



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

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 DO-
MAIN, 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 ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) 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

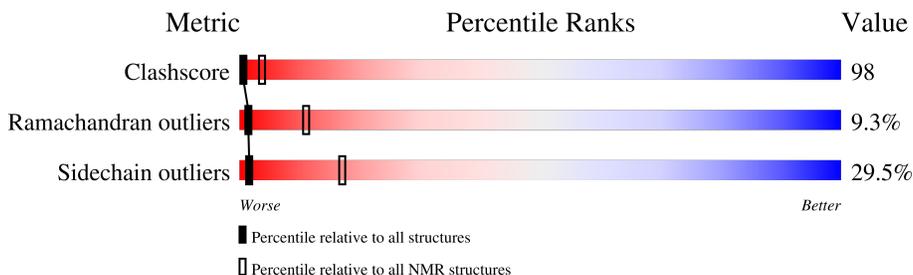
1 Overall quality at a glance

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 $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	208	

2 Ensemble composition and analysis

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

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.

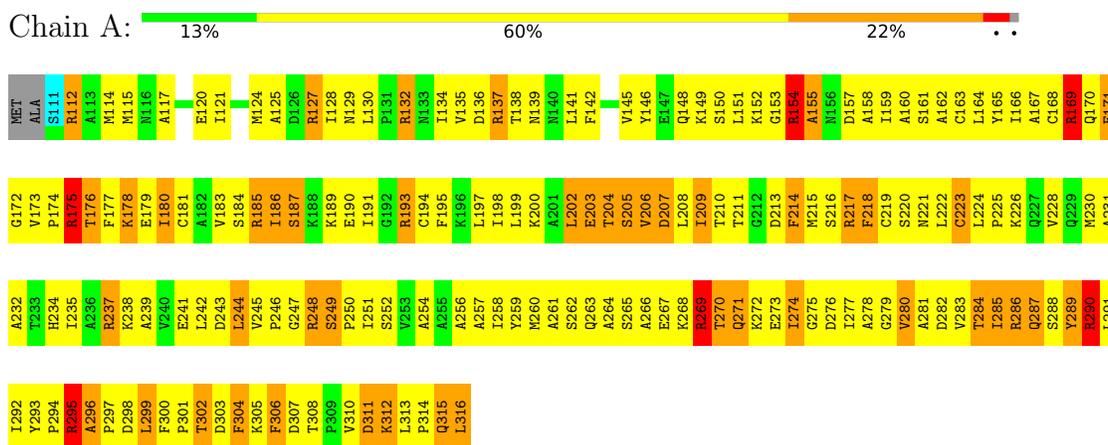
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	206	3273	1013	1666	287	295	12	0

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

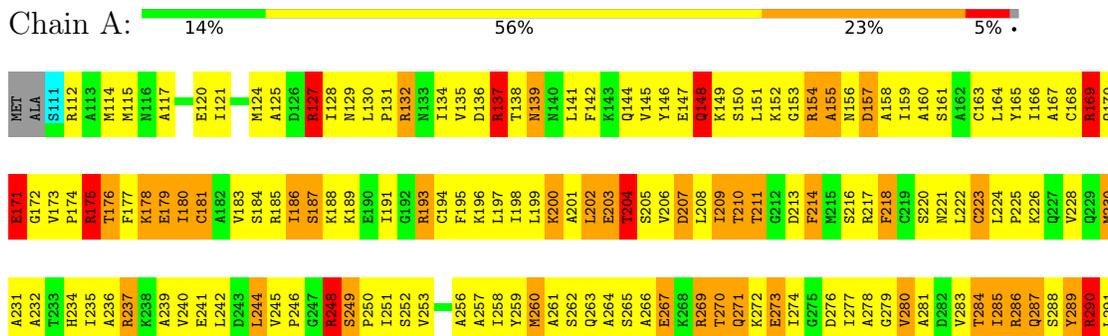


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: TFIIB

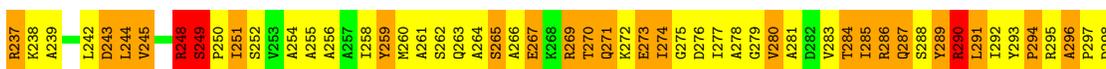
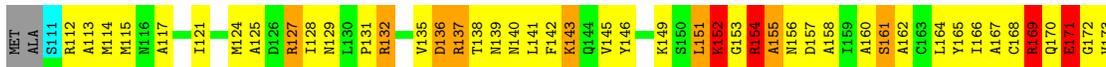




