75	2.16	9	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB3	0.75	1.56	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ILE:CG2	1:A:37:VAL:HA	0.75	2.10	7	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:HB2	0.75	1.58	10	2
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD13	0.75	1.59	4	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CG	0.75	2.08	4	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HA	0.75	1.59	7	1
1:A:170:LYS:HG3	1:A:180:ASP:HB3	0.75	1.55	1	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:HB2	0.75	1.81	4	9
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HB2	0.75	1.59	1	3
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.75	1.59	5	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:HB	0.74	1.58	4	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	2.16	8	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:HD2	0.74	1.59	7	3
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE2	0.74	2.18	6	2
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB2	0.74	1.82	7	3
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:OG1	0.74	1.82	7	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HB2	0.74	1.83	4	3
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HB2	0.74	1.60	9	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB2	0.74	1.83	10	4
1:A:16:GLY:HA3	1:A:293:VAL:HG23	0.74	1.57	2	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HD12	0.74	2.17	3	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:33:ILE:HG21	0.74	2.18	7	2
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:HG23	0.74	1.57	4	4
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG13	0.74	2.12	9	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD2	0.74	1.43	10	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:HD21	0.74	1.43	10	1
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB2	0.73	1.83	7	1
1:A:359:GLU:O	1:A:363:ASP:HB2	0.73	1.83	7	6
1:A:134:ALA:HA	1:A:137:LYS:HD3	0.73	1.60	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:301:ALA:HB3	0.73	1.61	8	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:15:LYS:HB3	0.73	1.61	5	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG21	0.73	1.99	5	1
1:A:297:LYS:HD2	1:A:299:LEU:HD22	0.73	1.58	6	1
1:A:132:ILE:HG13	1:A:133:PRO:CD	0.73	2.12	8	2
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.73	1.84	7	1
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB3	0.73	1.84	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD2	0.73	2.13	10	3
1:A:147:LEU:HD12	1:A:224:MET:HG3	0.73	1.60	5	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:294:ASN:ND2	0.73	1.98	10	1
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG23	0.73	2.14	10	4
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CB	0.72	2.14	10	7
1:A:89:LEU:HA	1:A:304:LEU:HG	0.72	1.59	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:ALA:O	1:A:296:ASP:HB2	0.72	1.85	1	7
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HD12	0.72	1.59	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:HB2	0.72	1.60	10	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD13	0.72	1.84	3	2
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.72	2.15	7	4
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:CB	0.72	2.15	8	1
1:A:50:VAL:O	1:A:53:THR:HG22	0.72	1.85	1	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD12	0.72	2.14	2	1
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HB2	0.72	1.60	9	3
1:A:107:PRO:HA	1:A:262:LEU:O	0.72	1.85	3	8
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:HD23	0.72	1.61	5	1
1:A:225:THR:C	1:A:226:ILE:HD13	0.72	2.05	9	1
1:A:272:ASN:HD22	1:A:275:LEU:HD13	0.72	1.45	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD13	0.72	2.14	7	3
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.72	2.14	8	1
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:HE2	0.71	1.45	3	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HG21	0.71	2.20	1	2
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:HG23	0.71	1.60	1	2
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD12	0.71	1.84	4	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:HG3	0.71	1.59	9	1
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:CB	0.71	2.14	3	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD2	0.71	2.16	8	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:HE2	0.71	1.62	8	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HB2	0.71	1.86	10	6
1:A:110:VAL:HA	1:A:260:GLY:O	0.71	1.85	9	5
1:A:72:GLN:HB3	1:A:104:ILE:HD13	0.71	1.62	5	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:HG23	0.71	2.21	9	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:H	0.71	1.45	9	4
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA2	0.71	2.21	7	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:105:ALA:HA	0.71	2.20	8	1
1:A:285:LEU:CD2	1:A:304:LEU:HD11	0.71	2.15	6	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD22	0.71	1.85	8	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.71	1.85	3	3
1:A:299:LEU:O	1:A:316:ARG:HB3	0.71	1.86	3	2
1:A:10:TRP:O	1:A:60:ILE:HG13	0.70	1.86	7	2
1:A:58:ASP:OD2	1:A:267:ASN:HB2	0.70	1.86	10	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG13	0.70	1.63	4	1
1:A:217:PHE:CB	1:A:225:THR:HG23	0.70	2.13	8	2
1:A:90:TYR:HD2	1:A:92:PHE:HB2	0.70	1.44	9	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG22	0.70	1.85	10	4
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:HB2	0.70	1.87	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HD3	0.70	1.86	7	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG3	0.70	1.62	8	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.69	2.17	1	2
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.69	1.63	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG23	0.69	1.64	7	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:317:ILE:HD13	0.69	2.17	7	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:57:PRO:HG2	0.69	2.21	2	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:O	0.69	1.87	6	2
1:A:176:TYR:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.69	2.21	8	1
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG23	0.69	1.87	9	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:CG2	0.69	2.17	1	7
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:CB	0.69	2.17	9	2
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD23	0.69	1.87	3	1
1:A:117:TYR:CZ	1:A:125:PRO:HG3	0.69	2.22	8	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CG	0.69	2.18	10	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:PRO:HB3	0.69	2.17	8	8
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HB2	0.69	1.63	2	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG2	0.69	2.17	4	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.88	1	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HG2	0.69	1.64	1	1
1:A:349:ASN:HD22	1:A:355:GLN:HG3	0.69	1.46	1	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.69	2.18	3	3
1:A:217:PHE:HB3	1:A:225:THR:CG2	0.69	2.14	2	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:256:LYS:HG3	0.69	1.64	9	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:CD1	0.69	2.17	3	5
1:A:112:ALA:C	1:A:113:LEU:HD12	0.69	2.08	4	1
1:A:113:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.68	2.18	4	2
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD22	0.68	2.18	8	1
1:A:345:THR:CA	1:A:349:ASN:HB2	0.68	2.18	8	2
1:A:296:ASP:OD2	1:A:297:LYS:HE2	0.68	1.88	4	1
1:A:161:ILE:HA	1:A:191:GLY:HA3	0.68	1.65	6	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:37:VAL:HA	0.68	1.62	7	1
1:A:183:VAL:CG2	1:A:365:GLN:HG3	0.68	2.18	9	1
1:A:112:ALA:O	1:A:229:PRO:HD3	0.68	1.88	6	3
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:HA3	0.68	2.23	3	2
1:A:111:GLU:HA	1:A:229:PRO:HG2	0.68	1.63	5	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HG2	0.68	1.88	10	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HG2	0.68	1.88	1	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD2	0.68	2.22	10	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CZ2	0.68	2.23	3	2
1:A:362:LYS:O	1:A:365:GLN:HG3	0.68	1.89	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:279:PHE:O	1:A:283:TYR:HB2	0.68	1.88	8	5
1:A:256:LYS:NZ	1:A:328:GLU:HG3	0.68	2.03	8	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.68	1.66	1	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:HD12	0.68	1.64	7	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:CD	0.68	2.19	10	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:HA	0.68	1.65	4	3
1:A:64:HIS:HB2	1:A:261:VAL:O	0.68	1.89	9	6
1:A:9:ILE:HG12	1:A:36:THR:O	0.68	1.89	4	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG13	0.67	1.64	9	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HG2	0.67	1.89	3	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG12	0.67	1.67	6	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CB	0.67	2.18	1	8
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB2	0.67	2.16	5	6
1:A:257:PRO:O	1:A:328:GLU:HB2	0.67	1.88	4	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:195:LEU:CD1	0.67	2.19	7	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:CE3	0.67	2.22	9	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.67	1.90	3	4
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:CB	0.67	2.19	6	2
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:OG	0.67	1.89	3	4
1:A:349:ASN:ND2	1:A:355:GLN:HG3	0.67	2.04	3	2
1:A:301:ALA:H	1:A:317:ILE:HG21	0.67	1.50	5	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:OG	0.67	1.90	10	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:CG	0.67	2.19	10	1
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:HB2	0.67	1.66	5	4
1:A:258:PHE:HB3	1:A:330:MET:HB3	0.67	1.65	6	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:HZ3	0.66	1.51	3	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:HG23	0.66	1.67	3	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:CD2	0.66	2.19	4	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CD1	0.66	2.20	3	2
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:HD13	0.66	1.67	1	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HD11	0.66	1.91	3	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:HG12	0.66	1.67	7	2
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:NH1	0.66	2.06	7	1
1:A:155:TYR:O	1:A:159:PRO:HG3	0.66	1.91	3	6
1:A:361:LEU:O	1:A:365:GLN:HB2	0.66	1.91	4	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:40:PRO:HG2	0.66	1.68	6	2
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CB	0.66	2.19	3	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HA	0.66	2.26	3	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:HD2	0.66	1.66	2	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CD1	0.66	2.26	4	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG13	0.66	1.91	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HD12	1:A:14:ASP:HB2	0.66	1.66	8	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:248:PRO:HD2	0.65	2.06	8	2
1:A:136:ASP:O	1:A:140:LYS:HB2	0.65	1.91	7	2
1:A:311:LEU:CD1	1:A:314:ASP:HB2	0.65	2.20	1	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.65	1.51	7	3
1:A:129:TRP:O	1:A:133:PRO:HD3	0.65	1.90	9	3
