Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 19, 2022 – 10:12 PM EST

PDB ID	:	1TFB
Title	:	NMR STUDIES OF HUMAN GENERAL TRANSCRIPTION FACTOR TFIIB: DYNAMICS AND INTERACTION WITH VP16 ACTIVATION DOMAIN, 20 STRUCTURES
Authors	:	Bagby, S.; Ikura, M.
Deposited on	:	1996-11-14

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:

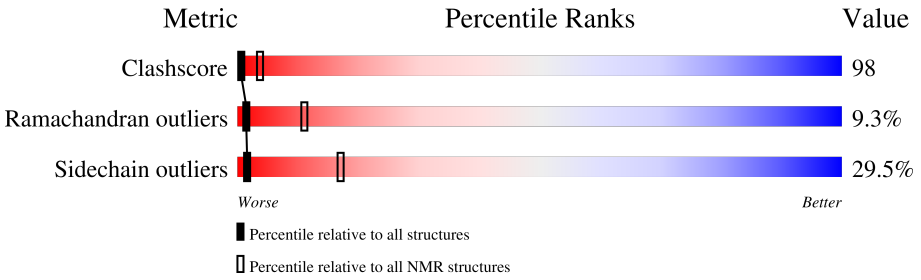
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

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	208	13% 60% 22% • •

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 14 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:112-A:316 (205)	0.53	14

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 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3273 atoms, of which 1666 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TFIIB.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	206	3273	1013	1666	287	295	12	0

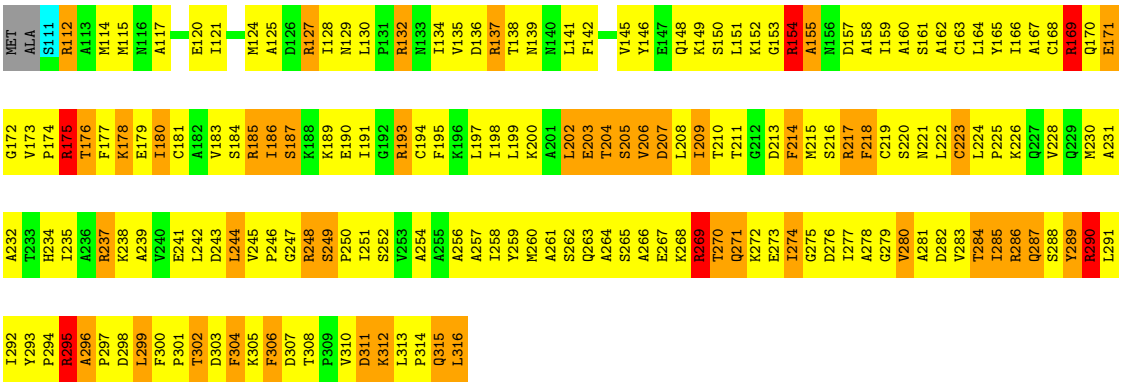
4 Residue-property plots (i)

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: TFIIB

Chain A: 13% 60% 22%



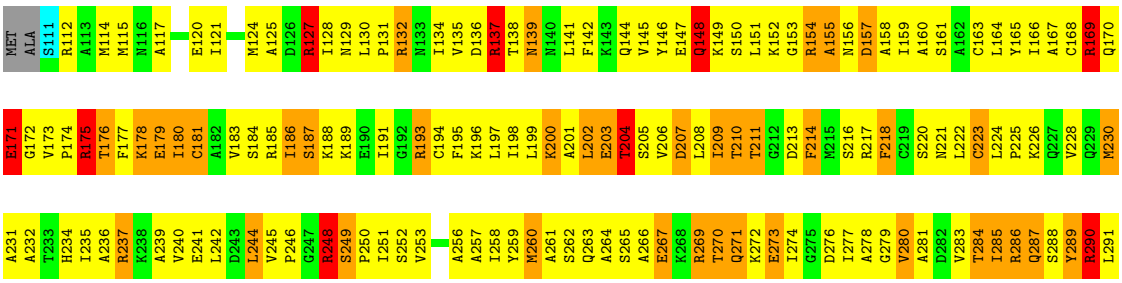
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: TFIIB

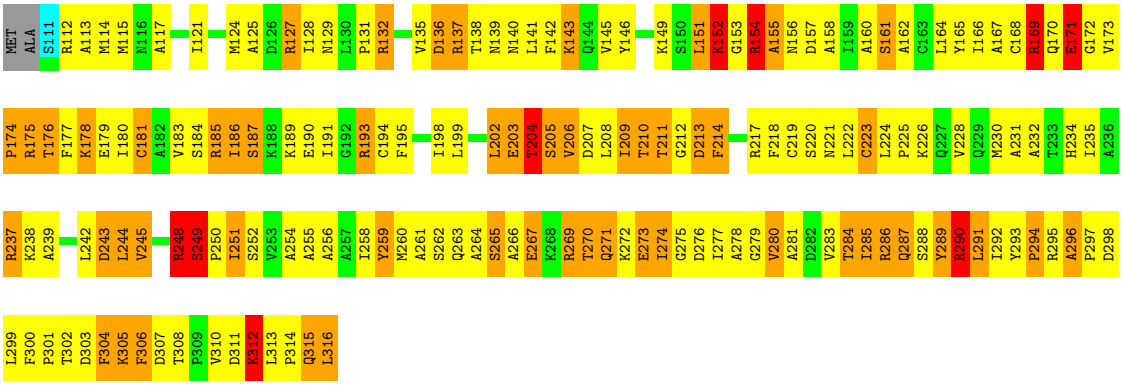
Chain A: 14% 56% 23% 5%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TFIIB

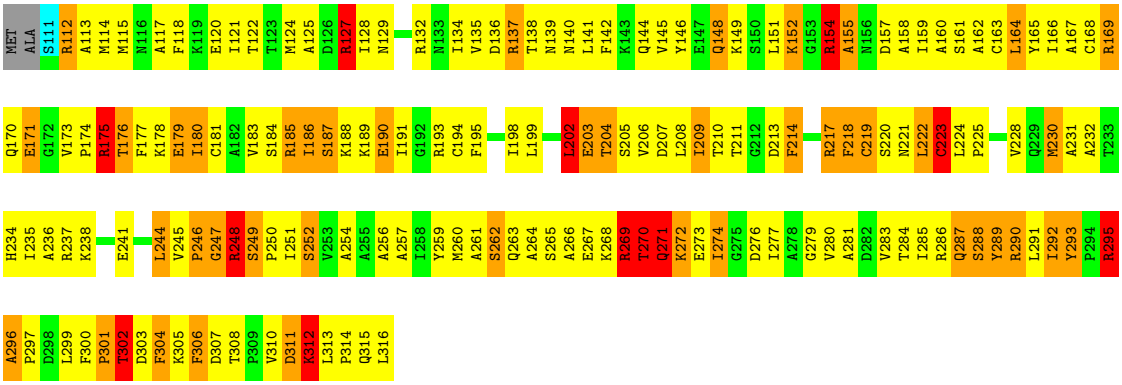
Chain A:



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TFIIB

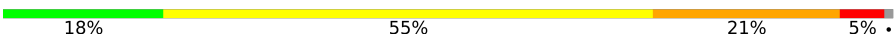
Chain A:

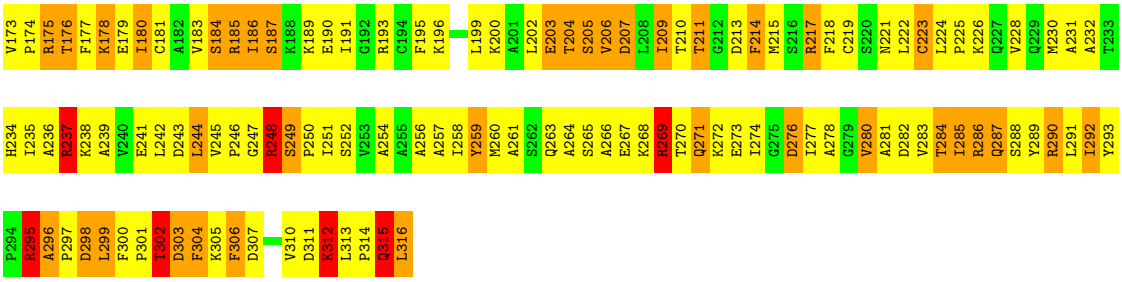


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

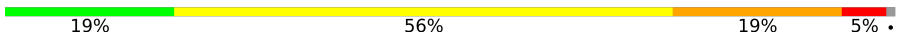


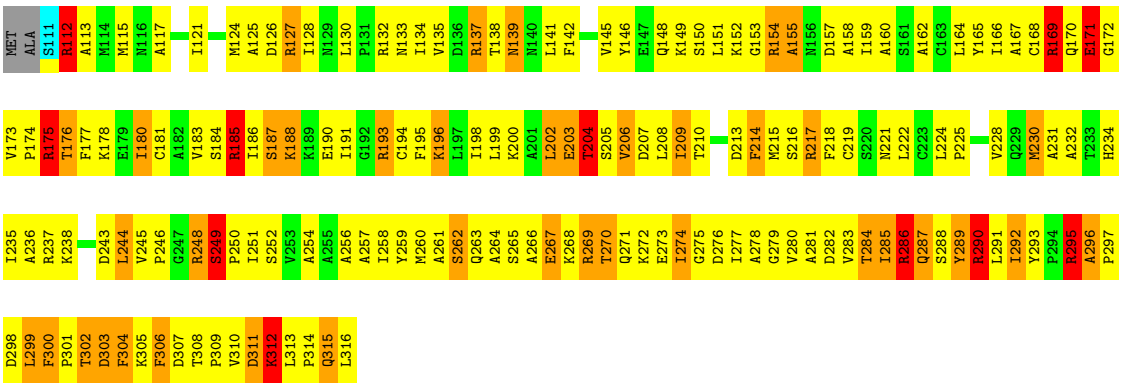


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

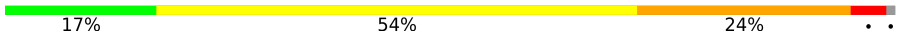


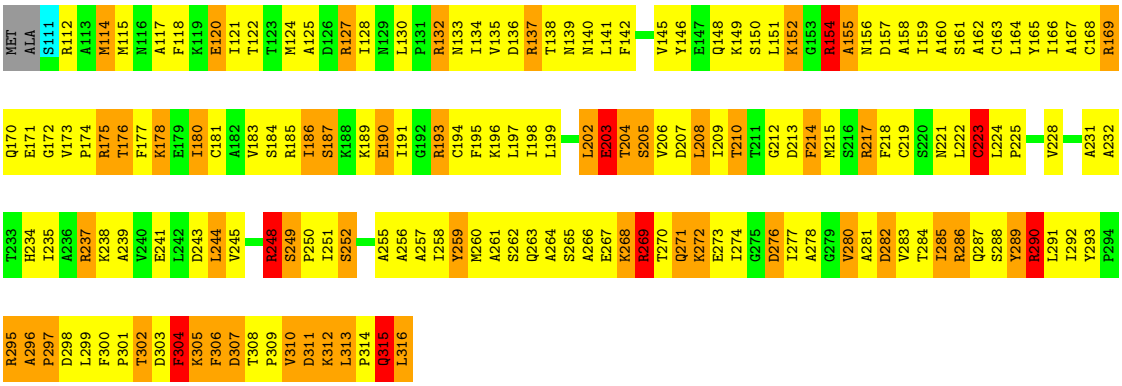


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

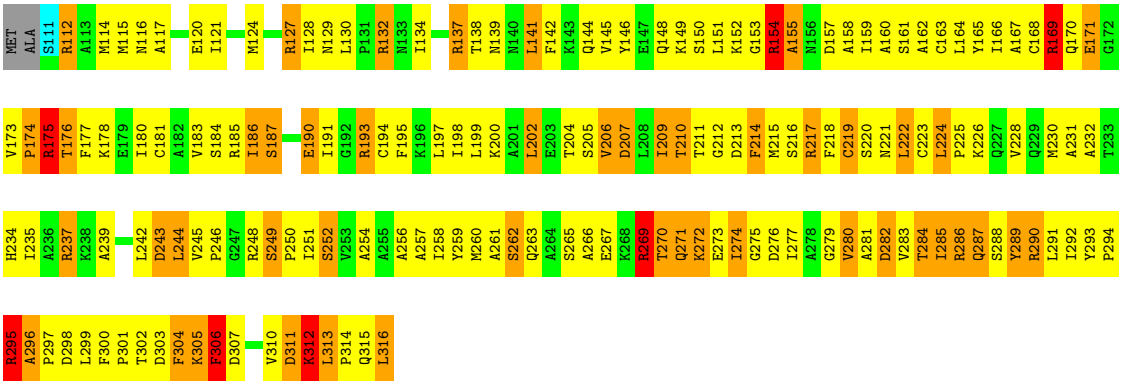




4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TFIIB

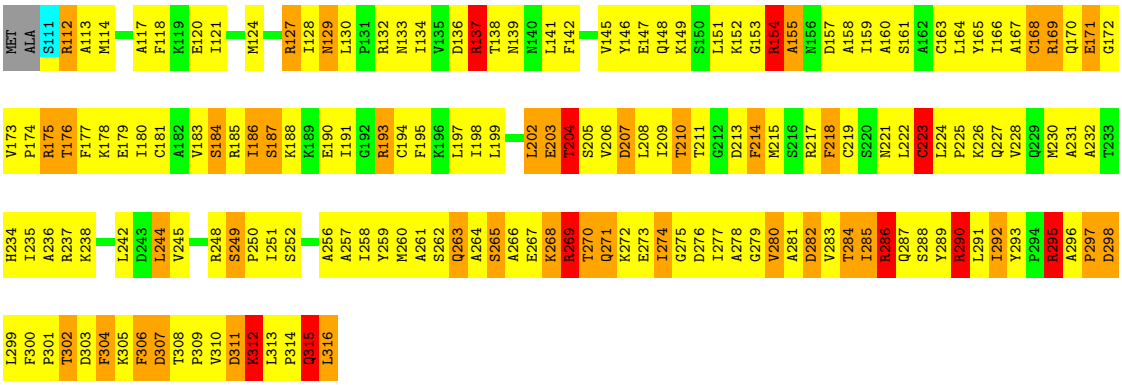
Chain A: 19% 53% 23%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TFIIB

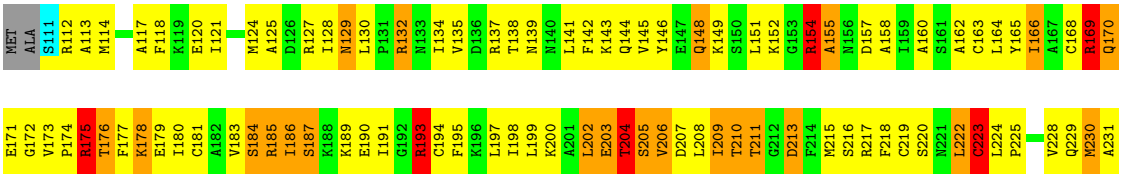
Chain A: 17% 57% 19% 5%

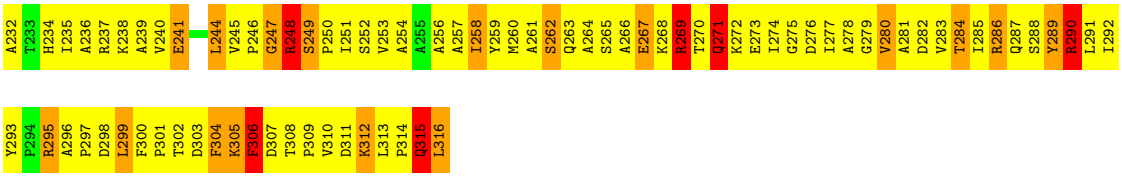


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 15% 59% 19% 6%

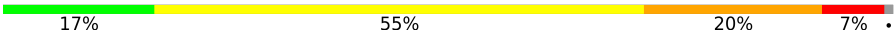


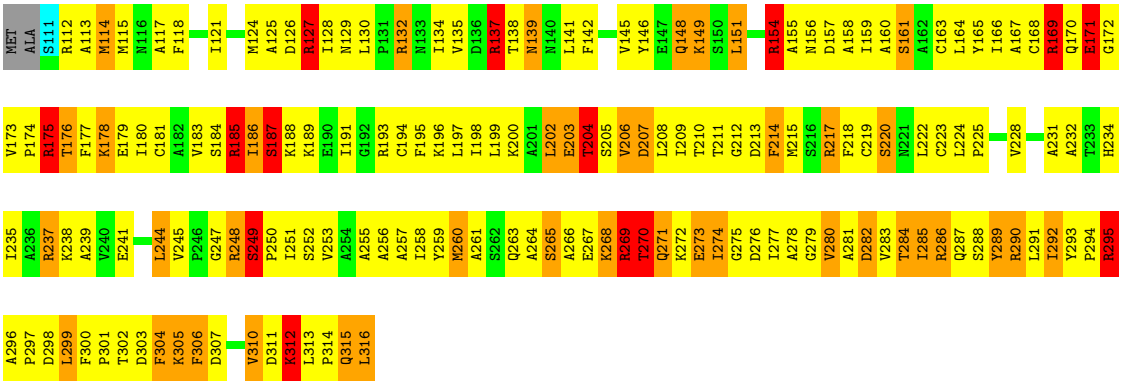


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

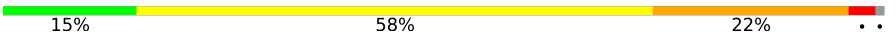


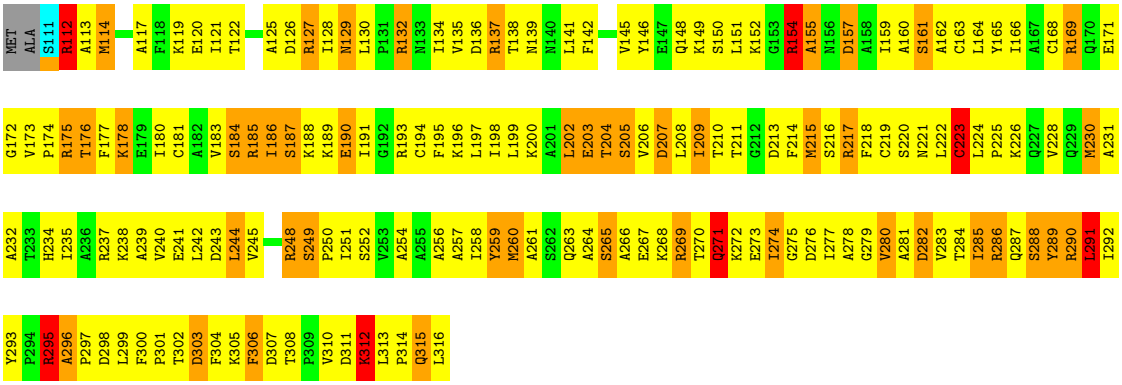


4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

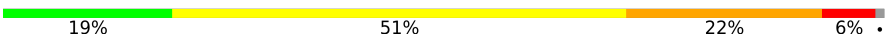


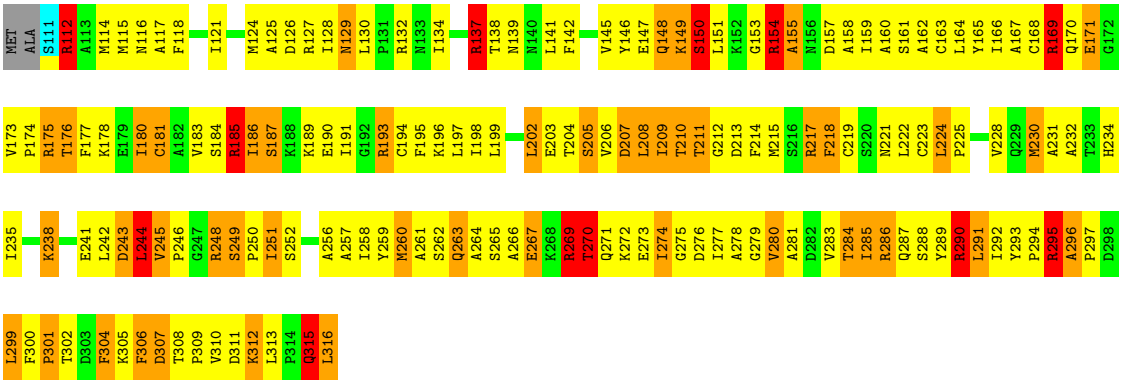


4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

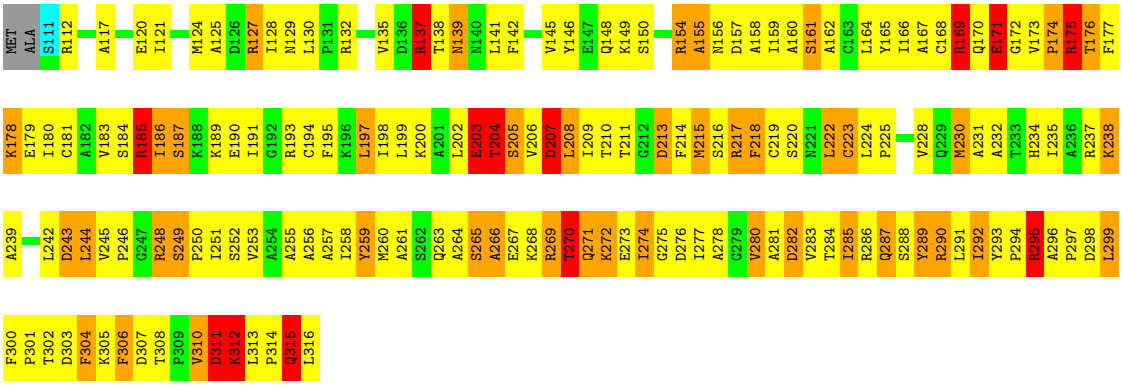




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TFIIB

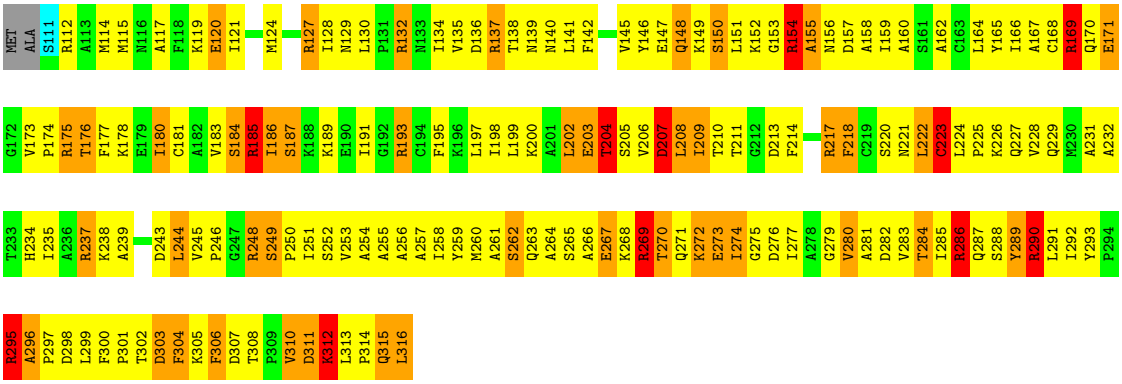
Chain A: 19% 52% 21% 6%



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: TFIIB

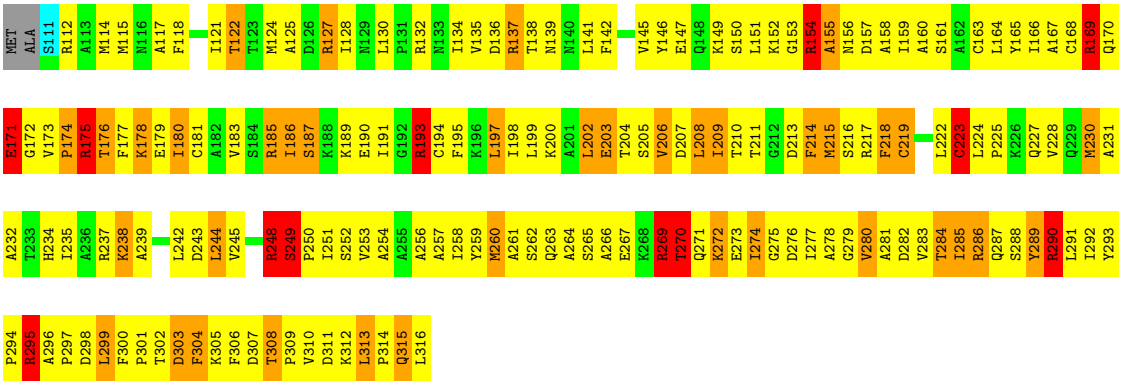
Chain A: 17% 55% 21% 5%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TFIIB