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TFIIB

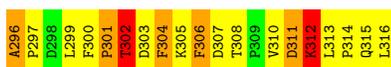
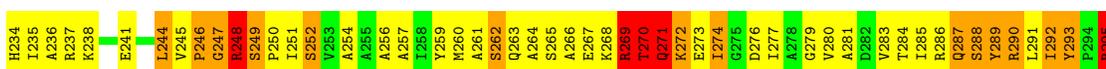
Chain A: 18% 50% 26% . .



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TFIIB

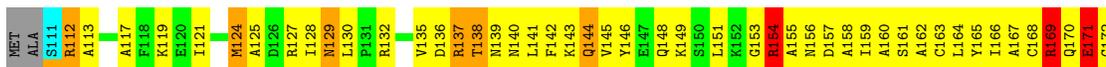
Chain A: 19% 53% 21% 6% . .



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 18% 55% 21% 5% . .

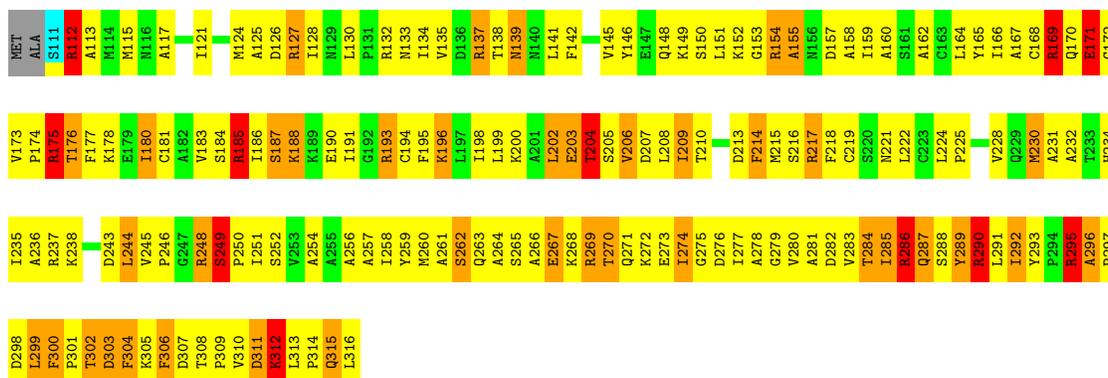




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TFIIB

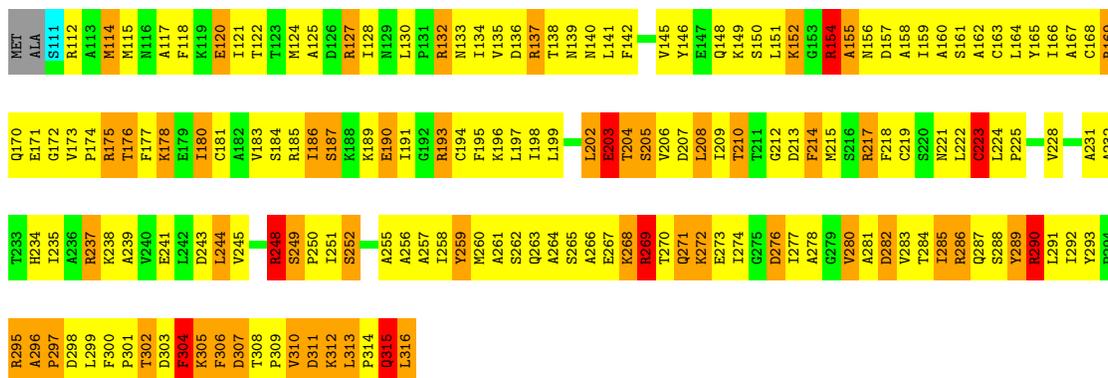
Chain A: 19% 56% 19% 5%

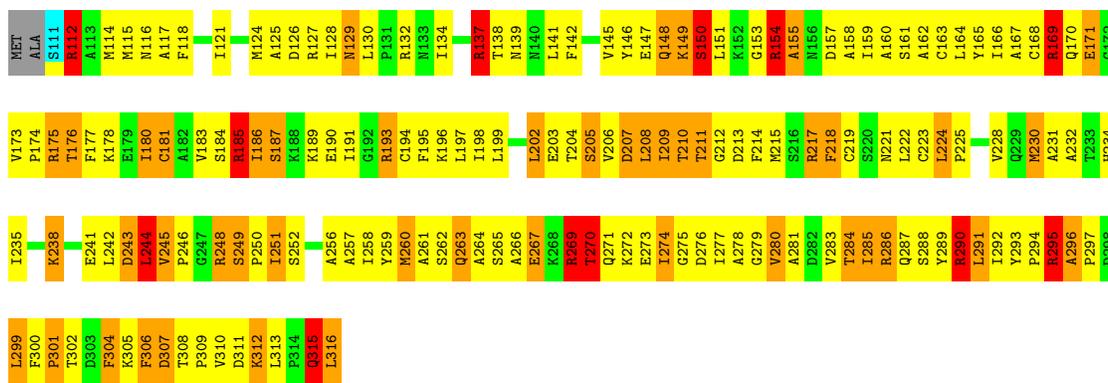


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TFIIB

Chain A: 17% 54% 24% 5%

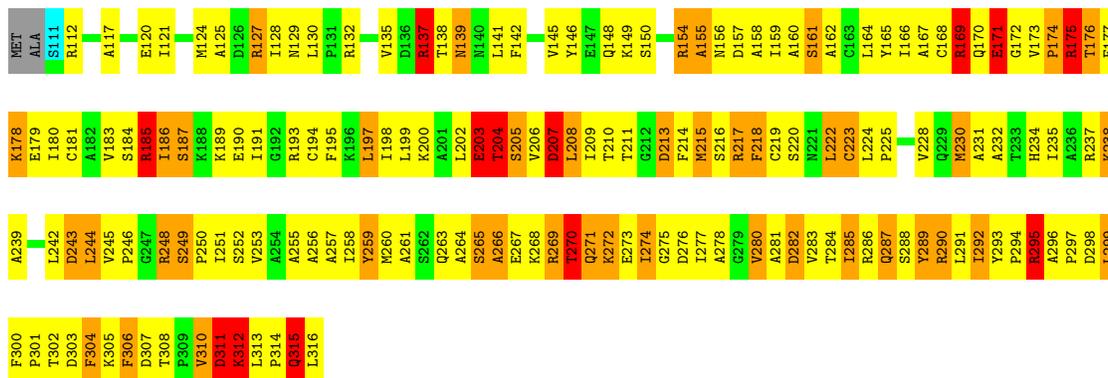




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TFIIB

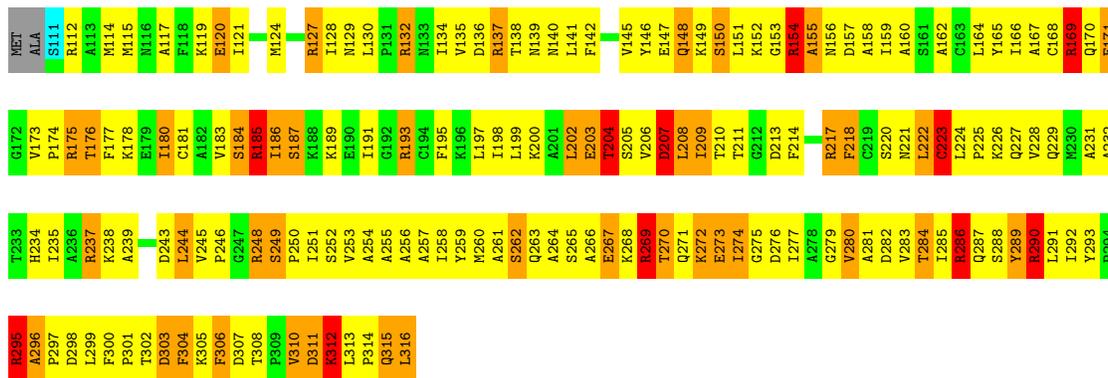
Chain A: 19% 52% 21% 6%