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:C	0.65	2.11	9	2
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:CE3	0.65	2.27	7	1
1:A:5:GLY:C	1:A:33:ILE:HG23	0.65	2.11	9	2
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CB	0.65	2.19	2	5
1:A:99:TYR:CG	1:A:104:ILE:HD11	0.65	2.26	5	1
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HD11	0.65	2.12	3	1
1:A:322:GLU:O	1:A:325:GLN:HB2	0.65	1.92	3	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:CG2	0.65	2.14	7	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.65	1.69	5	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD12	0.65	1.69	2	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG12	0.65	1.92	8	3
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:HD11	0.65	1.66	8	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG12	0.65	1.92	10	1
1:A:316:ARG:H	1:A:316:ARG:HD2	0.65	1.51	6	2
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:H	0.65	1.50	7	1
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:CB	0.65	2.20	5	10
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HB2	0.65	1.92	2	2
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:H	0.65	1.50	10	1
1:A:134:ALA:O	1:A:137:LYS:HG2	0.64	1.91	8	3
1:A:209:ASP:CB	1:A:212:ILE:HD13	0.64	2.22	4	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:HD2	0.64	1.52	6	2
1:A:298:PRO:HG2	1:A:316:ARG:HH12	0.64	1.52	6	1
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:HD12	0.64	1.69	6	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:324:ALA:HB1	0.64	1.69	10	1
1:A:150:ASN:CB	1:A:153:GLU:HB2	0.64	2.21	3	1
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HB	0.64	2.27	1	1
1:A:286:THR:O	1:A:290:LEU:HB2	0.64	1.93	8	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HB3	0.64	2.22	10	4
1:A:71:ALA:C	1:A:76:LEU:HB2	0.64	2.13	7	3
1:A:117:TYR:CE1	1:A:125:PRO:HG3	0.64	2.28	8	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:H	0.64	1.51	10	2
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG1	0.64	2.20	1	2
1:A:99:TYR:OH	1:A:332:ASN:HB2	0.64	1.92	2	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:14:ASP:HB2	0.64	2.23	8	1
1:A:285:LEU:HD13	1:A:304:LEU:HD11	0.64	1.68	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:LYS:HE3	0.64	1.67	10	1
1:A:214:GLU:HG3	1:A:218:ASN:CB	0.64	2.23	10	1
1:A:301:ALA:N	1:A:317:ILE:HG22	0.64	2.08	4	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG23	0.64	1.70	5	2
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:CE3	0.64	2.26	7	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CG	0.64	2.23	8	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:37:VAL:HA	0.64	1.68	1	1
1:A:28:GLU:HB3	1:A:33:ILE:O	0.64	1.93	2	3
1:A:68:GLY:O	1:A:72:GLN:HB2	0.64	1.93	6	2
1:A:163:ALA:HA	1:A:254:PRO:O	0.64	1.93	7	3
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:CB	0.64	2.23	9	1
1:A:106:TYR:O	1:A:263:SER:HA	0.64	1.93	1	5
1:A:164:ASP:HB2	1:A:253:GLN:HB3	0.64	1.68	4	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HG	0.64	1.68	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB2	0.64	2.22	2	6
1:A:275:LEU:O	1:A:279:PHE:HB2	0.64	1.93	3	2
1:A:9:ILE:HD11	1:A:35:VAL:HB	0.64	1.70	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HG3	0.64	1.92	10	3
1:A:214:GLU:O	1:A:218:ASN:HB2	0.64	1.91	7	3
1:A:147:LEU:HB3	1:A:224:MET:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:36:THR:O	0.63	1.93	7	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	0.63	1.69	10	2
1:A:47:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.63	2.27	3	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HA	0.63	1.93	6	2
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG12	0.63	2.23	6	1
1:A:115:LEU:HB3	1:A:245:THR:O	0.63	1.93	9	4
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:N	0.63	2.09	1	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD12	0.63	1.70	7	1
1:A:161:ILE:HG13	1:A:191:GLY:HA3	0.63	1.69	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:CG2	0.63	2.24	4	1
1:A:277:LYS:O	1:A:281:GLU:HG2	0.63	1.92	4	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:CG	0.63	2.21	9	1
1:A:99:TYR:CD1	1:A:104:ILE:HD11	0.63	2.28	5	1
1:A:191:GLY:O	1:A:195:LEU:HB2	0.63	1.93	5	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:59:ILE:HD11	0.63	1.70	10	3
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CD1	0.63	2.23	1	3
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HB2	0.63	1.93	8	2
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HD2	0.63	1.94	9	1
1:A:297:LYS:CG	1:A:298:PRO:HD2	0.63	2.24	2	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HB2	0.63	2.18	2	3
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:PRO:CA	0.63	2.23	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:CD1	0.63	2.24	4	2
1:A:64:HIS:CB	1:A:261:VAL:HG23	0.63	2.24	4	3
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:CG2	0.62	2.24	3	2
1:A:156:PHE:C	1:A:159:PRO:HD2	0.62	2.15	9	3
1:A:171:TYR:CZ	1:A:174:GLY:HA2	0.62	2.29	1	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CD1	0.62	2.24	8	2
1:A:109:ALA:HB1	1:A:111:GLU:OE2	0.62	1.93	6	1
1:A:200:LYS:O	1:A:204:MET:HG2	0.62	1.94	9	1
1:A:33:ILE:HG23	1:A:279:PHE:HE2	0.62	1.52	1	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.62	1.95	3	4
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HG22	0.62	1.70	9	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CG1	0.62	2.24	4	4
1:A:148:MET:N	1:A:224:MET:HB3	0.62	2.05	2	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CA	0.62	2.19	8	3
1:A:303:ALA:O	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.93	4	2
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HD13	0.62	1.70	4	3
1:A:314:ASP:CG	1:A:317:ILE:HG13	0.62	2.14	5	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:20:LEU:HD21	0.62	2.24	8	1
1:A:305:LYS:O	1:A:309:GLU:HB2	0.62	1.95	8	2
1:A:62:TRP:C	1:A:262:LEU:HG	0.62	2.15	3	3
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD22	0.62	1.72	1	1
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HG21	0.62	1.54	9	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:103:LEU:O	0.62	1.94	1	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:N	0.62	2.10	6	2
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD21	0.62	1.72	8	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:66:ARG:HD2	0.62	2.29	9	1
1:A:291:GLU:HA	1:A:295:LYS:CB	0.62	2.25	6	3
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG12	0.62	1.72	5	2
1:A:194:PHE:O	1:A:198:LEU:HB2	0.62	1.95	8	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:37:VAL:HA	0.62	2.25	10	2
1:A:126:PRO:CG	1:A:131:GLU:HG3	0.62	2.24	10	1
1:A:117:TYR:HD2	1:A:245:THR:HG1	0.62	1.38	1	1
1:A:304:LEU:HG	1:A:307:TYR:HB2	0.62	1.69	2	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:109:ALA:N	0.62	2.10	10	2
1:A:227:ASN:HB2	1:A:231:ALA:HB1	0.61	1.72	3	1
1:A:246:VAL:HB	1:A:322:GLU:HG3	0.61	1.70	3	1
1:A:64:HIS:NE2	1:A:105:ALA:HB1	0.61	2.10	4	1
1:A:119:LYS:CD	1:A:121:LEU:HD22	0.61	2.25	4	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:CB	0.61	2.25	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.61	1.95	7	6
1:A:128:THR:HG23	1:A:131:GLU:HB2	0.61	1.71	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HB	1:A:301:ALA:HB3	0.61	1.71	2	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB3	0.61	1.96	4	1
1:A:108:ILE:O	1:A:302:VAL:HG21	0.61	1.95	4	2
1:A:355:GLN:HE21	1:A:360:ALA:HB2	0.61	1.55	4	1
1:A:261:VAL:HG22	1:A:330:MET:CE	0.61	2.25	5	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:262:LEU:O	0.61	1.94	10	2
1:A:77:ALA:CB	1:A:268:ALA:HA	0.61	2.20	8	2
1:A:248:PRO:O	1:A:254:PRO:HB3	0.61	1.96	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:HG12	0.61	1.72	7	1
1:A:166:GLY:O	1:A:256:LYS:HD3	0.61	1.95	8	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.61	1.95	1	2
1:A:81:PRO:HA	1:A:85:PHE:CD2	0.61	2.29	2	1
1:A:166:GLY:HA2	1:A:185:ASN:HD21	0.61	1.56	8	1
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HD3	0.61	1.73	2	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:HE1	0.61	1.55	4	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB3	0.61	1.95	5	5
1:A:209:ASP:N	1:A:212:ILE:HD12	0.61	2.09	1	1
1:A:285:LEU:CD1	1:A:304:LEU:HD11	0.61	2.26	8	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:HA	0.61	1.72	9	4
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG13	0.60	1.73	2	3
1:A:303:ALA:CB	1:A:311:LEU:HG	0.60	2.26	2	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.60	1.73	7	1
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ILE:HD13	0.60	1.96	7	4
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:OG	0.60	1.94	2	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG13	0.60	2.25	2	1
1:A:259:VAL:CG1	1:A:329:ILE:HA	0.60	2.26	3	1
1:A:111:GLU:O	1:A:260:GLY:HA3	0.60	1.96	10	3
1:A:140:LYS:HA	1:A:144:LYS:O	0.60	1.96	7	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:223:ALA:HB2	0.60	1.71	9	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.12	6	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HG3	0.60	1.73	2	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:153:GLU:HB2	0.60	2.12	2	2
1:A:72:GLN:CG	1:A:104:ILE:HD13	0.60	2.27	3	2
1:A:6:LYS:HA	1:A:34:LYS:O	0.60	1.97	6	2
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD11	0.60	2.31	7	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CG1	0.60	2.26	8	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:HA	0.60	1.72	10	1
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:HD3	0.60	2.10	10	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:33:ILE:HG21	0.60	2.31	3	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CB	0.60	2.27	4	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:CG2	0.60	2.25	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD23	1:A:245:THR:HG23	0.60	1.72	9	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.60	2.31	2	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HB	0.60	1.73	4	2
1:A:303:ALA:HB2	1:A:311:LEU:HG	0.60	1.74	2	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HE2	0.60	1.71	3	1
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:H	0.60	1.38	4	1
1:A:298:PRO:HB2	1:A:314:ASP:OD2	0.60	1.96	4	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HB2	0.60	2.32	8	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:N	0.60	2.12	9	2
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CG	0.60	2.27	1	1
1:A:283:TYR:O	1:A:289:GLY:HA3	0.60	1.97	2	2
1:A:128:THR:O	1:A:131:GLU:HG2	0.60	1.97	4	1
1:A:90:TYR:HB3	1:A:93:THR:OG1	0.60	1.97	7	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:PHE:HB2	0.59	1.96	10	3
1:A:118:ASN:HB2	1:A:122:LEU:CD1	0.59	2.26	2	1
1:A:62:TRP:O	1:A:263:SER:N	0.59	2.34	1	10
1:A:290:LEU:HD13	1:A:294:ASN:HB2	0.59	1.73	2	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:TYR:HB2	0.59	1.98	4	3
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:HB2	0.59	1.74	10	1
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG13	0.59	2.27	2	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG22	0.59	1.96	2	3
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG22	0.59	1.98	4	2