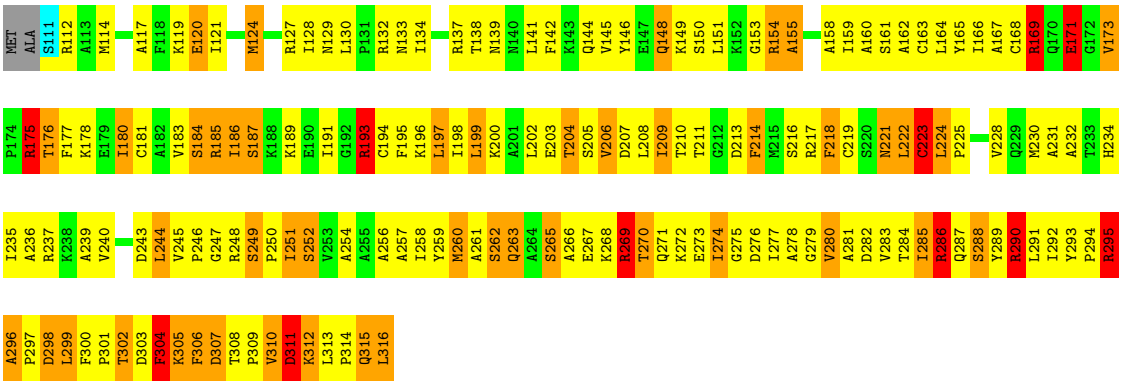
Chain A: 16% 59% 18% 6%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: TFIIB

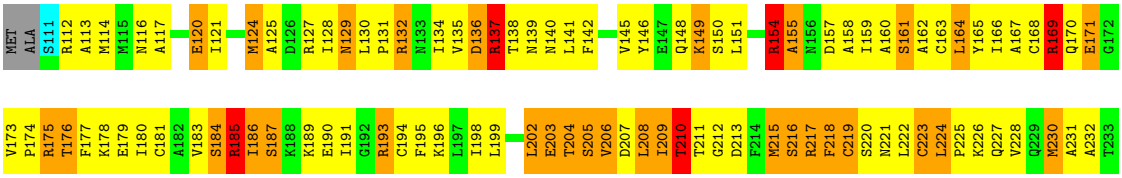
Chain A: 19% 52% 22% 5%

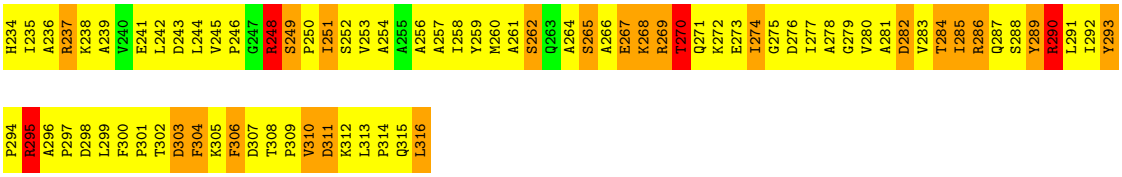


4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 13% 56% 25%

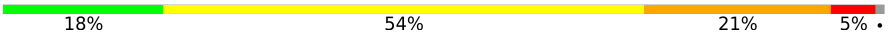


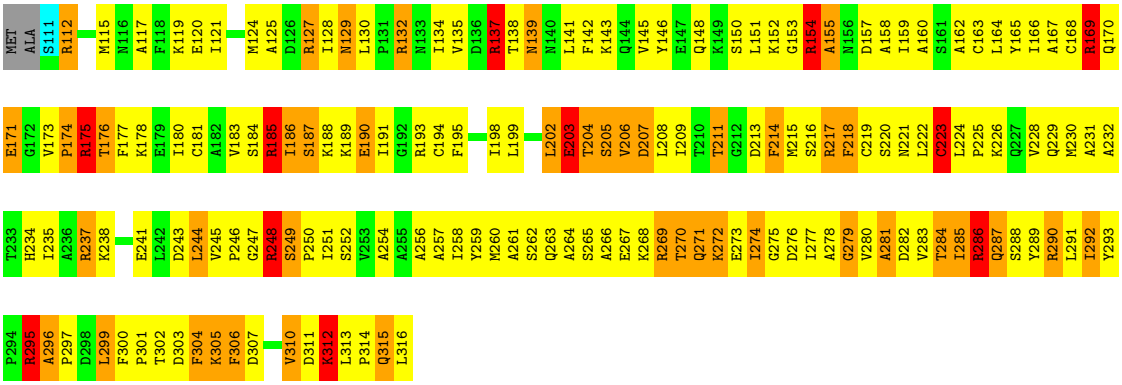


4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:

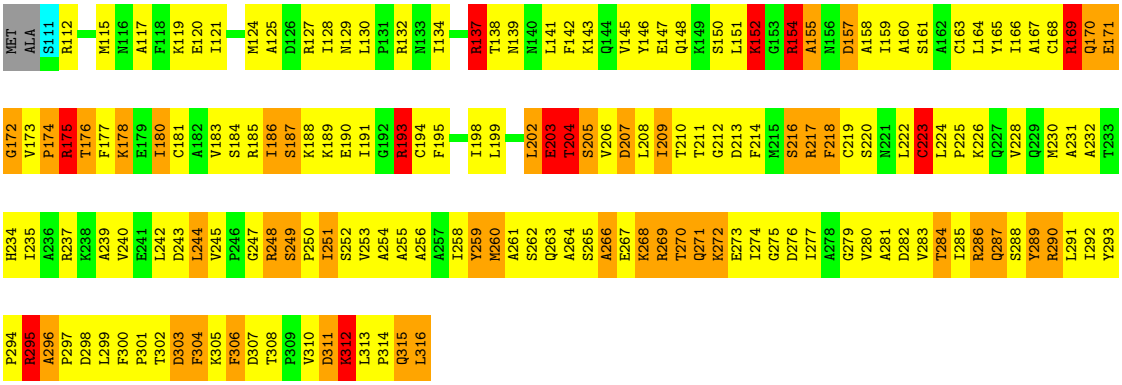




4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TFIIB

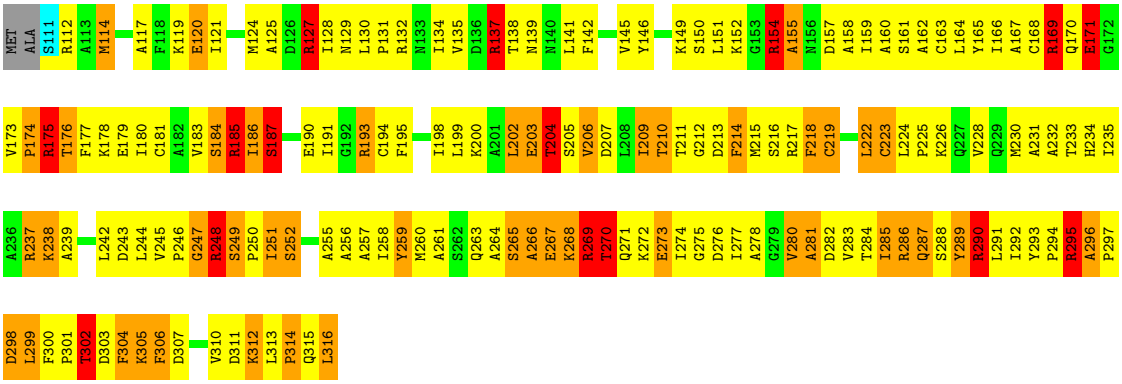
Chain A:



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TFIIB

Chain A:


MET
ALA
S111
R112
A113
M114
A117
F118
K119
E120
I121
M124
A125
D126
R127
I128
N129
L130
P131
R132
N133
I134
V135
D136
R137
T138
N139
N140
L141
F142
V145
Y146
K149
S150
L151
K152
G153
R154
A155
N156
D157
A158
I159
A160
S161
A162
C163
L164
Y165
I166
A167
C168
R169
Q170
E171
G172
V173
P174
R175
T176
F177
K178
E179
I180
C181
A182
V183
S184
R185
I186
S187
E190
I191
G192
R193
C194
F195
I198
L199
K200
A201
L202
E203
T204
S205
V206
D207
L208
I209
T210
T211
G212
D213
F214
M215
S216
R217
F218
C219
L222
C223
L224
P225
K226
Q227
V228
Q229
M230
A231
A232
T233
H234
I235
A236
R237
K238
A239
L242
D243
L244
V245
P246
G247
R248
S249
P250
I251
S252
A255
A256
A257
I258
Y259
M260
A261
S262
Q263
A264
S265
A266
E267
K268
R269
T270
Q271
K272
E273
I274
G275
D276
I277
A278
G279
V280
A281
D282
V283
T284
I285
R286
Q287
S288
Y289
R290
L291
I292
Y293
P294
R295
A296
P297
D298
L299
F300
P301
T302
D303
F304
K305
F306
D307
V310
D311
K312
L313
P314
Q315
L316

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *?*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

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.

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	15.6±0.6
All	All	0	312

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	112	ARG	Sidechain	20
1	A	127	ARG	Sidechain	20
1	A	132	ARG	Sidechain	20
1	A	169	ARG	Sidechain	20
1	A	175	ARG	Sidechain	20
1	A	185	ARG	Sidechain	20
1	A	193	ARG	Sidechain	20
1	A	217	ARG	Sidechain	20
1	A	248	ARG	Sidechain	20
1	A	290	ARG	Sidechain	20
1	A	137	ARG	Sidechain	19
1	A	154	ARG	Sidechain	19
1	A	237	ARG	Sidechain	19
1	A	269	ARG	Sidechain	19
1	A	295	ARG	Sidechain	18
1	A	286	ARG	Sidechain	18

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	1601	1662	1662	321±14
All	All	32020	33240	33240	6424