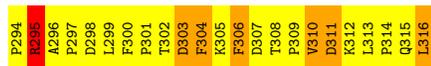


4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: TFIIB

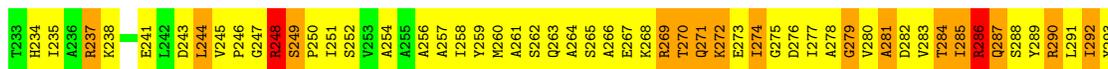
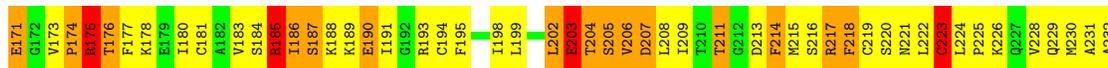
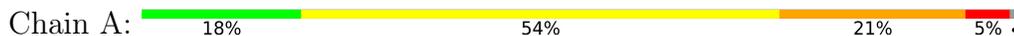
Chain A: 17% 55% 21% 5%





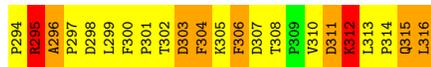
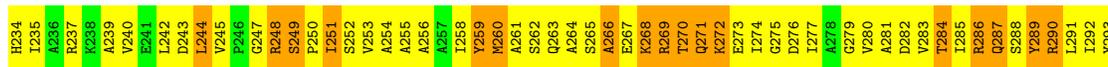
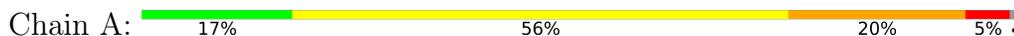
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TFIIB



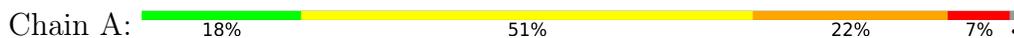
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TFIIB



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TFIIB



MET	V173	A236	D288
ALA	F174	R237	L299
R111	R175	K238	F300
R112	T176	A239	F301
A113	F177	L242	T302
M114	K178	D243	D303
A117	E179	L244	F304
F118	L180	L245	K305
K119	C181	P246	F306
E120	A182	G247	D307
I121	V183	R248	V310
M124	S184	S249	D311
A125	R185	P250	K312
D126	L186	I251	L313
R127	S187	S252	P314
I128	E190	A255	Q315
M129	I191	A256	L316
L130	G192	A257	
P131	R193	I258	
R132	C194	Y259	
N133	F195	M260	
I134	I198	A261	
V135	L199	S262	
D136	K200	Q263	
R137	A201	A264	
N139	L202	S265	
L141	E203	A266	
F142	T204	E267	
	S205	K268	
	Y206	R269	
	D207	T270	
V145	L208	Q271	
Y146	I209	K272	
	T210	E273	
K149	T211	I274	
S150	G212	G275	
L151	D213	D276	
K152	F214	I277	
G153	M215	A278	
R154	S216	G279	
A155	R217	V280	
N156	F218	A281	
D157	C219	D282	
A158	L222	V283	
A160	I159	T284	
S161	C223	I285	
A162	L224	R286	
C163	P225	Q287	
L164	K226	S288	
Y165	Q227	Y289	
I166	V228	R290	
A167	Q229	L291	
C168	M230	I292	
R169	A231	Y293	
Q170	A232	P294	
E171	T233	R295	
G172	H234	A296	
	I235	P297	

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

No chemical shift data were provided