1:A:330:MET:SD	1:A:331:PRO:HD2	0.59	2.37	3	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:HB1	0.59	1.74	4	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.59	2.33	3	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TRP:CZ3	0.59	2.32	3	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:37:VAL:HG22	0.59	1.74	6	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:CD1	0.59	2.28	8	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:227:ASN:C	0.59	2.17	8	2
1:A:349:ASN:O	1:A:355:GLN:HB2	0.59	1.97	8	4
1:A:10:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HG13	0.59	2.33	2	1
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HG	0.59	1.75	8	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:PRO:HD3	0.59	1.73	2	2
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:HD22	0.59	1.58	3	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:225:THR:O	0.59	1.96	2	1
1:A:364:ALA:O	1:A:367:ARG:HG3	0.59	1.97	10	2
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CD	0.59	2.28	9	1
1:A:259:VAL:CB	1:A:324:ALA:HB1	0.59	2.28	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HB	0.59	1.98	7	5
1:A:113:LEU:HG	1:A:228:GLY:CA	0.59	2.28	4	1
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:HG3	0.59	1.98	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:HD23	0.59	1.58	10	1
1:A:209:ASP:H	1:A:212:ILE:HD12	0.58	1.58	1	1
1:A:283:TYR:CD1	1:A:284:LEU:HD23	0.58	2.33	10	1
1:A:62:TRP:HA	1:A:62:TRP:HE3	0.58	1.58	9	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:289:GLY:HA2	0.58	1.75	1	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HD11	0.58	1.75	8	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HB	0.58	1.73	3	3
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:O	0.58	1.99	6	2
1:A:147:LEU:HB2	1:A:224:MET:CB	0.58	2.28	10	3
1:A:208:THR:HG23	1:A:212:ILE:HG22	0.58	1.75	7	1
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:CG2	0.58	2.28	10	2
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD2	0.58	1.99	8	1
1:A:199:ILE:HG13	1:A:200:LYS:H	0.58	1.58	9	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.58	1.76	10	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG13	0.58	1.75	2	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:CG1	0.58	2.29	3	1
1:A:146:ALA:HA	1:A:222:THR:HB	0.58	1.75	3	1
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HB2	0.58	1.99	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.58	1.75	2	1
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LYS:HG2	0.58	1.99	3	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:HD3	0.58	2.27	8	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HG21	0.58	1.57	1	2
1:A:159:PRO:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.58	1.76	2	1
1:A:258:PHE:HA	1:A:328:GLU:O	0.58	1.98	8	4
1:A:123:PRO:O	1:A:125:PRO:HD3	0.58	1.98	10	3
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:NE1	0.58	2.13	8	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:36:THR:OG1	0.58	1.99	9	1
1:A:304:LEU:HD23	1:A:304:LEU:N	0.58	2.14	10	1
1:A:109:ALA:O	1:A:261:VAL:HA	0.58	1.99	5	5
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	0.58	1.99	4	3
1:A:219:LYS:HG2	1:A:221:GLU:HG3	0.58	1.74	3	1
1:A:255:SER:O	1:A:257:PRO:HD3	0.58	1.99	3	3
1:A:189:LYS:HD2	1:A:361:LEU:HD12	0.57	1.76	4	1
1:A:350:ALA:CA	1:A:355:GLN:HB3	0.57	2.26	5	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:HD2	0.57	1.76	6	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.57	2.33	7	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:135:LEU:HD11	0.57	1.75	7	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.57	1.99	2	3
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:O	0.57	1.98	7	2
1:A:163:ALA:CA	1:A:255:SER:HA	0.57	2.29	8	3
1:A:183:VAL:O	1:A:188:ALA:HB3	0.57	1.98	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:PHE:CE2	1:A:265:GLY:HA3	0.57	2.29	4	2
1:A:270:SER:HB3	1:A:271:PRO:CD	0.57	2.25	8	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CG	0.57	2.28	9	2
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD12	0.57	1.99	1	1
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:CB	0.57	2.28	8	2
1:A:160:LEU:HG	1:A:250:PHE:CE2	0.57	2.33	3	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:HD2	0.57	2.13	9	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:H	0.57	1.58	1	1
1:A:217:PHE:CZ	1:A:227:ASN:HB3	0.57	2.35	1	1
1:A:27:PHE:HD2	1:A:33:ILE:HD13	0.57	1.59	4	2
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	5	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:CE	0.57	2.29	7	1
1:A:109:ALA:CA	1:A:302:VAL:HG11	0.57	2.28	7	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HB	0.57	2.25	1	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:CG2	0.57	2.28	2	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.57	2.33	2	1
1:A:281:GLU:O	1:A:285:LEU:HB3	0.57	2.00	3	2
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG3	0.57	2.29	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CD1	0.57	2.30	6	3
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:CG2	0.57	2.29	2	1
1:A:108:ILE:HB	1:A:262:LEU:CB	0.57	2.25	9	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HD12	0.57	1.76	1	1
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB2	0.57	2.00	8	4
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:HB3	0.57	1.75	3	2
1:A:177:ASP:HB2	1:A:180:ASP:OD2	0.57	1.99	3	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:225:THR:HB	0.57	1.76	6	1
1:A:129:TRP:HD1	1:A:248:PRO:HG2	0.57	1.58	2	2
1:A:95:ASP:O	1:A:98:ARG:HG2	0.57	1.99	4	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HE2	0.57	1.99	4	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:277:LYS:HE3	0.57	1.77	2	1
1:A:189:LYS:NZ	1:A:362:LYS:HB3	0.57	2.14	4	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HD21	0.57	1.60	1	1
1:A:171:TYR:CE1	1:A:174:GLY:HA2	0.57	2.35	10	2
1:A:7:LEU:O	1:A:36:THR:HG22	0.57	1.99	7	1
1:A:225:THR:O	1:A:226:ILE:HD13	0.57	2.00	7	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.56	2.00	4	2
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:HG2	0.56	1.75	6	1
1:A:186:ALA:O	1:A:189:LYS:HG3	0.56	2.00	1	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HB2	0.56	2.00	3	3
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.56	2.29	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:GLU:C	1:A:133:PRO:HD2	0.56	2.21	5	6
1:A:7:LEU:HG	1:A:58:ASP:OD2	0.56	2.00	4	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG12	0.56	1.99	4	2
1:A:87:ASP:O	1:A:88:LYS:HD2	0.56	2.01	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HD13	0.56	1.77	5	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HB2	0.56	2.34	6	1
1:A:25:LYS:HD2	1:A:34:LYS:HE3	0.56	1.77	9	1
1:A:156:PHE:HZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	1.60	9	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:HB3	0.56	1.61	1	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:CG1	0.56	2.30	7	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:155:TYR:CE2	0.56	2.35	8	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD13	0.56	2.20	2	2
1:A:147:LEU:HA	1:A:224:MET:HB3	0.56	1.78	9	4
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.56	2.30	2	2
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CB	0.56	2.30	3	2
1:A:246:VAL:CG1	1:A:322:GLU:HB3	0.56	2.30	4	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:HG23	0.56	1.76	7	1
1:A:7:LEU:CG	1:A:59:ILE:HD11	0.56	2.30	8	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD13	0.56	2.29	2	1
1:A:156:PHE:CZ	1:A:226:ILE:HD11	0.56	2.36	9	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:HD3	0.56	1.76	9	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:160:LEU:HG	0.56	2.36	8	1
1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:HD22	0.56	2.16	9	1
1:A:62:TRP:HB2	1:A:67:PHE:CD2	0.56	2.36	9	2
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:H	0.56	1.60	10	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:H	0.55	1.61	2	2
1:A:266:ILE:HG23	1:A:266:ILE:O	0.55	2.01	9	6
1:A:50:VAL:HG23	1:A:55:ASP:HB2	0.55	1.78	8	1
1:A:250:PHE:HZ	1:A:255:SER:HB2	0.55	1.60	10	1
1:A:164:ASP:CB	1:A:253:GLN:HB3	0.55	2.31	4	1
1:A:230:TRP:HA	1:A:230:TRP:CE3	0.55	2.35	10	2
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.55	2.00	8	5
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG22	0.55	2.02	4	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.55	2.31	5	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HB2	0.55	2.01	9	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:248:PRO:HD2	0.55	2.36	1	1
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:CG	0.55	2.30	2	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:301:ALA:HB3	0.55	2.30	8	2
1:A:209:ASP:CG	1:A:212:ILE:HG12	0.55	2.21	7	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:208:THR:HB	0.55	2.25	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:LEU:O	1:A:202:LYS:HG2	0.55	2.01	2	1
1:A:149:PHE:HE2	1:A:226:ILE:N	0.55	2.00	4	1
1:A:295:LYS:HG3	1:A:296:ASP:N	0.55	2.17	4	1
1:A:333:ILE:HG13	1:A:334:PRO:CD	0.55	2.30	7	2
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD23	0.55	2.32	5	1
1:A:311:LEU:O	1:A:318:ALA:HB2	0.55	2.01	10	1
1:A:58:ASP:HB2	1:A:266:ILE:CG2	0.55	2.30	1	1
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:TRP:NE1	0.55	2.15	1	1
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CZ	0.55	2.37	2	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:TYR:CE1	0.55	2.36	4	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:HG23	0.55	2.36	7	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD22	0.55	1.78	8	1
1:A:63:ALA:HB3	1:A:66:ARG:HG2	0.55	1.77	4	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:HD12	0.55	1.77	6	2
1:A:25:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.55	2.01	9	2
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:CD1	0.55	2.31	6	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HB2	0.55	1.79	9	1
1:A:78:GLU:HB3	1:A:104:ILE:HG22	0.55	1.78	8	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:160:LEU:HD13	0.55	2.37	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HA	0.55	1.78	3	1
1:A:64:HIS:HA	1:A:263:SER:HB3	0.55	1.77	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:294:ASN:HD22	0.55	1.62	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:CG	0.55	2.31	6	1
1:A:345:THR:HA	1:A:349:ASN:CB	0.55	2.27	8	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CB	0.55	2.55	1	5
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HB	0.55	2.01	6	3
1:A:314:ASP:HB2	1:A:318:ALA:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HG2	0.55	2.02	4	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CG1	0.55	2.31	6	2
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:HB3	0.55	1.78	10	1
1:A:156:PHE:O	1:A:159:PRO:HG2	0.54	2.02	4	5
1:A:350:ALA:HA	1:A:355:GLN:O	0.54	2.02	2	3
1:A:38:GLU:OE2	1:A:43:LEU:HD21	0.54	2.00	3	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:72:GLN:HA	1:A:76:LEU:HB3	0.54	1.79	4	1
1:A:194:PHE:HA	1:A:197:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.54	1.62	4	7
1:A:72:GLN:HE21	1:A:104:ILE:HD13	0.54	1.63	4	1
1:A:83:LYS:O	1:A:87:ASP:HB2	0.54	2.02	7	4
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:HB	0.54	2.32	4	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:CZ2	0.54	2.37	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:HD3	0.54	1.79	9	2