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 98.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:VAL:HG21	1:A:180:ILE:HG22	1.08	1.19	3	4
1:A:173:VAL:HG11	1:A:180:ILE:HG22	1.07	1.25	15	3
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD12	1.06	1.16	9	2
1:A:245:VAL:HG12	1:A:292:ILE:HD13	1.06	1.28	14	1
1:A:125:ALA:HB1	1:A:130:LEU:HD11	1.05	1.07	5	1
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HD11	1.03	1.11	9	9
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD22	1.02	1.84	15	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD23	1.02	1.26	5	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CD1	1.01	1.86	11	4
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:HD21	1.00	1.87	16	4
1:A:177:PHE:CE1	1:A:180:ILE:HD11	0.99	1.93	5	6
1:A:173:VAL:HG11	1:A:180:ILE:CG2	0.99	1.86	19	3
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:HG21	0.99	1.34	9	4
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:HD11	0.99	1.34	12	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:HD11	0.99	1.28	14	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD12	0.98	1.92	2	2
1:A:245:VAL:HG11	1:A:288:SER:O	0.98	1.59	1	11
1:A:244:LEU:HD11	1:A:293:TYR:N	0.98	1.72	20	5
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CG2	0.98	1.87	12	1
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD11	0.98	1.87	14	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HG21	0.97	1.36	12	7
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:OG	0.97	1.60	4	11
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CE2	0.97	1.94	8	19
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CD2	0.97	1.90	5	5
1:A:310:VAL:HG13	1:A:313:LEU:CD2	0.96	1.90	15	1
1:A:177:PHE:CE2	1:A:180:ILE:HD11	0.96	1.95	13	14
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD22	0.96	1.91	4	1
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:CD1	0.96	1.90	9	5
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:CB	0.95	1.90	12	8
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HB3	0.95	1.39	7	14
1:A:245:VAL:HG23	1:A:287:GLN:OE1	0.95	1.61	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:O	1:A:145:VAL:HG22	0.94	1.62	2	17
1:A:194:CYS:O	1:A:198:ILE:HD12	0.94	1.62	16	11
1:A:260:MET:SD	1:A:313:LEU:HD23	0.94	2.01	7	2
1:A:292:ILE:O	1:A:299:LEU:HD21	0.94	1.62	7	6
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HD13	0.94	1.93	14	1
1:A:197:LEU:O	1:A:197:LEU:HD22	0.94	1.62	16	2
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG23	0.93	1.99	6	8
1:A:296:ALA:HB1	1:A:297:PRO:HD2	0.93	1.41	20	16
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:SG	0.93	2.04	18	4
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HD13	0.93	1.39	20	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:313:LEU:HD22	0.92	0.95	15	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:C	0.92	1.84	8	5
1:A:141:LEU:O	1:A:145:VAL:HG12	0.92	1.64	3	3
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD21	0.91	1.40	19	7
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:CB	0.91	1.96	9	20
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:CG2	0.91	1.96	1	20
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:HG22	0.90	1.66	3	20
1:A:176:THR:HG21	1:A:315:GLN:O	0.90	1.65	19	13
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:C	0.90	1.85	9	4
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HD21	0.90	2.02	8	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:CB	0.90	1.97	9	3
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD13	0.89	1.83	5	4
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:HG12	0.88	1.43	10	6
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HD22	0.88	1.67	11	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD21	0.88	1.43	8	3
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HD21	0.88	2.05	19	6
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG12	0.87	1.46	19	8
1:A:124:MET:O	1:A:183:VAL:HG21	0.87	1.69	1	5
1:A:263:GLN:HG3	1:A:313:LEU:HD21	0.87	1.47	16	5
1:A:239:ALA:CB	1:A:292:ILE:HD11	0.87	2.00	19	8
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CZ	0.87	2.04	12	20
1:A:310:VAL:HA	1:A:313:LEU:HD13	0.86	1.46	15	1
1:A:180:ILE:O	1:A:183:VAL:HG12	0.86	1.69	9	20
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:HB2	0.86	1.45	10	8
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:HD12	0.86	1.70	10	2
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:CD1	0.86	2.01	20	1
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:CD2	0.86	2.01	12	6
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:HG22	0.86	1.45	10	1
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:CD2	0.86	2.01	15	1
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:HB2	0.86	1.48	13	1
1:A:210:THR:O	1:A:251:ILE:HD13	0.85	1.71	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD13	0.85	1.44	7	4
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:HB2	0.85	1.48	6	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:CG	0.85	2.02	11	2
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:CB	0.85	2.01	10	6
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:SG	0.85	2.12	4	1
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD23	0.85	2.00	5	2
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:HD22	0.85	1.70	7	2
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:HD12	0.85	2.07	18	3
1:A:125:ALA:HB3	1:A:135:VAL:HG22	0.85	1.49	15	8
1:A:280:VAL:HG11	1:A:284:THR:HG21	0.85	1.46	12	14
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:CG	0.85	1.92	12	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD23	0.85	1.72	11	3
1:A:316:LEU:HD23	1:A:316:LEU:OXT	0.84	1.72	15	1
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:HB1	0.84	1.49	20	4
1:A:244:LEU:HG	1:A:292:ILE:HD12	0.84	1.48	14	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HG21	0.84	1.47	5	1
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:O	0.84	1.73	19	2
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HD11	0.84	2.06	5	4
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HD11	0.84	2.07	3	4
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD23	0.84	1.50	17	3
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HD21	0.84	2.07	12	3
1:A:150:SER:C	1:A:151:LEU:HD22	0.84	1.94	6	2
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:CD1	0.83	2.02	6	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:HD2	0.83	1.47	7	2
1:A:292:ILE:HD13	1:A:292:ILE:O	0.83	1.73	8	2
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:HD12	0.83	1.93	2	9
1:A:259:TYR:CE2	1:A:274:ILE:HG21	0.83	2.08	19	4
1:A:127:ARG:HB3	1:A:183:VAL:HG23	0.83	1.49	3	6
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HB2	0.83	1.48	19	5
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CG2	0.83	2.03	5	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:172:GLY:O	0.83	1.74	1	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:134:ILE:HG21	0.83	2.04	6	3
1:A:218:PHE:O	1:A:277:ILE:HG21	0.83	1.73	18	14
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:CD2	0.83	2.08	3	5
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD13	0.83	1.73	8	1
1:A:121:ILE:HD13	1:A:139:ASN:HA	0.82	1.49	10	20
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:CB	0.82	2.04	3	12
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:CB	0.82	2.04	13	4
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD13	0.82	1.49	11	2
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD21	0.82	1.90	1	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD12	0.82	1.51	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ILE:HG21	1:A:202:LEU:HD11	0.82	1.49	1	6
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD11	0.82	2.04	12	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:291:LEU:O	0.82	1.75	13	5
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:CG1	0.81	2.05	10	5
1:A:113:ALA:HB3	1:A:146:TYR:OH	0.81	1.75	10	8
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:HB3	0.81	1.53	4	3
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD13	0.81	1.96	5	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:228:VAL:HB	0.81	1.50	20	2
1:A:308:THR:CG2	1:A:310:VAL:HG13	0.81	2.04	12	2
1:A:202:LEU:HD12	1:A:202:LEU:O	0.81	1.75	3	10
1:A:151:LEU:HD11	1:A:194:CYS:SG	0.81	2.16	11	4
1:A:297:PRO:O	1:A:299:LEU:HD22	0.81	1.74	15	1
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:HG22	0.80	1.51	16	20
1:A:249:SER:HB2	1:A:251:ILE:HD12	0.80	1.53	9	3
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:CD1	0.80	2.12	5	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:289:TYR:OH	0.80	1.74	8	8
1:A:157:ASP:CB	1:A:186:ILE:HD12	0.80	2.06	5	1
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HG12	0.80	1.51	14	1
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:CD1	0.80	2.06	4	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD22	0.80	1.50	4	2
1:A:219:CYS:SG	1:A:278:ALA:HB2	0.80	2.17	18	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:251:ILE:HG22	0.80	1.77	15	2
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:CE2	0.79	2.12	3	8
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:HD11	0.79	2.07	17	2
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:HB3	0.79	1.51	9	3
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:HG21	0.79	2.12	14	8
1:A:210:THR:HA	1:A:280:VAL:HG13	0.79	1.50	1	8
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:O	0.79	1.76	8	5
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:HG2	0.79	1.53	20	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CE1	0.79	2.12	11	13
1:A:245:VAL:HG23	1:A:288:SER:O	0.79	1.77	20	2
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:HG12	0.79	1.52	5	16
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD21	0.79	2.08	6	3
1:A:239:ALA:HB2	1:A:299:LEU:HD23	0.79	1.55	17	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:HG	0.78	1.55	18	8
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:SD	0.78	2.16	12	2
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD23	0.78	1.78	8	14
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG2	0.78	1.56	11	2
1:A:222:LEU:HD23	1:A:222:LEU:N	0.78	1.93	13	2
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:O	0.78	1.77	9	8
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HG2	0.78	1.54	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:HD21	0.78	2.09	8	1
1:A:230:MET:O	1:A:233:THR:HG22	0.78	1.79	20	1
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:CB	0.78	2.08	20	8
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:N	0.78	1.94	4	14
1:A:155:ALA:HB2	1:A:190:GLU:OE1	0.78	1.79	9	3
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:N	0.78	1.95	4	5
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:HD12	0.78	1.55	6	2
1:A:125:ALA:CB	1:A:130:LEU:HD11	0.77	2.00	5	1
1:A:256:ALA:HA	1:A:285:ILE:HG23	0.77	1.56	6	20
1:A:292:ILE:HG22	1:A:299:LEU:HD11	0.77	1.54	13	1
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:ILE:HD12	0.77	1.54	5	5
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:HD13	0.77	1.53	13	2
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:HD12	0.77	1.79	1	3
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:HD13	0.77	1.99	10	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:NE	0.77	1.94	12	1
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:HB3	0.77	1.54	19	3
1:A:316:LEU:OXT	1:A:316:LEU:HD13	0.77	1.80	4	1
1:A:137:ARG:HB3	1:A:167:ALA:HB2	0.77	1.57	14	11
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:HG13	0.77	1.53	12	6
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD21	0.76	1.57	10	4
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:HG22	0.76	2.01	7	3
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HG23	0.76	1.56	17	2
1:A:256:ALA:O	1:A:316:LEU:HD11	0.76	1.81	7	2
1:A:296:ALA:HB1	1:A:297:PRO:CD	0.76	2.10	12	12
1:A:244:LEU:HD21	1:A:292:ILE:O	0.76	1.81	6	3
1:A:173:VAL:HG21	1:A:180:ILE:CG2	0.76	2.08	3	4
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:HD12	0.76	1.81	13	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:277:ILE:HG22	0.76	2.16	12	5
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:CD2	0.75	2.11	16	8
1:A:254:ALA:O	1:A:258:ILE:HD12	0.75	1.81	9	4
1:A:151:LEU:HB3	1:A:159:ILE:HD11	0.75	1.57	19	3
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:HD12	0.75	1.56	4	1
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:N	0.75	1.96	16	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:CG	0.75	2.12	16	8
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CD2	0.74	2.17	8	17
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:HD12	0.74	1.58	10	3
1:A:222:LEU:HD23	1:A:222:LEU:O	0.74	1.81	12	2
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:HG21	0.74	2.11	20	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG22	0.74	2.12	10	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:HA	0.74	1.56	4	8
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD13	0.74	1.81	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:HD12	0.74	1.83	20	7
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG13	0.74	1.59	6	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HD22	0.74	1.83	16	2
1:A:298:ASP:C	1:A:299:LEU:HD13	0.74	2.02	20	2
1:A:293:TYR:HB3	1:A:299:LEU:HD11	0.74	1.58	11	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:198:ILE:N	0.74	1.98	16	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG23	0.74	2.12	17	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:245:VAL:O	0.73	1.83	4	4
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:HD13	0.73	1.81	10	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CG1	0.73	2.13	17	1
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:OG	0.73	1.81	5	3
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:HG23	0.73	1.84	15	12
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:HB3	0.73	1.58	14	3
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HG23	0.73	1.60	17	1
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HB3	0.73	1.58	18	8
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD12	0.73	2.14	10	1
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:HD12	0.73	1.59	2	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD22	0.73	2.04	8	3
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:SD	0.73	2.23	12	2
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG21	0.73	1.61	12	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD11	0.72	1.97	9	1
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HD21	0.72	1.82	12	3
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:HD12	0.72	1.84	10	4
1:A:310:VAL:HB	1:A:313:LEU:HD23	0.72	1.60	14	1
1:A:236:ALA:O	1:A:240:VAL:HG12	0.72	1.85	16	1
1:A:165:TYR:CD1	1:A:180:ILE:HG21	0.72	2.19	3	7
1:A:257:ALA:O	1:A:261:ALA:HB2	0.72	1.83	17	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:CG2	0.72	2.15	9	3
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD22	0.72	1.59	11	1
1:A:222:LEU:HD22	1:A:269:ARG:NH1	0.72	1.99	14	1
1:A:313:LEU:C	1:A:313:LEU:HD23	0.72	2.05	15	1
1:A:259:TYR:CZ	1:A:274:ILE:HG21	0.72	2.20	11	4
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:CG1	0.72	2.15	11	4
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CD2	0.72	2.19	6	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:310:VAL:O	0.72	1.84	17	1
1:A:207:ASP:C	1:A:208:LEU:HD12	0.72	2.05	3	2
1:A:125:ALA:CB	1:A:135:VAL:HG22	0.72	2.15	15	8
1:A:138:THR:CG2	1:A:164:LEU:HD22	0.72	2.15	17	18
1:A:228:VAL:HG11	1:A:262:SER:HA	0.72	1.61	14	6
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG22	0.72	1.61	10	1
1:A:256:ALA:HB2	1:A:285:ILE:HA	0.72	1.61	2	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:ILE:HG23	1:A:186:ILE:O	0.71	1.85	17	19
1:A:176:THR:HG23	1:A:177:PHE:N	0.71	1.98	6	19
1:A:161:SER:CB	1:A:191:ILE:HD13	0.71	2.15	6	14
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:HD23	0.71	1.85	5	1
1:A:145:VAL:HG22	1:A:145:VAL:O	0.71	1.85	1	3
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:HG3	0.71	1.62	9	2
1:A:292:ILE:HG23	1:A:292:ILE:O	0.71	1.85	5	5
1:A:285:ILE:HG22	1:A:316:LEU:HD21	0.71	1.62	15	3
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:HA	0.71	1.60	11	1
1:A:245:VAL:HG13	1:A:245:VAL:O	0.71	1.84	14	9
1:A:244:LEU:HD21	1:A:292:ILE:C	0.71	2.06	11	3
1:A:206:VAL:HG23	1:A:282:ASP:OD2	0.71	1.84	15	1
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:HB3	0.71	1.61	18	5
1:A:292:ILE:HG12	1:A:299:LEU:HD21	0.71	1.60	11	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HG13	0.71	1.60	1	3
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD22	0.70	1.60	18	3
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:HD21	0.70	1.62	16	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:HB2	0.70	1.85	2	4
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG11	0.70	1.63	6	1
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD21	0.70	1.59	6	2
1:A:228:VAL:HG13	1:A:265:SER:HB3	0.70	1.63	14	4
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:O	0.70	1.86	6	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HG13	0.70	1.63	7	3
1:A:127:ARG:CB	1:A:183:VAL:HG23	0.70	2.16	1	3
1:A:260:MET:HE3	1:A:260:MET:O	0.70	1.87	12	1
1:A:161:SER:OG	1:A:191:ILE:HD13	0.70	1.87	17	6
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HD12	0.70	1.87	14	2
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:OE1	0.70	1.87	20	2
1:A:209:ILE:HD13	1:A:279:GLY:O	0.70	1.87	8	3
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:HB1	0.70	1.86	12	3
1:A:224:LEU:HD23	1:A:228:VAL:HG21	0.70	1.64	17	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:259:TYR:OH	0.70	1.86	9	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:280:VAL:HG22	0.70	1.63	18	1
1:A:235:ILE:HB	1:A:257:ALA:HB1	0.69	1.64	15	4
1:A:155:ALA:HB1	1:A:158:ALA:HB3	0.69	1.63	1	12
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:HG3	0.69	1.62	7	1
1:A:252:SER:CA	1:A:284:THR:HG23	0.69	2.17	2	12
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HD2	0.69	1.62	2	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:199:LEU:HD22	0.69	2.02	3	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:O	0.69	1.87	8	3
1:A:130:LEU:HD12	1:A:130:LEU:O	0.69	1.87	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:CD	0.69	2.18	19	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CD2	0.69	2.80	5	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CB	0.69	2.17	5	1
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:HD1	0.69	1.46	5	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD13	0.69	2.18	7	3
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HD11	0.69	2.23	14	2
1:A:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CE1	0.69	2.81	5	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:146:TYR:CD1	0.69	2.81	16	18
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:HD21	0.69	1.64	3	8
1:A:197:LEU:HD13	1:A:197:LEU:C	0.69	2.08	16	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:HB	0.68	1.65	3	6
1:A:207:ASP:HB2	1:A:283:VAL:HG11	0.68	1.65	6	2
1:A:221:ASN:OD1	1:A:222:LEU:HD23	0.68	1.86	3	1
1:A:300:PHE:CZ	1:A:304:PHE:CD2	0.68	2.81	4	1
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:NE2	0.68	2.02	1	1
1:A:209:ILE:HG21	1:A:279:GLY:O	0.68	1.89	19	11
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CZ	0.68	2.81	20	6
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:HD21	0.68	1.63	6	4
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD22	0.68	2.02	13	2
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:O	0.68	1.88	13	2
1:A:235:ILE:HG23	1:A:289:TYR:OH	0.68	1.89	19	2
1:A:186:ILE:C	1:A:186:ILE:HD13	0.68	2.09	17	19
1:A:206:VAL:HG11	1:A:282:ASP:N	0.68	2.03	4	5
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:VAL:HG13	0.68	1.65	7	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:197:LEU:C	0.68	2.07	13	2
1:A:245:VAL:HG22	1:A:245:VAL:O	0.67	1.87	6	2
1:A:117:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CE2	0.67	2.25	9	3
1:A:245:VAL:HG23	1:A:291:LEU:HD21	0.67	1.65	3	5
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:CB	0.67	2.19	4	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:267:GLU:HB3	0.67	1.67	17	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD12	0.67	1.89	3	2
1:A:130:LEU:CD2	1:A:134:ILE:HG21	0.67	2.19	5	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:HG21	0.66	1.89	9	3
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:HE22	0.66	1.49	18	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CZ	0.66	2.79	5	20
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD1	0.66	2.57	5	3
1:A:253:VAL:HG22	1:A:288:SER:OG	0.66	1.90	13	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG3	0.66	1.65	18	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:148:GLN:NE2	0.66	2.04	16	3
1:A:299:LEU:HD13	1:A:299:LEU:N	0.66	2.05	20	1
1:A:236:ALA:HB2	1:A:257:ALA:HB2	0.66	1.68	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:HD23	0.66	2.06	4	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG22	0.66	1.68	18	2
1:A:125:ALA:HA	1:A:130:LEU:HD12	0.66	1.67	12	2
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HD2	0.66	1.67	1	2
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HB2	0.66	1.66	7	8
1:A:264:ALA:CB	1:A:300:PHE:CE2	0.66	2.78	5	1
1:A:154:ARG:O	1:A:155:ALA:HB2	0.66	1.91	2	16
1:A:176:THR:HG22	1:A:263:GLN:NE2	0.66	2.05	18	2
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:CD1	0.66	2.83	14	10
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:CD1	0.66	2.19	12	1
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:HD12	0.66	1.68	5	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG22	0.66	2.21	18	4
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HG2	0.66	1.66	7	1
1:A:260:MET:CA	1:A:316:LEU:HD23	0.66	2.21	12	1
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:HB2	0.65	1.91	18	15
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HD12	0.65	1.91	2	3
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:HD12	0.65	1.68	4	4
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CE2	0.65	2.77	11	7
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:HG21	0.65	1.67	8	10
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HG21	0.65	1.67	20	3
1:A:130:LEU:HD13	1:A:168:CYS:SG	0.65	2.32	8	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:CB	0.65	2.20	12	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HG13	0.65	1.67	15	1
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HD21	0.65	2.21	2	1
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:HD22	0.65	2.21	19	3
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CE1	0.65	2.80	10	12
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG12	0.65	2.22	5	3
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:H	0.65	1.52	20	7
1:A:252:SER:HA	1:A:280:VAL:HG11	0.65	1.66	11	4
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:CG2	0.65	2.80	3	11
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:CB	0.65	2.22	2	1
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:CB	0.65	2.80	9	5
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG13	0.65	2.27	17	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:CD	0.65	2.22	2	1
1:A:252:SER:CB	1:A:280:VAL:HG11	0.65	2.21	13	1
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:HD11	0.65	1.69	11	9
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:NE	0.65	2.07	19	1
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:CD1	0.65	2.21	19	4
1:A:297:PRO:HG3	1:A:313:LEU:HD12	0.65	1.69	8	3
1:A:308:THR:HG23	1:A:309:PRO:HD2	0.65	1.69	6	7
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:CG1	0.65	2.80	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HB3	0.65	1.69	15	1
1:A:209:ILE:HD12	1:A:209:ILE:N	0.64	2.07	8	7
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:HD11	0.64	1.69	19	2
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:CD2	0.64	2.80	12	6
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HG3	0.64	1.67	6	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG22	0.64	1.93	15	1
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:CB	0.64	2.22	1	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:CG2	0.64	2.81	20	2
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CE2	0.64	2.81	17	6
1:A:264:ALA:CB	1:A:300:PHE:CZ	0.64	2.81	5	1
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:HD13	0.64	1.91	6	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG13	0.64	2.22	6	1
1:A:258:ILE:HG22	1:A:274:ILE:HG13	0.64	1.70	6	3
1:A:134:ILE:HD11	1:A:171:GLU:HG2	0.64	1.69	11	1
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:HB3	0.64	1.91	15	1
1:A:207:ASP:HA	1:A:281:ALA:HB2	0.64	1.69	3	4
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:HG13	0.64	1.67	18	2
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CD2	0.64	2.81	8	5
1:A:270:THR:C	1:A:274:ILE:HG22	0.64	2.12	6	2
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:CG	0.64	2.22	2	2
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:HD22	0.64	1.70	17	11
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:CD1	0.64	2.81	3	2
1:A:249:SER:O	1:A:253:VAL:HG23	0.64	1.93	13	1
1:A:313:LEU:N	1:A:314:PRO:HD3	0.64	2.07	15	3
1:A:280:VAL:O	1:A:281:ALA:HB2	0.64	1.91	18	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:CB	0.64	2.81	8	4
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:CG2	0.64	2.81	5	2
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:CD	0.64	2.13	19	1
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:CD2	0.64	2.81	19	2
1:A:313:LEU:N	1:A:314:PRO:CD	0.64	2.61	15	3
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CE1	0.64	2.81	11	1
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:HG23	0.63	1.70	3	2
1:A:145:VAL:HG12	1:A:148:GLN:HE21	0.63	1.54	9	5
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:CB	0.63	2.24	17	14
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CZ	0.63	2.81	12	18
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:HG22	0.63	1.93	7	2
1:A:127:ARG:HB2	1:A:183:VAL:HG23	0.63	1.69	1	2
1:A:173:VAL:HG13	1:A:173:VAL:O	0.63	1.93	3	8
1:A:228:VAL:HG13	1:A:261:ALA:O	0.63	1.94	6	7
1:A:289:TYR:HA	1:A:292:ILE:HG22	0.63	1.68	11	4
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:HD23	0.63	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:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CZ	0.63	2.87	5	1
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE2	0.63	2.82	9	5
1:A:292:ILE:CG1	1:A:293:TYR:CE2	0.63	2.80	12	1
1:A:244:LEU:CG	1:A:292:ILE:HD12	0.63	2.23	14	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:138:THR:HG22	0.63	2.24	1	20
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:CD	0.63	2.23	10	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:260:MET:C	0.63	2.14	12	1
1:A:124:MET:HA	1:A:183:VAL:HG21	0.63	1.70	17	2
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:CD1	0.63	2.81	14	2
1:A:283:VAL:HG22	1:A:287:GLN:NE2	0.63	2.09	16	2
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CE1	0.63	2.28	2	19
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:C	0.63	2.13	7	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:CB	0.63	2.81	17	5
1:A:221:ASN:HB2	1:A:277:ILE:HD13	0.63	1.71	16	2
1:A:158:ALA:N	1:A:186:ILE:HG21	0.62	2.08	4	15
1:A:128:ILE:HG22	1:A:128:ILE:O	0.62	1.92	18	11
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:CD	0.62	2.62	5	2
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HD13	0.62	1.94	12	1
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:CD	0.62	2.23	2	1
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HG13	0.62	1.71	7	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HB2	0.62	1.70	12	2
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:CD1	0.62	2.24	13	1
1:A:137:ARG:CB	1:A:167:ALA:HB2	0.62	2.25	7	7
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CD	0.62	2.24	2	2
1:A:206:VAL:HG11	1:A:282:ASP:H	0.62	1.54	10	5
1:A:251:ILE:N	1:A:251:ILE:HD13	0.62	2.10	10	1
1:A:177:PHE:CD1	1:A:315:GLN:NE2	0.62	2.67	4	2
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HD13	0.62	2.29	12	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:CA	0.62	2.24	4	7
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:H	0.62	1.54	4	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD23	0.62	2.24	14	1
1:A:125:ALA:HB3	1:A:135:VAL:CG2	0.62	2.23	18	7
1:A:306:PHE:N	1:A:306:PHE:CD1	0.62	2.66	9	1
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:CD2	0.62	2.25	16	3
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:HG21	0.62	2.15	14	2
1:A:165:TYR:HD1	1:A:180:ILE:HG21	0.62	1.54	12	5
1:A:245:VAL:HG23	1:A:287:GLN:CD	0.62	2.14	13	1
1:A:244:LEU:HD11	1:A:293:TYR:CA	0.62	2.24	20	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HD12	0.62	2.25	9	2
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:HG21	0.62	1.94	11	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HA	0.62	1.71	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:TYR:CE1	1:A:274:ILE:HG21	0.62	2.29	3	4
1:A:128:ILE:HG23	1:A:130:LEU:HG	0.62	1.72	13	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CD1	0.61	2.30	11	7
1:A:224:LEU:HD12	1:A:269:ARG:HE	0.61	1.53	12	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HD23	0.61	1.94	1	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:145:VAL:HG13	0.61	1.95	4	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:CD	0.61	2.25	1	3
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:HD21	0.61	2.25	3	4
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HD2	0.61	1.72	2	1
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:HG21	0.61	1.72	12	6
1:A:299:LEU:HD12	1:A:299:LEU:H	0.61	1.55	1	5
1:A:242:LEU:HB3	1:A:244:LEU:HD23	0.61	1.71	12	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:CD2	0.61	2.25	16	16
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HG	0.61	1.71	7	3
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:HE2	0.61	1.56	12	4
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:HG2	0.61	1.73	1	1
1:A:232:ALA:HB1	1:A:257:ALA:O	0.61	1.94	7	7
1:A:234:HIS:CE1	1:A:300:PHE:CG	0.61	2.89	10	1
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:HD22	0.61	1.71	18	3
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG22	0.61	2.31	20	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:N	0.61	2.11	3	3
1:A:245:VAL:HG11	1:A:287:GLN:O	0.61	1.95	2	1
1:A:163:CYS:SG	1:A:198:ILE:HD13	0.61	2.36	17	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:HD11	0.60	1.73	1	2
1:A:239:ALA:HB1	1:A:292:ILE:CG1	0.60	2.23	14	1
1:A:236:ALA:HB2	1:A:257:ALA:CB	0.60	2.26	3	7
1:A:206:VAL:C	1:A:208:LEU:HD12	0.60	2.16	13	1
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:HD12	0.60	1.73	15	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:CD1	0.60	2.84	18	1
1:A:195:PHE:CD1	1:A:199:LEU:HD11	0.60	2.32	5	3
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:OE2	0.60	1.96	12	1
1:A:281:ALA:O	1:A:284:THR:HG22	0.60	1.97	13	2
1:A:245:VAL:HG13	1:A:292:ILE:HG13	0.60	1.72	2	1
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD13	0.60	2.26	13	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HA	0.60	1.72	17	1
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HG23	0.60	1.96	18	3
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ALA:N	0.60	2.11	13	18
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HD13	0.60	1.97	2	12
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:CG	0.60	2.27	2	2
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD11	0.60	1.74	10	2
1:A:278:ALA:O	1:A:280:VAL:HG23	0.60	1.96	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CD1	0.60	2.32	17	7
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HD12	0.60	2.27	15	1
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:CB	0.60	2.80	13	10
1:A:166:ILE:CD1	1:A:198:ILE:HG22	0.60	2.27	16	4
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:HD11	0.59	2.32	19	5
1:A:293:TYR:CD1	1:A:313:LEU:O	0.59	2.55	12	1
1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:ASP:N	0.59	2.11	15	7
1:A:134:ILE:HG21	1:A:168:CYS:SG	0.59	2.37	14	5
1:A:232:ALA:HB1	1:A:257:ALA:C	0.59	2.18	1	3
1:A:207:ASP:H	1:A:281:ALA:HB1	0.59	1.56	20	4
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:HD12	0.59	1.72	2	7
1:A:228:VAL:HG22	1:A:265:SER:HG	0.59	1.54	3	4
1:A:125:ALA:CB	1:A:135:VAL:CG2	0.59	2.81	4	10
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:CB	0.59	2.81	11	14
1:A:113:ALA:HB1	1:A:156:ASN:ND2	0.59	2.12	4	1
1:A:260:MET:SD	1:A:313:LEU:HD13	0.59	2.38	3	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD22	0.59	2.32	9	3
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:CG	0.59	2.90	13	7
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:CD2	0.59	2.80	16	4
1:A:264:ALA:CB	1:A:306:PHE:CE1	0.59	2.85	20	8
1:A:219:CYS:SG	1:A:258:ILE:HD13	0.59	2.37	4	3
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG22	0.59	1.74	17	4
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:HD2	0.59	2.13	5	1
1:A:235:ILE:CG2	1:A:260:MET:CE	0.59	2.81	11	1
1:A:159:ILE:HG23	1:A:198:ILE:HD11	0.59	1.75	13	1
1:A:121:ILE:HG12	1:A:160:ALA:HB1	0.59	1.73	1	2
1:A:313:LEU:CG	1:A:313:LEU:O	0.59	2.49	15	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:LEU:HD23	0.59	1.97	3	17
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:HG2	0.59	1.74	6	3
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:HD13	0.59	1.74	9	3
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD21	0.59	2.23	19	2
1:A:163:CYS:SG	1:A:198:ILE:HG21	0.59	2.38	3	2
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:CG2	0.59	2.81	20	6
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:HD12	0.59	1.75	5	1
1:A:114:MET:CG	1:A:146:TYR:CE2	0.59	2.86	14	3
1:A:260:MET:CE	1:A:316:LEU:HD12	0.59	2.28	17	1
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CE1	0.58	2.56	13	8
1:A:209:ILE:HG22	1:A:211:THR:H	0.58	1.58	13	6
1:A:296:ALA:CB	1:A:297:PRO:CD	0.58	2.79	12	11
1:A:166:ILE:CD1	1:A:198:ILE:CG2	0.58	2.81	16	3
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG11	0.58	2.38	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:VAL:HB	1:A:246:PRO:HD3	0.58	1.74	12	1
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HD12	0.58	1.98	3	3
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:CB	0.58	2.51	7	14
1:A:141:LEU:CD2	1:A:202:LEU:CD2	0.58	2.81	19	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:CD1	0.58	2.86	12	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:277:ILE:O	0.58	2.56	20	7