1:A:287:ASP:O	1:A:291:GLU:HB3	0.54	2.02	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:75:LEU:N	0.54	2.18	10	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.77	7	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG21	0.54	1.78	6	4
1:A:163:ALA:HB2	1:A:255:SER:HB2	0.54	1.78	1	1
1:A:149:PHE:HA	1:A:217:PHE:CE2	0.54	2.38	2	1
1:A:355:GLN:OE1	1:A:360:ALA:HB2	0.54	2.02	7	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG13	0.54	1.79	10	1
1:A:229:PRO:HA	1:A:316:ARG:HH12	0.54	1.62	2	1
1:A:106:TYR:HB2	1:A:264:ALA:HB3	0.54	1.80	5	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:OD1	0.54	2.03	5	1
1:A:67:PHE:CG	1:A:263:SER:HB3	0.54	2.38	10	1
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:CG2	0.54	2.32	10	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD22	0.54	2.33	1	2
1:A:170:LYS:CG	1:A:180:ASP:HB3	0.54	2.32	1	1
1:A:139:LEU:HD22	1:A:145:SER:O	0.54	2.02	9	2
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD23	0.54	2.32	4	1
1:A:178:ILE:HD12	1:A:178:ILE:O	0.54	2.03	5	1
1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:HD12	0.54	2.18	6	1
1:A:299:LEU:HG	1:A:300:GLY:H	0.54	1.63	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.54	2.03	9	1
1:A:170:LYS:HD2	1:A:180:ASP:OD2	0.54	2.02	9	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:262:LEU:O	0.54	2.03	4	2
1:A:358:ASP:O	1:A:362:LYS:HB3	0.54	2.02	5	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:HG2	0.54	1.79	6	2
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:VAL:N	0.54	2.18	2	2
1:A:289:GLY:O	1:A:292:ALA:HB3	0.54	2.03	1	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:294:ASN:HD21	0.54	2.16	1	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:LEU:HD22	0.54	2.22	4	1
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:N	0.54	2.17	5	1
1:A:363:ASP:HA	1:A:366:THR:OG1	0.54	2.02	7	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:HB3	0.53	2.03	1	3
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:N	0.53	2.18	4	2
1:A:149:PHE:CD2	1:A:151:LEU:HA	0.53	2.38	3	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:HB2	0.53	1.78	4	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:CG2	0.53	2.33	9	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HB	0.53	2.03	7	1
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:191:GLY:C	0.53	2.24	5	1
1:A:265:GLY:O	1:A:266:ILE:HD13	0.53	2.03	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:CD1	0.53	2.33	9	1
1:A:147:LEU:HD13	1:A:224:MET:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:HD23	0.53	1.80	2	1
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HD13	0.53	2.31	4	1
1:A:80:THR:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.53	2.33	10	1
1:A:277:LYS:HD3	1:A:281:GLU:OE1	0.53	2.03	3	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HG22	0.53	1.80	3	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:HD3	0.53	2.04	5	3
1:A:333:ILE:HG23	1:A:336:MET:HB2	0.53	1.78	8	1
1:A:88:LYS:O	1:A:89:LEU:HD12	0.53	2.04	2	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:CD	0.53	2.34	6	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD21	0.53	2.38	7	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.53	2.04	1	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG2	0.53	1.80	4	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:HD12	0.53	2.18	4	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD11	0.53	2.39	7	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:OE1	0.53	2.04	7	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG3	0.53	1.80	10	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HD12	0.53	2.34	10	3
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD11	0.53	1.81	6	3
1:A:146:ALA:CA	1:A:222:THR:HB	0.53	2.34	3	2
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:HB2	0.53	2.04	4	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:40:PRO:HD3	0.53	2.39	5	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:HG12	0.53	1.81	7	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:102:LYS:HE3	0.53	2.18	10	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:CB	0.53	2.33	10	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:ND2	0.53	2.19	6	3
1:A:354:ARG:O	1:A:355:GLN:HG3	0.53	2.04	2	1
1:A:311:LEU:HA	1:A:315:PRO:HG2	0.53	1.79	10	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD13	0.53	2.24	2	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:263:SER:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:HD1	0.53	1.64	4	1
1:A:164:ASP:HB3	1:A:187:GLY:O	0.53	2.04	5	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.53	1.81	9	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:C	0.53	2.24	9	1
1:A:47:PHE:N	1:A:48:PRO:HD2	0.52	2.19	6	6
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CB	0.52	2.32	4	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:288:GLU:HG2	0.52	2.19	6	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD12	0.52	2.04	6	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD3	0.52	2.19	7	1
1:A:10:TRP:C	1:A:11:ILE:HG13	0.52	2.24	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.52	2.20	10	9
1:A:144:LYS:HG3	1:A:145:SER:H	0.52	1.63	5	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HD3	0.52	1.81	8	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB3	0.52	1.80	8	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG22	0.52	2.04	10	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:79:ILE:N	0.52	2.19	10	1
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:CB	0.52	2.87	8	7
1:A:40:PRO:HA	1:A:43:LEU:HD13	0.52	1.81	4	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:365:GLN:NE2	0.52	2.20	4	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:CG	0.52	2.25	5	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG21	0.52	1.80	7	1
1:A:61:PHE:HB3	1:A:262:LEU:CD2	0.52	2.33	2	2
1:A:284:LEU:O	1:A:285:LEU:HD12	0.52	2.05	2	1
1:A:358:ASP:OD1	1:A:362:LYS:HE3	0.52	2.03	3	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:144:LYS:O	0.52	2.04	6	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HD12	0.52	2.39	6	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD2	0.52	2.19	8	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:37:VAL:CA	0.52	2.34	10	1
1:A:129:TRP:HE1	1:A:248:PRO:HD2	0.52	1.63	10	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HD12	0.52	1.81	6	4
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:CG	0.52	2.33	3	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.35	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:89:LEU:HD23	0.52	2.05	4	2
1:A:147:LEU:CB	1:A:224:MET:HB3	0.52	2.34	7	1
1:A:249:THR:CG2	1:A:254:PRO:HD3	0.52	2.29	10	1
1:A:294:ASN:OD1	1:A:302:VAL:HG11	0.52	2.05	2	1
1:A:294:ASN:ND2	1:A:298:PRO:HG3	0.52	2.20	4	1
1:A:111:GLU:HG3	1:A:260:GLY:HA3	0.52	1.82	5	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TRP:CD1	0.52	2.39	6	1
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:HD1	0.52	1.46	8	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:266:ILE:O	0.52	2.05	1	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:N	0.52	2.43	5	7
1:A:217:PHE:CE2	1:A:225:THR:HB	0.52	2.40	1	1
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:40:PRO:HB3	0.52	1.64	2	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:301:ALA:O	0.52	2.04	4	2
1:A:60:ILE:HG23	1:A:67:PHE:CE2	0.52	2.40	6	1
1:A:126:PRO:HG3	1:A:131:GLU:CG	0.52	2.35	6	1
1:A:272:ASN:HB3	1:A:275:LEU:CB	0.52	2.34	7	1
1:A:183:VAL:HG21	1:A:365:GLN:HG3	0.52	1.81	9	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:199:ILE:HG23	0.52	2.35	5	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:284:LEU:HB2	0.52	1.81	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HB2	0.52	1.80	7	1
1:A:302:VAL:HG11	1:A:304:LEU:HD12	0.52	1.82	1	1
1:A:159:PRO:O	1:A:255:SER:HB2	0.52	2.05	7	2
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HG	0.52	2.32	2	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:93:THR:HG21	0.52	1.82	3	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:CG2	0.52	2.29	4	1
1:A:55:ASP:OD2	1:A:75:LEU:HD12	0.52	2.05	4	1
1:A:273:LYS:O	1:A:277:LYS:HG2	0.52	2.04	4	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:318:ALA:HB2	0.52	2.05	5	1
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:HD13	0.52	2.04	8	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:HE2	0.52	1.60	8	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:ASP:HB2	0.52	1.80	9	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG22	0.52	1.81	1	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:CG1	0.52	2.34	5	2
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HB	0.52	1.81	3	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:38:GLU:HB3	0.52	2.40	6	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD22	0.52	2.26	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CA	0.52	2.34	7	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:102:LYS:HG2	0.52	1.82	9	1
1:A:11:ILE:O	1:A:40:PRO:HD2	0.51	2.05	1	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.51	2.35	2	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:57:PRO:HA	0.51	2.36	3	1
1:A:154:PRO:HB3	1:A:340:TRP:HH2	0.51	1.65	4	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:59:ILE:HG13	0.51	1.81	8	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG3	0.51	2.04	8	1
1:A:226:ILE:HD13	1:A:226:ILE:N	0.51	2.20	9	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB2	0.51	1.82	9	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.51	2.39	2	1
1:A:145:SER:HB3	1:A:222:THR:HG21	0.51	1.82	2	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG22	0.51	1.80	4	1
1:A:308:GLU:C	1:A:311:LEU:HG	0.51	2.24	6	1
1:A:344:ARG:HD3	1:A:348:ILE:HG13	0.51	1.82	8	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:226:ILE:HG22	0.51	1.81	9	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:191:GLY:O	0.51	2.04	9	1
1:A:304:LEU:O	1:A:308:GLU:HG3	0.51	2.05	1	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:319:ALA:CB	0.51	2.35	4	1
1:A:24:GLY:HA3	1:A:35:VAL:HG21	0.51	1.81	5	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:34:LYS:O	0.51	2.05	7	1
1:A:199:ILE:HA	1:A:202:LYS:HG2	0.51	1.82	2	1
1:A:315:PRO:HG2	1:A:316:ARG:CD	0.51	2.35	5	1
1:A:129:TRP:HB2	1:A:249:THR:O	0.51	2.05	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD23	0.51	1.82	9	1
1:A:72:GLN:OE1	1:A:72:GLN:HA	0.51	2.04	10	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:174:GLY:HA2	0.51	2.06	1	1
1:A:297:LYS:O	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.05	1	1
1:A:196:VAL:HG12	1:A:200:LYS:HD2	0.51	1.83	2	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:HD2	0.51	1.82	3	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.51	2.06	8	3
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:170:LYS:HD3	1:A:180:ASP:HB3	0.51	1.81	7	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:317:ILE:HD11	0.51	1.81	9	1
1:A:25:LYS:O	1:A:28:GLU:HG3	0.51	2.04	10	1
1:A:94:TRP:CA	1:A:97:VAL:HG12	0.51	2.28	1	1
1:A:83:LYS:HE2	1:A:281:GLU:OE1	0.51	2.05	5	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:223:ALA:HB2	0.51	2.36	5	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:CG2	0.51	2.36	5	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HD12	0.51	2.05	5	1
1:A:314:ASP:OD1	1:A:317:ILE:HG13	0.51	2.06	5	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.51	2.06	1	2