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:CD1	0.58	2.81	13	1
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CZ	0.58	2.56	1	8
1:A:218:PHE:CE2	1:A:277:ILE:O	0.58	2.57	19	4
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:HB2	0.58	2.34	11	6
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:CE2	0.58	2.57	5	2
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:CD2	0.58	2.92	20	3
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:CE1	0.58	2.57	14	2
1:A:293:TYR:CG	1:A:293:TYR:O	0.58	2.57	13	2
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:OD1	0.58	1.98	12	1
1:A:121:ILE:CG1	1:A:160:ALA:HB1	0.58	2.28	16	4
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CE2	0.58	2.57	16	2
1:A:161:SER:CB	1:A:191:ILE:CD1	0.58	2.81	17	10
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CE1	0.58	2.91	20	2
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CB	0.58	2.28	2	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:HD12	0.58	2.34	2	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:HD12	0.58	2.18	4	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:CD1	0.58	2.81	16	2
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:CE1	0.58	2.57	7	13
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:CD2	0.58	2.67	12	2
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:CB	0.58	2.51	6	20
1:A:291:LEU:N	1:A:291:LEU:CD2	0.58	2.65	4	11
1:A:293:TYR:CD1	1:A:293:TYR:O	0.58	2.57	18	2
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:O	0.58	2.57	6	2
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:O	0.58	2.57	7	3
1:A:289:TYR:CE2	1:A:293:TYR:OH	0.58	2.56	12	1
1:A:293:TYR:CE2	1:A:314:PRO:O	0.58	2.57	20	1
1:A:176:THR:HG23	1:A:178:LYS:H	0.58	1.59	15	14
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:CG1	0.58	2.86	13	3
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HG22	0.58	2.33	5	1
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HD13	0.58	1.99	5	1
1:A:292:ILE:HG23	1:A:299:LEU:HD21	0.58	1.76	2	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:173:VAL:O	0.58	1.99	7	2
1:A:173:VAL:CG2	1:A:179:GLU:CG	0.58	2.82	15	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:172:GLY:O	0.57	1.98	8	2
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:CB	0.57	2.82	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:CB	0.57	2.29	18	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:HG12	0.57	1.75	19	2
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:CG	0.57	2.51	5	4
1:A:165:TYR:O	1:A:165:TYR:CD1	0.57	2.57	7	5
1:A:224:LEU:HD13	1:A:224:LEU:C	0.57	2.19	3	2
1:A:312:LYS:C	1:A:314:PRO:HD3	0.57	2.19	11	3
1:A:260:MET:CE	1:A:289:TYR:CE1	0.57	2.87	5	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:277:ILE:O	0.57	2.57	6	1
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:HD12	0.57	1.99	10	2
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD13	0.57	2.29	11	1
1:A:300:PHE:CD2	1:A:300:PHE:O	0.57	2.57	9	2
1:A:145:VAL:HG21	1:A:198:ILE:CG1	0.57	2.29	13	3
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:CB	0.57	2.29	11	4
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:CD1	0.57	2.67	9	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:208:LEU:CD2	0.57	2.30	18	1
1:A:157:ASP:C	1:A:186:ILE:HG21	0.57	2.20	12	16
1:A:204:THR:CG2	1:A:205:SER:N	0.57	2.67	6	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG22	0.57	2.28	10	3
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:O	0.57	2.57	7	2
1:A:166:ILE:CG2	1:A:202:LEU:HD11	0.57	2.29	15	2
1:A:177:PHE:CD1	1:A:315:GLN:OE1	0.57	2.57	8	2
1:A:296:ALA:HB1	1:A:312:LYS:HA	0.57	1.76	3	7
1:A:130:LEU:HD12	1:A:130:LEU:C	0.57	2.20	5	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:O	0.57	2.00	5	1
1:A:269:ARG:NH1	1:A:274:ILE:CD1	0.57	2.67	10	1
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:CG	0.57	2.30	12	1
1:A:120:GLU:OE1	1:A:160:ALA:HB3	0.57	1.99	18	1
1:A:271:GLN:HA	1:A:274:ILE:CG2	0.57	2.29	9	14
1:A:274:ILE:CG2	1:A:275:GLY:N	0.57	2.68	12	11
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:CG2	0.57	2.87	19	1
1:A:300:PHE:CD2	1:A:304:PHE:HB3	0.57	2.35	9	4
1:A:259:TYR:CE2	1:A:274:ILE:CG2	0.57	2.88	4	2
1:A:207:ASP:CB	1:A:283:VAL:HG11	0.57	2.29	6	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:HB2	0.57	2.34	17	4
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:CD2	0.57	2.57	10	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CB	0.57	2.29	12	1
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CE2	0.57	2.98	9	2
1:A:166:ILE:HD12	1:A:199:LEU:HD21	0.57	1.75	7	2
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:HD12	0.57	2.00	17	2
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CD2	0.57	2.57	16	1
1:A:146:TYR:CD1	1:A:146:TYR:O	0.57	2.58	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ALA:HB1	1:A:195:PHE:HA	0.57	1.76	3	12
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:HD12	0.57	2.40	4	1
1:A:146:TYR:O	1:A:146:TYR:CG	0.57	2.57	19	4
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CE1	0.57	2.98	5	1
1:A:177:PHE:CG	1:A:315:GLN:OE1	0.57	2.57	13	1
1:A:138:THR:HG23	1:A:163:CYS:CB	0.57	2.30	20	4
1:A:221:ASN:CB	1:A:277:ILE:HD13	0.57	2.29	16	1
1:A:169:ARG:CD	1:A:271:GLN:NE2	0.57	2.67	18	1
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:HG11	0.57	2.30	19	1
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CB	0.56	2.54	2	7
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:OXT	0.56	2.58	6	1
1:A:260:MET:HA	1:A:316:LEU:HD23	0.56	1.77	12	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:202:LEU:HD11	0.56	1.75	18	2
1:A:204:THR:CG2	1:A:206:VAL:HG23	0.56	2.29	3	1
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HG	0.56	2.00	15	3
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:CD	0.56	2.28	7	1
1:A:235:ILE:HG13	1:A:300:PHE:CD1	0.56	2.36	9	2
1:A:260:MET:N	1:A:316:LEU:HD23	0.56	2.15	12	1
1:A:293:TYR:O	1:A:293:TYR:CD2	0.56	2.57	17	2
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:CB	0.56	2.53	18	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:225:PRO:O	0.56	1.99	20	1
1:A:161:SER:HA	1:A:164:LEU:HD12	0.56	1.75	1	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:289:TYR:CE1	0.56	2.35	2	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG11	0.56	2.28	6	1
1:A:259:TYR:CZ	1:A:271:GLN:OE1	0.56	2.57	9	1
1:A:242:LEU:N	1:A:242:LEU:CD2	0.56	2.67	11	1
1:A:265:SER:OG	1:A:304:PHE:CZ	0.56	2.57	15	2
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:HD13	0.56	1.77	13	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:CD1	0.56	2.81	17	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:C	0.56	2.78	17	8
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:CG2	0.56	2.54	19	18
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HB3	0.56	1.76	3	1
1:A:206:VAL:CG1	1:A:207:ASP:N	0.56	2.67	17	6
1:A:310:VAL:HG23	1:A:311:ASP:N	0.56	2.15	20	6
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:HB3	0.56	2.36	15	2
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:CD2	0.56	2.83	3	4
1:A:249:SER:CB	1:A:250:PRO:CD	0.56	2.83	20	20
1:A:274:ILE:HG23	1:A:275:GLY:N	0.56	2.15	16	13
1:A:151:LEU:CD1	1:A:159:ILE:CG1	0.56	2.83	16	4
1:A:211:THR:CG2	1:A:212:GLY:N	0.56	2.67	7	2
1:A:173:VAL:HG13	1:A:259:TYR:OH	0.56	2.01	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:235:ILE:HG23	1:A:299:LEU:HB2	0.56	1.78	12	1
1:A:222:LEU:CD2	1:A:277:ILE:CD1	0.56	2.84	3	1
1:A:210:THR:HA	1:A:280:VAL:HG12	0.56	1.76	6	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:OE1	0.56	2.59	9	2
1:A:137:ARG:C	1:A:141:LEU:HD12	0.56	2.21	1	1
1:A:186:ILE:O	1:A:186:ILE:CG2	0.56	2.54	4	19
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:CB	0.56	2.54	4	5
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:HG21	0.56	2.21	11	2
1:A:252:SER:HB3	1:A:280:VAL:HG11	0.56	1.77	13	1
1:A:240:VAL:HG23	1:A:253:VAL:HG11	0.56	1.75	19	1
1:A:145:VAL:HG22	1:A:151:LEU:HD12	0.56	1.77	1	1
1:A:218:PHE:O	1:A:277:ILE:CG2	0.56	2.54	9	10
1:A:299:LEU:HD12	1:A:299:LEU:N	0.56	2.15	1	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:HG3	0.56	1.77	6	2
1:A:266:ALA:HB2	1:A:307:ASP:HB2	0.56	1.78	10	1
1:A:222:LEU:N	1:A:222:LEU:CD2	0.56	2.67	13	2
1:A:252:SER:HA	1:A:284:THR:HG23	0.56	1.77	2	11
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CD1	0.56	2.81	2	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:HA	0.56	2.36	2	2
1:A:232:ALA:HB2	1:A:261:ALA:HB2	0.56	1.78	4	3
1:A:224:LEU:HD12	1:A:267:GLU:OE1	0.56	2.01	9	3
1:A:306:PHE:CD1	1:A:310:VAL:HG23	0.56	2.36	6	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:HB3	0.56	1.78	9	3
1:A:300:PHE:N	1:A:300:PHE:CD1	0.56	2.74	11	2
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:HD22	0.56	2.01	20	2
1:A:169:ARG:NH2	1:A:199:LEU:CD1	0.56	2.69	18	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:208:LEU:HD21	0.56	1.78	18	1
1:A:245:VAL:HG11	1:A:292:ILE:HB	0.56	1.78	4	2
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:CG	0.56	2.31	9	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CE1	0.55	2.89	20	6
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:HB2	0.55	2.36	5	1
1:A:264:ALA:HB3	1:A:300:PHE:CZ	0.55	2.36	5	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:CA	0.55	2.32	19	5
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:HG3	0.55	1.76	12	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:278:ALA:HB1	0.55	2.01	13	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:251:ILE:HG22	0.55	1.78	6	6
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:CB	0.55	2.85	11	3
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:CG	0.55	2.85	10	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:199:LEU:HD22	0.55	2.32	1	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:HB3	0.55	2.36	20	4
1:A:138:THR:HA	1:A:141:LEU:HD12	0.55	1.78	20	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:TYR:CB	1:A:296:ALA:O	0.55	2.55	3	9
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:CD1	0.55	2.84	6	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:CA	0.55	2.55	15	2
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:CG	0.55	2.22	19	3
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CE1	0.55	2.36	9	9
1:A:249:SER:CB	1:A:250:PRO:HD2	0.55	2.32	20	20
1:A:214:PHE:CE2	1:A:251:ILE:HG12	0.55	2.37	3	14
1:A:193:ARG:CZ	1:A:193:ARG:CB	0.55	2.84	8	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD22	0.55	2.16	8	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CD1	0.55	2.89	9	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:287:GLN:O	0.55	2.01	3	6
1:A:265:SER:O	1:A:266:ALA:HB3	0.55	2.02	12	1
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:CB	0.55	2.55	15	11
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:CG1	0.55	2.54	17	6
1:A:293:TYR:CE1	1:A:314:PRO:HA	0.55	2.36	17	3
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:N	0.55	2.74	11	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:199:LEU:HD12	0.55	2.17	18	1
1:A:295:ARG:O	1:A:296:ALA:CB	0.55	2.55	14	14
1:A:277:ILE:HG22	1:A:277:ILE:O	0.55	2.02	5	3
1:A:296:ALA:HB3	1:A:312:LYS:CD	0.55	2.32	6	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:235:ILE:HG12	0.55	2.37	10	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:CG	0.55	2.31	11	2
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:HD21	0.55	2.01	11	1
1:A:264:ALA:O	1:A:304:PHE:CZ	0.55	2.59	12	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:306:PHE:CZ	0.55	2.95	16	2
1:A:279:GLY:C	1:A:280:VAL:HG23	0.55	2.22	18	1
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:OG1	0.55	2.55	13	13
1:A:128:ILE:HG22	1:A:130:LEU:CD2	0.55	2.32	16	3
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:CD1	0.55	2.55	5	2
1:A:310:VAL:HG13	1:A:311:ASP:N	0.55	2.17	7	2
1:A:245:VAL:HG13	1:A:288:SER:O	0.55	2.02	12	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HG12	0.55	2.37	13	8
1:A:232:ALA:O	1:A:257:ALA:HB1	0.55	2.02	1	6
1:A:245:VAL:CG2	1:A:287:GLN:O	0.55	2.55	16	6
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CE2	0.55	2.37	13	2
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:CD1	0.55	2.55	5	3
1:A:304:PHE:O	1:A:306:PHE:N	0.55	2.40	12	6
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:CG	0.55	2.21	14	2
1:A:255:ALA:HB2	1:A:280:VAL:HG21	0.55	1.78	20	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:CG	0.54	2.55	16	3
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CB	0.54	2.55	3	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CB	0.54	2.55	6	12
1:A:251:ILE:O	1:A:254:ALA:HB3	0.54	2.01	16	10
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:CG	0.54	2.56	4	7
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:HB2	0.54	1.77	5	1
1:A:206:VAL:C	1:A:208:LEU:HD23	0.54	2.22	6	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG22	0.54	1.77	12	1
1:A:117:ALA:HB2	1:A:156:ASN:HB3	0.54	1.78	1	2
1:A:177:PHE:CD1	1:A:177:PHE:C	0.54	2.81	8	8
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:CB	0.54	2.56	15	19
1:A:228:VAL:CG2	1:A:267:GLU:CB	0.54	2.82	11	4
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:OG	0.54	2.56	12	3
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:HD2	0.54	1.57	6	1
1:A:193:ARG:CG	1:A:194:CYS:N	0.54	2.71	17	3
1:A:260:MET:HB3	1:A:289:TYR:CE1	0.54	2.36	11	1
1:A:275:GLY:CA	1:A:285:ILE:CD1	0.54	2.85	14	2
1:A:154:ARG:O	1:A:155:ALA:CB	0.54	2.56	2	12
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:HD11	0.54	1.78	6	2
1:A:306:PHE:HE1	1:A:313:LEU:HD11	0.54	1.61	18	2
1:A:292:ILE:HG13	1:A:293:TYR:CE2	0.54	2.38	12	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HD2	0.54	1.79	17	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:CG1	0.54	2.86	3	1
1:A:239:ALA:HB2	1:A:292:ILE:HD11	0.54	1.78	7	2
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD21	0.54	2.38	16	3
1:A:289:TYR:CE1	1:A:292:ILE:HG21	0.54	2.37	8	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HE	0.54	1.63	10	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CZ	0.54	2.38	17	5
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:C	0.54	2.80	6	1
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:HG22	0.54	1.79	14	2
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:CG	0.54	2.70	18	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CG	0.54	2.56	6	5
1:A:301:PRO:O	1:A:302:THR:CB	0.54	2.55	8	6
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:CB	0.54	2.91	5	2
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:NE2	0.54	2.76	11	2
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:CB	0.54	2.56	17	5
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:HG23	0.54	1.79	20	2
1:A:124:MET:CE	1:A:125:ALA:HB2	0.54	2.33	4	1
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:CZ	0.54	3.00	5	3
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:CG	0.54	2.56	12	8
1:A:270:THR:O	1:A:272:LYS:N	0.54	2.41	9	4
1:A:244:LEU:CG	1:A:244:LEU:O	0.54	2.55	12	2
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:HD21	0.54	2.38	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:LEU:HD12	1:A:242:LEU:O	0.54	2.03	19	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CB	0.54	2.56	6	6
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:CG2	0.54	2.56	11	2
1:A:316:LEU:O	1:A:316:LEU:CG	0.54	2.57	7	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:CG	0.54	2.32	12	3
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HD12	0.54	2.38	10	1
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:HG2	0.54	2.38	13	1
1:A:251:ILE:HD12	1:A:251:ILE:H	0.53	1.63	13	2
1:A:224:LEU:C	1:A:224:LEU:HD13	0.53	2.23	14	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:CA	0.53	2.32	17	1
1:A:146:TYR:O	1:A:146:TYR:CD1	0.53	2.61	2	3
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CG1	0.53	2.56	2	3
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CE2	0.53	2.39	17	2
1:A:259:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD21	0.53	2.32	6	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:291:LEU:O	0.53	2.56	11	3
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CG	0.53	2.56	12	2
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:CA	0.53	2.56	13	1
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:CB	0.53	2.57	11	18
1:A:231:ALA:HB1	1:A:304:PHE:CG	0.53	2.38	17	8
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HG	0.53	1.81	12	3
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:HG12	0.53	1.80	9	1
1:A:239:ALA:HB3	1:A:253:VAL:HG11	0.53	1.80	10	2
1:A:227:GLN:O	1:A:231:ALA:HB2	0.53	2.04	17	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:292:ILE:CG1	0.53	2.86	17	1
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:CB	0.53	2.55	20	2
1:A:176:THR:CG2	1:A:177:PHE:N	0.53	2.70	16	15
1:A:244:LEU:CD2	1:A:291:LEU:O	0.53	2.57	5	5
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:CB	0.53	2.57	3	15
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:CG1	0.53	2.91	19	4
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:O	0.53	2.57	19	4
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:CG	0.53	2.57	8	2
1:A:213:ASP:OD1	1:A:255:ALA:HB2	0.53	2.04	10	1
1:A:239:ALA:CB	1:A:253:VAL:HG11	0.53	2.34	15	2
1:A:207:ASP:OD1	1:A:283:VAL:CG1	0.53	2.56	17	2
1:A:209:ILE:CG2	1:A:279:GLY:O	0.53	2.57	3	7
1:A:235:ILE:CG2	1:A:289:TYR:OH	0.53	2.57	15	12
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CD1	0.53	2.57	2	3
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CG	0.53	2.57	13	3
1:A:238:LYS:CB	1:A:299:LEU:O	0.53	2.57	9	5
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG21	0.53	1.79	11	1
1:A:273:GLU:CD	1:A:277:ILE:HD11	0.53	2.24	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:HIS:CD2	1:A:303:ASP:CG	0.53	2.81	17	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:OG	0.53	2.56	1	3
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CE2	0.53	2.37	20	2
1:A:160:ALA:O	1:A:164:LEU:CD2	0.53	2.57	8	19
1:A:117:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.53	2.38	20	3
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:HG21	0.53	1.80	6	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:HG23	0.53	1.80	19	3
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:O	0.53	2.57	14	5
1:A:297:PRO:CD	1:A:313:LEU:O	0.53	2.57	6	1
1:A:222:LEU:HD13	1:A:273:GLU:OE1	0.53	2.03	10	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:CG2	0.53	2.57	15	1
1:A:298:ASP:O	1:A:299:LEU:HB2	0.53	2.04	15	1
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:CG	0.53	2.56	19	1
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CD1	0.53	2.57	6	7
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:CD2	0.53	2.87	2	1
1:A:210:THR:CG2	1:A:252:SER:OG	0.53	2.57	6	1
1:A:114:MET:O	1:A:118:PHE:CD1	0.53	2.61	8	3
1:A:269:ARG:CZ	1:A:273:GLU:O	0.53	2.57	9	1
1:A:269:ARG:CZ	1:A:274:ILE:HD12	0.53	2.34	10	1
1:A:128:ILE:O	1:A:129:ASN:CB	0.53	2.57	1	12
1:A:117:ALA:HB2	1:A:156:ASN:HB2	0.53	1.80	2	4
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:CD1	0.53	2.57	2	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CD2	0.53	2.57	16	4
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:CD1	0.53	2.57	4	2
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:HD12	0.53	2.03	6	2
1:A:176:THR:CG2	1:A:315:GLN:O	0.53	2.57	7	6
1:A:191:ILE:O	1:A:195:PHE:CB	0.53	2.57	16	5
1:A:312:LYS:CG	1:A:312:LYS:O	0.53	2.56	1	5
1:A:139:ASN:OD1	1:A:140:ASN:N	0.53	2.42	4	4
1:A:151:LEU:HD21	1:A:194:CYS:HB2	0.53	1.81	2	1
1:A:262:SER:CB	1:A:267:GLU:O	0.53	2.57	3	3
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CG	0.53	2.57	4	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:280:VAL:CG2	0.53	2.57	4	2
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:CD1	0.53	2.57	8	3
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CE2	0.53	2.97	5	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:288:SER:O	0.53	2.56	19	3
1:A:280:VAL:CG1	1:A:284:THR:HG21	0.53	2.29	12	2
1:A:117:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE1	0.53	2.92	20	2
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:HG22	0.53	2.02	20	2
1:A:141:LEU:CD2	1:A:202:LEU:HD22	0.53	2.34	19	2
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:CG2	0.53	2.57	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:ILE:O	1:A:183:VAL:CG1	0.53	2.57	12	14
1:A:142:PHE:CD1	1:A:142:PHE:C	0.53	2.82	17	11
1:A:245:VAL:CG1	1:A:287:GLN:O	0.53	2.57	2	1
1:A:134:ILE:CD1	1:A:167:ALA:O	0.53	2.57	6	9
1:A:172:GLY:HA2	1:A:271:GLN:N	0.53	2.18	9	3
1:A:121:ILE:HD11	1:A:142:PHE:CB	0.53	2.34	16	5
1:A:205:SER:O	1:A:207:ASP:N	0.53	2.42	15	2
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:HD23	0.53	2.04	8	1
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG13	0.53	1.79	10	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:CZ	0.53	2.57	10	1
1:A:224:LEU:CD1	1:A:269:ARG:CG	0.53	2.87	17	2
1:A:227:GLN:O	1:A:231:ALA:CB	0.53	2.57	17	1
1:A:144:GLN:CD	1:A:145:VAL:HG13	0.52	2.25	4	1
1:A:185:ARG:CG	1:A:185:ARG:O	0.52	2.57	5	2
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:HG11	0.52	1.79	11	1
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:CD2	0.52	2.57	11	1
1:A:260:MET:CE	1:A:260:MET:O	0.52	2.57	13	2
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CD	0.52	2.57	14	1
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:CG	0.52	2.57	4	3
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:HB3	0.52	2.35	15	16
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:CB	0.52	2.87	2	1
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:CD1	0.52	2.57	2	4
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HD13	0.52	2.19	5	2
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:CG	0.52	2.57	17	5
1:A:254:ALA:O	1:A:258:ILE:CD1	0.52	2.57	16	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:315:GLN:HG3	0.52	2.39	17	1
1:A:232:ALA:CB	1:A:257:ALA:O	0.52	2.57	1	5
1:A:289:TYR:CG	1:A:316:LEU:HA	0.52	2.40	6	4
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CB	0.52	2.57	1	4
1:A:157:ASP:OD1	1:A:186:ILE:CG2	0.52	2.58	2	1
1:A:247:GLY:O	1:A:249:SER:N	0.52	2.42	20	3
1:A:124:MET:HE1	1:A:164:LEU:HD12	0.52	1.81	4	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:163:CYS:HB3	0.52	1.81	4	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:286:ARG:CZ	0.52	2.57	8	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:HB2	0.52	2.39	20	2
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:CG1	0.52	2.57	16	4
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HD21	0.52	2.33	10	1
1:A:242:LEU:N	1:A:242:LEU:HD22	0.52	2.20	11	1
1:A:260:MET:CB	1:A:316:LEU:O	0.52	2.57	11	1
1:A:221:ASN:CB	1:A:277:ILE:CD1	0.52	2.88	16	1
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:CD2	0.52	2.57	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:195:PHE:CZ	1:A:199:LEU:HG	0.52	2.40	18	10
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:HB2	0.52	2.34	9	7
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:CA	0.52	2.97	5	1
1:A:278:ALA:CB	1:A:280:VAL:HG22	0.52	2.35	6	1
1:A:313:LEU:CA	1:A:315:GLN:OE1	0.52	2.57	15	1
1:A:128:ILE:O	1:A:130:LEU:CD2	0.52	2.57	16	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:316:LEU:HD12	0.52	1.80	17	1
1:A:247:GLY:CA	1:A:284:THR:OG1	0.52	2.57	20	1
1:A:128:ILE:O	1:A:128:ILE:CG2	0.52	2.57	18	10
1:A:157:ASP:CB	1:A:186:ILE:HG21	0.52	2.34	8	6
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:CB	0.52	2.57	11	13
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:CD1	0.52	2.57	14	2
1:A:113:ALA:CB	1:A:146:TYR:OH	0.52	2.57	4	3
1:A:174:PRO:O	1:A:176:THR:N	0.52	2.43	19	6
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.43	20	3
1:A:263:GLN:CG	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.81	20	1
1:A:270:THR:OG1	1:A:273:GLU:CG	0.52	2.57	20	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:OXT	0.52	2.43	1	1
1:A:271:GLN:HA	1:A:274:ILE:HG22	0.52	1.80	1	11
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:CG	0.52	2.57	2	2
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CG	0.52	2.35	2	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CG2	0.52	2.57	3	5
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:CG	0.52	2.57	3	2
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:O	0.52	2.57	5	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CG	0.52	2.40	16	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:CD1	0.52	2.35	17	1
1:A:222:LEU:HD23	1:A:222:LEU:C	0.52	2.25	18	1
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:CD2	0.52	2.57	1	4
1:A:209:ILE:O	1:A:211:THR:N	0.52	2.43	17	8
1:A:242:LEU:O	1:A:243:ASP:CB	0.52	2.57	12	7
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:CD1	0.52	2.58	3	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:145:VAL:CG1	0.52	2.57	4	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:HD13	0.52	1.81	7	10
1:A:168:CYS:CB	1:A:173:VAL:HG13	0.52	2.35	10	3
1:A:289:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD12	0.52	2.40	20	3
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:HG12	0.52	1.82	11	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:316:LEU:HA	0.52	2.40	13	1
1:A:177:PHE:CB	1:A:315:GLN:OE1	0.52	2.57	14	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:179:GLU:HG3	0.52	2.35	15	1
1:A:124:MET:CE	1:A:184:SER:OG	0.52	2.58	17	1
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:N	0.52	2.43	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:ILE:CB	1:A:279:GLY:O	0.52	2.58	11	6
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:ND1	0.52	2.43	5	7
1:A:303:ASP:O	1:A:305:LYS:N	0.52	2.43	1	3
1:A:135:VAL:O	1:A:139:ASN:ND2	0.52	2.43	2	3
1:A:218:PHE:CD1	1:A:219:CYS:N	0.52	2.77	19	7
1:A:228:VAL:CG2	1:A:267:GLU:HB2	0.52	2.35	11	5
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CB	0.52	2.57	14	6
1:A:141:LEU:CB	1:A:163:CYS:SG	0.52	2.98	11	7
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:HB3	0.52	2.40	8	5
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:HG13	0.52	2.45	9	1
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.87	10	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:139:ASN:OD1	0.52	2.57	12	1
1:A:260:MET:CG	1:A:289:TYR:CE2	0.52	2.92	15	2
1:A:224:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HD3	0.52	1.82	19	1
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:CD1	0.52	2.35	16	8
1:A:203:GLU:OE1	1:A:286:ARG:NH1	0.52	2.43	8	1
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:NH2	0.52	2.43	13	2
1:A:260:MET:HE3	1:A:313:LEU:CD1	0.52	2.35	13	1
1:A:269:ARG:NH2	1:A:273:GLU:O	0.52	2.43	13	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:HG21	0.52	1.80	20	1
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:CD1	0.52	2.97	4	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:172:GLY:O	0.52	2.57	4	1
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:CD	0.52	2.58	4	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:O	0.52	2.56	8	2
1:A:306:PHE:O	1:A:306:PHE:CD1	0.52	2.63	15	1
1:A:188:LYS:NZ	1:A:191:ILE:HD12	0.52	2.20	19	1
1:A:240:VAL:HG22	1:A:253:VAL:HG21	0.51	1.82	1	1
1:A:194:CYS:O	1:A:198:ILE:CD1	0.51	2.57	5	7
1:A:293:TYR:CD2	1:A:315:GLN:HA	0.51	2.40	2	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:302:THR:HB	0.51	2.41	6	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:194:CYS:SG	0.51	2.98	16	4
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:HB2	0.51	2.35	8	4
1:A:207:ASP:C	1:A:208:LEU:HD22	0.51	2.26	11	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:CZ	0.51	2.36	11	1
1:A:264:ALA:O	1:A:304:PHE:CE1	0.51	2.63	12	1
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CZ	0.51	2.63	14	1
1:A:260:MET:SD	1:A:260:MET:N	0.51	2.83	16	1
1:A:257:ALA:O	1:A:261:ALA:CB	0.51	2.57	17	1
1:A:128:ILE:O	1:A:128:ILE:HG22	0.51	2.05	1	4
1:A:194:CYS:HA	1:A:197:LEU:HD12	0.51	1.80	1	2
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:NH1	0.51	2.43	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:LEU:CD1	1:A:225:PRO:O	0.51	2.57	3	2
1:A:150:SER:CB	1:A:197:LEU:HD22	0.51	2.35	6	2
1:A:114:MET:HG3	1:A:146:TYR:CE2	0.51	2.40	14	3
1:A:260:MET:HG3	1:A:289:TYR:CE2	0.51	2.40	15	1
1:A:297:PRO:O	1:A:299:LEU:CD2	0.51	2.54	15	1
1:A:280:VAL:O	1:A:281:ALA:CB	0.51	2.56	18	2
1:A:230:MET:O	1:A:234:HIS:CG	0.51	2.63	12	2
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:CG2	0.51	2.56	5	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:CB	0.51	2.57	10	1
1:A:210:THR:CB	1:A:249:SER:OG	0.51	2.57	3	1
1:A:219:CYS:O	1:A:269:ARG:CZ	0.51	2.59	5	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.21	14	2
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:CB	0.51	2.58	15	1
1:A:129:ASN:C	1:A:130:LEU:HD22	0.51	2.26	16	2
1:A:206:VAL:HG11	1:A:281:ALA:HA	0.51	1.82	20	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:200:LYS:HE2	0.51	1.82	1	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG21	0.51	2.40	1	2
1:A:156:ASN:OD1	1:A:157:ASP:N	0.51	2.43	6	2
1:A:130:LEU:CD1	1:A:168:CYS:SG	0.51	2.98	8	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:246:PRO:CD	0.51	2.36	12	1
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:CG	0.51	2.58	16	3
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:CG1	0.51	2.88	19	1
1:A:168:CYS:SG	1:A:169:ARG:N	0.51	2.83	4	5
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:C	0.51	2.26	2	1
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:HB3	0.51	2.41	17	5
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:CG1	0.51	2.59	2	2
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HD22	0.51	2.35	16	1
1:A:161:SER:OG	1:A:191:ILE:CD1	0.51	2.57	17	1
1:A:289:TYR:OH	1:A:299:LEU:HD23	0.51	2.05	20	1
1:A:186:ILE:C	1:A:186:ILE:CD1	0.51	2.79	9	17
1:A:155:ALA:CB	1:A:190:GLU:OE1	0.51	2.58	9	2
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:CD1	0.51	2.86	7	1
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:CB	0.51	2.57	15	3
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:N	0.51	2.43	19	1
1:A:245:VAL:HG23	1:A:288:SER:C	0.51	2.26	20	1
1:A:186:ILE:HD13	1:A:187:SER:N	0.51	2.21	6	5
1:A:195:PHE:CE1	1:A:199:LEU:HG	0.51	2.41	8	4
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HD11	0.51	2.31	13	1
1:A:162:ALA:HB3	1:A:198:ILE:CD1	0.51	2.36	18	1
1:A:271:GLN:CA	1:A:274:ILE:HG22	0.51	2.36	9	5
1:A:265:SER:HB2	1:A:304:PHE:CZ	0.51	2.41	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:284:THR:HG23	1:A:285:ILE:N	0.51	2.20	6	2
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CG	0.51	2.59	13	1
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:CG2	0.51	2.92	14	1
1:A:235:ILE:CG1	1:A:300:PHE:CD2	0.51	2.94	19	1
1:A:202:LEU:CG	1:A:202:LEU:O	0.51	2.58	11	2
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:VAL:CG1	0.51	2.59	1	1
1:A:213:ASP:HB2	1:A:280:VAL:CG2	0.51	2.35	16	10
1:A:222:LEU:HD22	1:A:273:GLU:HB2	0.51	1.81	1	1
1:A:293:TYR:HB2	1:A:296:ALA:O	0.51	2.06	8	14
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:HB3	0.51	2.36	2	1
1:A:293:TYR:CE1	1:A:296:ALA:N	0.51	2.79	2	1
1:A:134:ILE:CG2	1:A:168:CYS:SG	0.51	2.98	14	5
1:A:124:MET:CE	1:A:164:LEU:HD12	0.51	2.35	4	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HD13	0.51	1.82	5	1
1:A:260:MET:O	1:A:260:MET:CE	0.51	2.57	12	1
1:A:212:GLY:O	1:A:218:PHE:CZ	0.51	2.64	20	2
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:HG2	0.50	2.41	1	7
1:A:206:VAL:HG12	1:A:206:VAL:O	0.50	2.06	6	2
1:A:193:ARG:O	1:A:196:LYS:CG	0.50	2.59	5	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:HB2	0.50	2.36	12	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:CD1	0.50	2.89	13	1
1:A:297:PRO:O	1:A:300:PHE:CE1	0.50	2.64	14	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:CG2	0.50	2.36	20	1
1:A:142:PHE:CE1	1:A:146:TYR:HB2	0.50	2.41	2	5
1:A:252:SER:HA	1:A:284:THR:CG2	0.50	2.37	2	14
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CE2	0.50	2.64	3	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:C	0.50	2.80	6	6
1:A:300:PHE:CD2	1:A:306:PHE:CE2	0.50	2.99	4	1
1:A:316:LEU:CD1	1:A:316:LEU:OXT	0.50	2.57	4	1
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CD2	0.50	2.41	6	5
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:CB	0.50	2.89	12	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:CD1	0.50	2.89	15	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:292:ILE:HG21	0.50	2.41	19	1
1:A:238:LYS:CG	1:A:299:LEU:O	0.50	2.59	20	1
1:A:157:ASP:N	1:A:157:ASP:OD1	0.50	2.43	1	1
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:HG	0.50	2.42	2	7
1:A:272:LYS:CG	1:A:273:GLU:N	0.50	2.73	5	1
1:A:169:ARG:NE	1:A:170:GLN:CG	0.50	2.74	6	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:304:PHE:CD2	0.50	2.99	6	2
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:HB3	0.50	2.41	18	2
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HD12	0.50	2.35	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:256:ALA:HB3	1:A:288:SER:OG	0.50	2.06	2	5
1:A:293:TYR:CE1	1:A:314:PRO:HB2	0.50	2.41	4	1
1:A:211:THR:HG23	1:A:212:GLY:N	0.50	2.21	12	2
1:A:265:SER:OG	1:A:304:PHE:CE1	0.50	2.61	15	4
1:A:271:GLN:HE22	1:A:285:ILE:HD12	0.50	1.65	8	1
1:A:293:TYR:C	1:A:293:TYR:CD1	0.50	2.85	8	3
1:A:171:GLU:HB3	1:A:272:LYS:CG	0.50	2.37	15	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:CG1	0.50	2.36	15	2
1:A:168:CYS:C	1:A:173:VAL:CG2	0.50	2.79	16	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CD1	0.50	2.41	16	1
1:A:267:GLU:OE1	1:A:269:ARG:NH1	0.50	2.45	20	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:166:ILE:N	0.50	2.20	12	3
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:CD2	0.50	2.59	6	1
1:A:252:SER:CB	1:A:284:THR:HB	0.50	2.37	6	2
1:A:259:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD21	0.50	2.41	6	1
1:A:193:ARG:HG3	1:A:194:CYS:N	0.50	2.22	17	3
1:A:260:MET:HG3	1:A:289:TYR:CZ	0.50	2.42	8	2
1:A:283:VAL:CG2	1:A:287:GLN:OE1	0.50	2.60	10	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:251:ILE:CG2	0.50	2.57	15	1
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CE2	0.50	2.42	19	1
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:HG22	0.50	2.07	1	2
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HB2	0.50	2.07	7	16
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CG1	0.50	2.36	3	7
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HD12	0.50	1.83	4	1
1:A:259:TYR:CB	1:A:316:LEU:HD11	0.50	2.36	4	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:314:PRO:HB2	0.50	2.42	4	1
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:CD2	0.50	2.41	10	1
1:A:269:ARG:HD3	1:A:274:ILE:HD12	0.50	1.82	13	1