1:A:363:ASP:O	1:A:366:THR:HG22	0.51	2.06	3	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:226:ILE:HG12	0.51	2.41	4	1
1:A:184:ASP:HB3	1:A:365:GLN:HG3	0.51	1.83	10	1
1:A:113:LEU:HG	1:A:227:ASN:O	0.51	2.06	3	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.51	2.05	7	2
1:A:147:LEU:HD13	1:A:147:LEU:O	0.51	2.06	4	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:41:ASP:HB2	0.51	2.05	5	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HG	0.51	1.82	6	1
1:A:272:ASN:ND2	1:A:275:LEU:HB2	0.51	2.20	7	1
1:A:163:ALA:C	1:A:255:SER:HA	0.51	2.26	8	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:107:PRO:HD2	0.51	2.41	9	1
1:A:108:ILE:CB	1:A:262:LEU:HB3	0.51	2.27	9	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:CD2	0.51	2.35	9	1
1:A:9:ILE:O	1:A:10:TRP:HD1	0.51	1.89	3	2
1:A:114:SER:CB	1:A:244:VAL:HG13	0.51	2.36	4	1
1:A:349:ASN:C	1:A:355:GLN:HB3	0.51	2.26	4	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CB	0.51	2.35	6	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD13	0.51	1.83	10	2
1:A:9:ILE:HA	1:A:59:ILE:HB	0.51	1.83	9	1
1:A:280:LEU:HD13	1:A:284:LEU:HB3	0.51	1.83	9	1
1:A:125:PRO:HD2	1:A:131:GLU:CG	0.51	2.27	1	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:N	0.51	2.21	2	1
1:A:90:TYR:CD1	1:A:92:PHE:HB2	0.51	2.41	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ASP:H	1:A:43:LEU:HD12	0.51	1.65	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HA	0.51	1.83	10	2
1:A:315:PRO:HD2	1:A:316:ARG:NE	0.51	2.21	6	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:279:PHE:CE2	0.51	2.41	8	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:268:ALA:HB3	0.51	1.80	8	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:97:VAL:HG22	0.50	1.83	2	1
1:A:90:TYR:CE2	1:A:92:PHE:HB2	0.50	2.41	7	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	0.50	1.83	6	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:117:TYR:CD2	0.50	2.40	7	1
1:A:183:VAL:HG23	1:A:365:GLN:HG3	0.50	1.83	9	1
1:A:301:ALA:HA	1:A:317:ILE:HG13	0.50	1.83	2	1
1:A:330:MET:CE	1:A:331:PRO:HD2	0.50	2.36	3	1
1:A:356:THR:HG23	1:A:359:GLU:HB2	0.50	1.82	3	1
1:A:108:ILE:C	1:A:302:VAL:HG21	0.50	2.25	4	2
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CD1	0.50	2.36	6	1
1:A:370:LYS:OXT	1:A:370:LYS:HG3	0.50	2.06	6	2
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HB2	0.50	2.04	2	2
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:N	0.50	2.21	6	2
1:A:125:PRO:HG2	1:A:131:GLU:OE2	0.50	2.06	5	1
1:A:196:VAL:HA	1:A:199:ILE:HD12	0.50	1.81	6	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:LYS:N	0.50	2.20	7	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:349:ASN:OD1	0.50	2.07	8	1
1:A:119:LYS:HG3	1:A:120:ASP:N	0.50	2.22	1	1
1:A:10:TRP:HA	1:A:38:GLU:O	0.50	2.06	5	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:218:ASN:N	0.50	2.80	6	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HB	0.50	1.82	1	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:ALA:HB2	0.50	2.06	1	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:267:ASN:HA	0.50	1.82	2	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	7	2
1:A:303:ALA:O	1:A:308:GLU:HB2	0.50	2.06	2	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD12	0.50	2.21	4	1
1:A:217:PHE:HD1	1:A:225:THR:CG2	0.50	2.17	7	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:333:ILE:HG21	0.50	2.41	8	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:LEU:CD1	0.50	2.31	2	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD23	0.50	2.42	3	1
1:A:179:LYS:HG3	1:A:369:THR:CG2	0.50	2.36	3	1
1:A:62:TRP:HD1	1:A:63:ALA:H	0.50	1.50	7	2
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:HB3	0.50	2.36	7	2
1:A:333:ILE:O	1:A:336:MET:HG2	0.50	2.06	9	1
1:A:150:ASN:C	1:A:151:LEU:HD13	0.50	2.26	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:VAL:CG1	1:A:200:LYS:HE3	0.50	2.36	2	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:108:ILE:O	0.50	2.06	3	2
1:A:89:LEU:HG	1:A:94:TRP:CZ2	0.50	2.41	4	1
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:HE3	0.50	1.65	7	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:CG	0.50	2.37	2	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:94:TRP:HZ2	0.50	2.25	2	1
1:A:246:VAL:HG23	1:A:323:ASN:HD21	0.50	1.65	6	1
1:A:330:MET:HG2	1:A:331:PRO:HD2	0.50	1.84	4	1
1:A:85:PHE:HA	1:A:89:LEU:CD1	0.49	2.36	1	1
1:A:51:ALA:HA	1:A:56:GLY:HA3	0.49	1.84	2	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.37	3	2
1:A:287:ASP:HA	1:A:291:GLU:HG2	0.49	1.83	6	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD22	0.49	2.07	8	1
1:A:157:THR:HA	1:A:195:LEU:HD21	0.49	1.84	8	1
1:A:124:ASN:O	1:A:126:PRO:HD3	0.49	2.07	1	3
1:A:147:LEU:CD1	1:A:224:MET:HG3	0.49	2.33	5	1
1:A:56:GLY:N	1:A:57:PRO:HD2	0.49	2.21	8	1
1:A:250:PHE:HD1	1:A:250:PHE:O	0.49	1.89	10	1
1:A:132:ILE:HG12	1:A:147:LEU:CD2	0.49	2.37	2	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:40:PRO:HG3	0.49	1.83	3	1
1:A:72:GLN:NE2	1:A:104:ILE:HD13	0.49	2.22	4	1
1:A:64:HIS:ND1	1:A:263:SER:HB3	0.49	2.23	4	2
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:GLU:HG2	0.49	1.83	3	1
1:A:28:GLU:HG3	1:A:34:LYS:HG3	0.49	1.83	4	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:139:LEU:HD11	0.49	2.38	7	1
1:A:178:ILE:HG23	1:A:178:ILE:O	0.49	2.06	10	1
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:N	0.49	2.23	10	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.49	2.75	2	4
1:A:217:PHE:CD2	1:A:225:THR:HA	0.49	2.30	2	1
1:A:254:PRO:HG3	1:A:326:LYS:HE3	0.49	1.83	2	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HD22	0.49	2.37	3	1
1:A:119:LYS:C	1:A:121:LEU:H	0.49	2.11	7	2
1:A:214:GLU:HG2	1:A:217:PHE:CE2	0.49	2.42	8	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:HD12	0.49	2.08	1	1
1:A:308:GLU:CG	1:A:321:MET:HE1	0.49	2.37	3	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:192:LEU:HB2	0.49	2.38	4	1
1:A:286:THR:HG23	1:A:289:GLY:H	0.49	1.66	8	2
1:A:284:LEU:HD11	1:A:293:VAL:HG11	0.49	1.83	1	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.49	2.08	3	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:144:LYS:HB3	0.49	1.84	5	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD13	0.49	2.38	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ALA:HB3	1:A:255:SER:OG	0.49	2.08	4	2
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:HG23	0.49	1.83	3	1
1:A:311:LEU:HG	1:A:317:ILE:CD1	0.49	2.38	3	1
1:A:202:LYS:HA	1:A:202:LYS:NZ	0.49	2.23	4	1
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HB3	0.49	2.07	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:OH	0.49	2.08	5	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:TRP:HE1	0.49	2.20	5	1
1:A:184:ASP:CG	1:A:362:LYS:HA	0.49	2.28	6	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.49	2.36	8	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:256:LYS:NZ	0.49	2.23	9	1
1:A:178:ILE:HG23	1:A:179:LYS:N	0.49	2.23	1	2
1:A:27:PHE:HE2	1:A:283:TYR:CD1	0.49	2.24	8	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:40:PRO:HD3	0.49	1.67	10	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:267:ASN:HD22	0.49	2.21	10	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB2	0.49	2.07	10	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:324:ALA:CB	0.49	2.38	10	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG23	0.49	1.83	2	1
1:A:302:VAL:CB	1:A:304:LEU:HD23	0.49	2.36	5	1
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD23	0.49	2.08	6	1
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:HD23	0.49	2.08	10	1
1:A:259:VAL:CG2	1:A:324:ALA:HB1	0.49	2.37	10	1
1:A:181:VAL:CG1	1:A:183:VAL:HG23	0.48	2.38	2	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CA	0.48	2.38	3	1
1:A:10:TRP:HZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.48	1.67	4	1
1:A:59:ILE:C	1:A:60:ILE:HG13	0.48	2.28	5	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:302:VAL:HG13	0.48	1.84	7	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG22	0.48	2.08	4	5
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.48	2.08	7	1
1:A:359:GLU:HA	1:A:363:ASP:OD2	0.48	2.08	7	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:HE1	0.48	1.67	8	1
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:ALA:HB3	0.48	2.07	10	1
1:A:355:GLN:NE2	1:A:360:ALA:HB2	0.48	2.23	1	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB3	0.48	1.85	3	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:LYS:HB2	0.48	2.09	4	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:O	0.48	2.07	5	2
1:A:208:THR:OG1	1:A:213:ALA:HB2	0.48	2.08	6	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:HB3	0.48	1.85	6	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.48	2.30	7	1
1:A:316:ARG:O	1:A:320:THR:HG23	0.48	2.09	7	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:97:VAL:O	0.48	2.08	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG12	0.48	2.07	3	1
1:A:308:GLU:HG2	1:A:321:MET:HE1	0.48	1.86	3	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HB3	0.48	2.08	5	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CE2	0.48	2.43	8	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:279:PHE:HZ	0.48	2.22	2	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG13	0.48	1.85	5	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD23	0.48	2.29	5	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG22	0.48	2.07	5	1
1:A:217:PHE:HZ	1:A:227:ASN:OD1	0.48	1.91	7	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:CA	0.48	2.29	9	1
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:HB	0.48	1.85	1	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG12	0.48	2.09	1	2
1:A:188:ALA:O	1:A:192:LEU:HB2	0.48	2.08	2	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.48	2.08	3	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:283:TYR:HE1	0.48	2.21	4	1
1:A:150:ASN:O	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.08	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:CG2	0.48	2.38	7	1
1:A:68:GLY:O	1:A:104:ILE:HD11	0.48	2.08	1	1
1:A:27:PHE:CD2	1:A:33:ILE:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:94:TRP:HZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.48	1.69	4	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD22	0.48	2.29	4	1
1:A:253:GLN:CG	1:A:254:PRO:HD2	0.48	2.28	6	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HD12	0.48	1.86	7	1
1:A:147:LEU:CA	1:A:224:MET:CB	0.48	2.92	10	8
1:A:111:GLU:OE2	1:A:229:PRO:HB3	0.48	2.08	3	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG12	0.48	2.39	5	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:92:PHE:HB2	0.48	2.43	5	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD2	0.48	3.02	9	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.48	2.09	10	1
1:A:290:LEU:CG	1:A:294:ASN:HD21	0.48	2.22	1	1
1:A:26:LYS:O	1:A:29:LYS:HB2	0.48	2.09	8	2
1:A:348:ILE:HD13	1:A:348:ILE:O	0.48	2.09	3	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:HB3	0.48	1.83	4	1
1:A:98:ARG:O	1:A:98:ARG:HG3	0.48	2.09	10	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HD12	0.48	2.43	1	3
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:CG2	0.48	2.38	1	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:O	0.48	2.08	2	2
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:HA3	0.48	2.09	2	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG12	0.48	1.86	3	2
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:OG	0.48	2.07	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HG22	1:A:61:PHE:HB2	0.48	1.86	6	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:O	0.48	2.08	10	2
1:A:117:TYR:HD2	1:A:245:THR:OG1	0.47	1.91	1	1
1:A:94:TRP:CZ3	1:A:103:LEU:HD21	0.47	2.44	4	1
1:A:214:GLU:CG	1:A:218:ASN:HB2	0.47	2.32	6	1
1:A:42:LYS:HE3	1:A:43:LEU:HB3	0.47	1.85	8	1
1:A:121:LEU:HD23	1:A:121:LEU:C	0.47	2.30	4	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HD23	0.47	1.86	4	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:202:LYS:HE2	0.47	2.09	9	1
1:A:300:GLY:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	3	1
1:A:189:LYS:HZ1	1:A:362:LYS:HB3	0.47	1.68	4	1
1:A:297:LYS:O	1:A:297:LYS:HG2	0.47	2.08	4	1
1:A:96:ALA:HB2	1:A:329:ILE:HD11	0.47	1.85	5	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:57:PRO:HG2	0.47	2.44	7	2
1:A:317:ILE:HD12	1:A:317:ILE:H	0.47	1.69	7	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:CG2	0.47	2.27	10	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.47	2.39	1	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:HB2	0.47	1.87	1	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:HG2	0.47	2.09	3	1
1:A:27:PHE:CB	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.40	6	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:CA	0.47	2.97	7	2
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:CE	0.47	2.40	7	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:108:ILE:O	0.47	2.10	1	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:303:ALA:N	0.47	2.24	1	2
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:H	0.47	1.68	2	1
1:A:348:ILE:HD13	1:A:348:ILE:C	0.47	2.30	3	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HG22	0.47	2.09	4	1
1:A:229:PRO:HB2	1:A:316:ARG:CG	0.47	2.39	6	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:199:ILE:HG12	0.47	1.87	7	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:285:LEU:HD11	0.47	2.09	9	1
1:A:314:ASP:OD2	1:A:317:ILE:HG12	0.47	2.08	9	1
1:A:181:VAL:CG2	1:A:183:VAL:HG23	0.47	2.38	10	1
1:A:181:VAL:HB	1:A:365:GLN:NE2	0.47	2.25	2	1
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.30	3	2
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.47	2.10	3	1
1:A:344:ARG:CA	1:A:348:ILE:HD12	0.47	2.39	6	2
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HB2	0.47	2.37	5	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:223:ALA:HB2	0.47	1.86	5	2
1:A:316:ARG:H	1:A:316:ARG:CD	0.47	2.23	5	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HG23	0.47	2.40	6	1
1:A:195:LEU:HD23	1:A:199:ILE:HD11	0.47	1.86	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HG	0.47	2.10	6	1
1:A:171:TYR:OH	1:A:328:GLU:HG2	0.47	2.10	7	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:146:ALA:CB	0.47	2.34	9	2
1:A:301:ALA:CA	1:A:317:ILE:HG22	0.47	2.40	8	1
1:A:163:ALA:CB	1:A:255:SER:HB3	0.47	2.33	9	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:HG2	0.47	2.44	10	1
1:A:169:PHE:CE2	1:A:331:PRO:HB3	0.47	2.45	10	1
1:A:81:PRO:HB3	1:A:85:PHE:CD2	0.47	2.45	3	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:HE1	0.47	1.68	4	3
1:A:298:PRO:CG	1:A:316:ARG:HH12	0.47	2.22	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:247:LEU:HG	0.47	1.86	7	2
1:A:202:LYS:HG3	1:A:203:HIS:H	0.47	1.69	2	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:OG1	0.47	2.10	4	1
1:A:302:VAL:HB	1:A:304:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:64:HIS:CA	1:A:263:SER:HB2	0.47	2.23	9	1
1:A:292:ALA:CA	1:A:295:LYS:HB2	0.47	2.36	5	1
1:A:71:ALA:O	1:A:76:LEU:HB2	0.47	2.09	7	2
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG23	0.47	2.10	7	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG23	0.47	2.11	10	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.46	2.63	10	7
1:A:291:GLU:HG2	1:A:295:LYS:HG3	0.46	1.85	3	2
1:A:136:ASP:OD2	1:A:147:LEU:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD11	0.46	2.10	4	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.46	2.45	6	1
1:A:164:ASP:OD2	1:A:253:GLN:HB3	0.46	2.10	8	1
1:A:250:PHE:CZ	1:A:255:SER:HB2	0.46	2.44	10	1
1:A:10:TRP:N	1:A:59:ILE:O	0.46	2.48	1	4
1:A:113:LEU:HD21	1:A:227:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:329:ILE:O	1:A:330:MET:O	0.46	2.33	3	1
1:A:52:ALA:C	1:A:53:THR:HG23	0.46	2.30	8	1
1:A:172:GLU:O	1:A:173:ASN:HB2	0.46	2.10	9	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:38:GLU:HB3	0.46	2.46	10	1
1:A:78:GLU:CA	1:A:104:ILE:HG22	0.46	2.40	1	1
1:A:287:ASP:HB2	1:A:291:GLU:OE2	0.46	2.10	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:57:PRO:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:N	0.46	2.83	6	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:LEU:HD22	0.46	2.40	9	1
1:A:62:TRP:CE2	1:A:67:PHE:CD2	0.46	3.03	3	1
1:A:90:TYR:CB	1:A:93:THR:HB	0.46	2.33	3	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:192:LEU:CB	0.46	2.39	4	1
1:A:160:LEU:HB3	1:A:195:LEU:CD2	0.46	2.30	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:HD12	1:A:144:LYS:CB	0.46	2.41	4	1
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LYS:O	0.46	2.33	5	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:283:TYR:HD2	0.46	1.71	5	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG13	0.46	2.10	5	1
1:A:128:THR:HB	1:A:130:GLU:HG2	0.46	1.87	10	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:59:ILE:HG21	0.46	1.87	5	2
1:A:275:LEU:O	1:A:278:GLU:HG3	0.46	2.11	3	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:CD1	0.46	2.41	6	1
1:A:344:ARG:HA	1:A:348:ILE:CD1	0.46	2.40	6	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:ILE:HG23	0.46	2.11	7	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:H	0.46	2.09	3	1
1:A:88:LYS:CD	1:A:306:SER:HB2	0.46	2.35	3	1
1:A:112:ALA:HB1	1:A:323:ASN:ND2	0.46	2.24	3	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:C	0.46	2.30	6	2
1:A:308:GLU:CA	1:A:311:LEU:HG	0.46	2.41	6	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:GLN:N	0.46	2.26	1	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG23	0.46	2.11	4	1
1:A:349:ASN:O	1:A:352:SER:HB2	0.46	2.11	7	1
1:A:355:GLN:HG3	1:A:360:ALA:HB2	0.46	1.86	9	1
1:A:297:LYS:HG2	1:A:298:PRO:HD2	0.46	1.88	8	2
1:A:184:ASP:OD2	1:A:362:LYS:HG2	0.46	2.11	3	1
1:A:153:GLU:HB3	1:A:154:PRO:HD2	0.46	1.87	5	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG23	0.46	2.11	6	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:ND2	0.46	2.26	9	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:263:SER:HB3	0.46	2.45	10	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB2	0.46	2.11	10	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:HD21	0.46	1.87	3	1
1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:HD13	0.46	2.26	5	1
1:A:7:LEU:HB3	1:A:59:ILE:HD12	0.46	1.87	10	2
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:H	0.46	2.21	9	2
1:A:344:ARG:HG3	1:A:344:ARG:HH11	0.46	1.71	7	1
1:A:129:TRP:HE3	1:A:132:ILE:HG12	0.46	1.70	8	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:LYS:HD2	0.45	2.10	2	1
1:A:297:LYS:HG3	1:A:298:PRO:HD2	0.45	1.87	2	1
1:A:274:GLU:O	1:A:278:GLU:HG2	0.45	2.11	3	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:CD	0.45	2.35	4	3
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.45	2.46	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:294:ASN:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:163:ALA:HA	1:A:255:SER:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:269:ALA:O	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.63	8	1
1:A:205:ASN:HB3	1:A:207:ASP:OD2	0.45	2.10	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ALA:O	1:A:304:LEU:HG	0.45	2.11	3	1
1:A:256:LYS:HG2	1:A:328:GLU:HB2	0.45	1.88	5	1
1:A:111:GLU:HB2	1:A:229:PRO:HG3	0.45	1.88	7	1
1:A:28:GLU:N	1:A:33:ILE:HB	0.45	2.27	2	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HB3	0.45	2.47	3	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.45	2.78	6	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:227:ASN:HB2	0.45	2.45	7	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:H	0.45	1.70	8	1
1:A:193:THR:O	1:A:196:VAL:HG12	0.45	2.12	9	1
1:A:283:TYR:CZ	1:A:284:LEU:HD13	0.45	2.47	2	1
1:A:310:GLU:O	1:A:312:ALA:N	0.45	2.50	3	4
1:A:308:GLU:O	1:A:311:LEU:HB3	0.45	2.11	5	2
1:A:10:TRP:O	1:A:11:ILE:HG23	0.45	2.12	6	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:HG12	0.45	1.88	8	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ALA:N	0.45	2.77	9	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:153:GLU:HG3	0.45	2.11	10	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:40:PRO:HD3	0.45	2.42	5	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:CD	0.45	2.91	8	1
1:A:9:ILE:O	1:A:38:GLU:HB2	0.45	2.11	9	1
1:A:283:TYR:HD1	1:A:284:LEU:CD2	0.45	2.24	10	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:PHE:CZ	0.45	3.00	2	1
1:A:114:SER:HB2	1:A:244:VAL:CG1	0.45	2.38	4	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:LYS:HG3	0.45	2.11	5	1
1:A:160:LEU:HD11	1:A:250:PHE:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:203:HIS:O	1:A:204:MET:HB2	0.45	2.11	10	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:315:PRO:CD	0.45	2.95	5	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:HB2	0.45	2.47	8	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:156:PHE:CE2	0.45	3.04	10	1
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.45	2.12	3	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	0.45	1.89	9	1
1:A:127:LYS:HE3	1:A:128:THR:CB	0.45	2.42	1	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB2	0.45	2.32	1	2
1:A:94:TRP:CE3	1:A:95:ASP:N	0.45	2.85	3	1
1:A:65:ASP:CB	1:A:331:PRO:HG3	0.45	2.36	4	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG21	0.45	1.88	5	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HD12	0.45	2.12	6	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HG21	0.45	2.42	5	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:327:GLY:C	0.45	2.15	7	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG13	0.45	2.11	10	1
1:A:64:HIS:N	1:A:261:VAL:O	0.44	2.49	2	6
1:A:296:ASP:O	1:A:297:LYS:HD3	0.44	2.12	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:362:LYS:HG3	1:A:363:ASP:N	0.44	2.26	4	1
1:A:284:LEU:C	1:A:290:LEU:HD23	0.44	2.33	5	1
1:A:314:ASP:CG	1:A:318:ALA:HB2	0.44	2.33	5	1
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:149:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CD1	0.44	3.05	7	1
1:A:333:ILE:HD11	1:A:335:GLN:NE2	0.44	2.27	7	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:TRP:NE1	0.44	2.27	8	1
1:A:292:ALA:HA	1:A:295:LYS:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:102:LYS:HD2	1:A:104:ILE:CD1	0.44	2.38	3	1
1:A:27:PHE:C	1:A:33:ILE:HD12	0.44	2.31	4	1
1:A:283:TYR:CG	1:A:284:LEU:N	0.44	2.86	4	1
1:A:317:ILE:HA	1:A:320:THR:CG2	0.44	2.43	4	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:62:TRP:HE1	0.44	2.17	6	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:225:THR:N	0.44	2.80	7	3
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HG22	0.44	1.88	8	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:60:ILE:HG13	0.44	2.48	2	1
1:A:156:PHE:CG	1:A:157:THR:N	0.44	2.85	2	1
1:A:136:ASP:HB2	1:A:147:LEU:CD2	0.44	2.42	3	1