1:A:173:VAL:N	1:A:270:THR:HG22	0.50	2.21	16	1
1:A:259:TYR:CG	1:A:274:ILE:HG12	0.50	2.42	19	6
1:A:259:TYR:CD1	1:A:274:ILE:HG12	0.50	2.42	7	3
1:A:151:LEU:CD1	1:A:159:ILE:HG12	0.50	2.37	11	4
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:HD11	0.50	1.83	6	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:166:ILE:HG21	0.50	1.84	7	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:282:ASP:OD2	0.50	2.45	7	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:263:GLN:OE1	0.50	2.59	7	2
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG22	0.50	2.46	10	1
1:A:293:TYR:CD1	1:A:315:GLN:HB2	0.50	2.42	17	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:ARG:CB	0.50	2.60	18	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:292:ILE:CG2	0.50	2.95	19	1
1:A:137:ARG:HB3	1:A:167:ALA:CB	0.50	2.37	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:HD12	0.50	2.06	2	2
1:A:232:ALA:HA	1:A:261:ALA:HB2	0.50	1.82	8	5
1:A:151:LEU:C	1:A:152:LYS:CD	0.50	2.81	2	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:316:LEU:OXT	0.50	2.06	2	2
1:A:204:THR:CG2	1:A:206:VAL:CG2	0.50	2.90	3	1
1:A:150:SER:HB3	1:A:197:LEU:HD22	0.50	1.82	6	3
1:A:161:SER:HB3	1:A:191:ILE:HD13	0.50	1.83	10	2
1:A:260:MET:C	1:A:260:MET:CE	0.50	2.80	12	1
1:A:129:ASN:OD1	1:A:129:ASN:N	0.50	2.45	17	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CB	0.50	2.60	6	3
1:A:256:ALA:CB	1:A:288:SER:HB3	0.50	2.37	5	10
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CZ	0.50	2.42	1	4
1:A:199:LEU:N	1:A:199:LEU:CD2	0.50	2.66	16	5
1:A:271:GLN:NE2	1:A:282:ASP:OD1	0.50	2.45	6	1
1:A:297:PRO:CG	1:A:313:LEU:HD23	0.50	2.37	6	1
1:A:300:PHE:N	1:A:301:PRO:HD3	0.50	2.22	6	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:271:GLN:NE2	0.50	2.59	12	1
1:A:296:ALA:HB1	1:A:312:LYS:HB3	0.50	1.83	15	1
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:CG	0.50	2.60	17	1
1:A:124:MET:HB3	1:A:164:LEU:HD13	0.49	1.84	1	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:OG1	0.49	2.30	10	7
1:A:298:ASP:O	1:A:299:LEU:C	0.49	2.51	10	8
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:CG	0.49	2.37	3	1
1:A:177:PHE:CE1	1:A:181:CYS:HB2	0.49	2.42	10	6
1:A:213:ASP:HB3	1:A:280:VAL:CG2	0.49	2.37	15	2
1:A:177:PHE:CD2	1:A:180:ILE:HD11	0.49	2.41	2	2
1:A:219:CYS:HA	1:A:277:ILE:HG22	0.49	1.84	3	2
1:A:221:ASN:OD1	1:A:277:ILE:CD1	0.49	2.60	3	1
1:A:293:TYR:CE1	1:A:295:ARG:C	0.49	2.86	17	3
1:A:256:ALA:HB1	1:A:288:SER:CB	0.49	2.37	11	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:CE	0.49	2.60	19	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:HG21	0.49	2.42	19	1
1:A:274:ILE:O	1:A:278:ALA:HB2	0.49	2.06	20	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HB2	0.49	2.07	13	18
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CB	0.49	2.37	16	4
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:HB2	0.49	2.42	4	3
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:CG2	0.49	2.57	5	5
1:A:260:MET:CE	1:A:264:ALA:HB2	0.49	2.38	13	2
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:CG	0.49	2.59	19	2
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HB3	0.49	2.38	16	5
1:A:275:GLY:HA3	1:A:285:ILE:CD1	0.49	2.36	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:CG1	0.49	2.37	11	1
1:A:206:VAL:CG2	1:A:282:ASP:OD1	0.49	2.60	14	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:304:PHE:HB2	0.49	2.43	14	1
1:A:235:ILE:HD12	1:A:257:ALA:O	0.49	2.07	15	1
1:A:297:PRO:HG3	1:A:313:LEU:CB	0.49	2.37	16	3
1:A:260:MET:HE3	1:A:264:ALA:HB2	0.49	1.84	13	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:HB	0.49	2.08	18	1
1:A:148:GLN:OE1	1:A:148:GLN:CA	0.49	2.59	3	1
1:A:166:ILE:CG1	1:A:199:LEU:HD21	0.49	2.37	4	3
1:A:300:PHE:CE2	1:A:306:PHE:CE1	0.49	3.01	5	1
1:A:213:ASP:CG	1:A:280:VAL:CG2	0.49	2.81	8	7
1:A:114:MET:HG3	1:A:146:TYR:CD2	0.49	2.43	9	3
1:A:244:LEU:HD11	1:A:292:ILE:CA	0.49	2.37	9	3
1:A:228:VAL:CG2	1:A:265:SER:HB3	0.49	2.37	10	4
1:A:245:VAL:CB	1:A:246:PRO:CD	0.49	2.91	12	1
1:A:208:LEU:HD12	1:A:208:LEU:O	0.49	2.08	19	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:158:ALA:CB	0.49	2.37	20	5
1:A:263:GLN:HE21	1:A:313:LEU:HD21	0.49	1.66	1	1
1:A:191:ILE:HA	1:A:194:CYS:HG	0.49	1.66	13	7
1:A:293:TYR:CE2	1:A:315:GLN:N	0.49	2.80	2	2
1:A:284:THR:CG2	1:A:285:ILE:N	0.49	2.76	6	2
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:HB2	0.49	1.83	14	2
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:CA	0.49	2.58	10	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:CE	0.49	2.37	11	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CD2	0.49	2.42	20	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:292:ILE:HD12	0.49	1.85	6	1
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:CD	0.49	2.81	2	1
1:A:260:MET:CE	1:A:297:PRO:HB3	0.49	2.38	8	5
1:A:214:PHE:CE2	1:A:251:ILE:CG1	0.49	2.96	3	1
1:A:265:SER:HB2	1:A:304:PHE:CE1	0.49	2.43	3	4
1:A:158:ALA:CA	1:A:191:ILE:HG12	0.49	2.38	5	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:289:TYR:HH	0.49	1.67	8	2
1:A:118:PHE:O	1:A:122:THR:HG23	0.49	2.08	6	1
1:A:240:VAL:HG13	1:A:241:GLU:N	0.49	2.23	11	2
1:A:114:MET:N	1:A:146:TYR:OH	0.49	2.45	14	1
1:A:238:LYS:CD	1:A:299:LEU:O	0.49	2.60	20	2
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:CG2	0.49	2.34	17	1
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG21	0.49	2.48	17	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:163:CYS:HB3	0.49	1.84	4	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:159:ILE:CD1	0.49	2.38	6	1
1:A:213:ASP:HB3	1:A:251:ILE:CG2	0.49	2.38	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:LYS:C	1:A:314:PRO:CD	0.49	2.81	11	2
1:A:223:CYS:CB	1:A:269:ARG:NH1	0.49	2.75	16	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CD2	0.49	2.42	17	1
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:SD	0.49	2.98	18	1
1:A:275:GLY:HA2	1:A:285:ILE:CD1	0.49	2.38	19	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:203:GLU:O	0.49	2.45	20	1
1:A:128:ILE:HD11	1:A:180:ILE:HA	0.49	1.83	1	1
1:A:165:TYR:CZ	1:A:177:PHE:HB2	0.49	2.43	11	3
1:A:301:PRO:O	1:A:302:THR:OG1	0.49	2.30	1	7
1:A:179:GLU:OE1	1:A:179:GLU:CA	0.49	2.61	2	2
1:A:142:PHE:CD1	1:A:160:ALA:HB2	0.49	2.43	4	1
1:A:204:THR:HG23	1:A:205:SER:N	0.49	2.22	6	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:HA	0.49	2.38	6	1
1:A:306:PHE:CE2	1:A:311:ASP:HA	0.49	2.43	7	4
1:A:218:PHE:HD1	1:A:277:ILE:HG22	0.49	1.59	12	1
1:A:310:VAL:HG21	1:A:313:LEU:HD11	0.49	1.84	12	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:C	0.48	2.67	1	1
1:A:265:SER:O	1:A:267:GLU:N	0.48	2.46	19	10
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HB2	0.48	2.08	3	8
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CD1	0.48	2.43	2	7
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:H	0.48	1.64	6	5
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:HG21	0.48	1.82	17	2
1:A:124:MET:CE	1:A:164:LEU:CD1	0.48	2.91	4	1
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:CB	0.48	2.38	16	4
1:A:157:ASP:HB3	1:A:186:ILE:CD1	0.48	2.37	5	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:CB	0.48	2.38	11	2
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:161:SER:HB2	1:A:191:ILE:HD13	0.48	1.85	8	2
1:A:124:MET:HE1	1:A:157:ASP:OD1	0.48	2.08	10	1
1:A:260:MET:CE	1:A:313:LEU:HD12	0.48	2.38	18	1
1:A:199:LEU:O	1:A:203:GLU:N	0.48	2.45	19	1
1:A:297:PRO:HD3	1:A:313:LEU:N	0.48	2.23	2	7
1:A:171:GLU:CA	1:A:272:LYS:HB2	0.48	2.38	3	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:O	0.48	2.60	6	1
1:A:199:LEU:CD2	1:A:199:LEU:N	0.48	2.74	11	1
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:CE1	0.48	2.43	14	1
1:A:293:TYR:CE2	1:A:314:PRO:HG2	0.48	2.43	15	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:131:PRO:HD2	0.48	2.38	17	2
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:HG2	0.48	2.08	19	1
1:A:210:THR:CA	1:A:280:VAL:HG13	0.48	2.33	1	2
1:A:158:ALA:HB1	1:A:191:ILE:CG1	0.48	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:297:PRO:HD3	1:A:313:LEU:O	0.48	2.08	6	1
1:A:240:VAL:CG1	1:A:241:GLU:N	0.48	2.76	11	2
1:A:234:HIS:C	1:A:234:HIS:CD2	0.48	2.86	14	1
1:A:244:LEU:HB2	1:A:292:ILE:CD1	0.48	2.38	15	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:228:VAL:CG2	0.48	2.36	17	1
1:A:248:ARG:CG	1:A:283:VAL:HG13	0.48	2.38	17	1
1:A:170:GLN:C	1:A:171:GLU:CG	0.48	2.81	15	5
1:A:262:SER:HB3	1:A:274:ILE:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:263:GLN:HE21	1:A:313:LEU:HD11	0.48	1.69	9	1
1:A:293:TYR:N	1:A:294:PRO:HD3	0.48	2.22	12	1
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:HG2	0.48	1.85	18	1
1:A:228:VAL:CG2	1:A:265:SER:OG	0.48	2.61	1	2
1:A:143:LYS:C	1:A:143:LYS:CD	0.48	2.82	2	1
1:A:259:TYR:CZ	1:A:271:GLN:HG2	0.48	2.43	7	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:HB	0.48	1.86	5	1
1:A:224:LEU:CG	1:A:225:PRO:HD2	0.48	2.38	17	1
1:A:245:VAL:N	1:A:246:PRO:HD3	0.48	2.24	4	5
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CD1	0.48	2.43	11	2
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:CG2	0.48	2.61	20	5
1:A:299:LEU:O	1:A:300:PHE:C	0.48	2.52	16	4
1:A:114:MET:SD	1:A:146:TYR:CD2	0.48	3.07	6	2
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:N	0.48	2.81	6	2
1:A:289:TYR:CE2	1:A:316:LEU:C	0.48	2.87	6	1
1:A:294:PRO:O	1:A:295:ARG:HB2	0.48	2.09	10	5
1:A:310:VAL:CG2	1:A:311:ASP:N	0.48	2.76	20	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:235:ILE:CG1	0.48	2.97	10	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:292:ILE:HG13	0.48	1.85	15	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:295:ARG:C	0.48	2.87	17	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:SER:O	0.48	2.32	13	19
1:A:137:ARG:CB	1:A:167:ALA:CB	0.48	2.92	3	4
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:CD2	0.48	2.91	14	2
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:CB	0.48	2.61	5	2
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:C	0.48	2.52	9	3
1:A:216:SER:O	1:A:229:GLN:NE2	0.48	2.47	18	1
1:A:289:TYR:HH	1:A:299:LEU:HD23	0.48	1.69	20	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:131:PRO:HD2	0.48	2.38	1	1
1:A:273:GLU:OE1	1:A:273:GLU:N	0.48	2.46	1	1
1:A:232:ALA:CA	1:A:261:ALA:HB2	0.48	2.39	6	5
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:HB1	0.48	2.38	4	4
1:A:272:LYS:HG3	1:A:273:GLU:N	0.48	2.23	12	2
1:A:258:ILE:HG22	1:A:269:ARG:HH11	0.48	1.69	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:LEU:HD12	1:A:291:LEU:O	0.48	2.08	11	2
1:A:310:VAL:O	1:A:312:LYS:N	0.48	2.46	13	14
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HB2	0.48	2.39	8	6
1:A:222:LEU:HD13	1:A:269:ARG:HG3	0.48	1.86	7	1
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:OG	0.48	2.32	14	4
1:A:310:VAL:CG2	1:A:313:LEU:HG	0.48	2.39	12	3
1:A:308:THR:HG22	1:A:310:VAL:CG2	0.48	2.39	9	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HG3	0.48	2.39	15	1
1:A:173:VAL:HG21	1:A:179:GLU:HG3	0.48	1.84	15	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:CG1	0.48	2.39	16	1
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:CD	0.48	2.62	17	1
1:A:224:LEU:C	1:A:224:LEU:CD1	0.48	2.82	3	3
1:A:291:LEU:CD2	1:A:291:LEU:N	0.48	2.76	3	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CG2	0.48	2.39	7	2
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HA	0.48	2.39	10	2
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:HG13	0.48	2.39	15	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:313:LEU:CD1	0.48	2.39	18	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HB3	0.47	1.86	2	1
1:A:137:ARG:HB2	1:A:167:ALA:HB1	0.47	1.86	19	2
1:A:225:PRO:CG	1:A:267:GLU:HG2	0.47	2.40	11	3
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:CG2	0.47	2.37	11	2
1:A:173:VAL:HG23	1:A:259:TYR:HH	0.47	1.68	9	1
1:A:213:ASP:CG	1:A:255:ALA:HB2	0.47	2.28	10	2
1:A:218:PHE:HB2	1:A:221:ASN:ND2	0.47	2.24	14	1
1:A:285:ILE:O	1:A:316:LEU:HD11	0.47	2.09	14	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD13	0.47	2.38	20	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:159:ILE:CD1	0.47	2.39	1	3
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HB2	0.47	2.09	1	8
1:A:245:VAL:HG12	1:A:291:LEU:HD21	0.47	1.85	2	1
1:A:244:LEU:O	1:A:291:LEU:O	0.47	2.32	6	5
1:A:204:THR:HG21	1:A:282:ASP:OD2	0.47	2.09	5	1
1:A:206:VAL:O	1:A:208:LEU:HD23	0.47	2.09	19	2
1:A:244:LEU:CD1	1:A:292:ILE:HA	0.47	2.39	12	2
1:A:269:ARG:NH1	1:A:274:ILE:HD12	0.47	2.24	10	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CD1	0.47	2.44	12	1
1:A:260:MET:CE	1:A:316:LEU:CD1	0.47	2.92	17	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:316:LEU:O	0.47	2.48	1	1
1:A:265:SER:HB3	1:A:304:PHE:CZ	0.47	2.45	5	2
1:A:305:LYS:O	1:A:306:PHE:HB2	0.47	2.09	11	11
1:A:256:ALA:O	1:A:316:LEU:CD1	0.47	2.60	2	2
1:A:269:ARG:NH1	1:A:273:GLU:O	0.47	2.48	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:HA	0.47	2.09	13	2
1:A:293:TYR:CE1	1:A:313:LEU:O	0.47	2.67	12	1
1:A:253:VAL:N	1:A:288:SER:OG	0.47	2.47	14	1
1:A:313:LEU:O	1:A:315:GLN:OE1	0.47	2.31	17	1
1:A:262:SER:O	1:A:267:GLU:O	0.47	2.32	1	7
1:A:296:ALA:HB2	1:A:312:LYS:HD3	0.47	1.86	3	1
1:A:292:ILE:O	1:A:299:LEU:HD11	0.47	2.10	9	1
1:A:248:ARG:CG	1:A:252:SER:HB3	0.47	2.39	10	1
1:A:209:ILE:HD12	1:A:280:VAL:O	0.47	2.10	17	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:OE1	0.47	2.33	16	7
1:A:181:CYS:O	1:A:184:SER:O	0.47	2.33	18	17
1:A:209:ILE:O	1:A:211:THR:OG1	0.47	2.33	1	3
1:A:222:LEU:HD21	1:A:269:ARG:HH11	0.47	1.69	2	1
1:A:142:PHE:CD2	1:A:159:ILE:CG2	0.47	2.97	3	1
1:A:234:HIS:ND1	1:A:303:ASP:HB3	0.47	2.25	5	1
1:A:210:THR:HG22	1:A:252:SER:OG	0.47	2.09	6	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:278:ALA:O	0.47	2.62	6	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:315:GLN:O	0.47	2.33	6	1
1:A:260:MET:HB3	1:A:289:TYR:CE2	0.47	2.44	10	1
1:A:275:GLY:CA	1:A:285:ILE:HD11	0.47	2.40	14	1
1:A:173:VAL:O	1:A:259:TYR:OH	0.47	2.32	10	10
1:A:208:LEU:C	1:A:209:ILE:CD1	0.47	2.81	15	3
1:A:264:ALA:HB3	1:A:300:PHE:CE2	0.47	2.45	5	1
1:A:271:GLN:CA	1:A:274:ILE:CG2	0.47	2.92	9	3
1:A:298:ASP:O	1:A:300:PHE:N	0.47	2.48	16	3
1:A:300:PHE:CE1	1:A:304:PHE:CB	0.47	2.97	18	1
1:A:121:ILE:HG23	1:A:138:THR:CB	0.47	2.39	1	1
1:A:203:GLU:HG2	1:A:204:THR:N	0.47	2.25	1	1
1:A:225:PRO:CG	1:A:267:GLU:HG3	0.47	2.40	8	8
1:A:265:SER:O	1:A:266:ALA:C	0.47	2.53	17	15
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:HD23	0.47	2.09	6	2
1:A:136:ASP:O	1:A:139:ASN:OD1	0.47	2.33	17	4
1:A:292:ILE:HG23	1:A:299:LEU:CD2	0.47	2.40	2	2
1:A:245:VAL:CG2	1:A:246:PRO:HD2	0.47	2.40	3	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:293:TYR:CE2	0.47	3.03	3	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:O	0.47	2.33	16	3
1:A:174:PRO:CB	1:A:268:LYS:HB2	0.47	2.40	6	3
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:CD	0.47	2.92	7	1
1:A:316:LEU:O	1:A:316:LEU:HD23	0.47	2.10	7	1
1:A:195:PHE:CE2	1:A:199:LEU:CD2	0.47	2.94	15	3
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:CG1	0.47	2.98	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:232:ALA:HB1	1:A:258:ILE:HA	0.47	1.86	20	3
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:ILE:HG13	0.47	1.86	16	1
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:HB3	0.47	2.09	16	1
1:A:222:LEU:HD12	1:A:273:GLU:CG	0.47	2.40	18	1
1:A:175:ARG:O	1:A:316:LEU:CD2	0.47	2.62	19	1
1:A:177:PHE:CE2	1:A:181:CYS:HB2	0.47	2.44	19	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HB2	0.47	2.10	5	5
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:HB3	0.47	2.10	10	13
1:A:248:ARG:O	1:A:249:SER:O	0.47	2.33	2	3
1:A:222:LEU:CD2	1:A:277:ILE:HD12	0.47	2.39	3	1
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:CD2	0.47	2.39	9	4
1:A:114:MET:HB2	1:A:146:TYR:CE2	0.47	2.44	11	8
1:A:209:ILE:CG1	1:A:279:GLY:O	0.47	2.63	7	1
1:A:166:ILE:HG21	1:A:202:LEU:CD1	0.47	2.40	19	2
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:CD	0.47	2.88	9	1
1:A:262:SER:HB2	1:A:274:ILE:CD1	0.47	2.40	9	1
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:CB	0.47	2.62	18	3
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:HD3	0.47	2.40	10	1
1:A:122:THR:HA	1:A:135:VAL:HG13	0.47	1.86	11	1
1:A:293:TYR:CZ	1:A:296:ALA:HA	0.47	2.45	15	1
1:A:293:TYR:HB2	1:A:315:GLN:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HE3	0.47	2.40	2	1
1:A:302:THR:O	1:A:304:PHE:N	0.47	2.48	10	7
1:A:121:ILE:HG13	1:A:160:ALA:HB1	0.47	1.86	20	3
1:A:171:GLU:HA	1:A:272:LYS:CB	0.47	2.39	3	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:H	0.47	1.68	16	5
1:A:202:LEU:C	1:A:202:LEU:HD12	0.47	2.30	7	1
1:A:114:MET:HB3	1:A:146:TYR:CE2	0.47	2.45	8	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:291:LEU:HG	0.47	2.40	8	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:194:CYS:SG	0.47	3.01	12	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HD23	0.47	2.45	1	2
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:CE1	0.47	2.45	1	1
1:A:265:SER:HB3	1:A:304:PHE:CE1	0.47	2.45	5	2
1:A:212:GLY:O	1:A:278:ALA:O	0.47	2.34	17	4
1:A:124:MET:HA	1:A:183:VAL:CG2	0.47	2.39	4	4
1:A:165:TYR:CE2	1:A:177:PHE:HB2	0.47	2.45	5	4
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:CD1	0.47	2.63	6	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:CD2	0.47	2.83	11	1
1:A:222:LEU:HD23	1:A:222:LEU:H	0.47	1.63	13	1
1:A:114:MET:HA	1:A:146:TYR:CZ	0.47	2.45	14	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HG3	0.47	1.84	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:THR:HG23	1:A:163:CYS:HB2	0.47	1.86	16	2
1:A:292:ILE:O	1:A:293:TYR:C	0.47	2.52	17	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:159:ILE:HG12	0.47	1.87	18	1
1:A:173:VAL:CG1	1:A:180:ILE:HG22	0.47	2.18	19	1
1:A:249:SER:O	1:A:252:SER:OG	0.47	2.33	20	1
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:CD1	0.46	2.57	1	1
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:HG3	0.46	2.40	9	6
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:HD21	0.46	2.29	1	2
1:A:171:GLU:HG3	1:A:272:LYS:CE	0.46	2.39	2	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:269:ARG:HD3	0.46	1.87	2	1
1:A:239:ALA:HB2	1:A:299:LEU:CD2	0.46	2.35	17	2
1:A:287:GLN:O	1:A:287:GLN:OE1	0.46	2.33	3	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:261:ALA:CB	0.46	2.92	12	3
1:A:263:GLN:HE21	1:A:316:LEU:HD23	0.46	1.68	4	1
1:A:289:TYR:CD1	1:A:292:ILE:HG21	0.46	2.45	16	3
1:A:213:ASP:CB	1:A:251:ILE:HG22	0.46	2.40	14	2
1:A:293:TYR:CE2	1:A:296:ALA:HA	0.46	2.44	15	1
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:CG2	0.46	2.63	16	1
1:A:260:MET:HE1	1:A:316:LEU:CD1	0.46	2.40	17	1
1:A:262:SER:CA	1:A:267:GLU:O	0.46	2.63	18	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CD	0.46	2.63	2	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.34	5	3
1:A:293:TYR:O	1:A:293:TYR:CG	0.46	2.68	2	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CB	0.46	2.63	3	3
1:A:235:ILE:O	1:A:239:ALA:HB2	0.46	2.10	13	3
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:CD2	0.46	3.03	14	2
1:A:218:PHE:CE1	1:A:278:ALA:HA	0.46	2.44	12	1
1:A:297:PRO:O	1:A:314:PRO:HG3	0.46	2.11	15	1
1:A:231:ALA:CB	1:A:304:PHE:CD1	0.46	2.99	17	1
1:A:235:ILE:HG13	1:A:300:PHE:CD2	0.46	2.45	19	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:OG	0.46	2.32	19	1
1:A:247:GLY:O	1:A:252:SER:OG	0.46	2.33	3	2
1:A:265:SER:OG	1:A:265:SER:O	0.46	2.33	18	2
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:HB2	0.46	2.11	4	6
1:A:199:LEU:HD12	1:A:286:ARG:NH1	0.46	2.24	4	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:271:GLN:HA	0.46	2.45	4	1
1:A:299:LEU:HD13	1:A:299:LEU:H	0.46	1.68	4	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:O	0.46	2.32	11	5
1:A:284:THR:O	1:A:288:SER:N	0.46	2.49	6	2
1:A:219:CYS:O	1:A:273:GLU:O	0.46	2.33	11	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:272:LYS:CB	0.46	2.41	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:N	0.46	2.48	17	1
1:A:175:ARG:O	1:A:176:THR:HB	0.46	2.11	12	19
1:A:209:ILE:O	1:A:210:THR:C	0.46	2.53	17	10
1:A:174:PRO:HA	1:A:259:TYR:OH	0.46	2.10	18	2
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HB3	0.46	2.10	8	11
1:A:117:ALA:HB1	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.44	7	2
1:A:310:VAL:O	1:A:310:VAL:CG1	0.46	2.57	17	1
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:N	0.46	2.49	1	18
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HB2	0.46	2.41	15	7
1:A:173:VAL:O	1:A:271:GLN:OE1	0.46	2.33	2	2
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:HB2	0.46	1.88	4	1
1:A:260:MET:CB	1:A:289:TYR:CZ	0.46	2.98	11	1
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:SD	0.46	2.74	16	1
1:A:259:TYR:O	1:A:263:GLN:OE1	0.46	2.34	16	1
1:A:269:ARG:NE	1:A:269:ARG:HA	0.46	2.25	19	1
1:A:287:GLN:OE1	1:A:287:GLN:O	0.46	2.33	19	1
1:A:142:PHE:CD1	1:A:146:TYR:HB2	0.46	2.45	2	1
1:A:190:GLU:O	1:A:194:CYS:SG	0.46	2.74	2	15
1:A:171:GLU:HA	1:A:272:LYS:HB2	0.46	1.88	3	1
1:A:263:GLN:O	1:A:263:GLN:NE2	0.46	2.49	3	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:159:ILE:HD11	0.46	1.87	4	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:159:ILE:CD1	0.46	2.40	8	2
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:HG2	0.46	2.11	4	2
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:OG	0.46	2.10	12	1
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:HG3	0.46	2.11	15	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG2	0.46	2.26	18	1
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:CG	0.46	2.63	18	1
1:A:207:ASP:HA	1:A:281:ALA:CB	0.46	2.41	6	12
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:HB3	0.46	2.11	4	14
1:A:151:LEU:O	1:A:153:GLY:N	0.46	2.48	2	1
1:A:179:GLU:OE1	1:A:179:GLU:O	0.46	2.33	2	2
1:A:186:ILE:O	1:A:188:LYS:N	0.46	2.48	5	1
1:A:169:ARG:NE	1:A:170:GLN:HG2	0.46	2.26	6	1
1:A:235:ILE:HG21	1:A:260:MET:CG	0.46	2.41	6	1
1:A:271:GLN:O	1:A:271:GLN:NE2	0.46	2.48	8	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:NH2	0.46	2.49	10	1
1:A:269:ARG:HB3	1:A:274:ILE:CD1	0.46	2.41	12	1
1:A:223:CYS:O	1:A:267:GLU:OE2	0.46	2.34	16	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:NE	0.46	2.79	19	1
1:A:247:GLY:O	1:A:249:SER:O	0.46	2.34	20	1
1:A:164:LEU:O	1:A:168:CYS:SG	0.46	2.74	7	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:LEU:CD1	1:A:225:PRO:HD2	0.46	2.41	8	6
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:OG1	0.46	2.10	13	9
1:A:266:ALA:N	1:A:307:ASP:HB3	0.46	2.26	16	5
1:A:218:PHE:CD1	1:A:277:ILE:O	0.46	2.69	2	1
1:A:260:MET:SD	1:A:263:GLN:OE1	0.46	2.74	2	2
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.33	19	2
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:CZ	0.46	2.69	4	1
1:A:178:LYS:O	1:A:181:CYS:SG	0.46	2.74	9	2
1:A:179:GLU:OE2	1:A:179:GLU:O	0.46	2.34	10	2
1:A:165:TYR:O	1:A:168:CYS:SG	0.46	2.74	11	1
1:A:260:MET:HB3	1:A:316:LEU:O	0.46	2.11	11	1
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:HD23	0.46	2.11	13	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:HG13	0.46	2.46	13	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:168:CYS:SG	0.46	3.04	18	1
1:A:147:GLU:O	1:A:148:GLN:O	0.46	2.34	1	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:260:MET:CG	0.46	2.41	6	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:OXT	0.46	2.74	6	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:VAL:N	0.46	2.26	7	1
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:CD2	0.46	2.38	11	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HA	0.46	2.40	12	1
1:A:176:THR:CB	1:A:316:LEU:HB2	0.46	2.41	12	1
1:A:245:VAL:CB	1:A:246:PRO:HD3	0.46	2.41	12	1
1:A:245:VAL:HA	1:A:292:ILE:HG22	0.46	1.87	12	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:O	0.46	2.11	15	1
1:A:151:LEU:O	1:A:159:ILE:HD11	0.46	2.11	17	1
1:A:169:ARG:HD2	1:A:271:GLN:NE2	0.46	2.25	18	1
1:A:213:ASP:OD2	1:A:254:ALA:HB3	0.46	2.11	19	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:280:VAL:HG23	0.46	2.41	20	1
1:A:128:ILE:HG21	1:A:130:LEU:HD11	0.46	1.88	4	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:CD1	0.46	2.41	4	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:280:VAL:HG23	0.46	1.88	4	3
1:A:289:TYR:HA	1:A:292:ILE:CG2	0.46	2.41	15	5
1:A:235:ILE:CG2	1:A:289:TYR:HH	0.46	2.24	20	2
1:A:245:VAL:HB	1:A:292:ILE:CG1	0.46	2.40	6	1
1:A:312:LYS:O	1:A:313:LEU:C	0.46	2.53	9	6
1:A:114:MET:HG3	1:A:118:PHE:CE2	0.46	2.46	12	1
1:A:295:ARG:HB2	1:A:295:ARG:CZ	0.46	2.41	15	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:HG3	0.46	2.11	18	3
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:OD1	0.46	2.64	17	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:SER:C	0.45	2.53	5	14
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:O	0.45	2.74	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:CG	0.45	2.63	7	2
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:HB	0.45	2.11	12	7
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:235:ILE:HD11	1:A:304:PHE:HD2	0.45	1.63	3	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD12	0.45	2.11	4	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:134:ILE:HB	0.45	1.87	5	1
1:A:209:ILE:O	1:A:210:THR:OG1	0.45	2.34	5	2
1:A:175:ARG:HG2	1:A:263:GLN:CB	0.45	2.41	7	2
1:A:258:ILE:CG2	1:A:274:ILE:HG13	0.45	2.41	9	1
1:A:174:PRO:HG2	1:A:268:LYS:CG	0.45	2.40	10	1
1:A:260:MET:HG3	1:A:261:ALA:N	0.45	2.24	12	2
1:A:197:LEU:C	1:A:197:LEU:CD1	0.45	2.79	16	2
1:A:260:MET:O	1:A:260:MET:SD	0.45	2.74	19	2
1:A:289:TYR:CE1	1:A:314:PRO:CB	0.45	2.99	15	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HB	0.45	2.41	4	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:N	0.45	2.89	5	1
1:A:292:ILE:HD12	1:A:299:LEU:HG	0.45	1.87	5	1
1:A:156:ASN:OD1	1:A:157:ASP:OD1	0.45	2.34	6	1
1:A:263:GLN:NE2	1:A:313:LEU:HG	0.45	2.27	7	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:HA	0.45	2.11	9	3
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HB3	0.45	2.11	18	5
1:A:134:ILE:CD1	1:A:171:GLU:HG2	0.45	2.40	11	1
1:A:124:MET:SD	1:A:164:LEU:HD21	0.45	2.51	14	1
1:A:293:TYR:CD1	1:A:293:TYR:C	0.45	2.90	18	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:313:LEU:HD11	0.45	2.45	18	1
1:A:175:ARG:CB	1:A:263:GLN:HB3	0.45	2.41	7	4
1:A:266:ALA:N	1:A:307:ASP:HB2	0.45	2.26	5	7
1:A:247:GLY:O	1:A:252:SER:CB	0.45	2.64	3	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CG2	0.45	2.41	3	1
1:A:308:THR:CG2	1:A:309:PRO:HD2	0.45	2.40	6	4
1:A:310:VAL:CG1	1:A:313:LEU:HB3	0.45	2.40	6	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:267:GLU:CD	0.45	2.32	9	1
1:A:269:ARG:HA	1:A:269:ARG:NE	0.45	2.25	16	3
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:SG	0.45	2.75	16	1
1:A:247:GLY:O	1:A:248:ARG:C	0.45	2.55	20	1
1:A:270:THR:OG1	1:A:273:GLU:HG2	0.45	2.11	20	1
1:A:250:PRO:C	1:A:251:ILE:CG1	0.45	2.85	16	7
1:A:293:TYR:CD2	1:A:315:GLN:CA	0.45	3.00	2	1
1:A:175:ARG:CD	1:A:179:GLU:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:141:LEU:CD1	1:A:163:CYS:SG	0.45	2.98	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:MET:O	1:A:263:GLN:HG2	0.45	2.10	8	2
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CE2	0.45	2.46	7	2
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HA	0.45	2.45	7	2
1:A:148:GLN:OE1	1:A:197:LEU:HD23	0.45	2.12	9	2
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:CD	0.45	2.65	10	1
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:CD2	0.45	2.59	12	1
1:A:238:LYS:HB2	1:A:299:LEU:O	0.45	2.11	12	5
1:A:292:ILE:HG13	1:A:293:TYR:CD2	0.45	2.45	12	1
1:A:176:THR:HB	1:A:263:GLN:NE2	0.45	2.25	15	1
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:HG22	0.45	2.12	16	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:269:ARG:CG	0.45	2.41	17	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:292:ILE:HG13	0.45	1.85	17	1
1:A:174:PRO:CG	1:A:268:LYS:HB2	0.45	2.42	19	1
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:CD1	0.45	2.99	19	1
1:A:302:THR:O	1:A:303:ASP:C	0.45	2.54	10	11
1:A:224:LEU:HD13	1:A:225:PRO:O	0.45	2.11	3	2
1:A:310:VAL:CG1	1:A:311:ASP:N	0.45	2.78	7	2
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:OG	0.45	2.34	20	2
1:A:308:THR:HG21	1:A:310:VAL:HG13	0.45	1.83	12	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HG	0.45	2.41	12	1
1:A:120:GLU:OE2	1:A:157:ASP:OD1	0.45	2.34	13	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:CG2	0.45	2.38	17	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:272:LYS:CD	0.45	2.65	18	1
1:A:178:LYS:HD2	1:A:314:PRO:CG	0.45	2.41	18	1
1:A:188:LYS:HZ1	1:A:191:ILE:HD12	0.45	1.70	19	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:172:GLY:O	0.45	2.57	1	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HB3	0.45	2.11	6	4
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HG3	0.45	2.12	18	4
1:A:222:LEU:CD2	1:A:222:LEU:O	0.45	2.64	7	1
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:N	0.45	2.85	10	1
1:A:257:ALA:HA	1:A:260:MET:CG	0.45	2.42	11	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:289:TYR:CZ	0.45	2.46	11	1
1:A:248:ARG:HG2	1:A:284:THR:CB	0.45	2.42	13	1
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:OG1	0.45	2.55	13	1
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HB3	0.45	2.11	13	2
1:A:252:SER:OG	1:A:284:THR:HA	0.45	2.12	15	1
1:A:263:GLN:O	1:A:308:THR:HG21	0.45	2.12	15	1
1:A:264:ALA:O	1:A:306:PHE:HB2	0.45	2.11	15	1
1:A:162:ALA:CB	1:A:195:PHE:HA	0.45	2.42	16	1
1:A:252:SER:HA	1:A:280:VAL:CG1	0.45	2.42	20	2
1:A:232:ALA:CB	1:A:258:ILE:HA	0.45	2.42	12	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:297:PRO:C	1:A:299:LEU:HD12	0.45	2.32	1	1
1:A:235:ILE:HG23	1:A:300:PHE:CE1	0.45	2.46	2	2
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:OG1	0.45	2.12	10	6
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:OE1	0.45	2.33	4	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:191:ILE:HG13	0.45	1.88	5	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HB	0.45	2.12	11	2
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HG3	0.45	2.12	11	4
1:A:163:CYS:CA	1:A:166:ILE:HG12	0.45	2.42	12	3
1:A:224:LEU:HD22	1:A:269:ARG:HD3	0.45	1.88	7	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:HB2	0.45	2.12	11	2
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:HB3	0.45	1.89	11	2
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:HG3	0.45	2.40	13	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:O	0.45	2.34	16	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:OG	0.45	2.33	16	1
1:A:234:HIS:NE2	1:A:303:ASP:OD1	0.45	2.50	17	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:292:ILE:HD11	0.45	1.85	17	1
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:HG2	0.45	2.12	7	6
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:CG2	0.45	2.41	3	1
1:A:140:ASN:O	1:A:143:LYS:CG	0.45	2.65	4	1
1:A:237:ARG:O	1:A:241:GLU:CB	0.45	2.65	4	1
1:A:173:VAL:CG2	1:A:174:PRO:HD2	0.45	2.40	5	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:310:VAL:HG12	0.45	2.45	7	1
1:A:222:LEU:N	1:A:273:GLU:OE1	0.45	2.49	11	1
1:A:304:PHE:C	1:A:304:PHE:CD1	0.45	2.90	12	1
1:A:114:MET:CA	1:A:146:TYR:OH	0.45	2.65	14	1
1:A:168:CYS:C	1:A:271:GLN:OE1	0.45	2.55	19	1
1:A:191:ILE:O	1:A:195:PHE:HB2	0.45	2.12	14	8
1:A:216:SER:O	1:A:216:SER:OG	0.45	2.33	19	5
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HA	0.45	2.42	6	2
1:A:138:THR:N	1:A:167:ALA:HB2	0.45	2.27	3	1
1:A:232:ALA:CB	1:A:261:ALA:HB2	0.45	2.41	4	3
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:CG1	0.45	2.42	6	4
1:A:225:PRO:CD	1:A:267:GLU:HG2	0.45	2.41	11	4
1:A:266:ALA:CB	1:A:307:ASP:CG	0.45	2.84	20	2
1:A:138:THR:HG23	1:A:164:LEU:HD22	0.45	1.89	2	3
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:C	0.45	2.55	9	7
1:A:193:ARG:O	1:A:197:LEU:HD12	0.45	2.12	15	2
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:O	0.45	2.33	8	1
1:A:244:LEU:CD1	1:A:293:TYR:N	0.45	2.68	9	1
1:A:195:PHE:CD1	1:A:195:PHE:C	0.45	2.90	10	1
1:A:310:VAL:HG23	1:A:311:ASP:H	0.45	1.72	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:TYR:CE1	1:A:169:ARG:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:VAL:HG11	0.45	2.12	15	1
1:A:120:GLU:OE1	1:A:160:ALA:CB	0.45	2.64	18	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:OD2	0.45	2.70	19	1
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HD11	0.44	2.12	2	1
1:A:134:ILE:HD12	1:A:167:ALA:O	0.44	2.11	3	2
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:N	0.44	2.50	3	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HA	0.44	1.89	5	3
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HD12	0.44	1.89	10	1
1:A:206:VAL:CG2	1:A:282:ASP:OD2	0.44	2.62	15	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:316:LEU:HD13	0.44	1.89	15	1
1:A:269:ARG:NE	1:A:274:ILE:HD12	0.44	2.27	17	1
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:CD	0.44	2.65	1	1
1:A:171:GLU:O	1:A:171:GLU:OE2	0.44	2.35	2	1
1:A:209:ILE:N	1:A:209:ILE:CD1	0.44	2.79	8	2
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:HB	0.44	2.12	13	8
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:CD1	0.44	2.42	5	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:315:GLN:O	0.44	2.33	4	2
1:A:169:ARG:NH1	1:A:170:GLN:OE1	0.44	2.50	5	1
1:A:285:ILE:CG2	1:A:316:LEU:HD21	0.44	2.39	15	2
1:A:292:ILE:CD1	1:A:299:LEU:HG	0.44	2.43	5	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:SD	0.44	2.75	6	3
1:A:230:MET:HG3	1:A:234:HIS:NE2	0.44	2.27	19	2
1:A:269:ARG:CB	1:A:274:ILE:HD12	0.44	2.43	9	1
1:A:112:ARG:O	1:A:116:ASN:OD1	0.44	2.35	12	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:278:ALA:CB	0.44	2.62	12	1
1:A:169:ARG:CD	1:A:169:ARG:C	0.44	2.85	17	1
1:A:263:GLN:HG2	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.42	18	1
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:HD12	0.44	1.89	19	1
1:A:138:THR:CG2	1:A:164:LEU:HG	0.44	2.41	1	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:CD1	0.44	2.43	14	14
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:C	0.44	2.56	2	4
1:A:283:VAL:O	1:A:287:GLN:HG2	0.44	2.12	3	1
1:A:252:SER:O	1:A:284:THR:HG23	0.44	2.12	18	5
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:HB3	0.44	2.43	6	2
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:HE2	0.44	2.42	10	1
1:A:293:TYR:N	1:A:294:PRO:CD	0.44	2.80	12	1
1:A:197:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG13	0.44	2.41	13	1
1:A:231:ALA:CA	1:A:234:HIS:CE1	0.44	3.01	14	1
1:A:260:MET:HE3	1:A:316:LEU:HG	0.44	1.89	16	1
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HB3	0.44	2.12	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:GLU:OE1	1:A:179:GLU:HA	0.44	2.13	2	2
1:A:270:THR:O	1:A:274:ILE:CB	0.44	2.65	2	6
1:A:174:PRO:C	1:A:259:TYR:OH	0.44	2.56	5	5
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.80	6	2