1:A:158:TRP:HH2	1:A:168:ALA:HB2	0.44	1.73	4	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD1	0.44	2.41	8	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:318:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:37:VAL:O	0.44	2.12	9	1
1:A:311:LEU:CA	1:A:315:PRO:HG2	0.44	2.41	10	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:O	0.44	2.71	3	2
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.44	2.65	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:263:SER:CB	0.44	3.00	7	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ALA:H	0.44	2.19	10	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:263:SER:CB	0.44	2.42	1	1
1:A:344:ARG:HD2	1:A:345:THR:HG23	0.44	1.88	1	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:320:THR:HG23	0.44	2.42	2	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.44	2.27	3	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:97:VAL:O	0.44	2.12	3	1
1:A:340:TRP:O	1:A:344:ARG:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:143:GLY:O	1:A:144:LYS:HG3	0.44	2.12	7	1
1:A:299:LEU:CD1	1:A:300:GLY:H	0.44	2.25	10	1
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:VAL:HG22	0.44	1.89	1	1
1:A:250:PHE:O	1:A:251:LYS:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD23	0.44	2.12	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HB2	0.44	2.43	4	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG12	0.44	2.12	4	1
1:A:356:THR:OG1	1:A:359:GLU:HG2	0.44	2.13	5	1
1:A:158:TRP:O	1:A:161:ILE:HG13	0.44	2.12	7	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:294:ASN:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:197:ASP:HA	1:A:200:LYS:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:261:VAL:HG13	1:A:261:VAL:O	0.44	2.13	9	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:HG13	0.44	1.89	10	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:CG	0.44	2.65	1	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG13	0.44	2.13	2	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:CA	0.44	2.43	4	1
1:A:200:LYS:HA	1:A:204:MET:HA	0.44	1.88	5	1
1:A:290:LEU:HD21	1:A:303:ALA:HB2	0.44	1.90	7	1
1:A:244:VAL:HG13	1:A:244:VAL:O	0.44	2.13	8	2
1:A:118:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD12	0.44	2.40	2	1
1:A:348:ILE:HG23	1:A:349:ASN:N	0.44	2.28	3	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD23	0.44	2.33	5	1
1:A:7:LEU:CB	1:A:59:ILE:HD11	0.44	2.42	8	1
1:A:72:GLN:HG3	1:A:104:ILE:CG1	0.44	2.43	8	2
1:A:340:TRP:HA	1:A:340:TRP:CE3	0.43	2.47	4	1
1:A:153:GLU:CB	1:A:155:TYR:CE2	0.43	3.00	8	1
1:A:302:VAL:CG2	1:A:317:ILE:HG21	0.43	2.43	10	1
1:A:290:LEU:HG	1:A:294:ASN:ND2	0.43	2.28	1	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:317:ILE:CG1	0.43	2.42	2	1
1:A:291:GLU:CA	1:A:295:LYS:HB3	0.43	2.42	6	1
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD12	0.43	2.33	6	1
1:A:329:ILE:HG23	1:A:329:ILE:O	0.43	2.13	6	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:13:GLY:H	0.43	1.72	7	1
1:A:343:VAL:HG23	1:A:344:ARG:N	0.43	2.28	8	1
1:A:88:LYS:C	1:A:89:LEU:HD12	0.43	2.33	2	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:67:PHE:CZ	0.43	2.48	5	2
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:OH	0.43	2.13	6	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:89:LEU:CD2	0.43	2.44	9	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:331:PRO:HB3	0.43	2.49	10	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:321:MET:HE2	0.43	2.13	10	1
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:PRO:HG2	0.43	1.89	3	1
1:A:279:PHE:HE1	1:A:283:TYR:CE1	0.43	2.31	3	1
1:A:366:THR:O	1:A:369:THR:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:N	0.43	2.23	9	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:HB2	0.43	1.88	1	1
1:A:107:PRO:HB3	1:A:261:VAL:HG21	0.43	1.90	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ALA:C	1:A:304:LEU:HD12	0.43	2.34	4	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:33:ILE:HG13	0.43	2.43	5	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD1	0.43	3.02	5	1
1:A:160:LEU:CB	1:A:195:LEU:HD21	0.43	2.32	5	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:341:TYR:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:349:ASN:HB3	1:A:355:GLN:CD	0.43	2.33	9	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:NZ	0.43	2.28	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:161:ILE:O	0.43	2.14	2	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD13	0.43	2.13	4	1
1:A:302:VAL:O	1:A:308:GLU:HG3	0.43	2.13	5	1
1:A:280:LEU:CG	1:A:284:LEU:HD13	0.43	2.44	6	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:279:PHE:CE2	0.43	3.06	7	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:248:PRO:HG2	0.43	2.48	7	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:64:HIS:H	0.43	2.32	8	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD22	0.43	2.34	9	1
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD13	0.43	2.44	1	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:314:ASP:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.43	1.88	7	1
1:A:11:ILE:N	1:A:40:PRO:HD3	0.43	2.28	8	1
1:A:172:GLU:HG3	1:A:172:GLU:O	0.43	2.14	8	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:CD1	0.43	2.49	1	2
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CB	0.43	2.67	2	3
1:A:149:PHE:CG	1:A:156:PHE:CE2	0.43	3.07	4	1
1:A:170:LYS:HB3	1:A:177:ASP:OD2	0.43	2.13	6	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:262:LEU:O	0.43	2.67	9	2
1:A:257:PRO:HB2	1:A:323:ASN:OD1	0.43	2.13	3	1
1:A:291:GLU:O	1:A:295:LYS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:N	0.43	2.29	4	1
1:A:158:TRP:HB3	1:A:159:PRO:CD	0.43	2.44	4	3
1:A:148:MET:CB	1:A:216:ALA:HB3	0.43	2.43	5	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:247:LEU:HA	0.43	2.44	7	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:36:THR:HB	0.43	1.91	8	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:247:LEU:HA	0.43	1.91	8	1
1:A:278:GLU:OE1	1:A:278:GLU:HA	0.43	2.14	9	1
1:A:47:PHE:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.42	1.91	1	1
1:A:78:GLU:HG2	1:A:103:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:HH2	0.42	1.74	2	1
1:A:348:ILE:HG13	1:A:349:ASN:N	0.42	2.29	2	1
1:A:90:TYR:HD2	1:A:93:THR:N	0.42	2.12	3	1
1:A:365:GLN:O	1:A:368:ILE:HG13	0.42	2.14	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ILE:HG22	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.90	6	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:265:GLY:CA	0.42	3.02	9	1
1:A:116:ILE:HG21	1:A:225:THR:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:39:HIS:HB2	1:A:40:PRO:CD	0.42	2.39	2	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:225:THR:HG22	0.42	1.88	2	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:308:GLU:CA	0.42	2.44	2	1
1:A:67:PHE:CB	1:A:263:SER:HB3	0.42	2.44	3	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:223:ALA:HB2	0.42	2.44	5	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:NE1	0.42	2.19	6	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:180:ASP:OD1	0.42	2.14	6	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:CG2	0.42	2.43	7	1
1:A:114:SER:OG	1:A:319:ALA:HB1	0.42	2.14	7	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:HG2	0.42	2.49	1	1
1:A:62:TRP:NE1	1:A:67:PHE:HB2	0.42	2.28	3	1
1:A:45:GLU:O	1:A:48:PRO:HG2	0.42	2.13	4	2
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.42	2.87	5	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:330:MET:HE1	0.42	1.91	7	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:133:PRO:HG3	0.42	2.49	9	1
1:A:225:THR:HG22	1:A:227:ASN:HD22	0.42	1.74	9	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:206:ALA:HB1	0.42	1.92	2	1
1:A:192:LEU:HG	1:A:361:LEU:HD23	0.42	1.91	4	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:HB2	0.42	2.14	6	1
1:A:139:LEU:HB3	1:A:145:SER:HA	0.42	1.90	6	1
1:A:299:LEU:HA	1:A:316:ARG:HH11	0.42	1.74	7	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:34:LYS:HG2	0.42	1.90	3	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:304:LEU:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:263:SER:CB	0.42	3.02	8	1
1:A:315:PRO:HD2	1:A:318:ALA:CB	0.42	2.43	10	1
1:A:126:PRO:HG2	1:A:131:GLU:HB3	0.42	1.90	4	1
1:A:285:LEU:HD11	1:A:304:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:302:VAL:O	1:A:303:ALA:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:HD1	0.42	2.30	8	1
1:A:64:HIS:CG	1:A:261:VAL:HG23	0.42	2.50	8	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:285:LEU:HA	1:A:290:LEU:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG13	0.42	2.43	2	1
1:A:209:ASP:HB2	1:A:212:ILE:CG1	0.42	2.45	3	1
1:A:116:ILE:HG12	1:A:225:THR:N	0.42	2.30	4	1
1:A:256:LYS:HZ2	1:A:328:GLU:HG3	0.42	1.73	8	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.42	2.15	8	1
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLU:CB	0.42	2.67	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:ASN:HB2	1:A:125:PRO:HD2	0.42	1.91	5	1
1:A:47:PHE:HA	1:A:50:VAL:HG12	0.42	1.92	6	1
1:A:229:PRO:CB	1:A:316:ARG:HB3	0.42	2.44	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:37:VAL:CG1	0.42	2.42	7	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB2	0.42	2.15	9	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:40:PRO:HD3	0.42	2.47	10	1
1:A:181:VAL:HG22	1:A:183:VAL:HG23	0.42	1.91	10	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:360:ALA:HB1	0.42	1.91	2	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:THR:HG23	0.42	1.92	3	1
1:A:62:TRP:HE1	1:A:66:ARG:C	0.42	2.19	3	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:315:PRO:CD	0.42	2.44	5	1
1:A:126:PRO:CD	1:A:131:GLU:HG2	0.42	2.45	8	2
1:A:147:LEU:HD23	1:A:224:MET:CG	0.42	2.39	9	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:CG2	0.42	2.68	2	1
1:A:183:VAL:HB	1:A:365:GLN:CD	0.42	2.35	3	1
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:HG	0.42	2.15	4	1
1:A:303:ALA:HB1	1:A:307:TYR:CB	0.42	2.44	4	1
1:A:158:TRP:CA	1:A:161:ILE:HG12	0.42	2.44	6	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:311:LEU:HD23	0.42	1.88	6	1
1:A:186:ALA:HA	1:A:189:LYS:HE2	0.42	1.91	7	1
1:A:58:ASP:O	1:A:266:ILE:HG12	0.41	2.14	1	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CE1	0.41	2.88	2	1
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:H	0.41	1.75	2	2
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD22	0.41	2.50	4	1
1:A:171:TYR:CD1	1:A:171:TYR:N	0.41	2.88	8	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:97:VAL:HG13	0.41	2.50	9	1
1:A:296:ASP:C	1:A:297:LYS:HG3	0.41	2.35	9	1
1:A:314:ASP:N	1:A:315:PRO:CD	0.41	2.83	10	1
1:A:127:LYS:CE	1:A:128:THR:HB	0.41	2.45	1	1
1:A:274:GLU:O	1:A:277:LYS:HG3	0.41	2.14	1	1
1:A:285:LEU:CA	1:A:290:LEU:HD23	0.41	2.45	2	1
1:A:217:PHE:HA	1:A:225:THR:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:258:PHE:O	1:A:323:ASN:HB3	0.41	2.14	3	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:228:GLY:HA3	0.41	2.45	4	1
1:A:169:PHE:HE1	1:A:339:PHE:HE2	0.41	1.58	4	1
1:A:330:MET:CG	1:A:331:PRO:HD2	0.41	2.45	4	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:283:TYR:HD2	0.41	2.28	5	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:284:LEU:HD22	0.41	2.35	5	1