1:A:177:PHE:CE1	1:A:180:ILE:CD1	0.44	2.86	19	2
1:A:193:ARG:O	1:A:196:LYS:HG2	0.44	2.13	5	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD3	0.44	2.42	7	2
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:N	0.44	2.49	9	4
1:A:178:LYS:CA	1:A:315:GLN:HG3	0.44	2.42	9	1
1:A:269:ARG:HD3	1:A:274:ILE:CD1	0.44	2.42	17	3
1:A:161:SER:OG	1:A:184:SER:CB	0.44	2.66	11	1
1:A:252:SER:OG	1:A:284:THR:OG1	0.44	2.34	12	2
1:A:269:ARG:HG3	1:A:270:THR:N	0.44	2.26	12	1
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:O	0.44	2.34	18	2
1:A:222:LEU:CD2	1:A:269:ARG:NH1	0.44	2.78	14	1
1:A:263:GLN:HE21	1:A:316:LEU:HD12	0.44	1.71	15	1
1:A:306:PHE:O	1:A:307:ASP:C	0.44	2.56	16	16
1:A:310:VAL:O	1:A:311:ASP:C	0.44	2.56	19	15
1:A:219:CYS:HA	1:A:277:ILE:CG2	0.44	2.43	7	3
1:A:270:THR:O	1:A:271:GLN:C	0.44	2.55	3	4
1:A:114:MET:HG3	1:A:118:PHE:CZ	0.44	2.47	6	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:300:PHE:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:CG2	0.44	2.43	11	2
1:A:224:LEU:CD1	1:A:269:ARG:HD2	0.44	2.42	10	2
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:CD1	0.44	2.42	13	4
1:A:234:HIS:CB	1:A:303:ASP:OD2	0.44	2.65	14	1
1:A:313:LEU:CD2	1:A:313:LEU:C	0.44	2.77	15	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HG23	0.44	1.89	17	1
1:A:273:GLU:OE1	1:A:273:GLU:CA	0.44	2.64	1	1
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:C	0.44	2.55	2	5
1:A:169:ARG:HG3	1:A:170:GLN:N	0.44	2.27	15	5
1:A:228:VAL:HG12	1:A:261:ALA:HB3	0.44	1.88	19	3
1:A:244:LEU:HB3	1:A:292:ILE:HG12	0.44	1.90	2	1
1:A:304:PHE:O	1:A:305:LYS:C	0.44	2.55	11	9
1:A:118:PHE:O	1:A:122:THR:HG22	0.44	2.13	3	2
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:CD1	0.44	2.43	18	10
1:A:281:ALA:HB1	1:A:283:VAL:HG12	0.44	1.90	3	2
1:A:259:TYR:CB	1:A:274:ILE:HG12	0.44	2.43	10	10
1:A:313:LEU:O	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.66	6	1
1:A:150:SER:O	1:A:150:SER:OG	0.44	2.36	7	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CA	0.44	2.43	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:235:ILE:HG12	1:A:300:PHE:CG	0.44	2.48	11	1
1:A:289:TYR:CG	1:A:292:ILE:HD11	0.44	2.47	12	1
1:A:313:LEU:CD2	1:A:313:LEU:O	0.44	2.65	15	1
1:A:193:ARG:NH1	1:A:193:ARG:HG2	0.44	2.28	19	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:O	0.44	2.33	19	1
1:A:234:HIS:ND1	1:A:303:ASP:HB2	0.44	2.28	20	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:248:ARG:HA	1:A:248:ARG:NE	0.44	2.28	2	1
1:A:161:SER:OG	1:A:184:SER:OG	0.44	2.33	3	2
1:A:168:CYS:HB3	1:A:173:VAL:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:220:SER:CB	1:A:224:LEU:HB3	0.44	2.43	14	2
1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:ASP:H	0.44	1.73	17	5
1:A:245:VAL:HB	1:A:292:ILE:CB	0.44	2.42	6	2
1:A:310:VAL:HB	1:A:313:LEU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:313:LEU:HD23	1:A:313:LEU:N	0.44	2.28	6	1
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:CG	0.44	2.43	19	2
1:A:297:PRO:CB	1:A:300:PHE:CZ	0.44	3.01	9	1
1:A:166:ILE:O	1:A:167:ALA:C	0.44	2.56	10	1
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:HD11	0.44	2.47	14	1
1:A:315:GLN:O	1:A:316:LEU:HB2	0.44	2.13	17	3
1:A:116:ASN:O	1:A:120:GLU:OE1	0.44	2.35	17	1
1:A:276:ASP:O	1:A:277:ILE:C	0.44	2.56	18	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:CG1	0.44	2.43	2	1
1:A:168:CYS:SG	1:A:173:VAL:HG12	0.44	2.53	5	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:202:LEU:HD21	0.44	1.88	7	1
1:A:209:ILE:CD1	1:A:279:GLY:O	0.44	2.61	8	1
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:CD1	0.44	2.43	19	1
1:A:264:ALA:HB3	1:A:304:PHE:CE2	0.44	2.48	19	1
1:A:120:GLU:OE2	1:A:157:ASP:OD2	0.44	2.35	1	1
1:A:145:VAL:CG2	1:A:148:GLN:NE2	0.44	2.78	1	1
1:A:168:CYS:O	1:A:173:VAL:HG12	0.44	2.12	4	2
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:CD	0.44	2.56	13	10
1:A:175:ARG:N	1:A:259:TYR:CE1	0.44	2.86	3	2
1:A:124:MET:HB2	1:A:183:VAL:HG21	0.44	1.90	4	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:316:LEU:C	0.44	2.56	6	3
1:A:213:ASP:HB3	1:A:278:ALA:HB1	0.44	1.89	8	1
1:A:238:LYS:HB3	1:A:299:LEU:O	0.44	2.13	10	3
1:A:148:GLN:O	1:A:149:LYS:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:245:VAL:CG1	1:A:292:ILE:HG13	0.44	2.42	11	2
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:CD2	0.44	2.65	11	1
1:A:252:SER:CB	1:A:280:VAL:CG1	0.44	2.95	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:N	0.44	2.28	15	4
1:A:287:GLN:O	1:A:291:LEU:HB3	0.44	2.13	15	2
1:A:124:MET:CB	1:A:164:LEU:HG	0.44	2.43	16	2
1:A:297:PRO:CB	1:A:300:PHE:CE2	0.44	3.01	20	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:272:LYS:HB3	0.43	2.43	2	1
1:A:273:GLU:O	1:A:277:ILE:HG13	0.43	2.13	5	3
1:A:140:ASN:O	1:A:143:LYS:HG2	0.43	2.12	4	1
1:A:141:LEU:HB3	1:A:163:CYS:SG	0.43	2.53	6	5
1:A:278:ALA:CB	1:A:280:VAL:CG2	0.43	2.96	6	1
1:A:205:SER:O	1:A:206:VAL:C	0.43	2.57	15	2
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:CG	0.43	2.57	9	1
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:CG1	0.43	2.43	17	2
1:A:224:LEU:HD13	1:A:269:ARG:NE	0.43	2.28	10	1
1:A:260:MET:HE2	1:A:261:ALA:HA	0.43	1.89	10	1
1:A:292:ILE:CG1	1:A:293:TYR:CD2	0.43	3.01	12	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:280:VAL:CG1	0.43	2.43	20	2
1:A:248:ARG:HD3	1:A:283:VAL:CG1	0.43	2.43	15	1
1:A:249:SER:OG	1:A:250:PRO:HD2	0.43	2.13	20	1
1:A:297:PRO:CA	1:A:299:LEU:HD22	0.43	2.44	4	1
1:A:222:LEU:HB2	1:A:273:GLU:CG	0.43	2.43	18	2
1:A:314:PRO:C	1:A:315:GLN:CG	0.43	2.86	6	1
1:A:114:MET:CB	1:A:146:TYR:CE2	0.43	3.00	14	2
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:HG12	0.43	1.89	12	3
1:A:286:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG2	0.43	2.27	7	1
1:A:114:MET:O	1:A:114:MET:SD	0.43	2.76	10	1
1:A:220:SER:HA	1:A:269:ARG:NH2	0.43	2.28	10	2
1:A:234:HIS:CB	1:A:301:PRO:HG3	0.43	2.43	12	1
1:A:291:LEU:C	1:A:292:ILE:CG2	0.43	2.85	12	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:HB3	0.43	2.43	13	1
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:HD12	0.43	1.90	14	2
1:A:169:ARG:NH2	1:A:286:ARG:HD2	0.43	2.28	16	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:HG	0.43	2.13	16	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:303:ASP:OD1	0.43	2.71	17	1
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:HB2	0.43	2.13	19	13
1:A:193:ARG:O	1:A:194:CYS:C	0.43	2.56	16	4
1:A:203:GLU:C	1:A:204:THR:OG1	0.43	2.57	1	9
1:A:145:VAL:HG23	1:A:148:GLN:HG2	0.43	1.90	3	1
1:A:210:THR:O	1:A:251:ILE:CD1	0.43	2.57	3	1
1:A:313:LEU:HG	1:A:313:LEU:O	0.43	2.13	4	1
1:A:289:TYR:O	1:A:291:LEU:N	0.43	2.51	5	2
1:A:278:ALA:HB1	1:A:280:VAL:HG22	0.43	1.89	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:282:ASP:OD1	1:A:282:ASP:O	0.43	2.35	9	1
1:A:129:ASN:O	1:A:130:LEU:CD1	0.43	2.64	10	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:248:ARG:HD3	0.43	2.13	10	1
1:A:214:PHE:CZ	1:A:251:ILE:CD1	0.43	3.01	10	1
1:A:141:LEU:HB2	1:A:163:CYS:SG	0.43	2.53	11	3
1:A:168:CYS:HB2	1:A:173:VAL:CG1	0.43	2.43	11	1
1:A:272:LYS:HA	1:A:276:ASP:CB	0.43	2.42	11	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.41	15	1
1:A:289:TYR:CE1	1:A:299:LEU:HD23	0.43	2.49	15	1
1:A:120:GLU:OE2	1:A:124:MET:SD	0.43	2.76	18	1
1:A:222:LEU:CG	1:A:273:GLU:HG2	0.43	2.43	18	1
1:A:220:SER:CB	1:A:224:LEU:HB2	0.43	2.43	19	1
1:A:135:VAL:O	1:A:139:ASN:CG	0.43	2.57	3	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HG21	0.43	1.90	3	1
1:A:213:ASP:O	1:A:214:PHE:C	0.43	2.56	16	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:HG	0.43	2.44	4	2
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:HD22	0.43	2.42	4	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:CB	0.43	3.07	5	1
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:HB3	0.43	2.13	5	1
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:CD	0.43	2.57	12	2
1:A:142:PHE:CE2	1:A:146:TYR:CD1	0.43	3.06	8	1
1:A:260:MET:CE	1:A:261:ALA:HA	0.43	2.42	10	1
1:A:235:ILE:HD13	1:A:300:PHE:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:260:MET:CG	1:A:289:TYR:CE1	0.43	3.01	11	1
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HG12	0.43	2.13	15	2
1:A:222:LEU:C	1:A:222:LEU:CD2	0.43	2.87	18	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:CB	0.43	2.41	2	1
1:A:220:SER:HA	1:A:224:LEU:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:237:ARG:O	1:A:241:GLU:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:173:VAL:HG23	1:A:174:PRO:HD2	0.43	1.90	5	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:313:LEU:CD1	0.43	2.80	5	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:300:PHE:CE2	0.43	2.47	5	1
1:A:210:THR:HB	1:A:251:ILE:HD13	0.43	1.89	9	1
1:A:264:ALA:O	1:A:307:ASP:N	0.43	2.51	9	1
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:HB3	0.43	2.49	11	1
1:A:177:PHE:CD2	1:A:180:ILE:CG1	0.43	3.02	13	1
1:A:297:PRO:HB2	1:A:299:LEU:CD1	0.43	2.44	15	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:292:ILE:CG2	0.43	2.43	17	1
1:A:156:ASN:N	1:A:156:ASN:ND2	0.43	2.64	1	1
1:A:256:ALA:HA	1:A:285:ILE:CG2	0.43	2.40	13	5
1:A:249:SER:HB3	1:A:250:PRO:HD2	0.43	1.90	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:GLU:HB2	1:A:272:LYS:HB2	0.43	1.91	3	1
1:A:169:ARG:HA	1:A:173:VAL:CG1	0.43	2.43	4	1
1:A:205:SER:OG	1:A:205:SER:O	0.43	2.33	16	1
1:A:240:VAL:HG22	1:A:253:VAL:CB	0.43	2.44	19	1
1:A:289:TYR:O	1:A:290:ARG:C	0.43	2.56	5	7
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:OG1	0.43	2.57	19	5
1:A:310:VAL:O	1:A:311:ASP:CG	0.43	2.57	19	2
1:A:244:LEU:O	1:A:244:LEU:HG	0.43	2.12	12	3
1:A:193:ARG:CZ	1:A:193:ARG:HB2	0.43	2.44	8	1
1:A:178:LYS:CB	1:A:315:GLN:HG3	0.43	2.44	9	1
1:A:120:GLU:CG	1:A:157:ASP:OD2	0.43	2.67	11	1
1:A:292:ILE:CG2	1:A:299:LEU:CD1	0.43	2.97	13	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.96	15	1
1:A:169:ARG:NH1	1:A:286:ARG:HG3	0.43	2.27	18	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:272:LYS:CG	0.43	2.67	18	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:225:PRO:HD3	1:A:267:GLU:OE1	0.43	2.14	20	1
1:A:210:THR:HB	1:A:249:SER:OG	0.43	2.13	3	1
1:A:213:ASP:CB	1:A:278:ALA:HB1	0.43	2.44	4	1
1:A:218:PHE:N	1:A:218:PHE:CD1	0.43	2.86	7	1
1:A:193:ARG:O	1:A:195:PHE:N	0.43	2.52	16	3
1:A:172:GLY:HA2	1:A:271:GLN:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:240:VAL:O	1:A:241:GLU:C	0.43	2.57	11	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:272:LYS:CG	0.43	2.97	15	1
1:A:248:ARG:HD3	1:A:283:VAL:CG2	0.43	2.44	15	2
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:CD2	0.43	2.43	19	1
1:A:169:ARG:HD3	1:A:199:LEU:HD11	0.43	1.90	20	1
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HG2	0.43	2.13	16	5
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:C	0.43	2.98	9	5
1:A:177:PHE:O	1:A:178:LYS:C	0.43	2.57	4	3
1:A:151:LEU:HD22	1:A:151:LEU:N	0.43	2.28	6	1
1:A:289:TYR:OH	1:A:297:PRO:HB3	0.43	2.14	6	2
1:A:260:MET:SD	1:A:289:TYR:OH	0.43	2.73	10	4
1:A:209:ILE:HD13	1:A:209:ILE:N	0.43	2.28	10	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:HB2	0.43	2.14	20	2
1:A:213:ASP:OD2	1:A:255:ALA:CB	0.43	2.66	14	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:304:PHE:CB	0.43	3.01	14	1
1:A:218:PHE:CE2	1:A:277:ILE:HG22	0.43	2.49	18	1
1:A:260:MET:HG2	1:A:289:TYR:OH	0.43	2.14	13	5
1:A:286:ARG:O	1:A:290:ARG:HG3	0.43	2.13	1	3
1:A:174:PRO:HB3	1:A:270:THR:N	0.43	2.28	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HB3	1:A:159:ILE:CD1	0.43	2.44	3	2
1:A:165:TYR:O	1:A:169:ARG:HB2	0.43	2.13	18	3
1:A:174:PRO:O	1:A:175:ARG:HB2	0.43	2.14	11	3
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:HD3	0.43	2.14	13	8
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:HB3	0.43	2.44	9	3
1:A:210:THR:HG21	1:A:249:SER:OG	0.43	2.13	9	1
1:A:231:ALA:O	1:A:234:HIS:NE2	0.43	2.52	10	1
1:A:165:TYR:OH	1:A:169:ARG:NE	0.43	2.52	12	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:225:PRO:HD2	0.43	2.44	12	1
1:A:260:MET:CB	1:A:316:LEU:HA	0.43	2.44	12	1
1:A:266:ALA:HB3	1:A:307:ASP:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:295:ARG:CZ	1:A:295:ARG:CB	0.43	2.96	15	1
1:A:289:TYR:CZ	1:A:315:GLN:HG3	0.43	2.49	17	1
1:A:186:ILE:HD13	1:A:187:SER:HB2	0.43	1.91	20	1
1:A:179:GLU:O	1:A:179:GLU:OE1	0.42	2.37	1	1
1:A:248:ARG:N	1:A:248:ARG:HD2	0.42	2.29	18	3
1:A:295:ARG:O	1:A:295:ARG:HD3	0.42	2.13	1	1
1:A:245:VAL:HG22	1:A:246:PRO:HD2	0.42	1.89	3	1
1:A:124:MET:SD	1:A:124:MET:C	0.42	2.97	4	1
1:A:124:MET:HE1	1:A:164:LEU:CD1	0.42	2.44	4	1
1:A:252:SER:CA	1:A:284:THR:CG2	0.42	2.97	4	1
1:A:259:TYR:HD2	1:A:316:LEU:HD23	0.42	1.74	5	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:CA	0.42	2.97	6	1
1:A:153:GLY:O	1:A:154:ARG:HB2	0.42	2.14	18	3
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:HG2	0.42	2.14	11	1
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:HG2	0.42	2.14	12	1
1:A:272:LYS:HG2	1:A:276:ASP:CB	0.42	2.44	16	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:CB	0.42	2.66	20	1
1:A:247:GLY:HA2	1:A:284:THR:OG1	0.42	2.13	20	1
1:A:200:LYS:HG3	1:A:201:ALA:N	0.42	2.29	1	1
1:A:139:ASN:OD1	1:A:139:ASN:C	0.42	2.57	14	3
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:CG	0.42	2.67	3	1
1:A:174:PRO:CB	1:A:268:LYS:HB3	0.42	2.44	4	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:173:VAL:HB	0.42	2.44	5	1
1:A:171:GLU:CD	1:A:171:GLU:O	0.42	2.57	8	2
1:A:175:ARG:CG	1:A:263:GLN:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:228:VAL:HG11	1:A:262:SER:CA	0.42	2.44	8	1
1:A:145:VAL:CG1	1:A:148:GLN:NE2	0.42	2.81	9	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:LYS:C	0.42	2.57	12	3
1:A:214:PHE:O	1:A:215:MET:C	0.42	2.57	13	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HG2	0.42	2.14	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HB3	1:A:198:ILE:CG2	0.42	2.44	14	1
1:A:180:ILE:HG13	1:A:181:CYS:N	0.42	2.29	15	1
1:A:187:SER:O	1:A:187:SER:OG	0.42	2.37	15	1
1:A:294:PRO:HD2	1:A:297:PRO:HG3	0.42	1.90	15	1
1:A:130:LEU:CD1	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.44	16	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:267:GLU:CB	0.42	2.43	17	1
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:HB2	0.42	2.14	18	1
1:A:120:GLU:CD	1:A:157:ASP:OD2	0.42	2.57	19	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:PRO:CD	0.42	2.44	1	1
1:A:234:HIS:HB3	1:A:301:PRO:CD	0.42	2.44	1	4
1:A:278:ALA:O	1:A:279:GLY:C	0.42	2.56	18	6
1:A:219:CYS:SG	1:A:258:ILE:HG21	0.42	2.54	2	1
1:A:231:ALA:HA	1:A:234:HIS:ND1	0.42	2.30	2	3
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HB	0.42	1.91	6	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:CA	0.42	3.02	16	2
1:A:292:ILE:HG12	1:A:299:LEU:CD2	0.42	2.41	11	2
1:A:151:LEU:CG	1:A:159:ILE:HD11	0.42	2.44	8	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:C	0.42	2.57	8	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:CD	0.42	2.57	8	1
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:O	0.42	2.77	9	1
1:A:130:LEU:CD2	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.44	9	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:O	0.42	2.37	10	1
1:A:245:VAL:HA	1:A:291:LEU:CD1	0.42	2.45	11	1
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:CG1	0.42	2.44	15	2
1:A:199:LEU:HD23	1:A:286:ARG:HD3	0.42	1.91	12	1
1:A:289:TYR:CB	1:A:316:LEU:HB3	0.42	2.43	15	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:CD1	0.42	2.66	16	1
1:A:169:ARG:HA	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.15	19	1
1:A:188:LYS:CE	1:A:191:ILE:HD12	0.42	2.44	19	1
1:A:209:ILE:C	1:A:210:THR:OG1	0.42	2.57	2	1
1:A:222:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD2	0.42	2.39	2	1
1:A:252:SER:C	1:A:284:THR:HG23	0.42	2.34	2	1
1:A:297:PRO:CA	1:A:299:LEU:HD12	0.42	2.44	2	2
1:A:206:VAL:O	1:A:207:ASP:HB3	0.42	2.13	11	2
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:HB3	0.42	2.15	20	2
1:A:264:ALA:HB2	1:A:313:LEU:HD21	0.42	1.91	5	1
1:A:167:ALA:O	1:A:171:GLU:HB2	0.42	2.15	6	1
1:A:297:PRO:O	1:A:298:ASP:C	0.42	2.57	6	3
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:CG2	0.42	2.68	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:TYR:OH	1:A:271:GLN:CA	0.42	2.67	11	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:172:GLY:CA	0.42	2.45	19	1
1:A:225:PRO:HG2	1:A:228:VAL:HG23	0.42	1.90	19	1
1:A:166:ILE:O	1:A:170:GLN:HG3	0.42	2.14	1	1
1:A:209:ILE:HB	1:A:279:GLY:O	0.42	2.14	3	3
1:A:234:HIS:HB3	1:A:301:PRO:CG	0.42	2.45	3	2
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:HB3	0.42	2.14	6	2
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HG2	0.42	2.14	6	1
1:A:206:VAL:O	1:A:206:VAL:HG12	0.42	2.15	8	1
1:A:164:LEU:HD22	1:A:164:LEU:N	0.42	2.29	10	4
1:A:207:ASP:N	1:A:281:ALA:HB1	0.42	2.29	9	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HG3	0.42	2.44	16	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ILE:HD12	0.42	2.14	16	1
1:A:163:CYS:HA	1:A:166:ILE:CD1	0.42	2.45	17	1
1:A:145:VAL:HG22	1:A:151:LEU:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:177:PHE:N	0.42	2.52	3	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:316:LEU:OXT	0.42	2.68	3	1
1:A:176:THR:HA	1:A:259:TYR:CE2	0.42	2.48	3	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG12	0.42	2.15	3	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HB2	0.42	2.13	14	4
1:A:300:PHE:CE2	1:A:304:PHE:CG	0.42	3.08	4	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HG2	0.42	2.43	7	1
1:A:303:ASP:O	1:A:304:PHE:C	0.42	2.58	8	2
1:A:128:ILE:O	1:A:129:ASN:HB2	0.42	2.14	10	2
1:A:207:ASP:O	1:A:208:LEU:HG	0.42	2.15	10	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:CA	0.42	2.45	12	1
1:A:259:TYR:CE2	1:A:316:LEU:CD2	0.42	3.03	16	1
1:A:262:SER:OG	1:A:267:GLU:O	0.42	2.34	17	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:N	0.42	2.88	20	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:HG2	0.42	2.14	2	1
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:HD3	0.42	2.15	2	2
1:A:297:PRO:CD	1:A:313:LEU:N	0.42	2.83	8	3
1:A:175:ARG:C	1:A:259:TYR:CZ	0.42	2.93	3	1
1:A:177:PHE:O	1:A:180:ILE:HG13	0.42	2.15	9	5
1:A:221:ASN:OD1	1:A:221:ASN:C	0.42	2.57	3	1
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:HA	0.42	2.44	3	3
1:A:138:THR:OG1	1:A:164:LEU:HA	0.42	2.15	4	1
1:A:222:LEU:C	1:A:223:CYS:SG	0.42	2.98	4	2
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HB3	0.42	2.14	4	3
1:A:314:PRO:O	1:A:315:GLN:HB3	0.42	2.15	6	1
1:A:259:TYR:O	1:A:316:LEU:CD2	0.42	2.68	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:277:ILE:O	1:A:278:ALA:C	0.42	2.57	9	2
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:HB3	0.42	1.91	12	1
1:A:288:SER:O	1:A:292:ILE:HG13	0.42	2.15	13	2
1:A:293:TYR:OH	1:A:314:PRO:C	0.42	2.57	13	1
1:A:275:GLY:HA2	1:A:285:ILE:HD11	0.42	1.90	14	1
1:A:130:LEU:CG	1:A:134:ILE:HG13	0.42	2.45	16	1
1:A:166:ILE:HG12	1:A:199:LEU:HD22	0.42	1.91	16	1
1:A:259:TYR:CA	1:A:274:ILE:HG12	0.42	2.45	16	1
1:A:289:TYR:CE2	1:A:297:PRO:HB3	0.42	2.50	16	1
1:A:215:MET:N	1:A:215:MET:SD	0.42	2.93	18	1
1:A:221:ASN:ND2	1:A:277:ILE:HD13	0.42	2.30	3	1
1:A:204:THR:O	1:A:205:SER:HB3	0.42	2.14	20	3
1:A:162:ALA:O	1:A:166:ILE:HG12	0.42	2.15	12	3
1:A:250:PRO:O	1:A:251:ILE:CG1	0.42	2.68	6	4
1:A:269:ARG:CB	1:A:274:ILE:CD1	0.42	2.98	9	1
1:A:289:TYR:O	1:A:293:TYR:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:292:ILE:O	1:A:292:ILE:HG13	0.42	2.15	10	2
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:HD23	0.42	2.13	11	1
1:A:252:SER:C	1:A:288:SER:OG	0.42	2.57	14	1
1:A:311:ASP:O	1:A:312:LYS:HD2	0.42	2.15	14	1
1:A:114:MET:HG2	1:A:146:TYR:CE2	0.42	2.50	16	1
1:A:223:CYS:CB	1:A:269:ARG:HD2	0.42	2.44	16	1
1:A:169:ARG:O	1:A:170:GLN:C	0.42	2.57	18	1
1:A:245:VAL:HG21	1:A:288:SER:OG	0.42	2.14	20	1
1:A:121:ILE:CG1	1:A:160:ALA:CB	0.42	2.96	16	2
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:HA	0.42	1.75	2	3
1:A:224:LEU:HD22	1:A:225:PRO:HD2	0.42	1.92	2	2
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HG2	0.42	2.15	20	2
1:A:140:ASN:OD1	1:A:140:ASN:N	0.42	2.52	6	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ILE:HG13	0.42	2.15	6	3
1:A:265:SER:C	1:A:307:ASP:HB3	0.42	2.35	6	1
1:A:291:LEU:O	1:A:291:LEU:HG	0.42	2.15	6	1
1:A:175:ARG:HG2	1:A:263:GLN:HB3	0.42	1.91	7	2
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:HD22	0.42	2.15	7	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:134:ILE:HG13	0.42	1.91	9	1
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG13	0.42	2.15	12	2
1:A:242:LEU:HB3	1:A:244:LEU:CD2	0.42	2.43	12	1
1:A:292:ILE:HG22	1:A:299:LEU:CD1	0.42	2.36	13	1
1:A:260:MET:N	1:A:260:MET:HE2	0.42	2.29	17	1
1:A:247:GLY:HA2	1:A:287:GLN:NE2	0.42	2.30	19	1
1:A:258:ILE:O	1:A:261:ALA:HB3	0.42	2.14	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD2	0.42	2.74	20	1
1:A:157:ASP:HB2	1:A:186:ILE:CG2	0.42	2.43	1	3
1:A:224:LEU:HD22	1:A:267:GLU:OE1	0.42	2.14	2	1
1:A:137:ARG:O	1:A:141:LEU:HG	0.42	2.15	5	2
1:A:220:SER:OG	1:A:224:LEU:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:171:GLU:HG3	1:A:272:LYS:CG	0.42	2.45	4	1
1:A:235:ILE:CG2	1:A:299:LEU:HB2	0.42	2.45	5	1
1:A:136:ASP:O	1:A:140:ASN:CG	0.42	2.58	6	1
1:A:222:LEU:CD2	1:A:222:LEU:C	0.42	2.88	7	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:MET:HG2	0.42	2.15	9	2
1:A:193:ARG:HB2	1:A:193:ARG:NH2	0.42	2.30	8	1
1:A:271:GLN:NE2	1:A:285:ILE:HD12	0.42	2.30	8	1
1:A:259:TYR:C	1:A:316:LEU:HD21	0.42	2.35	9	1
1:A:211:THR:O	1:A:211:THR:HG22	0.42	2.15	11	1
1:A:266:ALA:HA	1:A:308:THR:OG1	0.42	2.14	11	2
1:A:165:TYR:CZ	1:A:169:ARG:NE	0.42	2.88	12	1
1:A:289:TYR:HB3	1:A:316:LEU:O	0.42	2.15	15	1
1:A:292:ILE:CD1	1:A:299:LEU:HD11	0.42	2.44	18	1
1:A:244:LEU:HD12	1:A:244:LEU:O	0.42	2.15	19	1
1:A:268:LYS:O	1:A:269:ARG:NH1	0.42	2.52	20	1
1:A:121:ILE:HG12	1:A:138:THR:HG22	0.41	1.91	1	1
1:A:248:ARG:HG3	1:A:283:VAL:HG13	0.41	1.92	2	2
1:A:210:THR:OG1	1:A:249:SER:OG	0.41	2.35	3	1
1:A:138:THR:HG21	1:A:164:LEU:HD11	0.41	1.92	4	1
1:A:244:LEU:O	1:A:246:PRO:HD3	0.41	2.15	5	2
1:A:272:LYS:HG3	1:A:273:GLU:CG	0.41	2.45	5	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:OG	0.41	2.75	9	1
1:A:178:LYS:N	1:A:315:GLN:HG3	0.41	2.30	9	1
1:A:223:CYS:HB2	1:A:269:ARG:NH2	0.41	2.30	14	1
1:A:293:TYR:HB2	1:A:315:GLN:HB2	0.41	1.91	17	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:HG13	0.41	2.50	17	1
1:A:279:GLY:O	1:A:280:VAL:HG23	0.41	2.15	18	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:228:VAL:CB	0.41	2.35	20	1
1:A:269:ARG:NH2	1:A:274:ILE:HD12	0.41	2.29	2	1
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:HG3	0.41	2.15	4	2
1:A:139:ASN:OD1	1:A:139:ASN:N	0.41	2.52	3	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:CG2	0.41	2.45	5	1
1:A:300:PHE:CG	1:A:306:PHE:CZ	0.41	3.09	5	1
1:A:255:ALA:HB2	1:A:278:ALA:HB1	0.41	1.93	6	1
1:A:258:ILE:HG22	1:A:274:ILE:CG1	0.41	2.43	6	1
1:A:165:TYR:CD2	1:A:195:PHE:CE2	0.41	3.07	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:VAL:HG21	1:A:267:GLU:HG3	0.41	1.90	8	1
1:A:165:TYR:HB2	1:A:180:ILE:CG1	0.41	2.45	14	1
1:A:206:VAL:HG23	1:A:282:ASP:OD1	0.41	2.14	14	1
1:A:195:PHE:O	1:A:199:LEU:CD2	0.41	2.63	15	1
1:A:259:TYR:CG	1:A:316:LEU:HD11	0.41	2.51	15	1
1:A:246:PRO:HD2	1:A:291:LEU:CD2	0.41	2.45	17	1
1:A:142:PHE:O	1:A:146:TYR:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:166:ILE:O	1:A:169:ARG:HG3	0.41	2.15	6	3
1:A:141:LEU:CD1	1:A:166:ILE:HB	0.41	2.44	19	2
1:A:235:ILE:CD1	1:A:260:MET:CE	0.41	2.98	10	1
1:A:169:ARG:NH2	1:A:170:GLN:NE2	0.41	2.67	14	1
1:A:297:PRO:CG	1:A:313:LEU:HG	0.41	2.46	14	1
1:A:242:LEU:O	1:A:243:ASP:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:273:GLU:OE1	1:A:273:GLU:O	0.41	2.38	17	1
1:A:164:LEU:O	1:A:168:CYS:HB2	0.41	2.15	19	1
1:A:151:LEU:O	1:A:152:LYS:HB2	0.41	2.14	20	1
1:A:248:ARG:HD2	1:A:283:VAL:HG13	0.41	1.92	2	1
1:A:291:LEU:HG	1:A:291:LEU:O	0.41	2.16	19	4
1:A:177:PHE:CD1	1:A:180:ILE:HG12	0.41	2.49	5	1
1:A:174:PRO:CA	1:A:269:ARG:O	0.41	2.69	8	2
1:A:283:VAL:CG2	1:A:287:GLN:NE2	0.41	2.84	6	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:278:ALA:HA	0.41	2.51	1	1
1:A:271:GLN:NE2	1:A:271:GLN:O	0.41	2.54	1	1
1:A:293:TYR:CD2	1:A:293:TYR:O	0.41	2.74	2	1
1:A:177:PHE:O	1:A:179:GLU:N	0.41	2.54	4	1
1:A:190:GLU:HA	1:A:190:GLU:OE1	0.41	2.15	4	1
1:A:150:SER:O	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.64	5	1
1:A:145:VAL:CG2	1:A:198:ILE:HG12	0.41	2.45	7	1
1:A:290:ARG:C	1:A:291:LEU:HD23	0.41	2.34	8	1
1:A:277:ILE:O	1:A:279:GLY:N	0.41	2.53	9	1
1:A:292:ILE:O	1:A:293:TYR:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:316:LEU:HG	0.41	2.51	10	1
1:A:149:LYS:O	1:A:150:SER:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:171:GLU:HG2	1:A:272:LYS:HA	0.41	1.93	12	1
1:A:316:LEU:O	1:A:316:LEU:HG	0.41	2.16	13	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:HD12	0.41	2.46	14	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HG3	0.41	1.92	17	1
1:A:224:LEU:CB	1:A:225:PRO:CD	0.41	2.98	17	1
1:A:240:VAL:HG23	1:A:253:VAL:CG1	0.41	2.43	19	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:134:ILE:CG1	0.41	2.45	1	1
1:A:151:LEU:C	1:A:152:LYS:HD2	0.41	2.36	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:ALA:HB2	1:A:135:VAL:CG2	0.41	2.45	4	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:130:LEU:CG	0.41	2.99	4	1
1:A:242:LEU:HG	1:A:242:LEU:O	0.41	2.15	4	1
1:A:175:ARG:HB3	1:A:263:GLN:NE2	0.41	2.30	10	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:292:ILE:HD11	0.41	2.50	12	1
1:A:146:TYR:CG	1:A:146:TYR:O	0.41	2.74	13	1
1:A:176:THR:HB	1:A:263:GLN:OE1	0.41	2.15	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:CB	0.41	3.03	14	1
1:A:234:HIS:NE2	1:A:304:PHE:HB2	0.41	2.30	14	1
1:A:285:ILE:O	1:A:316:LEU:OXT	0.41	2.38	15	1
1:A:296:ALA:N	1:A:297:PRO:HD3	0.41	2.31	15	1
1:A:313:LEU:HA	1:A:315:GLN:OE1	0.41	2.15	15	1
1:A:176:THR:HB	1:A:316:LEU:HD22	0.41	1.93	19	1
1:A:256:ALA:HB2	1:A:288:SER:HB3	0.41	1.92	19	1
1:A:242:LEU:O	1:A:242:LEU:HG	0.41	2.16	1	1
1:A:202:LEU:HD12	1:A:202:LEU:C	0.41	2.35	2	1
1:A:269:ARG:NH2	1:A:274:ILE:CD1	0.41	2.84	2	1
1:A:141:LEU:HD13	1:A:166:ILE:CB	0.41	2.43	3	1
1:A:248:ARG:NE	1:A:248:ARG:HA	0.41	2.30	3	1
1:A:289:TYR:HB2	1:A:316:LEU:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:297:PRO:HA	1:A:299:LEU:CD2	0.41	2.46	4	1
1:A:234:HIS:CE1	1:A:300:PHE:CD2	0.41	3.08	10	1
1:A:310:VAL:CB	1:A:313:LEU:CD2	0.41	2.98	10	1
1:A:248:ARG:HG3	1:A:283:VAL:CG1	0.41	2.45	11	1
1:A:289:TYR:CG	1:A:292:ILE:CD1	0.41	3.04	12	1
1:A:210:THR:HB	1:A:252:SER:OG	0.41	2.15	13	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:C	0.41	2.58	15	1
1:A:259:TYR:CD2	1:A:271:GLN:OE1	0.41	2.74	17	1
1:A:292:ILE:O	1:A:294:PRO:CD	0.41	2.68	17	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:225:PRO:N	0.41	2.30	20	1
1:A:165:TYR:HA	1:A:168:CYS:HG	0.41	1.76	1	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:199:LEU:HD22	0.41	1.92	1	1
1:A:140:ASN:O	1:A:144:GLN:CD	0.41	2.59	3	1
1:A:169:ARG:CG	1:A:170:GLN:N	0.41	2.83	4	1
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:CD2	0.41	2.45	4	1
1:A:112:ARG:O	1:A:113:ALA:C	0.41	2.58	5	1
1:A:184:SER:O	1:A:185:ARG:HB2	0.41	2.15	5	2
1:A:213:ASP:HB2	1:A:278:ALA:O	0.41	2.16	6	1
1:A:262:SER:CB	1:A:274:ILE:CD1	0.41	2.99	6	1
1:A:124:MET:SD	1:A:183:VAL:HG22	0.41	2.56	9	1
1:A:134:ILE:CD1	1:A:171:GLU:HB2	0.41	2.38	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:ARG:HB2	1:A:169:ARG:NH1	0.41	2.31	15	1
1:A:165:TYR:CD1	1:A:169:ARG:HB3	0.41	2.51	16	1
1:A:193:ARG:C	1:A:195:PHE:N	0.41	2.74	16	1
1:A:165:TYR:OH	1:A:316:LEU:CD2	0.41	2.68	17	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:269:ARG:HD2	0.41	2.45	17	1
1:A:236:ALA:HA	1:A:253:VAL:HG11	0.41	1.92	17	1
1:A:262:SER:HB3	1:A:267:GLU:O	0.41	2.15	18	1
1:A:272:LYS:O	1:A:276:ASP:N	0.41	2.53	18	1
1:A:245:VAL:CG2	1:A:288:SER:C	0.41	2.89	20	1
1:A:281:ALA:O	1:A:285:ILE:HG13	0.41	2.16	20	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:172:GLY:O	0.41	2.16	1	1
1:A:305:LYS:O	1:A:305:LYS:HG3	0.41	2.16	1	1
1:A:124:MET:CG	1:A:184:SER:HG	0.41	2.28	2	1
1:A:293:TYR:CG	1:A:296:ALA:O	0.41	2.74	3	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:310:VAL:HG23	0.41	2.49	3	1
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:CB	0.41	2.45	4	1
1:A:238:LYS:O	1:A:242:LEU:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:304:PHE:C	1:A:306:PHE:N	0.41	2.74	17	4
1:A:222:LEU:O	1:A:223:CYS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:292:ILE:HD12	1:A:299:LEU:HD22	0.41	1.93	8	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:CB	0.41	2.87	10	1
1:A:252:SER:HB2	1:A:284:THR:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:260:MET:HB2	1:A:316:LEU:HA	0.41	1.91	12	1
1:A:296:ALA:CB	1:A:312:LYS:CG	0.41	2.98	12	1
1:A:260:MET:HA	1:A:263:GLN:NE2	0.41	2.31	13	1
1:A:169:ARG:O	1:A:271:GLN:HG3	0.41	2.16	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:HB3	0.41	2.51	14	1
1:A:234:HIS:CD2	1:A:300:PHE:CG	0.41	3.09	14	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:292:ILE:HG13	0.41	2.45	15	1
1:A:292:ILE:CG1	1:A:292:ILE:O	0.41	2.69	15	1
1:A:219:CYS:O	1:A:224:LEU:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:259:TYR:HA	1:A:274:ILE:HG12	0.41	1.93	17	2
1:A:174:PRO:HB2	1:A:268:LYS:HB2	0.41	1.92	17	1
1:A:234:HIS:CG	1:A:303:ASP:CG	0.41	2.94	17	1
1:A:165:TYR:CE1	1:A:177:PHE:CA	0.41	3.04	19	1
1:A:262:SER:OG	1:A:269:ARG:HG2	0.41	2.16	19	1
1:A:222:LEU:O	1:A:222:LEU:HG	0.41	2.16	1	2
1:A:310:VAL:C	1:A:312:LYS:N	0.41	2.75	14	4
1:A:262:SER:HB2	1:A:267:GLU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:124:MET:HE3	1:A:125:ALA:CA	0.41	2.46	4	1
1:A:203:GLU:O	1:A:204:THR:HB	0.41	2.15	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:256:ALA:HB1	1:A:288:SER:OG	0.41	2.16	6	1
1:A:265:SER:HG	1:A:304:PHE:HZ	0.41	1.51	7	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:HA	0.41	2.14	10	1
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:HG	0.41	2.15	11	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:146:TYR:CE1	0.41	3.09	14	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HG	0.41	2.16	15	1
1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:ASP:OD1	0.41	2.15	17	1
1:A:137:ARG:N	1:A:137:ARG:HD2	0.41	2.29	18	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:139:ASN:HA	0.41	1.91	19	1
1:A:256:ALA:O	1:A:260:MET:HB3	0.40	2.16	1	1
1:A:158:ALA:HA	1:A:191:ILE:HG12	0.40	1.94	2	1
1:A:221:ASN:OD1	1:A:277:ILE:HD13	0.40	2.16	3	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:CA	0.40	2.69	3	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:CD1	0.40	2.86	4	1
1:A:235:ILE:HD11	1:A:300:PHE:CE1	0.40	2.51	4	1
1:A:247:GLY:HA3	1:A:287:GLN:NE2	0.40	2.31	18	2
1:A:222:LEU:HB2	1:A:273:GLU:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:300:PHE:O	1:A:300:PHE:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:245:VAL:O	1:A:245:VAL:HG13	0.40	2.16	11	1
1:A:306:PHE:C	1:A:308:THR:N	0.40	2.73	12	2
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:ILE:CD1	0.40	2.45	15	1
1:A:296:ALA:O	1:A:312:LYS:HG3	0.40	2.16	15	1
1:A:248:ARG:N	1:A:287:GLN:OE1	0.40	2.53	17	1
1:A:168:CYS:O	1:A:271:GLN:HB2	0.40	2.17	19	1
1:A:261:ALA:O	1:A:265:SER:N	0.40	2.55	19	1
1:A:174:PRO:HB3	1:A:269:ARG:O	0.40	2.16	1	1
1:A:259:TYR:HB3	1:A:316:LEU:CD1	0.40	2.44	4	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:313:LEU:HD22	0.40	2.14	8	1
1:A:287:GLN:OE1	1:A:290:ARG:HD3	0.40	2.16	9	1
1:A:128:ILE:O	1:A:130:LEU:HD23	0.40	2.16	16	1
1:A:124:MET:O	1:A:183:VAL:CG2	0.40	2.57	1	1
1:A:222:LEU:HD21	1:A:277:ILE:HD12	0.40	1.92	3	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:316:LEU:N	0.40	2.54	3	1
1:A:273:GLU:HA	1:A:277:ILE:HG13	0.40	1.94	9	2
1:A:225:PRO:HG3	1:A:267:GLU:CD	0.40	2.36	5	1
1:A:234:HIS:HB2	1:A:300:PHE:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:293:TYR:OH	1:A:315:GLN:HA	0.40	2.16	8	1
1:A:297:PRO:C	1:A:299:LEU:N	0.40	2.75	9	1
1:A:149:LYS:CD	1:A:149:LYS:O	0.40	2.69	10	1
1:A:248:ARG:N	1:A:287:GLN:NE2	0.40	2.70	10	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:225:PRO:HD2	0.40	1.94	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:VAL:CG1	1:A:245:VAL:O	0.40	2.56	14	1
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:HD13	0.40	2.31	15	1
1:A:260:MET:N	1:A:316:LEU:HD13	0.40	2.31	15	1
1:A:316:LEU:CD2	1:A:316:LEU:OXT	0.40	2.58	15	1
1:A:253:VAL:HA	1:A:288:SER:OG	0.40	2.16	17	1
1:A:120:GLU:HG3	1:A:157:ASP:OD2	0.40	2.17	19	1
1:A:240:VAL:CG2	1:A:253:VAL:HB	0.40	2.46	19	1
1:A:121:ILE:HD13	1:A:139:ASN:CA	0.40	2.36	3	1
1:A:124:MET:SD	1:A:184:SER:HB3	0.40	2.57	5	1
1:A:161:SER:HB2	1:A:191:ILE:CD1	0.40	2.45	8	1
1:A:170:GLN:O	1:A:171:GLU:HG2	0.40	2.16	10	1
1:A:251:ILE:N	1:A:251:ILE:CD1	0.40	2.77	10	1
1:A:283:VAL:HG22	1:A:287:GLN:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:286:ARG:HG2	1:A:290:ARG:CD	0.40	2.47	10	1
1:A:310:VAL:HG11	1:A:313:LEU:HD23	0.40	1.88	10	1
1:A:175:ARG:O	1:A:259:TYR:CD1	0.40	2.74	11	1
1:A:289:TYR:CD2	1:A:293:TYR:CE2	0.40	3.09	11	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:159:ILE:HG12	0.40	2.45	14	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:292:ILE:HA	0.40	2.41	15	1
1:A:308:THR:OG1	1:A:309:PRO:HD2	0.40	2.15	15	1
1:A:260:MET:SD	1:A:316:LEU:HG	0.40	2.57	16	1
1:A:176:THR:HB	1:A:260:MET:SD	0.40	2.57	17	1
1:A:215:MET:O	1:A:216:SER:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:198:ILE:CG2	0.40	2.45	19	1
1:A:252:SER:HB3	1:A:284:THR:HG23	0.40	1.92	19	1
1:A:190:GLU:HA	1:A:193:ARG:CD	0.40	2.46	20	1
1:A:213:ASP:OD1	1:A:213:ASP:O	0.40	2.38	1	1
1:A:222:LEU:HD11	1:A:269:ARG:HD3	0.40	1.93	3	1
1:A:247:GLY:HA3	1:A:284:THR:OG1	0.40	2.16	3	1
1:A:171:GLU:O	1:A:171:GLU:CD	0.40	2.60	6	1
1:A:220:SER:HB2	1:A:224:LEU:CB	0.40	2.47	7	1
1:A:166:ILE:CG2	1:A:202:LEU:CD1	0.40	2.99	8	1
1:A:177:PHE:CE1	1:A:315:GLN:NE2	0.40	2.89	9	1
1:A:245:VAL:HB	1:A:291:LEU:CB	0.40	2.46	10	1
1:A:190:GLU:O	1:A:194:CYS:HB2	0.40	2.17	11	1
1:A:256:ALA:CB	1:A:285:ILE:HA	0.40	2.44	11	1
1:A:312:LYS:O	1:A:314:PRO:CD	0.40	2.69	13	1
1:A:228:VAL:CG1	1:A:265:SER:HB3	0.40	2.42	14	1
1:A:238:LYS:HE2	1:A:299:LEU:O	0.40	2.15	14	1
1:A:195:PHE:CD2	1:A:199:LEU:CD2	0.40	3.05	15	1
1:A:204:THR:HG22	1:A:206:VAL:H	0.40	1.75	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ILE:HD11	1:A:199:LEU:HD23	0.40	1.89	16	1
1:A:223:CYS:HB2	1:A:269:ARG:NH1	0.40	2.31	16	1
1:A:269:ARG:HA	1:A:269:ARG:CZ	0.40	2.46	16	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:316:LEU:HG	0.40	2.16	17	1
1:A:224:LEU:CB	1:A:225:PRO:HD2	0.40	2.47	17	1
1:A:313:LEU:CD1	1:A:314:PRO:HD2	0.40	2.46	17	1
1:A:289:TYR:CZ	1:A:292:ILE:HG21	0.40	2.51	19	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	204/208 (98%)	152±4 (74±2%)	33±4 (16±2%)	19±3 (9±1%)	1 11
All	All	4080/4160 (98%)	3034 (74%)	665 (16%)	381 (9%)	1 11

All 61 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	187	SER	20
1	A	155	ALA	19
1	A	176	THR	19
1	A	171	GLU	17
1	A	203	GLU	17
1	A	204	THR	17
1	A	295	ARG	17
1	A	312	LYS	17
1	A	209	ILE	16
1	A	280	VAL	14
1	A	296	ALA	14
1	A	301	PRO	13
1	A	185	ARG	13
1	A	223	CYS	12
1	A	206	VAL	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	207	ASP	9
1	A	154	ARG	9
1	A	175	ARG	8
1	A	302	THR	8
1	A	315	GLN	8
1	A	174	PRO	7
1	A	270	THR	7
1	A	172	GLY	6
1	A	311	ASP	6
1	A	152	LYS	5
1	A	251	ILE	5
1	A	247	GLY	5
1	A	249	SER	4
1	A	246	PRO	4
1	A	248	ARG	4
1	A	271	GLN	4
1	A	148	GLN	3
1	A	304	PHE	3
1	A	150	SER	3
1	A	266	ALA	3
1	A	153	GLY	2
1	A	243	ASP	2
1	A	112	ARG	2
1	A	297	PRO	2
1	A	310	VAL	2
1	A	306	PHE	2
1	A	292	ILE	2
1	A	281	ALA	2
1	A	131	PRO	1
1	A	294	PRO	1
1	A	202	LEU	1
1	A	303	ASP	1
1	A	129	ASN	1
1	A	166	ILE	1
1	A	291	LEU	1
1	A	211	THR	1
1	A	244	LEU	1
1	A	245	VAL	1
1	A	305	LYS	1
1	A	299	LEU	1
1	A	208	LEU	1
1	A	210	THR	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	293	TYR	1
1	A	205	SER	1
1	A	279	GLY	1
1	A	314	PRO	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	174/176 (99%)	123±4 (70±2%)	51±4 (30±2%)	1 17
All	All	3480/3520 (99%)	2453 (70%)	1027 (30%)	1 17

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	249	SER	20
1	A	186	ILE	19
1	A	304	PHE	19
1	A	306	PHE	19
1	A	202	LEU	18
1	A	244	LEU	18
1	A	149	LYS	17
1	A	169	ARG	16
1	A	189	LYS	16
1	A	270	THR	16
1	A	285	ILE	16
1	A	223	CYS	15
1	A	289	TYR	15
1	A	154	ARG	15
1	A	284	THR	14
1	A	316	LEU	14
1	A	274	ILE	14
1	A	312	LYS	14
1	A	178	LYS	13
1	A	214	PHE	13
1	A	218	PHE	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	290	ARG	13
1	A	315	GLN	13
1	A	217	ARG	13
1	A	268	LYS	13
1	A	269	ARG	13
1	A	115	MET	12
1	A	200	LYS	12
1	A	221	ASN	12
1	A	271	GLN	12
1	A	215	MET	12
1	A	127	ARG	11
1	A	226	LYS	11
1	A	248	ARG	11
1	A	132	ARG	10
1	A	137	ARG	10
1	A	148	GLN	10
1	A	152	LYS	10
1	A	180	ILE	10
1	A	204	THR	10
1	A	230	MET	10
1	A	237	ARG	10
1	A	287	GLN	10
1	A	299	LEU	10
1	A	262	SER	10
1	A	243	ASP	10
1	A	150	SER	9
1	A	171	GLU	9
1	A	196	LYS	9
1	A	210	THR	9
1	A	295	ARG	9
1	A	185	ARG	9
1	A	205	SER	9
1	A	305	LYS	9
1	A	282	ASP	9
1	A	241	GLU	8
1	A	267	GLU	8
1	A	298	ASP	8
1	A	303	ASP	8
1	A	193	ARG	8
1	A	238	LYS	8
1	A	265	SER	8
1	A	272	LYS	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	184	SER	8
1	A	114	MET	7
1	A	136	ASP	7
1	A	188	LYS	7
1	A	260	MET	7
1	A	259	TYR	7
1	A	120	GLU	7
1	A	222	LEU	7
1	A	119	LYS	7
1	A	129	ASN	7
1	A	203	GLU	7
1	A	208	LEU	7
1	A	175	ARG	6
1	A	220	SER	6
1	A	273	GLU	6
1	A	286	ARG	6
1	A	112	ARG	6
1	A	219	CYS	6
1	A	311	ASP	6
1	A	197	LEU	6
1	A	139	ASN	5
1	A	211	THR	5
1	A	161	SER	5
1	A	190	GLU	5
1	A	252	SER	5
1	A	292	ILE	5
1	A	224	LEU	5
1	A	147	GLU	5
1	A	310	VAL	5
1	A	144	GLN	4
1	A	179	GLU	4
1	A	181	CYS	4
1	A	313	LEU	4
1	A	143	LYS	4
1	A	302	THR	4
1	A	126	ASP	4
1	A	133	ASN	4
1	A	307	ASP	4
1	A	207	ASP	4
1	A	216	SER	4
1	A	157	ASP	3
1	A	213	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	291	LEU	3
1	A	288	SER	3
1	A	124	MET	3
1	A	227	GLN	3
1	A	263	GLN	3
1	A	151	LEU	2
1	A	164	LEU	2
1	A	276	ASP	2
1	A	170	GLN	2
1	A	229	GLN	2
1	A	187	SER	2
1	A	245	VAL	1
1	A	176	THR	1
1	A	293	TYR	1
1	A	138	THR	1
1	A	300	PHE	1
1	A	280	VAL	1
1	A	116	ASN	1
1	A	141	LEU	1
1	A	168	CYS	1
1	A	258	ILE	1
1	A	122	THR	1
1	A	308	THR	1
1	A	173	VAL	1
1	A	199	LEU	1
1	A	251	ILE	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