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:320:THR:HA	1:A:323:ASN:HD21	0.41	1.75	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:GLY:O	1:A:72:GLN:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:124:ASN:N	1:A:124:ASN:HD22	0.41	2.13	1	1
1:A:336:MET:O	1:A:339:PHE:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:CG2	0.41	3.04	7	1
1:A:163:ALA:HB1	1:A:253:GLN:O	0.41	2.16	7	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.41	2.15	9	1
1:A:67:PHE:HB3	1:A:263:SER:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:181:VAL:HG12	1:A:183:VAL:HG23	0.41	1.91	2	1
1:A:318:ALA:O	1:A:321:MET:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:94:TRP:HA	1:A:94:TRP:CE3	0.41	2.50	4	1
1:A:83:LYS:HG2	1:A:84:ALA:H	0.41	1.76	5	1
1:A:280:LEU:HG	1:A:284:LEU:HD13	0.41	1.91	6	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:THR:HG22	0.41	1.92	7	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:299:LEU:HD11	0.41	1.91	8	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:CG	0.41	3.03	10	1
1:A:276:ALA:O	1:A:280:LEU:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:361:LEU:HD13	1:A:361:LEU:O	0.41	2.16	1	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.41	2.89	2	2
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:333:ILE:HG23	1:A:333:ILE:O	0.41	2.15	10	1
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HA	0.41	1.91	2	1
1:A:110:VAL:H	1:A:301:ALA:HA	0.41	1.75	3	1
1:A:311:LEU:HB3	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	4	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:317:ILE:HG22	0.41	1.92	5	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.41	2.16	5	1
1:A:158:TRP:HA	1:A:161:ILE:CD1	0.41	2.45	6	1
1:A:291:GLU:C	1:A:295:LYS:HB3	0.41	2.33	6	1
1:A:62:TRP:CB	1:A:67:PHE:CD2	0.41	3.00	9	1
1:A:99:TYR:O	1:A:100:ASN:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:149:PHE:N	1:A:149:PHE:CD1	0.41	2.88	10	1
1:A:62:TRP:HB3	1:A:67:PHE:HD1	0.41	1.76	1	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:223:ALA:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:190:ALA:H	0.41	1.75	1	1
1:A:259:VAL:HG22	1:A:260:GLY:N	0.41	2.29	2	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:108:ILE:N	1:A:108:ILE:CD1	0.41	2.83	4	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:122:LEU:HD11	0.41	2.51	6	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:264:ALA:HB2	0.41	2.51	8	1
1:A:63:ALA:CA	1:A:262:LEU:HA	0.41	2.22	8	1
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:SER:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:314:ASP:HB2	0.41	1.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:341:TYR:HA	1:A:344:ARG:HH11	0.41	1.75	6	1
1:A:254:PRO:CG	1:A:326:LYS:HD3	0.41	2.46	8	1
1:A:151:LEU:N	1:A:151:LEU:CD1	0.41	2.80	1	1
1:A:183:VAL:HG22	1:A:361:LEU:HD11	0.41	1.93	1	1
1:A:267:ASN:C	1:A:269:ALA:H	0.41	2.19	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:10:TRP:N	0.41	2.30	2	1
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:HD22	0.41	2.31	2	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:217:PHE:CE1	0.41	3.09	4	1
1:A:161:ILE:O	1:A:161:ILE:CG1	0.41	2.67	4	1
1:A:277:LYS:HG3	1:A:278:GLU:N	0.41	2.31	4	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:248:PRO:HD3	0.41	2.45	5	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:122:LEU:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:214:GLU:HA	1:A:217:PHE:CZ	0.41	2.50	6	1
1:A:308:GLU:HG3	1:A:311:LEU:HD21	0.41	1.93	6	1
1:A:63:ALA:HA	1:A:262:LEU:CA	0.41	2.22	8	1
1:A:89:LEU:CG	1:A:94:TRP:HE1	0.41	2.28	8	1
1:A:258:PHE:CB	1:A:330:MET:HG2	0.41	2.46	9	1
1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:PRO:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:94:TRP:CH2	0.41	2.51	2	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:TYR:CE1	0.41	2.51	4	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:139:LEU:HD11	0.41	1.93	7	1
1:A:314:ASP:HB2	1:A:317:ILE:HD13	0.41	1.91	7	1
1:A:321:MET:HG3	1:A:325:GLN:HG2	0.41	1.93	10	1
1:A:66:ARG:NH1	1:A:66:ARG:HG2	0.40	2.31	2	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:57:PRO:CG	0.40	3.04	4	1
1:A:113:LEU:CG	1:A:228:GLY:HA3	0.40	2.46	4	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:150:ASN:N	0.40	2.88	4	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:179:LYS:HG2	0.40	2.15	4	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:223:ALA:HB2	0.40	1.91	7	1
1:A:146:ALA:C	1:A:222:THR:HB	0.40	2.36	7	1
1:A:222:THR:C	1:A:224:MET:H	0.40	2.19	7	1
1:A:6:LYS:HA	1:A:33:ILE:CG2	0.40	2.46	8	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG22	0.40	1.93	10	1
1:A:219:LYS:O	1:A:221:GLU:N	0.40	2.54	10	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:HG2	0.40	1.93	2	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD1	0.40	2.84	4	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:339:PHE:HE2	0.40	2.34	4	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:106:TYR:CE2	0.40	2.51	5	1
1:A:217:PHE:HB2	1:A:225:THR:CG2	0.40	2.25	6	1
1:A:35:VAL:HG22	1:A:279:PHE:HE1	0.40	1.76	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:ILE:CG1	1:A:225:THR:O	0.40	2.69	8	1
1:A:146:ALA:O	1:A:223:ALA:CA	0.40	2.69	8	1
1:A:256:LYS:HZ1	1:A:328:GLU:HG3	0.40	1.73	8	1
1:A:5:GLY:O	1:A:33:ILE:HG23	0.40	2.17	9	1
1:A:333:ILE:CG2	1:A:334:PRO:HD2	0.40	2.46	1	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:ASP:CG	0.40	2.60	2	1
1:A:357:VAL:O	1:A:361:LEU:CB	0.40	2.70	2	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HG13	0.40	2.37	4	1
1:A:118:ASN:O	1:A:122:LEU:HD12	0.40	2.16	7	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:O	0.40	2.17	10	1
1:A:156:PHE:CA	1:A:159:PRO:HG2	0.40	2.45	3	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:94:TRP:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:HG23	0.40	2.49	5	1
1:A:368:ILE:HG13	1:A:369:THR:N	0.40	2.31	5	1
1:A:311:LEU:HD22	1:A:317:ILE:CD1	0.40	2.47	7	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:57:PRO:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:40:PRO:CA	1:A:43:LEU:HG	0.40	2.45	8	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:140:LYS:O	0.40	2.16	8	1
1:A:158:TRP:CB	1:A:159:PRO:HD3	0.40	2.45	9	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:263:SER:O	0.40	2.74	10	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	357/370 (96%)	280±3 (79±1%)	55±4 (15±1%)	22±3 (6±1%)	3	20
All	All	3570/3700 (96%)	2804 (79%)	547 (15%)	219 (6%)	3	20

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	16	GLY	10
1	A	31	THR	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	143	GLY	10
1	A	257	PRO	10
1	A	311	LEU	10
1	A	97	VAL	9
1	A	248	PRO	8
1	A	108	ILE	8
1	A	32	GLY	7
1	A	150	ASN	7
1	A	178	ILE	7
1	A	174	GLY	7
1	A	55	ASP	5
1	A	88	LYS	5
1	A	120	ASP	5
1	A	126	PRO	5
1	A	285	LEU	5
1	A	53	THR	4
1	A	74	GLY	4
1	A	315	PRO	4
1	A	41	ASP	3
1	A	119	LYS	3
1	A	40	PRO	3
1	A	75	LEU	3
1	A	101	GLY	3
1	A	304	LEU	3
1	A	154	PRO	3
1	A	302	VAL	3
1	A	54	GLY	3
1	A	5	GLY	3
1	A	163	ALA	3
1	A	15	LYS	2
1	A	56	GLY	2
1	A	205	ASN	2
1	A	220	GLY	2
1	A	82	ASP	2
1	A	331	PRO	2
1	A	165	GLY	2
1	A	303	ALA	2
1	A	241	ASN	2
1	A	63	ALA	2
1	A	230	TRP	2
1	A	57	PRO	1
1	A	223	ALA	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	268	ALA	1
1	A	272	ASN	1
1	A	100	ASN	1
1	A	166	GLY	1
1	A	221	GLU	1
1	A	326	LYS	1
1	A	327	GLY	1
1	A	330	MET	1
1	A	59	ILE	1
1	A	104	ILE	1
1	A	254	PRO	1
1	A	297	LYS	1
1	A	72	GLN	1
1	A	121	LEU	1
1	A	123	PRO	1
1	A	332	ASN	1
1	A	87	ASP	1
1	A	52	ALA	1
1	A	270	SER	1
1	A	271	PRO	1
1	A	301	ALA	1
1	A	313	LYS	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	285/297 (96%)	186±6 (65±2%)	99±6 (35±2%)	1 10
All	All	2850/2970 (96%)	1861 (65%)	989 (35%)	1 10

All 227 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	195	LEU	10
1	A	299	LEU	10
1	A	89	LEU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	103	LEU	9
1	A	148	MET	9
1	A	280	LEU	9
1	A	285	LEU	9
1	A	367	ARG	9
1	A	370	LYS	9
1	A	160	LEU	9
1	A	98	ARG	8
1	A	102	LYS	8
1	A	129	TRP	8
1	A	192	LEU	8
1	A	202	LYS	8
1	A	273	LYS	8
1	A	290	LEU	8
1	A	330	MET	8
1	A	336	MET	8
1	A	29	LYS	7
1	A	30	ASP	7
1	A	38	GLU	7
1	A	42	LYS	7
1	A	46	LYS	7
1	A	55	ASP	7
1	A	75	LEU	7
1	A	88	LYS	7
1	A	122	LEU	7
1	A	140	LYS	7
1	A	153	GLU	7
1	A	219	LYS	7
1	A	256	LYS	7
1	A	277	LYS	7
1	A	322	GLU	7
1	A	344	ARG	7
1	A	15	LYS	7
1	A	203	HIS	7
1	A	251	LYS	7
1	A	262	LEU	7
1	A	339	PHE	7
1	A	6	LYS	6
1	A	14	ASP	6
1	A	20	LEU	6
1	A	31	THR	6
1	A	44	GLU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	64	HIS	6
1	A	78	GLU	6
1	A	92	PHE	6
1	A	142	LYS	6
1	A	147	LEU	6
1	A	151	LEU	6
1	A	170	LYS	6
1	A	177	ASP	6
1	A	180	ASP	6
1	A	200	LYS	6
1	A	224	MET	6
1	A	281	GLU	6
1	A	295	LYS	6
1	A	296	ASP	6
1	A	309	GLU	6
1	A	313	LYS	6
1	A	340	TRP	6
1	A	70	TYR	6
1	A	179	LYS	6
1	A	194	PHE	6
1	A	198	LEU	6
1	A	25	LYS	6
1	A	316	ARG	6
1	A	28	GLU	6
1	A	34	LYS	5
1	A	66	ARG	5
1	A	83	LYS	5
1	A	119	LYS	5
1	A	120	ASP	5
1	A	189	LYS	5
1	A	201	ASN	5
1	A	204	MET	5
1	A	207	ASP	5
1	A	209	ASP	5
1	A	218	ASN	5
1	A	284	LEU	5
1	A	305	LYS	5
1	A	306	SER	5
1	A	326	LYS	5
1	A	335	GLN	5
1	A	352	SER	5
1	A	354	ARG	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	362	LYS	5
1	A	363	ASP	5
1	A	17	TYR	5
1	A	47	PHE	5
1	A	62	TRP	5
1	A	87	ASP	5
1	A	95	ASP	5
1	A	113	LEU	5
1	A	121	LEU	5
1	A	135	LEU	5
1	A	144	LYS	5
1	A	145	SER	5
1	A	185	ASN	5
1	A	253	GLN	5
1	A	274	GLU	5
1	A	314	ASP	5
1	A	361	LEU	5
1	A	137	LYS	5
1	A	164	ASP	5
1	A	297	LYS	5
1	A	10	TRP	4
1	A	26	LYS	4
1	A	39	HIS	4
1	A	43	LEU	4
1	A	45	GLU	4
1	A	106	TYR	4
1	A	124	ASN	4
1	A	127	LYS	4
1	A	150	ASN	4
1	A	158	TRP	4
1	A	172	GLU	4
1	A	270	SER	4
1	A	275	LEU	4
1	A	307	TYR	4
1	A	311	LEU	4
1	A	328	GLU	4
1	A	349	ASN	4
1	A	355	GLN	4
1	A	365	GLN	4
1	A	27	PHE	4
1	A	104	ILE	4
1	A	130	GLU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	152	GLN	4
1	A	291	GLU	4
1	A	304	LEU	4
1	A	321	MET	4
1	A	138	GLU	4
1	A	139	LEU	4
1	A	341	TYR	4
1	A	230	TRP	4
1	A	49	GLN	4
1	A	86	GLN	3
1	A	90	TYR	3
1	A	156	PHE	3
1	A	175	LYS	3
1	A	197	ASP	3
1	A	263	SER	3
1	A	359	GLU	3
1	A	4	GLU	3
1	A	53	THR	3
1	A	108	ILE	3
1	A	114	SER	3
1	A	167	TYR	3
1	A	210	TYR	3
1	A	272	ASN	3
1	A	283	TYR	3
1	A	287	ASP	3
1	A	310	GLU	3
1	A	332	ASN	3
1	A	358	ASP	3
1	A	18	ASN	3
1	A	67	PHE	3
1	A	72	GLN	3
1	A	76	LEU	3
1	A	82	ASP	3
1	A	128	THR	3
1	A	131	GLU	3
1	A	184	ASP	3
1	A	205	ASN	3
1	A	247	LEU	3
1	A	288	GLU	3
1	A	117	TYR	3
1	A	173	ASN	3
1	A	279	PHE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	SER	3
1	A	85	PHE	3
1	A	214	GLU	3
1	A	308	GLU	3
1	A	169	PHE	2
1	A	245	THR	2
1	A	286	THR	2
1	A	323	ASN	2
1	A	36	THR	2
1	A	41	ASP	2
1	A	93	THR	2
1	A	193	THR	2
1	A	227	ASN	2
1	A	266	ILE	2
1	A	282	ASN	2
1	A	320	THR	2
1	A	80	THR	2
1	A	225	THR	2
1	A	250	PHE	2
1	A	258	PHE	2
1	A	278	GLU	2
1	A	7	LEU	2
1	A	157	THR	2
1	A	178	ILE	2
1	A	242	TYR	2
1	A	111	GLU	2
1	A	155	TYR	2
1	A	241	ASN	2
1	A	325	GLN	2
1	A	333	ILE	2
1	A	337	SER	2
1	A	99	TYR	1
1	A	12	ASN	1
1	A	267	ASN	1
1	A	294	ASN	1
1	A	348	ILE	1
1	A	369	THR	1
1	A	9	ILE	1
1	A	100	ASN	1
1	A	116	ILE	1
1	A	33	ILE	1
1	A	329	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	136	ASP	1
1	A	149	PHE	1
1	A	255	SER	1
1	A	261	VAL	1
1	A	317	ILE	1
1	A	366	THR	1
1	A	368	ILE	1
1	A	11	ILE	1
1	A	183	VAL	1
1	A	226	ILE	1
1	A	58	ASP	1
1	A	79	ILE	1
1	A	118	ASN	1
1	A	221	GLU	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 monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided