



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:06 PM BST

PDB ID : 1AJE
Title : CDC42 FROM HUMAN, NMR, 20 STRUCTURES
Authors : Feltham, J.L.; Dotsch, V.; Raza, S.; Manor, D.; Cerione, R.A.; Sutcliffe, M.J.;
Wagner, G.; Oswald, R.E.
Deposited on : 1997-05-02

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
<http://wwpdb.org/validation/2016/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:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

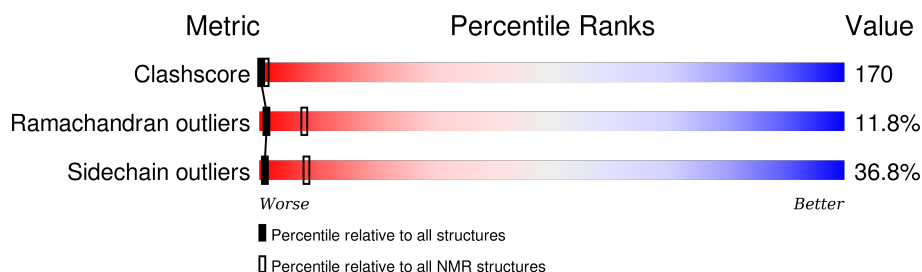
1 Overall quality at a glance

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 | 114402 | 11133 |
| Ramachandran outliers | 111179 | 9975 |
| Sidechain outliers | 111093 | 9958 |

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 | 194 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 4 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:1-A:32, A:40-A:57, A:76-A:178 (153) | 0.71 | 4 |

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

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

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

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3053 atoms, of which 1542 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called CDC42HS.

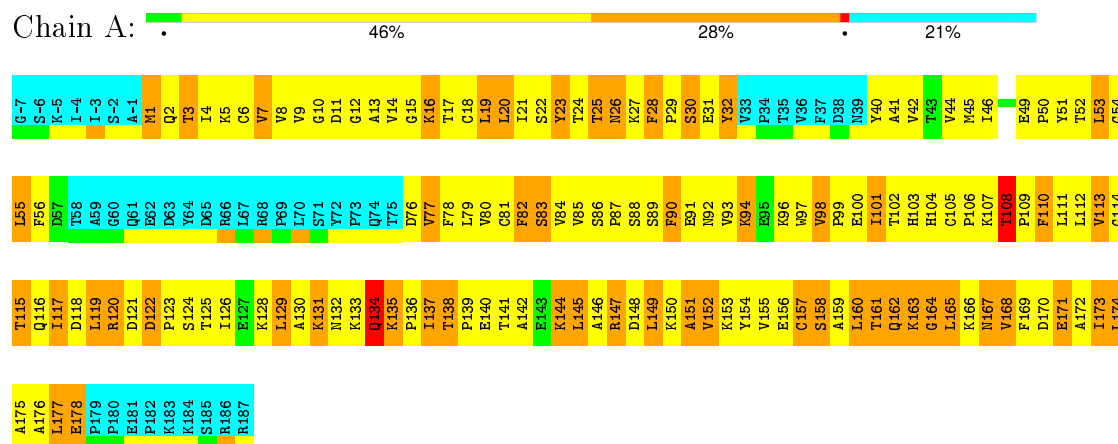
| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| 1 | A | 194 | Total | C | H | N | O | S | |
| | | | 3053 | 969 | 1542 | 246 | 289 | 7 | 0 |

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: CDC42HS



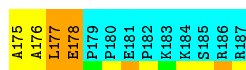
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: CDC42HS

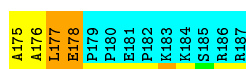
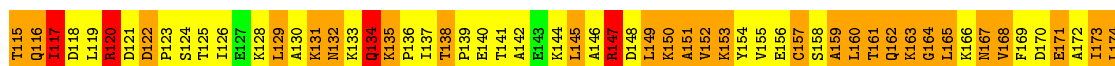
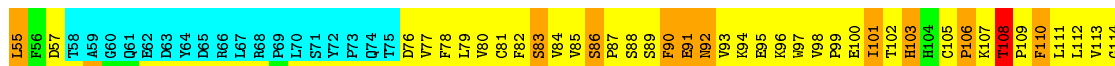
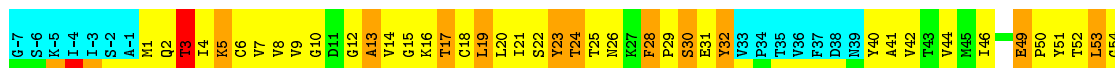




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: CDC42HS

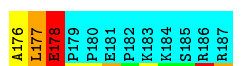
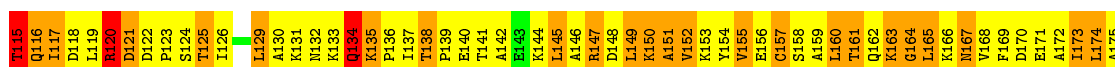
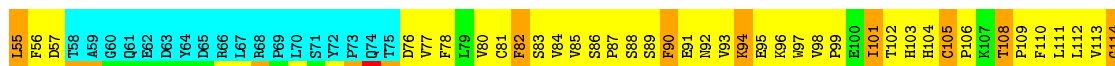
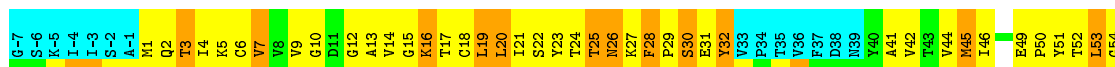
Chain A: 5% 45% 26% • 21%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: CDC42HS

Chain A: 6% 48% 23% • 21%

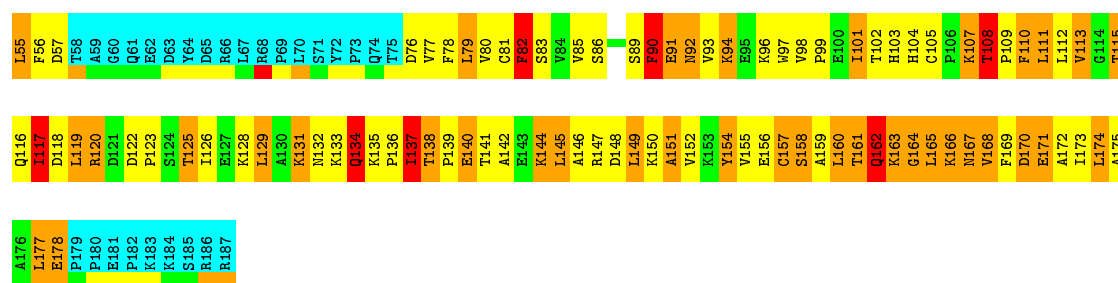


4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: CDC42HS

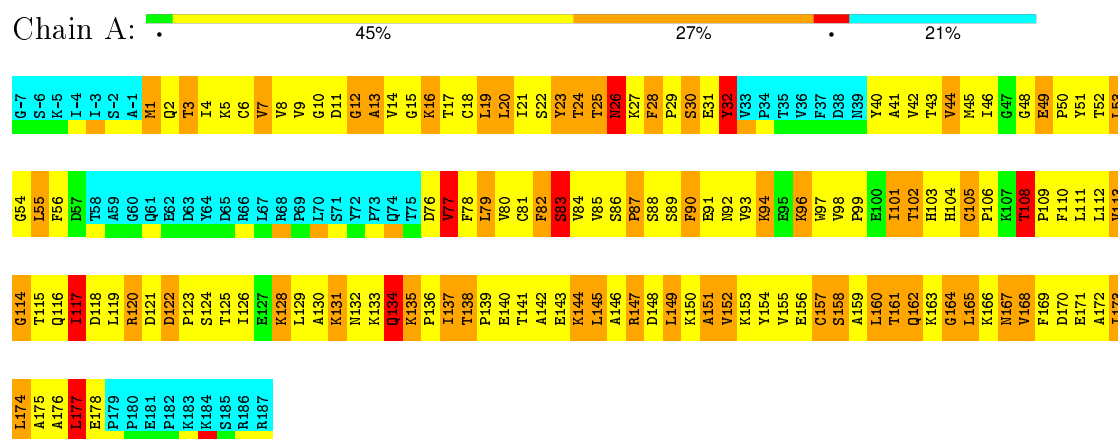
Chain A: 9% 40% 25% • 21%





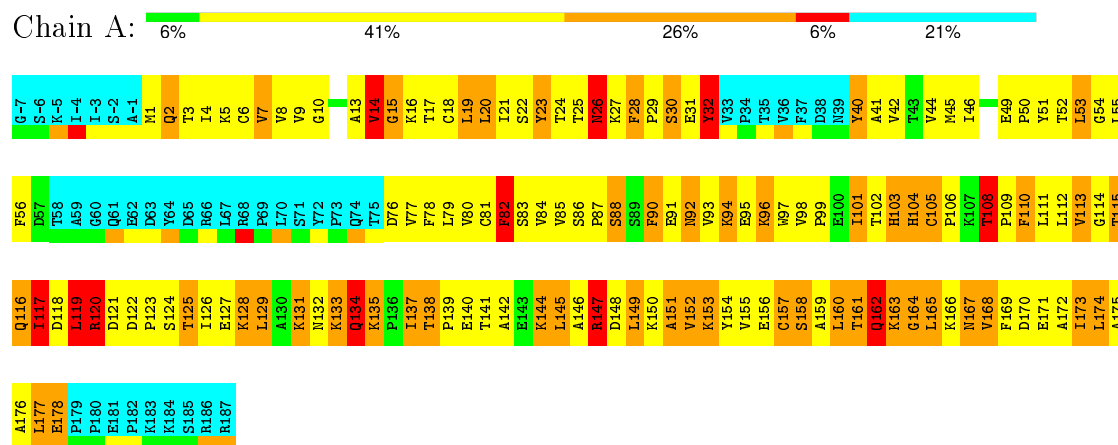
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: CDC42HS



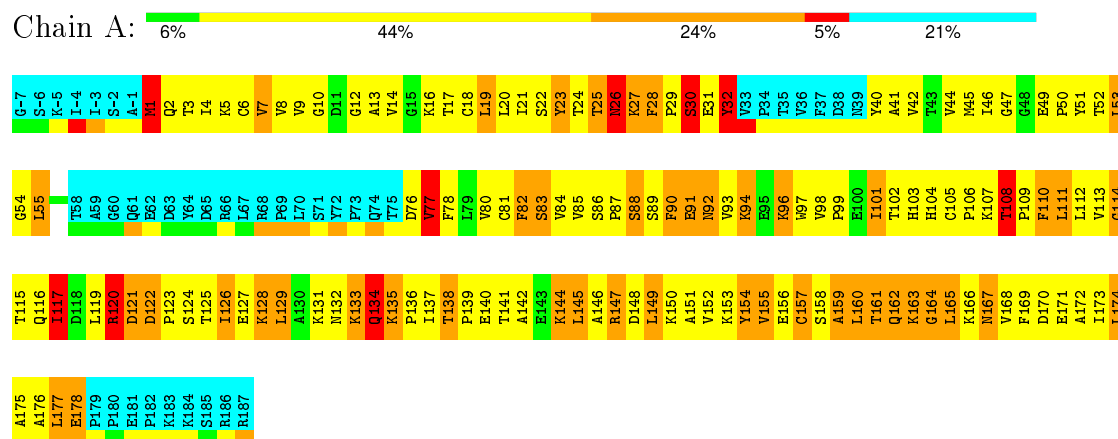
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: CDC42HS



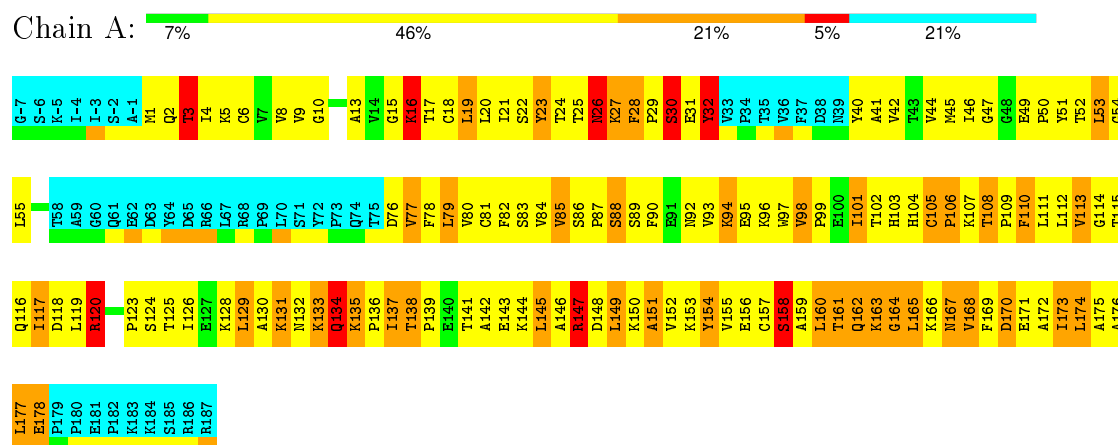
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: CDC42HS



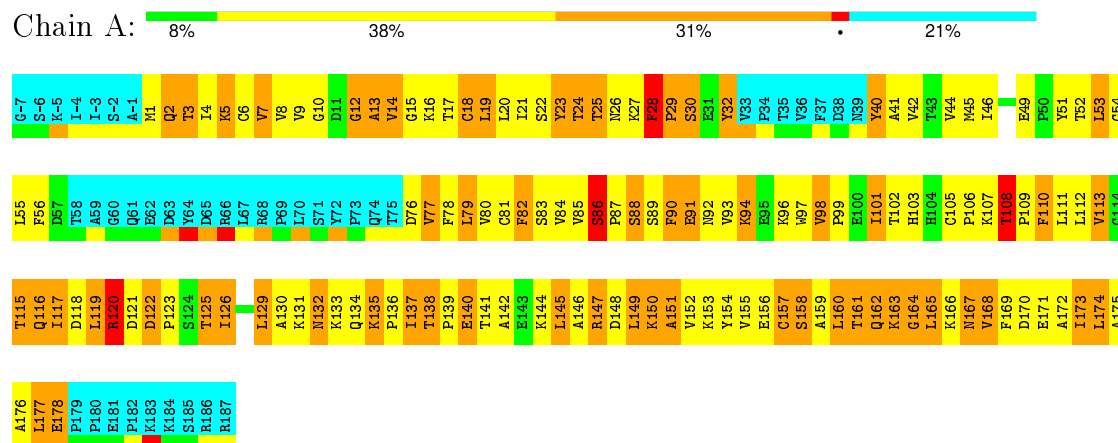
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: CDC42HS



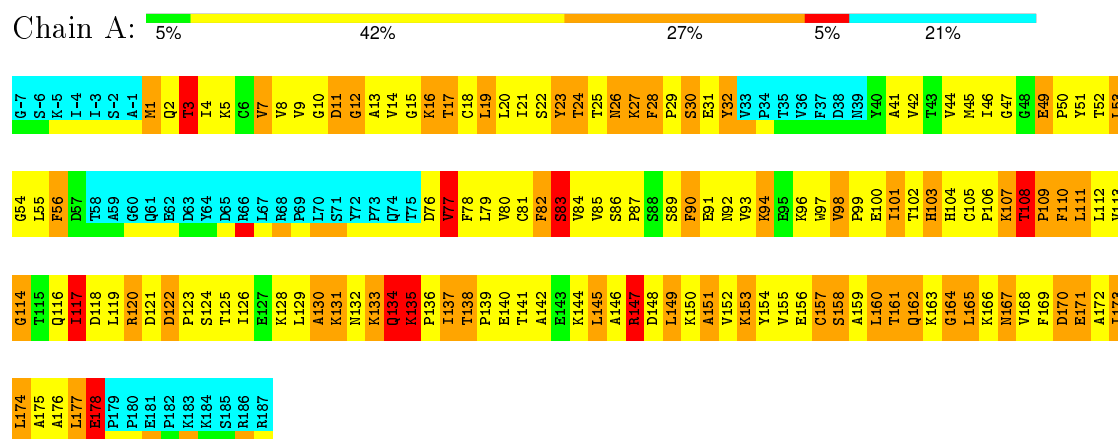
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: CDC42HS



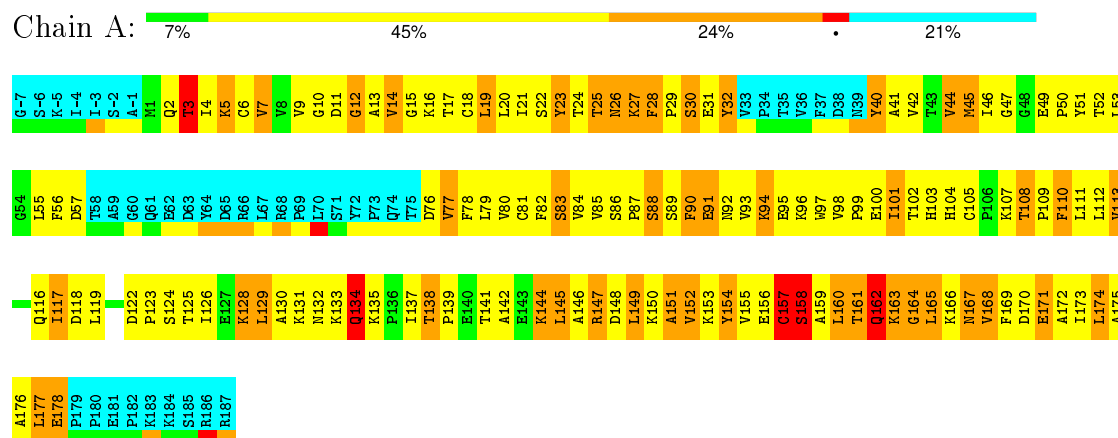
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: CDC42HS



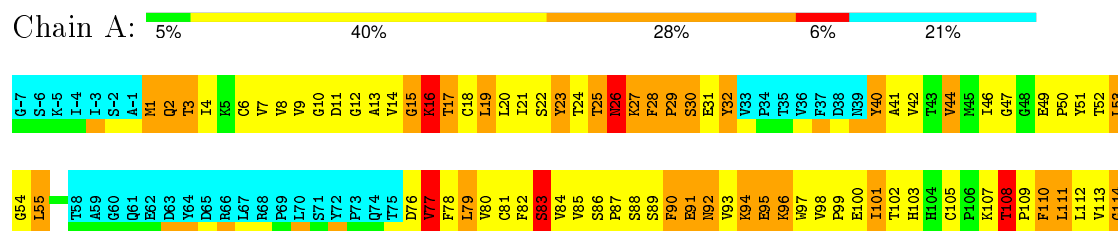
4.2.11 Score per residue for model 11

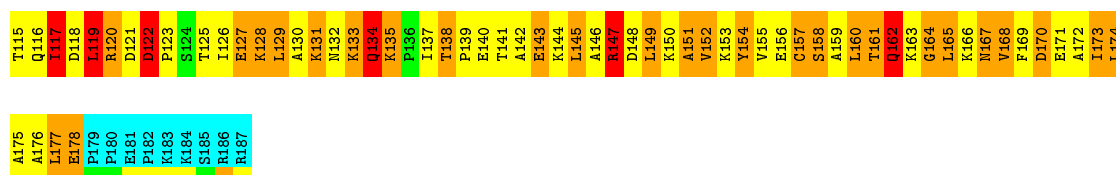
- Molecule 1: CDC42HS



4.2.12 Score per residue for model 12

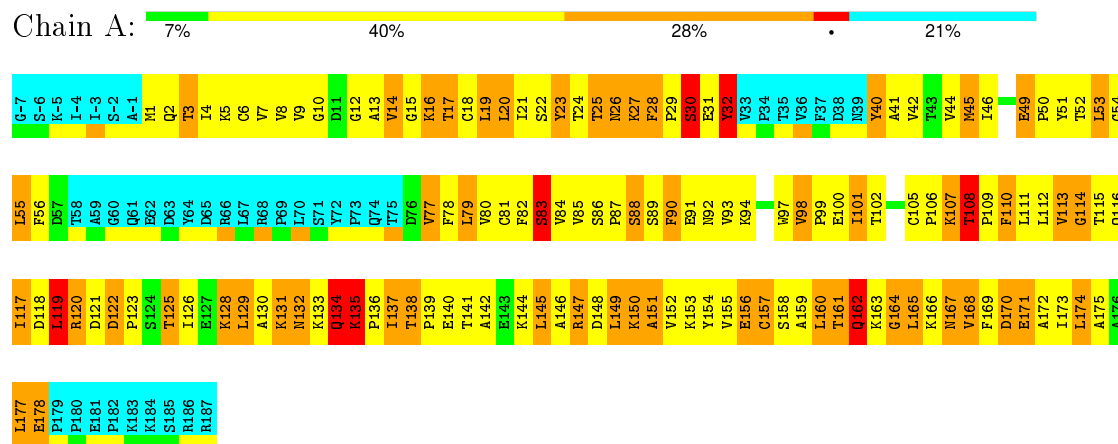
- Molecule 1: CDC42HS





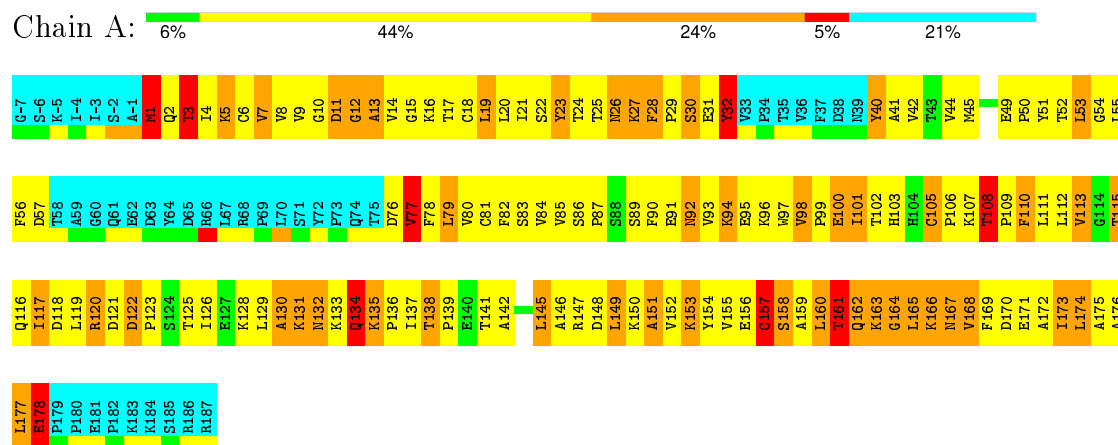
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: CDC42HS



4.2.14 Score per residue for model 14

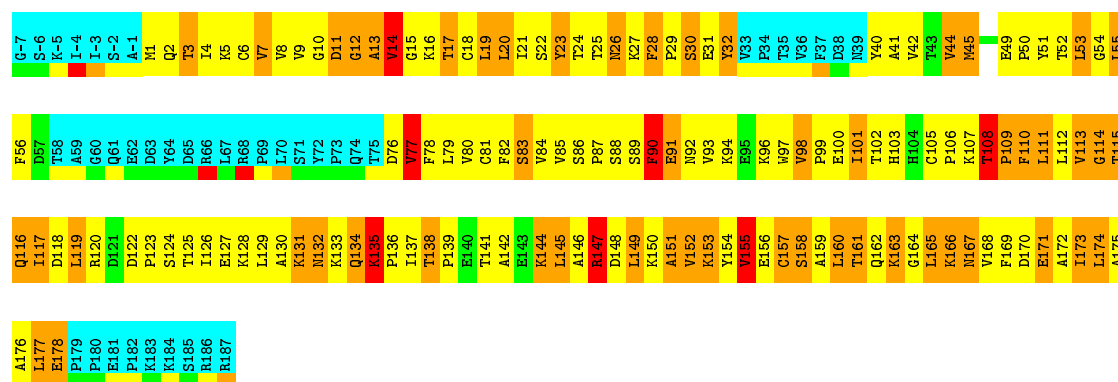
- Molecule 1: CDC42HS



4.2.15 Score per residue for model 15

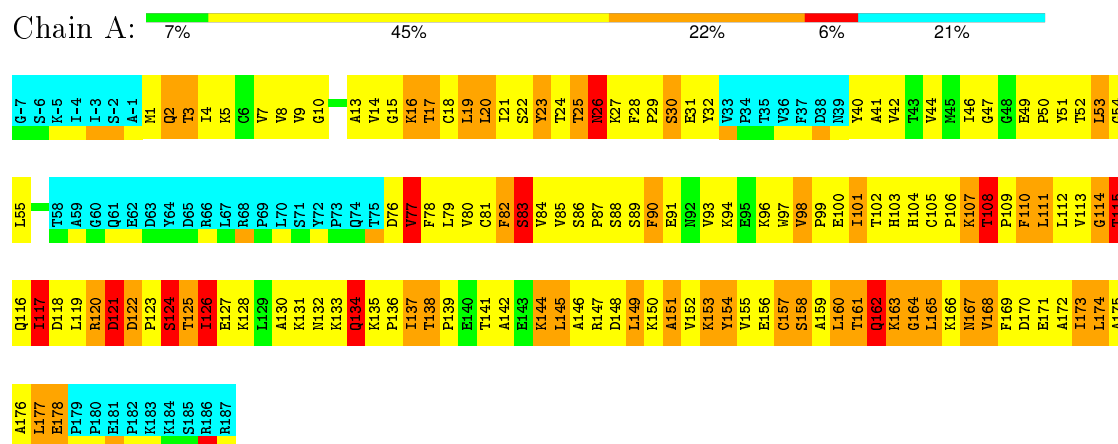
- Molecule 1: CDC42HS





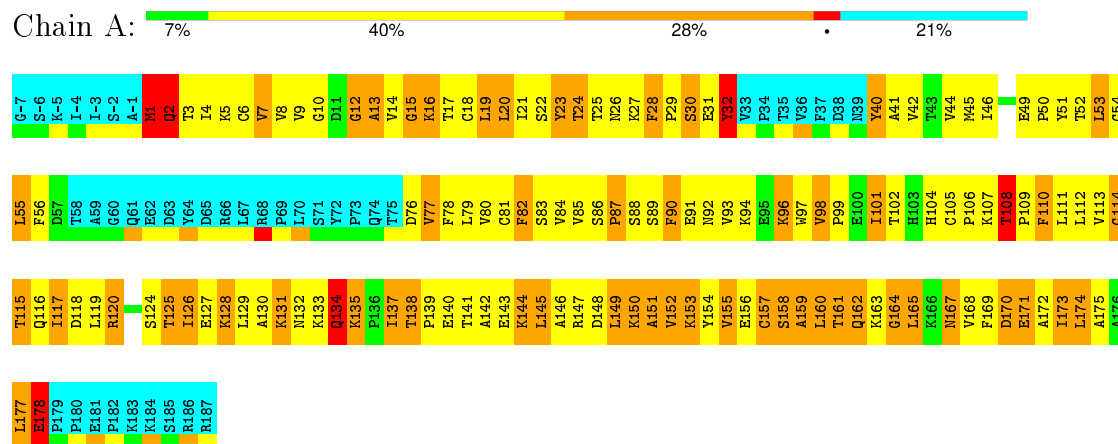
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: CDC42HS



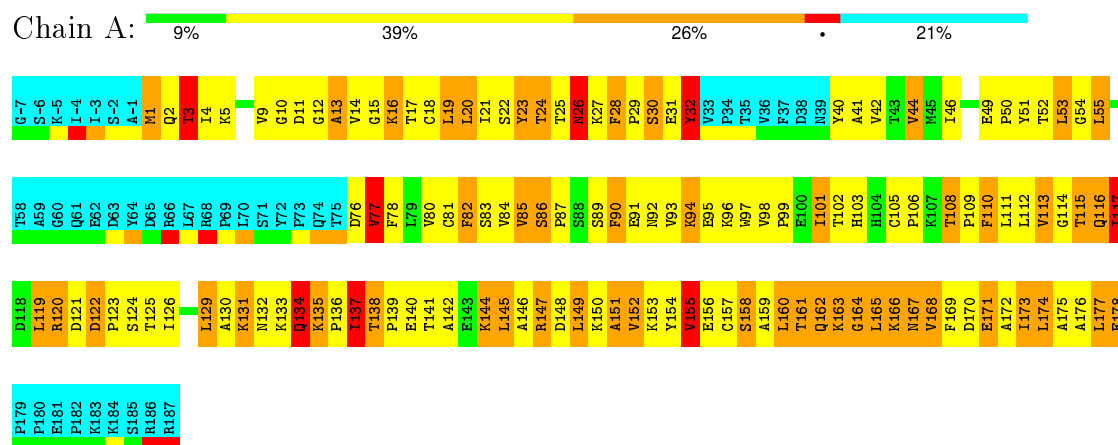
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: CDC42HS



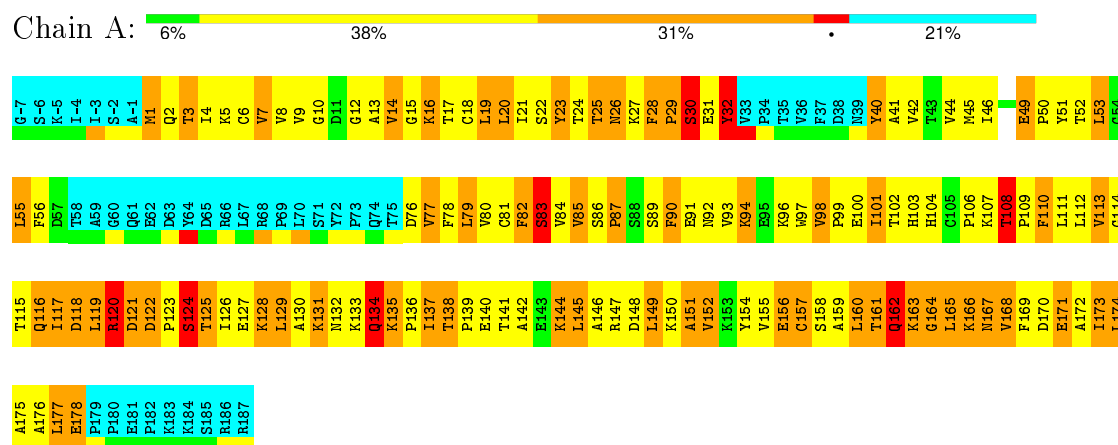
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: CDC42HS



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: CDC42HS



| | |
|------|------|
| T115 | A175 |
| Q116 | A176 |
| I117 | L177 |
| D118 | E178 |
| L119 | P179 |
| P120 | P180 |
| D121 | E181 |
| D122 | P182 |
| P123 | K183 |
| S124 | K184 |
| T125 | S185 |
| I126 | R186 |
| E127 | R187 |
| K128 | |
| L129 | |
| A130 | |
| K131 | |
| N132 | |
| K133 | |
| Q134 | |
| K135 | |
| P136 | |
| I137 | |
| T138 | |
| P139 | |
| E140 | |
| T141 | |
| A142 | |
| E143 | |
| K144 | |
| L145 | |
| A146 | |
| R147 | |
| D148 | |
| L149 | |
| K150 | |
| A151 | |
| V152 | |
| K153 | |
| Y154 | |
| V155 | |
| E156 | |
| C157 | |
| S158 | |
| A159 | |
| L160 | |
| T161 | |
| Q162 | |
| K163 | |
| G164 | |
| L165 | |
| K166 | |
| N167 | |
| V168 | |
| F169 | |
| D170 | |
| E171 | |
| A172 | |
| I173 | |
| L174 | |

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY FOLLOWED BY SIMULATED ANNEALING*.

Of the 50 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST OVERALL ENERGY AND LOWEST CONSTRAINT VIOLATIONS*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|--------------------|---------|
| X-PLOR | refinement | 3.843 |
| X-PLOR | structure solution | 3.843 |

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|-----|-------|--------------|---------------------|-------------|---------------------|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 1.03±0.01 | 0±0/1210 (0.0±0.0%) | 1.27±0.01 | 1±1/1646 (0.0±0.0%) |
| All | All | 1.03 | 0/24200 (0.0%) | 1.27 | 13/32920 (0.0%) |

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 | 1.9±0.4 |
| All | All | 0 | 37 |

There are no bond-length outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|----------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 132 | ASN | N-CA-CB | -5.74 | 100.27 | 110.60 | 14 | 5 |
| 1 | A | 111 | LEU | CA-CB-CG | -5.40 | 102.88 | 115.30 | 7 | 6 |
| 1 | A | 177 | LEU | N-CA-CB | -5.36 | 99.67 | 110.40 | 5 | 1 |
| 1 | A | 161 | THR | N-CA-CB | -5.33 | 100.17 | 110.30 | 14 | 1 |

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 | 147 | ARG | Sidechain | 20 |
| 1 | A | 120 | ARG | Sidechain | 17 |

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 1185 | 1215 | 1215 | 409±22 |
| All | All | 23700 | 24300 | 24300 | 8176 |

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 170.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:177:LEU:HD22 | 1:A:177:LEU:O | 1.23 | 1.34 | 13 | 13 |
| 1:A:145:LEU:HD12 | 1:A:146:ALA:N | 1.14 | 1.57 | 8 | 20 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:102:THR:HG23 | 1.05 | 1.29 | 4 | 16 |
| 1:A:93:VAL:HG13 | 1:A:97:TRP:CE3 | 1.04 | 1.88 | 14 | 19 |
| 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:161:THR:N | 1.04 | 1.68 | 5 | 20 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:112:LEU:HD11 | 1.04 | 1.86 | 20 | 7 |
| 1:A:145:LEU:HD12 | 1:A:145:LEU:C | 1.02 | 1.74 | 5 | 11 |
| 1:A:171:GLU:HA | 1:A:174:LEU:HD12 | 1.01 | 1.30 | 6 | 18 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:149:LEU:HD11 | 1.01 | 1.32 | 8 | 3 |
| 1:A:174:LEU:HA | 1:A:177:LEU:HD12 | 1.01 | 1.33 | 8 | 11 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:177:LEU:HD22 | 1.01 | 1.55 | 8 | 7 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:HA | 1.00 | 1.31 | 20 | 8 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:160:LEU:HD13 | 1.00 | 1.92 | 11 | 20 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD21 | 1.00 | 1.33 | 10 | 1 |
| 1:A:145:LEU:C | 1:A:145:LEU:HD12 | 1.00 | 1.77 | 1 | 9 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:125:THR:HG22 | 0.99 | 1.58 | 20 | 1 |
| 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:154:TYR:CE2 | 0.99 | 1.93 | 15 | 6 |
| 1:A:53:LEU:O | 1:A:53:LEU:HD22 | 0.98 | 1.59 | 17 | 3 |
| 1:A:177:LEU:HD13 | 1:A:177:LEU:O | 0.98 | 1.58 | 5 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HD13 | 1:A:166:LYS:N | 0.98 | 1.74 | 12 | 12 |
| 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:168:VAL:HG21 | 0.96 | 1.31 | 19 | 5 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:109:PRO:HB2 | 0.96 | 1.34 | 8 | 9 |
| 1:A:174:LEU:O | 1:A:174:LEU:HD22 | 0.95 | 1.62 | 10 | 10 |
| 1:A:174:LEU:HD22 | 1:A:174:LEU:O | 0.95 | 1.62 | 18 | 10 |
| 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:53:LEU:O | 0.95 | 1.62 | 9 | 6 |
| 1:A:177:LEU:HD13 | 1:A:178:GLU:N | 0.95 | 1.76 | 18 | 18 |
| 1:A:41:ALA:HB1 | 1:A:52:THR:HG22 | 0.95 | 1.36 | 7 | 20 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:ILE:N | 0.95 | 1.77 | 6 | 3 |
| 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:145:LEU:HD11 | 0.95 | 1.37 | 13 | 17 |
| 1:A:87:PRO:CG | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.94 | 1.91 | 20 | 7 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:CB | 0.94 | 1.91 | 9 | 7 |
| 1:A:174:LEU:HD13 | 1:A:175:ALA:N | 0.94 | 1.76 | 18 | 20 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:77:VAL:HG23 | 0.94 | 1.63 | 3 | 7 |
| 1:A:165:LEU:HD22 | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.93 | 1.97 | 5 | 13 |
| 1:A:145:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.93 | 1.41 | 20 | 17 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:112:LEU:HD11 | 0.93 | 1.98 | 19 | 4 |
| 1:A:93:VAL:HG22 | 1:A:97:TRP:CZ2 | 0.93 | 1.99 | 12 | 16 |
| 1:A:84:VAL:HA | 1:A:137:ILE:HD13 | 0.93 | 1.41 | 5 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.92 | 1.98 | 9 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CD2 | 1:A:173:ILE:HG21 | 0.92 | 1.98 | 10 | 7 |
| 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.92 | 1.39 | 18 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.92 | 1.37 | 9 | 6 |
| 1:A:155:VAL:HG21 | 1:A:168:VAL:HG23 | 0.92 | 1.38 | 10 | 12 |
| 1:A:137:ILE:CG2 | 1:A:142:ALA:HB2 | 0.92 | 1.95 | 9 | 10 |
| 1:A:80:VAL:HG11 | 1:A:94:LYS:NZ | 0.92 | 1.80 | 20 | 6 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.91 | 1.98 | 5 | 7 |
| 1:A:165:LEU:HD23 | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.91 | 1.99 | 7 | 6 |
| 1:A:52:THR:C | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.91 | 1.85 | 4 | 4 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:116:GLN:O | 0.90 | 1.65 | 1 | 2 |
| 1:A:53:LEU:N | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.90 | 1.81 | 13 | 5 |
| 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:168:VAL:CG2 | 0.90 | 1.94 | 12 | 8 |
| 1:A:14:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:CZ | 0.90 | 1.96 | 18 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HG12 | 1:A:102:THR:OG1 | 0.90 | 1.67 | 14 | 10 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.90 | 1.67 | 19 | 2 |
| 1:A:9:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:CG2 | 0.90 | 1.97 | 16 | 17 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:O | 0.90 | 1.66 | 7 | 1 |
| 1:A:24:THR:HA | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.90 | 1.43 | 11 | 9 |
| 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:165:LEU:HD23 | 0.90 | 1.44 | 6 | 10 |
| 1:A:161:THR:HG22 | 1:A:162:GLN:N | 0.89 | 1.82 | 13 | 20 |
| 1:A:19:LEU:HA | 1:A:159:ALA:HB2 | 0.88 | 1.43 | 12 | 18 |
| 1:A:174:LEU:HD13 | 1:A:174:LEU:C | 0.88 | 1.87 | 7 | 11 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:84:VAL:HG22 | 0.88 | 2.02 | 10 | 13 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.88 | 1.43 | 8 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:124:SER:CB | 0.87 | 1.99 | 8 | 4 |
| 1:A:19:LEU:CD1 | 1:A:165:LEU:HD23 | 0.87 | 1.98 | 19 | 11 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.87 | 1.42 | 18 | 7 |
| 1:A:165:LEU:HD22 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.87 | 2.04 | 13 | 12 |
| 1:A:177:LEU:HD22 | 1:A:177:LEU:C | 0.87 | 1.90 | 7 | 13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:117:ILE:HD12 | 0.87 | 1.69 | 18 | 6 |
| 1:A:168:VAL:HG12 | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.87 | 2.05 | 7 | 17 |
| 1:A:113:VAL:CG1 | 1:A:168:VAL:HG21 | 0.87 | 1.99 | 19 | 3 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:177:LEU:HD12 | 0.86 | 1.69 | 3 | 10 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:109:PRO:CB | 0.86 | 1.99 | 12 | 5 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:177:LEU:HD13 | 0.86 | 1.70 | 10 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.86 | 1.47 | 14 | 2 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.86 | 2.00 | 6 | 7 |
| 1:A:28:PHE:CG | 1:A:160:LEU:HD13 | 0.86 | 2.05 | 16 | 1 |
| 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:154:TYR:CZ | 0.86 | 2.05 | 2 | 16 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD11 | 0.85 | 1.47 | 9 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:125:THR:OG1 | 0.85 | 1.70 | 6 | 3 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:HG21 | 0.85 | 1.71 | 20 | 6 |
| 1:A:6:CYS:CB | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.85 | 2.02 | 7 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:HD12 | 0.84 | 2.11 | 20 | 16 |
| 1:A:137:ILE:HG21 | 1:A:142:ALA:HB2 | 0.84 | 1.47 | 2 | 9 |
| 1:A:174:LEU:C | 1:A:174:LEU:HD13 | 0.84 | 1.92 | 1 | 9 |
| 1:A:87:PRO:HG2 | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.84 | 1.47 | 20 | 7 |
| 1:A:87:PRO:CB | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.84 | 2.00 | 9 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.84 | 2.07 | 1 | 2 |
| 1:A:117:ILE:HD13 | 1:A:157:CYS:N | 0.84 | 1.86 | 8 | 9 |
| 1:A:177:LEU:C | 1:A:177:LEU:HD22 | 0.84 | 1.93 | 13 | 7 |
| 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:161:THR:H | 0.84 | 1.32 | 2 | 20 |
| 1:A:121:ASP:CA | 1:A:125:THR:HB | 0.84 | 2.03 | 9 | 1 |
| 1:A:165:LEU:C | 1:A:165:LEU:HD13 | 0.83 | 1.91 | 11 | 4 |
| 1:A:2:GLN:OE1 | 1:A:177:LEU:HD23 | 0.83 | 1.72 | 16 | 2 |
| 1:A:117:ILE:HD11 | 1:A:156:GLU:HB3 | 0.83 | 1.49 | 15 | 5 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:112:LEU:HD21 | 0.83 | 2.08 | 20 | 5 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:52:THR:HA | 0.83 | 1.74 | 3 | 20 |
| 1:A:165:LEU:CD2 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.83 | 2.60 | 20 | 18 |
| 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:109:PRO:CG | 0.83 | 2.02 | 18 | 2 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.83 | 2.03 | 17 | 10 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.83 | 2.04 | 8 | 7 |
| 1:A:155:VAL:HG11 | 1:A:167:ASN:HD21 | 0.83 | 1.32 | 8 | 14 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:CG | 0.83 | 2.32 | 5 | 16 |
| 1:A:117:ILE:HD12 | 1:A:157:CYS:N | 0.83 | 1.89 | 1 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:102:THR:CG2 | 0.82 | 2.04 | 17 | 17 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:119:LEU:HD12 | 0.82 | 1.74 | 15 | 1 |
| 1:A:113:VAL:CG1 | 1:A:155:VAL:HG22 | 0.82 | 2.02 | 10 | 7 |
| 1:A:154:TYR:O | 1:A:155:VAL:HG13 | 0.82 | 1.74 | 18 | 5 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:108:THR:HG22 | 0.82 | 2.09 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:HG23 | 0.82 | 1.74 | 20 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.81 | 2.10 | 6 | 1 |
| 1:A:19:LEU:C | 1:A:19:LEU:HD12 | 0.81 | 1.96 | 12 | 11 |
| 1:A:155:VAL:HG11 | 1:A:167:ASN:ND2 | 0.81 | 1.89 | 8 | 8 |
| 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.81 | 2.04 | 2 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:112:LEU:HD11 | 0.81 | 2.10 | 6 | 6 |
| 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.81 | 2.06 | 15 | 5 |
| 1:A:177:LEU:HD13 | 1:A:177:LEU:C | 0.81 | 1.96 | 8 | 13 |
| 1:A:93:VAL:HG13 | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.81 | 2.11 | 11 | 17 |
| 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:79:LEU:HD12 | 0.81 | 1.50 | 19 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:124:SER:HB3 | 0.81 | 1.49 | 15 | 2 |
| 1:A:21:ILE:HD12 | 1:A:32:TYR:CE1 | 0.81 | 2.10 | 2 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.81 | 1.50 | 12 | 7 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:20:LEU:HD22 | 0.81 | 1.75 | 3 | 3 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:53:LEU:O | 0.81 | 1.74 | 1 | 20 |
| 1:A:128:LYS:O | 1:A:129:LEU:HD12 | 0.81 | 1.76 | 4 | 4 |
| 1:A:3:THR:C | 1:A:4:ILE:HD12 | 0.81 | 1.97 | 4 | 13 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:122:ASP:HB3 | 0.81 | 1.50 | 9 | 1 |
| 1:A:138:THR:HG22 | 1:A:139:PRO:HD2 | 0.80 | 1.53 | 11 | 20 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.80 | 2.05 | 4 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.80 | 1.53 | 1 | 4 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:HA | 0.80 | 2.07 | 20 | 6 |
| 1:A:6:CYS:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.80 | 1.53 | 7 | 3 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:CA | 0.80 | 2.05 | 20 | 1 |
| 1:A:21:ILE:HG21 | 1:A:28:PHE:HA | 0.80 | 1.54 | 20 | 3 |
| 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:131:LYS:HE2 | 0.80 | 1.52 | 17 | 3 |
| 1:A:118:ASP:C | 1:A:119:LEU:HD22 | 0.80 | 1.96 | 17 | 7 |
| 1:A:53:LEU:HB3 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.80 | 1.53 | 5 | 3 |
| 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:154:TYR:CE1 | 0.79 | 2.12 | 3 | 9 |
| 1:A:8:VAL:HG23 | 1:A:55:LEU:HD11 | 0.79 | 1.53 | 7 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD1 | 1:A:160:LEU:HD13 | 0.79 | 2.11 | 16 | 19 |
| 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:146:ALA:HB2 | 0.79 | 1.54 | 9 | 13 |
| 1:A:117:ILE:HD13 | 1:A:163:LYS:HE2 | 0.79 | 1.53 | 13 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:THR:HG23 | 0.79 | 1.54 | 6 | 6 |
| 1:A:94:LYS:HG3 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.79 | 1.53 | 6 | 9 |
| 1:A:93:VAL:HA | 1:A:97:TRP:CD1 | 0.79 | 2.12 | 3 | 18 |
| 1:A:121:ASP:HA | 1:A:125:THR:HB | 0.79 | 1.54 | 9 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HA | 1:A:98:VAL:HG23 | 0.79 | 1.55 | 2 | 20 |
| 1:A:9:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HG21 | 0.79 | 1.55 | 20 | 7 |
| 1:A:28:PHE:CD1 | 1:A:28:PHE:O | 0.79 | 2.36 | 15 | 11 |
| 1:A:81:CYS:O | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.79 | 2.36 | 3 | 18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:51:TYR:O | 0.78 | 1.77 | 6 | 10 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:171:GLU:HB3 | 0.78 | 1.54 | 7 | 12 |
| 1:A:123:PRO:HA | 1:A:126:ILE:HG12 | 0.78 | 1.52 | 19 | 17 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.78 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:162:GLN:N | 1:A:162:GLN:NE2 | 0.78 | 2.31 | 12 | 12 |
| 1:A:80:VAL:HG21 | 1:A:110:PHE:CE1 | 0.78 | 2.12 | 10 | 11 |
| 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:168:VAL:HG21 | 0.78 | 1.54 | 1 | 8 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.78 | 1.53 | 13 | 2 |
| 1:A:24:THR:CG2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 0.78 | 2.08 | 15 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:156:GLU:OE1 | 0.78 | 1.78 | 9 | 2 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:108:THR:HG21 | 0.78 | 1.77 | 18 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.78 | 1.56 | 3 | 5 |
| 1:A:94:LYS:O | 1:A:98:VAL:HG23 | 0.78 | 1.79 | 5 | 10 |
| 1:A:155:VAL:HG21 | 1:A:168:VAL:CG2 | 0.78 | 2.09 | 10 | 9 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:HB3 | 0.78 | 1.79 | 19 | 1 |
| 1:A:52:THR:O | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.77 | 1.79 | 7 | 4 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.77 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:177:LEU:CD1 | 0.77 | 2.32 | 5 | 2 |
| 1:A:113:VAL:CG1 | 1:A:155:VAL:HG23 | 0.77 | 2.09 | 15 | 1 |
| 1:A:110:PHE:O | 1:A:152:VAL:HB | 0.77 | 1.80 | 19 | 20 |
| 1:A:145:LEU:CD1 | 1:A:145:LEU:C | 0.77 | 2.53 | 4 | 11 |
| 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.77 | 2.14 | 10 | 12 |
| 1:A:137:ILE:HG23 | 1:A:142:ALA:HB2 | 0.77 | 1.55 | 9 | 4 |
| 1:A:145:LEU:CD1 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.77 | 2.09 | 20 | 4 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:160:LEU:HD13 | 0.77 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:83:SER:OG | 0.77 | 1.78 | 4 | 2 |
| 1:A:162:GLN:N | 1:A:162:GLN:HE21 | 0.77 | 1.77 | 8 | 10 |
| 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:173:ILE:HD13 | 0.77 | 1.54 | 15 | 3 |
| 1:A:87:PRO:CG | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.77 | 2.09 | 9 | 2 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:94:LYS:N | 0.77 | 2.47 | 8 | 6 |
| 1:A:177:LEU:C | 1:A:177:LEU:HD13 | 0.77 | 2.00 | 1 | 7 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.77 | 2.15 | 17 | 5 |
| 1:A:17:THR:HA | 1:A:20:LEU:HD11 | 0.77 | 1.55 | 1 | 1 |
| 1:A:145:LEU:C | 1:A:145:LEU:CD1 | 0.77 | 2.54 | 6 | 9 |
| 1:A:165:LEU:HD13 | 1:A:165:LEU:C | 0.77 | 1.99 | 14 | 8 |
| 1:A:82:PHE:HA | 1:A:93:VAL:HG21 | 0.77 | 1.57 | 15 | 7 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.76 | 1.54 | 18 | 6 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:123:PRO:CD | 0.76 | 2.33 | 16 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:19:LEU:C | 0.76 | 2.01 | 16 | 9 |
| 1:A:41:ALA:HB1 | 1:A:52:THR:CG2 | 0.76 | 2.09 | 5 | 20 |
| 1:A:123:PRO:HA | 1:A:126:ILE:CG1 | 0.76 | 2.10 | 8 | 17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:CB | 0.76 | 2.10 | 19 | 1 |
| 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:154:TYR:CZ | 0.76 | 2.15 | 12 | 3 |
| 1:A:90:PHE:CD2 | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.76 | 2.69 | 14 | 14 |
| 1:A:94:LYS:HG2 | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.76 | 1.54 | 5 | 6 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:89:SER:OG | 0.76 | 1.81 | 2 | 2 |
| 1:A:109:PRO:HA | 1:A:175:ALA:HB1 | 0.76 | 1.55 | 2 | 7 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:157:CYS:HB3 | 0.76 | 1.79 | 9 | 2 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:93:VAL:HG23 | 0.75 | 1.81 | 9 | 3 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:159:ALA:HB1 | 0.75 | 1.81 | 5 | 3 |
| 1:A:97:TRP:O | 1:A:101:ILE:HG12 | 0.75 | 1.81 | 8 | 20 |
| 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:125:THR:HG22 | 0.75 | 1.56 | 19 | 1 |
| 1:A:23:TYR:HA | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.75 | 2.16 | 14 | 19 |
| 1:A:21:ILE:O | 1:A:25:THR:HG23 | 0.75 | 1.81 | 3 | 12 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.75 | 1.54 | 16 | 2 |
| 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:53:LEU:H | 0.75 | 1.42 | 16 | 1 |
| 1:A:108:THR:HG22 | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.75 | 1.58 | 11 | 2 |
| 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.75 | 1.57 | 6 | 1 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:CB | 0.75 | 2.34 | 5 | 11 |
| 1:A:93:VAL:HG22 | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.75 | 2.17 | 14 | 5 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:CD | 0.74 | 2.03 | 14 | 5 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:119:LEU:HD22 | 0.74 | 1.81 | 10 | 6 |
| 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:56:PHE:N | 0.74 | 1.95 | 10 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.74 | 1.57 | 19 | 5 |
| 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.74 | 1.57 | 17 | 7 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:HD22 | 0.74 | 2.02 | 6 | 3 |
| 1:A:93:VAL:HA | 1:A:97:TRP:CG | 0.74 | 2.17 | 3 | 10 |
| 1:A:4:ILE:HG23 | 1:A:176:ALA:CB | 0.74 | 2.12 | 14 | 7 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:120:ARG:O | 0.74 | 1.81 | 13 | 6 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:HG22 | 0.74 | 1.57 | 10 | 2 |
| 1:A:55:LEU:N | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.74 | 1.97 | 13 | 2 |
| 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:136:PRO:HB2 | 0.74 | 1.59 | 3 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:24:THR:HG23 | 0.74 | 2.18 | 4 | 5 |
| 1:A:108:THR:HG22 | 1:A:109:PRO:CD | 0.74 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:137:ILE:HB | 0.74 | 1.58 | 9 | 9 |
| 1:A:177:LEU:CD2 | 1:A:177:LEU:O | 0.74 | 2.36 | 5 | 2 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:21:ILE:CG1 | 0.74 | 2.13 | 3 | 19 |
| 1:A:22:SER:HA | 1:A:26:ASN:N | 0.74 | 1.98 | 1 | 20 |
| 1:A:162:GLN:NE2 | 1:A:162:GLN:N | 0.74 | 2.35 | 16 | 8 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.74 | 1.58 | 16 | 2 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.74 | 2.13 | 4 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HA | 1:A:109:PRO:HB2 | 0.73 | 1.58 | 3 | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:16:LYS:NZ | 1:A:19:LEU:HD23 | 0.73 | 1.98 | 18 | 2 |
| 1:A:24:THR:CA | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.73 | 2.12 | 11 | 8 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 0.73 | 2.18 | 11 | 1 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.73 | 2.12 | 6 | 3 |
| 1:A:87:PRO:CD | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.73 | 2.13 | 20 | 2 |
| 1:A:14:VAL:CG2 | 1:A:85:VAL:HG21 | 0.73 | 2.13 | 16 | 2 |
| 1:A:161:THR:O | 1:A:162:GLN:HB2 | 0.73 | 1.83 | 12 | 20 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:HB2 | 0.73 | 1.83 | 5 | 10 |
| 1:A:111:LEU:CD1 | 1:A:172:ALA:HA | 0.73 | 2.13 | 3 | 20 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:HB2 | 0.73 | 1.61 | 19 | 1 |
| 1:A:122:ASP:HB3 | 1:A:123:PRO:CD | 0.73 | 2.13 | 9 | 4 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:102:THR:HG23 | 0.73 | 2.11 | 4 | 17 |
| 1:A:116:GLN:HA | 1:A:158:SER:HA | 0.73 | 1.60 | 4 | 9 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:116:GLN:HB2 | 0.73 | 1.60 | 1 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.73 | 1.83 | 15 | 1 |
| 1:A:162:GLN:OE1 | 1:A:165:LEU:HD22 | 0.73 | 1.83 | 15 | 3 |
| 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.73 | 1.61 | 3 | 4 |
| 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:121:ASP:CG | 0.72 | 2.03 | 6 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:137:ILE:HG21 | 0.72 | 2.19 | 11 | 4 |
| 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.72 | 1.60 | 3 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.72 | 2.76 | 3 | 4 |
| 1:A:16:LYS:O | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.72 | 1.83 | 4 | 8 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CZ2 | 0.72 | 2.19 | 4 | 15 |
| 1:A:118:ASP:OD2 | 1:A:160:LEU:HD11 | 0.72 | 1.84 | 9 | 3 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:177:LEU:CD2 | 0.72 | 2.36 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.72 | 2.19 | 10 | 2 |
| 1:A:87:PRO:HA | 1:A:137:ILE:HD12 | 0.72 | 1.62 | 5 | 2 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.72 | 2.20 | 19 | 4 |
| 1:A:93:VAL:HA | 1:A:97:TRP:CE2 | 0.72 | 2.19 | 14 | 18 |
| 1:A:97:TRP:N | 1:A:97:TRP:CD1 | 0.72 | 2.57 | 13 | 11 |
| 1:A:126:ILE:HG22 | 1:A:127:GLU:N | 0.72 | 1.98 | 17 | 2 |
| 1:A:118:ASP:OD2 | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.72 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:42:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.72 | 2.15 | 8 | 5 |
| 1:A:162:GLN:HE21 | 1:A:162:GLN:N | 0.72 | 1.82 | 9 | 6 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.72 | 1.61 | 13 | 7 |
| 1:A:8:VAL:HG13 | 1:A:81:CYS:SG | 0.72 | 2.24 | 4 | 5 |
| 1:A:121:ASP:CG | 1:A:125:THR:HG22 | 0.72 | 2.05 | 9 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:19:LEU:O | 0.71 | 1.84 | 7 | 7 |
| 1:A:165:LEU:CD2 | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.71 | 2.74 | 5 | 12 |
| 1:A:28:PHE:CE2 | 1:A:160:LEU:HD22 | 0.71 | 2.20 | 11 | 1 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CE3 | 0.71 | 2.20 | 3 | 14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:53:LEU:H | 0.71 | 1.44 | 14 | 6 |
| 1:A:126:ILE:HG23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.71 | 1.61 | 12 | 2 |
| 1:A:161:THR:CG2 | 1:A:162:GLN:N | 0.71 | 2.53 | 4 | 20 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CZ2 | 0.71 | 2.20 | 19 | 4 |
| 1:A:53:LEU:CB | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.71 | 2.15 | 5 | 4 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:117:ILE:CB | 0.71 | 2.39 | 12 | 7 |
| 1:A:31:GLU:O | 1:A:32:TYR:O | 0.71 | 2.08 | 6 | 16 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:CG | 0.71 | 2.37 | 11 | 12 |
| 1:A:94:LYS:N | 1:A:94:LYS:HD2 | 0.71 | 2.01 | 5 | 5 |
| 1:A:174:LEU:CA | 1:A:177:LEU:HD12 | 0.71 | 2.15 | 19 | 10 |
| 1:A:97:TRP:CD1 | 1:A:97:TRP:N | 0.71 | 2.59 | 18 | 9 |
| 1:A:28:PHE:CG | 1:A:160:LEU:CD1 | 0.71 | 2.74 | 16 | 1 |
| 1:A:85:VAL:C | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.71 | 2.05 | 18 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HD12 | 1:A:134:GLN:CG | 0.71 | 2.15 | 12 | 4 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:HB2 | 0.71 | 1.61 | 20 | 4 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:118:ASP:N | 0.71 | 2.24 | 20 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.71 | 2.16 | 9 | 2 |
| 1:A:87:PRO:HG2 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.70 | 1.63 | 15 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:131:LYS:NZ | 0.70 | 2.01 | 20 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.70 | 1.64 | 4 | 4 |
| 1:A:17:THR:HG22 | 1:A:18:CYS:N | 0.70 | 2.00 | 12 | 15 |
| 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.70 | 2.16 | 3 | 3 |
| 1:A:108:THR:O | 1:A:152:VAL:HG23 | 0.70 | 1.87 | 15 | 4 |
| 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:53:LEU:N | 0.70 | 2.01 | 14 | 5 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:CG | 0.70 | 2.17 | 12 | 1 |
| 1:A:112:LEU:O | 1:A:154:TYR:HA | 0.70 | 1.86 | 12 | 16 |
| 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:125:THR:HG23 | 0.70 | 1.61 | 11 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HD13 | 1:A:157:CYS:H | 0.70 | 1.46 | 9 | 4 |
| 1:A:93:VAL:O | 1:A:97:TRP:HB2 | 0.70 | 1.87 | 17 | 19 |
| 1:A:169:PHE:O | 1:A:173:ILE:HD13 | 0.70 | 1.85 | 1 | 10 |
| 1:A:122:ASP:CB | 1:A:123:PRO:CD | 0.70 | 2.69 | 20 | 7 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.70 | 2.20 | 8 | 2 |
| 1:A:22:SER:CB | 1:A:159:ALA:HB1 | 0.70 | 2.17 | 2 | 9 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.70 | 2.80 | 11 | 3 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:125:THR:HG23 | 0.70 | 2.17 | 11 | 2 |
| 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.70 | 1.62 | 4 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:14:VAL:HG12 | 0.70 | 1.86 | 14 | 3 |
| 1:A:23:TYR:O | 1:A:42:VAL:HG21 | 0.70 | 1.87 | 5 | 2 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.70 | 2.16 | 5 | 1 |
| 1:A:108:THR:OG1 | 1:A:109:PRO:CD | 0.70 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HG23 | 1:A:78:PHE:N | 0.70 | 2.02 | 4 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:93:VAL:O | 1:A:97:TRP:CG | 0.70 | 2.45 | 2 | 7 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:119:LEU:HB2 | 0.69 | 1.85 | 9 | 4 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.69 | 2.16 | 1 | 5 |
| 1:A:94:LYS:HA | 1:A:98:VAL:CG2 | 0.69 | 2.17 | 9 | 20 |
| 1:A:112:LEU:CD2 | 1:A:146:ALA:HB2 | 0.69 | 2.16 | 9 | 6 |
| 1:A:28:PHE:O | 1:A:28:PHE:CD1 | 0.69 | 2.45 | 17 | 4 |
| 1:A:80:VAL:HG13 | 1:A:93:VAL:CG1 | 0.69 | 2.18 | 15 | 14 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.69 | 2.22 | 3 | 15 |
| 1:A:14:VAL:HG13 | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.69 | 1.63 | 9 | 1 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:105:CYS:CA | 0.69 | 2.70 | 6 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:21:ILE:HG13 | 0.69 | 1.62 | 6 | 7 |
| 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:121:ASP:OD2 | 0.69 | 1.87 | 6 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HG12 | 1:A:104:HIS:N | 0.69 | 2.03 | 3 | 3 |
| 1:A:16:LYS:NZ | 1:A:114:GLY:O | 0.69 | 2.24 | 18 | 2 |
| 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.69 | 2.23 | 16 | 8 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CE2 | 0.69 | 2.22 | 1 | 15 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:145:LEU:HD23 | 0.69 | 2.22 | 20 | 11 |
| 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.69 | 1.63 | 13 | 3 |
| 1:A:94:LYS:CG | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.69 | 2.17 | 9 | 10 |
| 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:131:LYS:CE | 0.69 | 2.17 | 17 | 4 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.69 | 1.64 | 14 | 2 |
| 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.69 | 1.64 | 2 | 3 |
| 1:A:53:LEU:O | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.69 | 1.87 | 8 | 1 |
| 1:A:53:LEU:CD1 | 1:A:53:LEU:N | 0.69 | 2.54 | 14 | 5 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:79:LEU:HD23 | 0.69 | 2.28 | 5 | 3 |
| 1:A:174:LEU:HD22 | 1:A:174:LEU:C | 0.69 | 2.08 | 18 | 6 |
| 1:A:94:LYS:N | 1:A:94:LYS:CD | 0.69 | 2.54 | 7 | 3 |
| 1:A:53:LEU:H | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.69 | 1.47 | 9 | 2 |
| 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:145:LEU:CD1 | 0.69 | 2.16 | 13 | 4 |
| 1:A:94:LYS:HG3 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.69 | 1.64 | 9 | 2 |
| 1:A:98:VAL:N | 1:A:99:PRO:HD2 | 0.69 | 2.03 | 2 | 20 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:119:LEU:HD23 | 0.68 | 1.88 | 6 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:30:SER:HA | 0.68 | 2.24 | 6 | 14 |
| 1:A:90:PHE:CD2 | 1:A:145:LEU:HD23 | 0.68 | 2.22 | 14 | 12 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.68 | 2.81 | 5 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:O | 0.68 | 1.88 | 18 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:THR:HG23 | 0.68 | 1.64 | 10 | 1 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:105:CYS:SG | 0.68 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:16:LYS:CD | 1:A:19:LEU:HD23 | 0.68 | 2.18 | 6 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HA | 1:A:97:TRP:NE1 | 0.68 | 2.03 | 7 | 17 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.68 | 2.23 | 3 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:LEU:N | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.68 | 2.55 | 13 | 6 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:77:VAL:HG13 | 0.68 | 1.88 | 13 | 2 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:C | 0.68 | 2.07 | 7 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:106:PRO:O | 0.68 | 1.89 | 8 | 1 |
| 1:A:22:SER:HA | 1:A:26:ASN:CA | 0.68 | 2.18 | 1 | 19 |
| 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.68 | 1.47 | 13 | 2 |
| 1:A:19:LEU:C | 1:A:19:LEU:CD1 | 0.68 | 2.62 | 12 | 5 |
| 1:A:109:PRO:CB | 1:A:175:ALA:HB1 | 0.68 | 2.19 | 11 | 3 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:115:THR:O | 0.68 | 2.12 | 18 | 3 |
| 1:A:174:LEU:HA | 1:A:177:LEU:CD1 | 0.68 | 2.18 | 4 | 18 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.68 | 2.24 | 9 | 4 |
| 1:A:28:PHE:HB2 | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.68 | 1.66 | 9 | 3 |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:14:VAL:HG12 | 0.68 | 1.89 | 1 | 2 |
| 1:A:93:VAL:HG12 | 1:A:94:LYS:HZ2 | 0.68 | 1.46 | 5 | 1 |
| 1:A:118:ASP:CG | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.68 | 2.09 | 19 | 2 |
| 1:A:8:VAL:HG11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 0.68 | 1.65 | 13 | 1 |
| 1:A:142:ALA:CB | 1:A:154:TYR:CZ | 0.67 | 2.78 | 13 | 17 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:24:THR:HG22 | 0.67 | 2.23 | 17 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:169:PHE:CZ | 0.67 | 2.82 | 13 | 3 |
| 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:THR:CG2 | 0.67 | 2.19 | 7 | 4 |
| 1:A:77:VAL:CG1 | 1:A:109:PRO:HB2 | 0.67 | 2.19 | 16 | 13 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.67 | 2.20 | 13 | 3 |
| 1:A:117:ILE:HG12 | 1:A:117:ILE:O | 0.67 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:155:VAL:HG23 | 0.67 | 1.66 | 18 | 2 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.67 | 1.67 | 6 | 2 |
| 1:A:174:LEU:C | 1:A:174:LEU:HD22 | 0.67 | 2.09 | 6 | 12 |
| 1:A:160:LEU:CD2 | 1:A:161:THR:N | 0.67 | 2.55 | 5 | 20 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:152:VAL:HG12 | 0.67 | 2.20 | 18 | 15 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:24:THR:CG2 | 0.67 | 2.77 | 4 | 6 |
| 1:A:77:VAL:HA | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.67 | 1.67 | 13 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CB | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.67 | 2.20 | 9 | 3 |
| 1:A:21:ILE:HG21 | 1:A:28:PHE:CA | 0.67 | 2.19 | 20 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:122:ASP:CB | 0.67 | 2.19 | 9 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:28:PHE:HB2 | 0.67 | 1.65 | 1 | 1 |
| 1:A:108:THR:O | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.67 | 1.90 | 5 | 3 |
| 1:A:87:PRO:CD | 1:A:129:LEU:HD21 | 0.67 | 2.20 | 2 | 1 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:171:GLU:HB3 | 0.67 | 2.19 | 19 | 17 |
| 1:A:170:ASP:O | 1:A:174:LEU:HB3 | 0.67 | 1.90 | 1 | 20 |
| 1:A:94:LYS:HG3 | 1:A:149:LEU:CD2 | 0.67 | 2.20 | 19 | 8 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.67 | 1.65 | 5 | 5 |
| 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.67 | 1.65 | 3 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:154:TYR:C | 1:A:154:TYR:CD1 | 0.67 | 2.69 | 12 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:114:GLY:N | 0.67 | 2.63 | 7 | 7 |
| 1:A:7:VAL:O | 1:A:7:VAL:HG12 | 0.67 | 1.88 | 14 | 9 |
| 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.66 | 1.50 | 6 | 4 |
| 1:A:98:VAL:HG12 | 1:A:104:HIS:H | 0.66 | 1.50 | 5 | 2 |
| 1:A:22:SER:HB3 | 1:A:159:ALA:HB1 | 0.66 | 1.66 | 18 | 8 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.66 | 1.66 | 13 | 1 |
| 1:A:126:ILE:O | 1:A:130:ALA:HB2 | 0.66 | 1.89 | 18 | 9 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:24:THR:CG2 | 0.66 | 2.78 | 16 | 3 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.66 | 1.90 | 4 | 1 |
| 1:A:55:LEU:HD21 | 1:A:79:LEU:HD12 | 0.66 | 1.65 | 2 | 1 |
| 1:A:155:VAL:CG2 | 1:A:168:VAL:HG23 | 0.66 | 2.20 | 18 | 13 |
| 1:A:8:VAL:HG22 | 1:A:79:LEU:HB2 | 0.66 | 1.67 | 12 | 3 |
| 1:A:126:ILE:HD11 | 1:A:134:GLN:HA | 0.66 | 1.67 | 17 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:86:SER:CB | 0.66 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:124:SER:HB2 | 0.66 | 1.66 | 8 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:117:ILE:HB | 0.66 | 1.88 | 12 | 6 |
| 1:A:2:GLN:CG | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.66 | 2.79 | 10 | 7 |
| 1:A:94:LYS:CG | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.66 | 2.20 | 6 | 4 |
| 1:A:78:PHE:CD2 | 1:A:109:PRO:O | 0.66 | 2.48 | 4 | 11 |
| 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:149:LEU:HD22 | 0.66 | 1.68 | 18 | 4 |
| 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.66 | 1.68 | 9 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:24:THR:HG23 | 0.66 | 2.25 | 1 | 3 |
| 1:A:19:LEU:CA | 1:A:159:ALA:HB2 | 0.66 | 2.21 | 12 | 14 |
| 1:A:7:VAL:HG12 | 1:A:7:VAL:O | 0.66 | 1.91 | 4 | 6 |
| 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:90:PHE:HB2 | 0.66 | 1.66 | 3 | 6 |
| 1:A:80:VAL:HG11 | 1:A:94:LYS:HZ1 | 0.66 | 1.47 | 20 | 2 |
| 1:A:23:TYR:C | 1:A:23:TYR:CD1 | 0.66 | 2.70 | 20 | 5 |
| 1:A:4:ILE:O | 1:A:53:LEU:HA | 0.66 | 1.91 | 3 | 15 |
| 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:84:VAL:HG22 | 0.66 | 1.51 | 10 | 6 |
| 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:125:THR:CG2 | 0.66 | 2.21 | 7 | 2 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.66 | 2.21 | 8 | 2 |
| 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:20:LEU:HD11 | 0.65 | 1.66 | 2 | 2 |
| 1:A:80:VAL:CG1 | 1:A:93:VAL:HG12 | 0.65 | 2.21 | 20 | 6 |
| 1:A:17:THR:HG23 | 1:A:21:ILE:HD11 | 0.65 | 1.66 | 9 | 2 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:157:CYS:CB | 0.65 | 2.44 | 3 | 15 |
| 1:A:158:SER:O | 1:A:159:ALA:HB3 | 0.65 | 1.90 | 14 | 12 |
| 1:A:90:PHE:CD1 | 1:A:91:GLU:N | 0.65 | 2.64 | 5 | 13 |
| 1:A:9:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HG23 | 0.65 | 1.68 | 3 | 13 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.65 | 2.84 | 5 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:NH2 | 0.65 | 2.04 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:108:THR:N | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.65 | 2.06 | 10 | 14 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.65 | 2.21 | 5 | 5 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:154:TYR:CE1 | 0.65 | 2.85 | 5 | 1 |
| 1:A:16:LYS:N | 1:A:115:THR:HG23 | 0.65 | 2.07 | 4 | 1 |
| 1:A:161:THR:CG2 | 1:A:163:LYS:CG | 0.65 | 2.75 | 14 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.65 | 2.27 | 3 | 1 |
| 1:A:116:GLN:CA | 1:A:158:SER:HA | 0.65 | 2.21 | 18 | 7 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:84:VAL:HG22 | 0.65 | 2.26 | 15 | 7 |
| 1:A:108:THR:HG23 | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.65 | 1.65 | 18 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HG13 | 1:A:110:PHE:CZ | 0.65 | 2.27 | 20 | 1 |
| 1:A:80:VAL:CG1 | 1:A:93:VAL:CG1 | 0.65 | 2.74 | 10 | 20 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:50:PRO:HA | 0.65 | 1.92 | 15 | 19 |
| 1:A:90:PHE:CZ | 1:A:141:THR:CG2 | 0.65 | 2.80 | 14 | 20 |
| 1:A:51:TYR:HD2 | 1:A:173:ILE:HG21 | 0.65 | 1.46 | 10 | 4 |
| 1:A:8:VAL:CG2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 0.65 | 2.20 | 7 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:86:SER:HB3 | 0.65 | 1.66 | 18 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:19:LEU:HD23 | 0.65 | 1.67 | 6 | 1 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:31:GLU:N | 0.65 | 2.30 | 8 | 15 |
| 1:A:109:PRO:HB3 | 1:A:175:ALA:HB1 | 0.65 | 1.69 | 11 | 3 |
| 1:A:134:GLN:O | 1:A:135:LYS:O | 0.65 | 2.14 | 10 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HG13 | 1:A:102:THR:H | 0.64 | 1.51 | 3 | 3 |
| 1:A:80:VAL:HG11 | 1:A:94:LYS:HZ3 | 0.64 | 1.52 | 12 | 3 |
| 1:A:129:LEU:O | 1:A:130:ALA:HB3 | 0.64 | 1.91 | 15 | 6 |
| 1:A:118:ASP:HB3 | 1:A:158:SER:CB | 0.64 | 2.21 | 16 | 2 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.64 | 1.69 | 12 | 2 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:40:TYR:CD2 | 0.64 | 2.49 | 9 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:164:GLY:N | 0.64 | 2.70 | 18 | 1 |
| 1:A:171:GLU:CA | 1:A:174:LEU:HD12 | 0.64 | 2.17 | 6 | 6 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:160:LEU:CD1 | 0.64 | 2.79 | 14 | 18 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:26:ASN:N | 0.64 | 2.31 | 11 | 5 |
| 1:A:19:LEU:CD1 | 1:A:19:LEU:C | 0.64 | 2.64 | 16 | 12 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.64 | 2.27 | 13 | 16 |
| 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.64 | 2.28 | 10 | 6 |
| 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.64 | 1.68 | 8 | 3 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:149:LEU:CD2 | 0.64 | 2.22 | 16 | 7 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:115:THR:OG1 | 0.64 | 2.13 | 9 | 4 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.64 | 1.68 | 9 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CZ | 1:A:141:THR:HG22 | 0.64 | 2.28 | 7 | 15 |
| 1:A:122:ASP:HB3 | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.64 | 1.68 | 19 | 6 |
| 1:A:78:PHE:CZ | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.64 | 2.28 | 8 | 1 |
| 1:A:3:THR:HA | 1:A:52:THR:HB | 0.64 | 1.69 | 17 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:178:GLU:HB3 | 0.64 | 1.91 | 16 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.64 | 2.86 | 5 | 1 |
| 1:A:97:TRP:O | 1:A:101:ILE:CG1 | 0.64 | 2.46 | 8 | 17 |
| 1:A:159:ALA:O | 1:A:162:GLN:NE2 | 0.64 | 2.31 | 18 | 19 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:108:THR:HG22 | 0.64 | 1.91 | 12 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.64 | 1.70 | 16 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:23:TYR:C | 0.64 | 2.70 | 12 | 7 |
| 1:A:87:PRO:HB3 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.64 | 1.68 | 9 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:104:HIS:C | 0.64 | 2.14 | 6 | 1 |
| 1:A:83:SER:HA | 1:A:115:THR:HG23 | 0.64 | 1.68 | 6 | 1 |
| 1:A:165:LEU:C | 1:A:165:LEU:CD1 | 0.64 | 2.67 | 11 | 5 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:122:ASP:N | 0.64 | 2.28 | 15 | 9 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:125:THR:HG21 | 0.64 | 1.93 | 18 | 2 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:136:PRO:CB | 0.63 | 2.45 | 15 | 8 |
| 1:A:4:ILE:CG2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.63 | 2.24 | 2 | 4 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:C | 0.63 | 2.13 | 18 | 2 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.63 | 1.92 | 14 | 3 |
| 1:A:156:GLU:C | 1:A:157:CYS:SG | 0.63 | 2.76 | 18 | 2 |
| 1:A:22:SER:HB2 | 1:A:159:ALA:HB1 | 0.63 | 1.68 | 13 | 3 |
| 1:A:155:VAL:CG2 | 1:A:168:VAL:CG2 | 0.63 | 2.77 | 10 | 11 |
| 1:A:145:LEU:CD1 | 1:A:146:ALA:N | 0.63 | 2.56 | 9 | 14 |
| 1:A:16:LYS:O | 1:A:19:LEU:HB3 | 0.63 | 1.93 | 8 | 18 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:124:SER:HB3 | 0.63 | 1.70 | 11 | 3 |
| 1:A:42:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.63 | 2.24 | 11 | 3 |
| 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.63 | 2.28 | 20 | 9 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:CG2 | 0.63 | 2.23 | 19 | 1 |
| 1:A:107:LYS:C | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.63 | 2.14 | 2 | 2 |
| 1:A:44:VAL:CG1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.63 | 2.24 | 16 | 1 |
| 1:A:132:ASN:O | 1:A:133:LYS:CG | 0.63 | 2.47 | 10 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.63 | 1.70 | 8 | 2 |
| 1:A:108:THR:CB | 1:A:109:PRO:CD | 0.63 | 2.77 | 11 | 6 |
| 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:125:THR:HG22 | 0.63 | 1.69 | 7 | 1 |
| 1:A:142:ALA:CB | 1:A:154:TYR:OH | 0.63 | 2.47 | 6 | 14 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.63 | 2.87 | 11 | 4 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:152:VAL:HG12 | 0.63 | 1.70 | 4 | 10 |
| 1:A:40:TYR:N | 1:A:40:TYR:CD1 | 0.63 | 2.64 | 11 | 3 |
| 1:A:158:SER:OG | 1:A:160:LEU:CD2 | 0.63 | 2.47 | 13 | 2 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:125:THR:CB | 0.63 | 2.47 | 9 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:124:SER:CB | 0.63 | 2.47 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.63 | 2.82 | 11 | 5 |
| 1:A:77:VAL:CG1 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.63 | 2.21 | 18 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:110:PHE:HB2 | 0.63 | 1.69 | 5 | 1 |
| 1:A:164:GLY:O | 1:A:167:ASN:ND2 | 0.63 | 2.32 | 11 | 20 |
| 1:A:55:LEU:HD22 | 1:A:55:LEU:O | 0.63 | 1.94 | 13 | 1 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:175:ALA:N | 0.62 | 2.32 | 5 | 20 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:157:CYS:HB2 | 0.62 | 1.92 | 3 | 12 |
| 1:A:108:THR:CG2 | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.62 | 2.24 | 18 | 2 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:40:TYR:O | 0.62 | 2.17 | 18 | 11 |
| 1:A:174:LEU:C | 1:A:174:LEU:CD1 | 0.62 | 2.66 | 19 | 10 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.62 | 2.29 | 13 | 17 |
| 1:A:86:SER:N | 1:A:87:PRO:CD | 0.62 | 2.62 | 9 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HD23 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.62 | 2.30 | 20 | 3 |
| 1:A:134:GLN:NE2 | 1:A:134:GLN:N | 0.62 | 2.46 | 16 | 2 |
| 1:A:93:VAL:HG12 | 1:A:94:LYS:CE | 0.62 | 2.24 | 16 | 3 |
| 1:A:10:GLY:CA | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.62 | 2.83 | 6 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:137:ILE:HG12 | 0.62 | 2.29 | 1 | 13 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:21:ILE:HG12 | 0.62 | 1.71 | 15 | 14 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:125:THR:HB | 0.62 | 1.95 | 9 | 5 |
| 1:A:115:THR:O | 1:A:158:SER:HA | 0.62 | 1.94 | 16 | 6 |
| 1:A:104:HIS:C | 1:A:106:PRO:CD | 0.62 | 2.68 | 6 | 1 |
| 1:A:41:ALA:HB2 | 1:A:54:GLY:CA | 0.62 | 2.24 | 7 | 13 |
| 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:114:GLY:HA3 | 0.62 | 1.71 | 15 | 5 |
| 1:A:117:ILE:HG22 | 1:A:117:ILE:O | 0.62 | 1.94 | 9 | 1 |
| 1:A:16:LYS:CE | 1:A:19:LEU:HD23 | 0.62 | 2.24 | 18 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:90:PHE:HB2 | 0.62 | 2.30 | 4 | 11 |
| 1:A:28:PHE:CD1 | 1:A:30:SER:N | 0.62 | 2.67 | 11 | 1 |
| 1:A:115:THR:HG22 | 1:A:116:GLN:N | 0.62 | 2.09 | 4 | 1 |
| 1:A:55:LEU:HD21 | 1:A:79:LEU:CD1 | 0.62 | 2.25 | 2 | 1 |
| 1:A:121:ASP:HA | 1:A:124:SER:HB3 | 0.62 | 1.70 | 20 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:117:ILE:CD1 | 0.62 | 2.47 | 18 | 3 |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:40:TYR:HE1 | 0.62 | 1.54 | 4 | 1 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:78:PHE:CE1 | 0.62 | 2.52 | 10 | 8 |
| 1:A:10:GLY:HA3 | 1:A:93:VAL:HG13 | 0.62 | 1.70 | 20 | 1 |
| 1:A:121:ASP:CA | 1:A:124:SER:HB3 | 0.62 | 2.25 | 20 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:CD1 | 0.62 | 2.88 | 8 | 15 |
| 1:A:19:LEU:HA | 1:A:159:ALA:CB | 0.62 | 2.24 | 2 | 17 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:154:TYR:CE1 | 0.62 | 2.88 | 13 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CD | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.62 | 2.25 | 3 | 3 |
| 1:A:41:ALA:HB2 | 1:A:54:GLY:HA2 | 0.62 | 1.71 | 10 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:24:THR:CG2 | 0.62 | 2.83 | 8 | 2 |
| 1:A:28:PHE:CE2 | 1:A:30:SER:HA | 0.61 | 2.29 | 4 | 15 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:40:TYR:CZ | 0.61 | 2.54 | 7 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:125:THR:HG23 | 0.61 | 1.71 | 18 | 1 |
| 1:A:158:SER:O | 1:A:160:LEU:N | 0.61 | 2.30 | 8 | 15 |
| 1:A:108:THR:HB | 1:A:109:PRO:CD | 0.61 | 2.25 | 8 | 2 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:CG2 | 0.61 | 2.48 | 12 | 7 |
| 1:A:157:CYS:HB2 | 1:A:165:LEU:HB3 | 0.61 | 1.69 | 18 | 3 |
| 1:A:86:SER:HA | 1:A:136:PRO:HA | 0.61 | 1.72 | 9 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HG12 | 1:A:94:LYS:HE3 | 0.61 | 1.70 | 6 | 2 |
| 1:A:169:PHE:O | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.61 | 2.48 | 1 | 10 |
| 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:109:PRO:CB | 0.61 | 2.24 | 11 | 7 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:77:VAL:HG21 | 0.61 | 2.36 | 11 | 5 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.61 | 2.53 | 1 | 5 |
| 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.61 | 2.25 | 8 | 1 |
| 1:A:83:SER:HA | 1:A:115:THR:HG22 | 0.61 | 1.71 | 8 | 2 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:21:ILE:HG12 | 0.61 | 1.95 | 1 | 9 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:23:TYR:CD2 | 0.61 | 2.53 | 20 | 11 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:154:TYR:CE1 | 0.61 | 2.88 | 13 | 4 |
| 1:A:55:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:H | 0.61 | 1.55 | 9 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.61 | 1.94 | 20 | 1 |
| 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.61 | 2.30 | 15 | 4 |
| 1:A:117:ILE:CD1 | 1:A:157:CYS:N | 0.61 | 2.64 | 12 | 10 |
| 1:A:83:SER:O | 1:A:137:ILE:HD13 | 0.61 | 1.96 | 6 | 4 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.61 | 1.70 | 6 | 1 |
| 1:A:23:TYR:HA | 1:A:169:PHE:CZ | 0.61 | 2.31 | 20 | 13 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:137:ILE:HG12 | 0.61 | 2.31 | 2 | 2 |
| 1:A:117:ILE:CG2 | 1:A:157:CYS:C | 0.61 | 2.69 | 16 | 1 |
| 1:A:9:VAL:O | 1:A:97:TRP:CE3 | 0.61 | 2.54 | 17 | 16 |
| 1:A:98:VAL:N | 1:A:99:PRO:CD | 0.61 | 2.64 | 2 | 19 |
| 1:A:117:ILE:CG2 | 1:A:158:SER:N | 0.61 | 2.64 | 16 | 1 |
| 1:A:140:GLU:O | 1:A:144:LYS:HB2 | 0.61 | 1.96 | 9 | 14 |
| 1:A:98:VAL:HA | 1:A:101:ILE:CG1 | 0.61 | 2.26 | 5 | 8 |
| 1:A:165:LEU:CD1 | 1:A:165:LEU:C | 0.61 | 2.69 | 5 | 6 |
| 1:A:8:VAL:HG22 | 1:A:79:LEU:CB | 0.61 | 2.26 | 14 | 8 |
| 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.61 | 2.31 | 2 | 6 |
| 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:GLY:N | 0.61 | 2.11 | 1 | 7 |
| 1:A:41:ALA:HB2 | 1:A:54:GLY:HA3 | 0.61 | 1.73 | 9 | 4 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.61 | 2.30 | 9 | 1 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:32:TYR:HB2 | 0.61 | 1.96 | 16 | 1 |
| 1:A:126:ILE:O | 1:A:130:ALA:N | 0.61 | 2.34 | 2 | 12 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:115:THR:HG23 | 0.61 | 1.70 | 9 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.61 | 1.73 | 20 | 1 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:171:GLU:N | 0.60 | 2.33 | 20 | 17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:4:ILE:HG12 | 1:A:176:ALA:HB3 | 0.60 | 1.73 | 15 | 12 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:HB2 | 0.60 | 2.26 | 19 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:94:LYS:N | 0.60 | 2.11 | 12 | 3 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.60 | 1.95 | 16 | 6 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:89:SER:OG | 0.60 | 1.96 | 20 | 3 |
| 1:A:111:LEU:CD1 | 1:A:172:ALA:CA | 0.60 | 2.78 | 3 | 18 |
| 1:A:161:THR:CG2 | 1:A:163:LYS:HG2 | 0.60 | 2.26 | 8 | 3 |
| 1:A:4:ILE:HB | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.60 | 2.26 | 1 | 4 |
| 1:A:122:ASP:CB | 1:A:123:PRO:HD3 | 0.60 | 2.26 | 9 | 2 |
| 1:A:53:LEU:CD2 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.60 | 2.26 | 2 | 2 |
| 1:A:121:ASP:HB3 | 1:A:125:THR:HB | 0.60 | 1.74 | 20 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HG | 1:A:53:LEU:O | 0.60 | 1.95 | 6 | 2 |
| 1:A:13:ALA:CA | 1:A:83:SER:HB2 | 0.60 | 2.25 | 6 | 1 |
| 1:A:28:PHE:C | 1:A:28:PHE:CD1 | 0.60 | 2.74 | 11 | 8 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:85:VAL:CG2 | 0.60 | 2.80 | 14 | 5 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.60 | 2.26 | 1 | 3 |
| 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:173:ILE:CG1 | 0.60 | 2.26 | 10 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.60 | 2.31 | 15 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.60 | 1.72 | 19 | 1 |
| 1:A:135:LYS:N | 1:A:136:PRO:HD3 | 0.60 | 2.11 | 20 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:112:LEU:CD1 | 0.60 | 2.83 | 20 | 1 |
| 1:A:122:ASP:CB | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.60 | 2.26 | 12 | 9 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:172:ALA:C | 0.60 | 2.38 | 8 | 18 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:82:PHE:C | 0.60 | 2.74 | 13 | 10 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:CG | 0.60 | 2.79 | 14 | 4 |
| 1:A:84:VAL:H | 1:A:115:THR:HG22 | 0.60 | 1.56 | 9 | 1 |
| 1:A:41:ALA:CB | 1:A:52:THR:HG22 | 0.60 | 2.24 | 6 | 9 |
| 1:A:108:THR:O | 1:A:152:VAL:CG2 | 0.60 | 2.49 | 5 | 4 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.60 | 2.80 | 7 | 11 |
| 1:A:138:THR:HG22 | 1:A:139:PRO:CD | 0.60 | 2.27 | 2 | 6 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:HG22 | 0.60 | 1.96 | 8 | 2 |
| 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:105:CYS:HA | 0.60 | 1.74 | 6 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CE1 | 1:A:141:THR:CG2 | 0.60 | 2.84 | 20 | 8 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:HB2 | 0.60 | 1.97 | 1 | 4 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.60 | 1.96 | 2 | 4 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:HB2 | 0.60 | 2.27 | 20 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG21 | 1:A:164:GLY:O | 0.60 | 1.96 | 11 | 3 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:116:GLN:HB3 | 0.60 | 2.27 | 19 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:ILE:N | 0.60 | 2.12 | 5 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.60 | 2.27 | 19 | 6 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:24:THR:HG22 | 0.60 | 2.31 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:106:PRO:CA | 0.60 | 2.85 | 8 | 1 |
| 1:A:78:PHE:N | 1:A:78:PHE:CD1 | 0.60 | 2.70 | 10 | 1 |
| 1:A:154:TYR:C | 1:A:155:VAL:HG22 | 0.60 | 2.16 | 15 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:112:LEU:CD1 | 0.59 | 2.83 | 17 | 4 |
| 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:109:PRO:HB2 | 0.59 | 1.73 | 2 | 5 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:76:ASP:N | 0.59 | 2.32 | 17 | 6 |
| 1:A:2:GLN:CG | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.59 | 2.85 | 13 | 7 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:109:PRO:CA | 0.59 | 2.27 | 5 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:172:ALA:N | 0.59 | 2.13 | 11 | 16 |
| 1:A:90:PHE:O | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.59 | 2.51 | 13 | 15 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.59 | 2.90 | 15 | 2 |
| 1:A:135:LYS:HG2 | 1:A:135:LYS:O | 0.59 | 1.97 | 19 | 1 |
| 1:A:18:CYS:O | 1:A:159:ALA:HB1 | 0.59 | 1.97 | 1 | 6 |
| 1:A:53:LEU:CD1 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.59 | 2.26 | 4 | 3 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:89:SER:HB3 | 0.59 | 1.97 | 12 | 3 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:106:PRO:CB | 0.59 | 2.85 | 8 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:CD | 0.59 | 2.49 | 20 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:86:SER:OG | 0.59 | 1.98 | 15 | 2 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:105:CYS:CB | 0.59 | 2.80 | 6 | 3 |
| 1:A:108:THR:N | 1:A:109:PRO:CD | 0.59 | 2.66 | 12 | 13 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:117:ILE:CG1 | 0.59 | 2.50 | 10 | 4 |
| 1:A:77:VAL:CG1 | 1:A:109:PRO:CB | 0.59 | 2.80 | 7 | 8 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:117:ILE:CG2 | 0.59 | 2.50 | 9 | 2 |
| 1:A:14:VAL:HG11 | 1:A:116:GLN:HB3 | 0.59 | 1.74 | 3 | 1 |
| 1:A:165:LEU:CD1 | 1:A:166:LYS:N | 0.59 | 2.64 | 5 | 6 |
| 1:A:119:LEU:HA | 1:A:122:ASP:HB2 | 0.59 | 1.72 | 18 | 3 |
| 1:A:93:VAL:HG22 | 1:A:97:TRP:CE2 | 0.59 | 2.32 | 15 | 6 |
| 1:A:164:GLY:O | 1:A:168:VAL:N | 0.59 | 2.33 | 7 | 2 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:122:ASP:O | 0.59 | 2.20 | 9 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.59 | 2.28 | 10 | 3 |
| 1:A:121:ASP:HB2 | 1:A:125:THR:CG2 | 0.59 | 2.28 | 9 | 1 |
| 1:A:122:ASP:O | 1:A:126:ILE:CG1 | 0.59 | 2.51 | 9 | 1 |
| 1:A:118:ASP:HB3 | 1:A:158:SER:OG | 0.59 | 1.98 | 16 | 1 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:108:THR:CB | 0.59 | 2.50 | 12 | 14 |
| 1:A:77:VAL:O | 1:A:78:PHE:CD1 | 0.59 | 2.55 | 15 | 14 |
| 1:A:32:TYR:O | 1:A:32:TYR:CD2 | 0.59 | 2.56 | 14 | 2 |
| 1:A:134:GLN:CD | 1:A:135:LYS:N | 0.59 | 2.56 | 10 | 2 |
| 1:A:118:ASP:HB3 | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.59 | 1.73 | 2 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CB | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.59 | 2.86 | 5 | 2 |
| 1:A:174:LEU:CD1 | 1:A:174:LEU:C | 0.59 | 2.70 | 9 | 8 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:124:SER:CB | 0.59 | 2.27 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:168:VAL:HG12 | 1:A:169:PHE:N | 0.59 | 2.13 | 17 | 17 |
| 1:A:174:LEU:O | 1:A:177:LEU:HD12 | 0.59 | 1.97 | 18 | 4 |
| 1:A:17:THR:HA | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.59 | 2.28 | 16 | 16 |
| 1:A:117:ILE:HD13 | 1:A:157:CYS:CA | 0.59 | 2.28 | 19 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CA | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.59 | 2.85 | 19 | 2 |
| 1:A:90:PHE:HB3 | 1:A:137:ILE:HD11 | 0.59 | 1.73 | 16 | 4 |
| 1:A:122:ASP:HB3 | 1:A:123:PRO:HD3 | 0.59 | 1.75 | 9 | 2 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:178:GLU:C | 0.59 | 2.41 | 20 | 15 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.59 | 2.86 | 11 | 2 |
| 1:A:99:PRO:HA | 1:A:103:HIS:HB2 | 0.59 | 1.74 | 2 | 11 |
| 1:A:77:VAL:CG2 | 1:A:78:PHE:N | 0.59 | 2.65 | 4 | 2 |
| 1:A:140:GLU:O | 1:A:144:LYS:N | 0.59 | 2.36 | 12 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:94:LYS:N | 0.59 | 2.13 | 10 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:90:PHE:CB | 0.59 | 2.85 | 18 | 2 |
| 1:A:18:CYS:O | 1:A:21:ILE:HB | 0.58 | 1.98 | 6 | 5 |
| 1:A:108:THR:CG2 | 1:A:109:PRO:CD | 0.58 | 2.81 | 11 | 1 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:120:ARG:C | 0.58 | 2.41 | 20 | 4 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.58 | 2.33 | 13 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:CG | 0.58 | 2.28 | 12 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:20:LEU:HD11 | 0.58 | 1.75 | 10 | 1 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.58 | 1.97 | 4 | 3 |
| 1:A:49:GLU:HG3 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.58 | 2.33 | 17 | 1 |
| 1:A:119:LEU:C | 1:A:119:LEU:CD1 | 0.58 | 2.71 | 7 | 1 |
| 1:A:41:ALA:CB | 1:A:52:THR:CG2 | 0.58 | 2.82 | 7 | 17 |
| 1:A:110:PHE:O | 1:A:152:VAL:N | 0.58 | 2.33 | 18 | 20 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.58 | 2.91 | 11 | 2 |
| 1:A:107:LYS:C | 1:A:109:PRO:CD | 0.58 | 2.71 | 12 | 2 |
| 1:A:6:CYS:HB3 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.58 | 1.74 | 7 | 2 |
| 1:A:98:VAL:HG11 | 1:A:104:HIS:CD2 | 0.58 | 2.34 | 5 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:105:CYS:CB | 0.58 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:9:VAL:O | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.58 | 2.55 | 16 | 16 |
| 1:A:51:TYR:CB | 1:A:173:ILE:HG12 | 0.58 | 2.29 | 7 | 11 |
| 1:A:14:VAL:HG11 | 1:A:116:GLN:CB | 0.58 | 2.27 | 3 | 1 |
| 1:A:94:LYS:O | 1:A:98:VAL:CG2 | 0.58 | 2.51 | 5 | 2 |
| 1:A:104:HIS:CD2 | 1:A:104:HIS:O | 0.58 | 2.56 | 6 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:120:ARG:CG | 0.58 | 2.29 | 6 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:102:THR:CG2 | 0.58 | 2.82 | 20 | 7 |
| 1:A:173:ILE:C | 1:A:177:LEU:HD12 | 0.58 | 2.18 | 3 | 4 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:121:ASP:N | 0.58 | 2.36 | 16 | 3 |
| 1:A:4:ILE:CG1 | 1:A:176:ALA:HB3 | 0.58 | 2.29 | 6 | 8 |
| 1:A:94:LYS:N | 1:A:94:LYS:HE3 | 0.58 | 2.13 | 11 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:119:LEU:N | 0.58 | 2.13 | 1 | 3 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:102:THR:HG22 | 0.58 | 1.73 | 20 | 8 |
| 1:A:136:PRO:O | 1:A:137:ILE:C | 0.58 | 2.42 | 18 | 6 |
| 1:A:84:VAL:CG1 | 1:A:136:PRO:HB2 | 0.58 | 2.29 | 18 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:85:VAL:CG2 | 0.58 | 2.28 | 14 | 3 |
| 1:A:81:CYS:O | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.58 | 2.57 | 10 | 9 |
| 1:A:8:VAL:HG21 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.58 | 1.75 | 7 | 1 |
| 1:A:145:LEU:O | 1:A:148:ASP:N | 0.58 | 2.36 | 10 | 20 |
| 1:A:80:VAL:CG1 | 1:A:93:VAL:HG11 | 0.58 | 2.29 | 11 | 6 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:CG | 0.58 | 2.28 | 4 | 1 |
| 1:A:117:ILE:CG2 | 1:A:117:ILE:O | 0.58 | 2.50 | 20 | 4 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:32:TYR:N | 0.58 | 2.36 | 16 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:OG1 | 0.58 | 2.21 | 8 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:102:THR:HG21 | 0.58 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:128:LYS:C | 1:A:129:LEU:HD12 | 0.58 | 2.19 | 15 | 1 |
| 1:A:119:LEU:C | 1:A:121:ASP:N | 0.58 | 2.53 | 16 | 5 |
| 1:A:17:THR:HA | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.58 | 1.76 | 10 | 7 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:128:LYS:CE | 0.58 | 2.51 | 7 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HG12 | 1:A:94:LYS:NZ | 0.58 | 2.13 | 1 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:129:LEU:O | 0.58 | 1.99 | 2 | 1 |
| 1:A:93:VAL:O | 1:A:97:TRP:CB | 0.58 | 2.51 | 7 | 15 |
| 1:A:150:LYS:O | 1:A:151:ALA:O | 0.58 | 2.22 | 20 | 17 |
| 1:A:56:PHE:CD2 | 1:A:57:ASP:O | 0.58 | 2.57 | 11 | 2 |
| 1:A:12:GLY:O | 1:A:13:ALA:C | 0.58 | 2.42 | 9 | 10 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:OG1 | 0.58 | 2.22 | 4 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG12 | 1:A:14:VAL:O | 0.58 | 1.99 | 13 | 2 |
| 1:A:78:PHE:CE1 | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.58 | 2.34 | 8 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:122:ASP:OD2 | 0.57 | 1.98 | 6 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:110:PHE:HE2 | 0.57 | 1.52 | 10 | 2 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:118:ASP:CG | 0.57 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CB | 1:A:169:PHE:CZ | 0.57 | 2.87 | 19 | 5 |
| 1:A:32:TYR:O | 1:A:32:TYR:CD1 | 0.57 | 2.56 | 18 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CA | 1:A:106:PRO:HG2 | 0.57 | 2.28 | 8 | 1 |
| 1:A:87:PRO:N | 1:A:129:LEU:CD1 | 0.57 | 2.67 | 18 | 1 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:177:LEU:HB3 | 0.57 | 1.99 | 10 | 10 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:83:SER:HB3 | 0.57 | 1.75 | 12 | 3 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:CD | 0.57 | 2.72 | 10 | 3 |
| 1:A:131:LYS:HD2 | 1:A:132:ASN:HD22 | 0.57 | 1.59 | 17 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:121:ASP:CB | 0.57 | 2.29 | 9 | 1 |
| 1:A:174:LEU:HA | 1:A:177:LEU:HB3 | 0.57 | 1.74 | 5 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HA | 1:A:125:THR:HG23 | 0.57 | 1.76 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:14:VAL:HG13 | 0.57 | 1.98 | 15 | 1 |
| 1:A:171:GLU:HA | 1:A:174:LEU:CD1 | 0.57 | 2.21 | 6 | 2 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:4:ILE:HD12 | 0.57 | 1.98 | 6 | 2 |
| 1:A:141:THR:O | 1:A:144:LYS:HB3 | 0.57 | 2.00 | 9 | 15 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:78:PHE:CE2 | 0.57 | 2.57 | 11 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:84:VAL:CG2 | 0.57 | 2.84 | 10 | 9 |
| 1:A:124:SER:O | 1:A:128:LYS:CG | 0.57 | 2.53 | 19 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CG2 | 1:A:127:GLU:N | 0.57 | 2.68 | 17 | 1 |
| 1:A:134:GLN:N | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.57 | 2.51 | 2 | 1 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:52:THR:HG23 | 0.57 | 2.00 | 10 | 2 |
| 1:A:131:LYS:HB3 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.57 | 2.14 | 6 | 10 |
| 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:81:CYS:CB | 0.57 | 2.30 | 19 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:115:THR:CG2 | 0.57 | 2.53 | 7 | 1 |
| 1:A:105:CYS:O | 1:A:107:LYS:N | 0.57 | 2.37 | 8 | 1 |
| 1:A:12:GLY:CA | 1:A:83:SER:OG | 0.57 | 2.53 | 10 | 1 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.57 | 2.82 | 5 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:53:LEU:HG | 0.57 | 2.35 | 5 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.57 | 1.75 | 5 | 1 |
| 1:A:86:SER:C | 1:A:129:LEU:CD1 | 0.57 | 2.73 | 18 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HG | 1:A:169:PHE:CZ | 0.57 | 2.35 | 15 | 1 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:125:THR:CG2 | 0.57 | 2.52 | 13 | 7 |
| 1:A:6:CYS:O | 1:A:55:LEU:HA | 0.57 | 2.00 | 13 | 3 |
| 1:A:134:GLN:NE2 | 1:A:135:LYS:N | 0.57 | 2.52 | 13 | 1 |
| 1:A:82:PHE:C | 1:A:82:PHE:CD1 | 0.57 | 2.76 | 10 | 3 |
| 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:175:ALA:HB2 | 0.57 | 1.76 | 10 | 2 |
| 1:A:126:ILE:HG23 | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.57 | 2.14 | 14 | 1 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:175:ALA:CB | 0.57 | 2.53 | 12 | 5 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:108:THR:CG2 | 0.57 | 2.52 | 12 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG21 | 1:A:167:ASN:ND2 | 0.57 | 2.15 | 3 | 5 |
| 1:A:4:ILE:HG22 | 1:A:6:CYS:SG | 0.57 | 2.39 | 17 | 3 |
| 1:A:84:VAL:CB | 1:A:137:ILE:HB | 0.57 | 2.29 | 5 | 2 |
| 1:A:134:GLN:CG | 1:A:135:LYS:H | 0.57 | 2.13 | 12 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:115:THR:CG2 | 0.57 | 2.30 | 13 | 3 |
| 1:A:169:PHE:CD1 | 1:A:169:PHE:N | 0.57 | 2.70 | 15 | 4 |
| 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:19:LEU:HB3 | 0.57 | 1.75 | 18 | 1 |
| 1:A:40:TYR:CD1 | 1:A:40:TYR:N | 0.57 | 2.71 | 6 | 3 |
| 1:A:113:VAL:HA | 1:A:155:VAL:O | 0.57 | 1.99 | 18 | 5 |
| 1:A:141:THR:O | 1:A:144:LYS:CB | 0.57 | 2.53 | 11 | 9 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:112:LEU:CD2 | 0.57 | 2.87 | 20 | 2 |
| 1:A:165:LEU:HD23 | 1:A:169:PHE:HE2 | 0.57 | 1.57 | 7 | 2 |
| 1:A:28:PHE:CD2 | 1:A:160:LEU:HD13 | 0.57 | 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:23:TYR:OH | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.57 | 2.53 | 15 | 1 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:105:CYS:HA | 0.56 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:174:LEU:N | 0.56 | 2.38 | 8 | 11 |
| 1:A:16:LYS:CA | 1:A:115:THR:HG23 | 0.56 | 2.30 | 4 | 1 |
| 1:A:86:SER:O | 1:A:135:LYS:O | 0.56 | 2.23 | 9 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:142:ALA:HA | 0.56 | 2.35 | 20 | 16 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:141:THR:O | 0.56 | 2.58 | 5 | 8 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:171:GLU:HB2 | 0.56 | 2.00 | 11 | 12 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:78:PHE:H | 0.56 | 1.59 | 11 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD2 | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.56 | 2.35 | 9 | 3 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:106:PRO:HA | 0.56 | 2.35 | 8 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.56 | 2.93 | 5 | 1 |
| 1:A:40:TYR:CE2 | 1:A:42:VAL:CG1 | 0.56 | 2.88 | 18 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:120:ARG:CG | 0.56 | 2.30 | 20 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:83:SER:HB2 | 0.56 | 1.76 | 6 | 1 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:172:ALA:N | 0.56 | 2.38 | 2 | 18 |
| 1:A:177:LEU:CD2 | 1:A:177:LEU:C | 0.56 | 2.68 | 12 | 6 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:116:GLN:NE2 | 0.56 | 2.39 | 10 | 13 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:118:ASP:OD2 | 0.56 | 2.59 | 4 | 3 |
| 1:A:157:CYS:CB | 1:A:165:LEU:N | 0.56 | 2.68 | 12 | 2 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:136:PRO:HA | 0.56 | 1.99 | 13 | 3 |
| 1:A:117:ILE:HD11 | 1:A:156:GLU:HB2 | 0.56 | 1.75 | 20 | 3 |
| 1:A:14:VAL:HG22 | 1:A:120:ARG:NH2 | 0.56 | 2.15 | 9 | 1 |
| 1:A:134:GLN:CA | 1:A:134:GLN:HE21 | 0.56 | 2.12 | 16 | 1 |
| 1:A:157:CYS:HB3 | 1:A:165:LEU:HB3 | 0.56 | 1.76 | 19 | 7 |
| 1:A:23:TYR:O | 1:A:23:TYR:CD1 | 0.56 | 2.58 | 2 | 5 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.56 | 2.36 | 8 | 5 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:116:GLN:O | 0.56 | 2.53 | 16 | 2 |
| 1:A:121:ASP:CB | 1:A:125:THR:HB | 0.56 | 2.30 | 9 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HB2 | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.56 | 1.77 | 18 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:154:TYR:CZ | 0.56 | 2.93 | 13 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:169:PHE:CD2 | 0.56 | 2.93 | 5 | 1 |
| 1:A:10:GLY:CA | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.56 | 2.89 | 12 | 3 |
| 1:A:16:LYS:CD | 1:A:81:CYS:CB | 0.56 | 2.83 | 19 | 1 |
| 1:A:7:VAL:CG1 | 1:A:7:VAL:O | 0.56 | 2.54 | 14 | 5 |
| 1:A:121:ASP:OD2 | 1:A:125:THR:HG22 | 0.56 | 2.00 | 9 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:83:SER:N | 0.56 | 2.74 | 1 | 4 |
| 1:A:117:ILE:HG23 | 1:A:117:ILE:O | 0.56 | 2.00 | 20 | 1 |
| 1:A:174:LEU:C | 1:A:177:LEU:HD12 | 0.56 | 2.21 | 18 | 4 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:160:LEU:HD22 | 0.56 | 2.36 | 11 | 1 |
| 1:A:77:VAL:C | 1:A:78:PHE:CD1 | 0.56 | 2.79 | 10 | 13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:40:TYR:CE2 | 0.56 | 2.36 | 1 | 2 |
| 1:A:117:ILE:HG21 | 1:A:163:LYS:HE3 | 0.56 | 1.77 | 8 | 1 |
| 1:A:118:ASP:N | 1:A:158:SER:OG | 0.56 | 2.39 | 11 | 9 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:26:ASN:CA | 0.56 | 2.54 | 11 | 5 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:94:LYS:N | 0.56 | 2.69 | 15 | 5 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:CG | 0.56 | 2.54 | 2 | 6 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:42:VAL:CG1 | 0.56 | 2.54 | 7 | 4 |
| 1:A:137:ILE:O | 1:A:137:ILE:HG22 | 0.56 | 2.01 | 20 | 7 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:HG23 | 0.56 | 2.00 | 3 | 2 |
| 1:A:14:VAL:CG1 | 1:A:15:GLY:N | 0.56 | 2.68 | 11 | 2 |
| 1:A:117:ILE:HG23 | 1:A:158:SER:N | 0.56 | 2.16 | 16 | 2 |
| 1:A:134:GLN:HG3 | 1:A:135:LYS:H | 0.56 | 1.61 | 12 | 2 |
| 1:A:129:LEU:HG | 1:A:131:LYS:CG | 0.56 | 2.31 | 5 | 2 |
| 1:A:32:TYR:C | 1:A:32:TYR:CD1 | 0.56 | 2.78 | 7 | 3 |
| 1:A:97:TRP:N | 1:A:97:TRP:HD1 | 0.56 | 1.99 | 16 | 9 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:89:SER:CB | 0.56 | 2.54 | 10 | 3 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:94:LYS:N | 0.56 | 2.15 | 7 | 2 |
| 1:A:161:THR:HG22 | 1:A:163:LYS:H | 0.56 | 1.61 | 5 | 8 |
| 1:A:145:LEU:O | 1:A:149:LEU:HG | 0.55 | 2.01 | 8 | 16 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:19:LEU:HD12 | 0.55 | 1.99 | 12 | 5 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:H | 0.55 | 1.61 | 16 | 3 |
| 1:A:142:ALA:CB | 1:A:154:TYR:CE1 | 0.55 | 2.89 | 7 | 3 |
| 1:A:113:VAL:O | 1:A:114:GLY:O | 0.55 | 2.24 | 3 | 8 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:112:LEU:CD1 | 0.55 | 2.31 | 7 | 4 |
| 1:A:78:PHE:CD2 | 1:A:106:PRO:HB2 | 0.55 | 2.36 | 8 | 1 |
| 1:A:92:ASN:C | 1:A:92:ASN:OD1 | 0.55 | 2.44 | 19 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HD11 | 1:A:165:LEU:HD23 | 0.55 | 1.77 | 4 | 3 |
| 1:A:134:GLN:CG | 1:A:135:LYS:N | 0.55 | 2.69 | 12 | 2 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.55 | 2.84 | 16 | 6 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.55 | 2.89 | 9 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:30:SER:HB3 | 0.55 | 2.36 | 20 | 2 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:HG | 0.55 | 2.01 | 5 | 2 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:N | 0.55 | 2.40 | 18 | 2 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:42:VAL:HG13 | 0.55 | 2.01 | 10 | 2 |
| 1:A:155:VAL:HG22 | 1:A:168:VAL:HG23 | 0.55 | 1.79 | 6 | 2 |
| 1:A:98:VAL:O | 1:A:101:ILE:CG1 | 0.55 | 2.54 | 3 | 3 |
| 1:A:96:LYS:HA | 1:A:99:PRO:CG | 0.55 | 2.31 | 14 | 13 |
| 1:A:31:GLU:O | 1:A:32:TYR:C | 0.55 | 2.45 | 11 | 7 |
| 1:A:154:TYR:CD1 | 1:A:154:TYR:C | 0.55 | 2.79 | 18 | 5 |
| 1:A:53:LEU:C | 1:A:53:LEU:HD22 | 0.55 | 2.22 | 12 | 2 |
| 1:A:49:GLU:CB | 1:A:51:TYR:CZ | 0.55 | 2.89 | 2 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:161:THR:CG2 | 1:A:163:LYS:HG3 | 0.55 | 2.31 | 14 | 2 |
| 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:170:ASP:HA | 0.55 | 1.79 | 3 | 6 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:24:THR:HG23 | 0.55 | 2.36 | 14 | 1 |
| 1:A:49:GLU:HB2 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.55 | 2.35 | 15 | 4 |
| 1:A:113:VAL:CG1 | 1:A:155:VAL:CG2 | 0.55 | 2.84 | 15 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:55:LEU:HB2 | 0.55 | 2.37 | 14 | 4 |
| 1:A:117:ILE:HD13 | 1:A:163:LYS:CE | 0.55 | 2.30 | 13 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.55 | 2.32 | 17 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:121:ASP:HB2 | 0.55 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.55 | 2.02 | 14 | 5 |
| 1:A:117:ILE:HD12 | 1:A:157:CYS:H | 0.55 | 1.61 | 12 | 4 |
| 1:A:126:ILE:HG23 | 1:A:134:GLN:CB | 0.55 | 2.32 | 13 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CG | 1:A:125:THR:CG2 | 0.55 | 2.85 | 7 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CD1 | 1:A:110:PHE:CZ | 0.55 | 2.89 | 18 | 3 |
| 1:A:108:THR:OG1 | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.55 | 2.00 | 18 | 1 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:116:GLN:CG | 0.55 | 2.54 | 14 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HG22 | 1:A:176:ALA:HB2 | 0.55 | 1.77 | 6 | 3 |
| 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:53:LEU:C | 0.55 | 2.22 | 5 | 3 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:O | 0.55 | 2.25 | 13 | 1 |
| 1:A:9:VAL:CG2 | 1:A:80:VAL:HG22 | 0.55 | 2.32 | 2 | 4 |
| 1:A:120:ARG:N | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.55 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:HG3 | 0.55 | 2.01 | 12 | 10 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:30:SER:CB | 0.55 | 2.54 | 11 | 4 |
| 1:A:10:GLY:CA | 1:A:97:TRP:CE2 | 0.55 | 2.89 | 3 | 5 |
| 1:A:49:GLU:HB3 | 1:A:51:TYR:CZ | 0.55 | 2.37 | 2 | 7 |
| 1:A:40:TYR:O | 1:A:54:GLY:HA2 | 0.55 | 2.01 | 9 | 4 |
| 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:173:ILE:HG13 | 0.55 | 1.78 | 10 | 2 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.55 | 2.31 | 6 | 2 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:CG | 0.55 | 2.95 | 11 | 9 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:4:ILE:CD1 | 0.55 | 2.54 | 17 | 2 |
| 1:A:145:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.55 | 2.30 | 3 | 2 |
| 1:A:154:TYR:C | 1:A:155:VAL:CG1 | 0.55 | 2.75 | 7 | 6 |
| 1:A:22:SER:CB | 1:A:159:ALA:O | 0.55 | 2.55 | 1 | 13 |
| 1:A:49:GLU:CG | 1:A:51:TYR:CZ | 0.55 | 2.89 | 17 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:156:GLU:CD | 0.55 | 2.22 | 1 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.55 | 1.79 | 5 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:90:PHE:CD2 | 0.55 | 2.95 | 8 | 3 |
| 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:110:PHE:CD2 | 0.55 | 2.36 | 4 | 2 |
| 1:A:4:ILE:N | 1:A:4:ILE:HD12 | 0.55 | 2.17 | 9 | 13 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:30:SER:HB2 | 0.55 | 2.37 | 1 | 1 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:177:LEU:CB | 0.55 | 2.55 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:21:ILE:HG22 | 1:A:22:SER:N | 0.55 | 2.16 | 20 | 1 |
| 1:A:166:LYS:HA | 1:A:169:PHE:CD2 | 0.55 | 2.37 | 8 | 6 |
| 1:A:161:THR:HG21 | 1:A:163:LYS:CG | 0.55 | 2.31 | 13 | 3 |
| 1:A:87:PRO:O | 1:A:89:SER:N | 0.55 | 2.38 | 9 | 6 |
| 1:A:28:PHE:CG | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.55 | 2.36 | 20 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:90:PHE:CD2 | 0.55 | 2.95 | 1 | 2 |
| 1:A:114:GLY:N | 1:A:155:VAL:O | 0.55 | 2.40 | 18 | 1 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:18:CYS:N | 0.54 | 2.71 | 16 | 5 |
| 1:A:117:ILE:HG22 | 1:A:158:SER:OG | 0.54 | 2.00 | 17 | 4 |
| 1:A:168:VAL:HG12 | 1:A:169:PHE:HD1 | 0.54 | 1.60 | 2 | 3 |
| 1:A:108:THR:OG1 | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.54 | 2.01 | 18 | 1 |
| 1:A:106:PRO:O | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.54 | 2.02 | 2 | 1 |
| 1:A:130:ALA:HA | 1:A:135:LYS:HE3 | 0.54 | 1.78 | 20 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HD23 | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.54 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:85:VAL:HG21 | 0.54 | 1.78 | 4 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:129:LEU:HD11 | 0.54 | 1.79 | 9 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:30:SER:CB | 0.54 | 2.90 | 1 | 2 |
| 1:A:5:LYS:HA | 1:A:54:GLY:O | 0.54 | 2.03 | 15 | 3 |
| 1:A:28:PHE:CE1 | 1:A:30:SER:OG | 0.54 | 2.59 | 1 | 2 |
| 1:A:162:GLN:HE22 | 1:A:165:LEU:HD13 | 0.54 | 1.61 | 1 | 3 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:86:SER:OG | 0.54 | 2.02 | 8 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CD2 | 1:A:119:LEU:N | 0.54 | 2.70 | 8 | 2 |
| 1:A:78:PHE:CD1 | 1:A:78:PHE:N | 0.54 | 2.75 | 20 | 1 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:85:VAL:HG22 | 0.54 | 2.33 | 20 | 2 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.54 | 2.41 | 15 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:128:LYS:CD | 0.54 | 2.55 | 11 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HA | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.54 | 2.37 | 10 | 6 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:141:THR:HG22 | 0.54 | 2.37 | 16 | 7 |
| 1:A:53:LEU:O | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.54 | 2.55 | 3 | 2 |
| 1:A:90:PHE:CE1 | 1:A:91:GLU:HG3 | 0.54 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:86:SER:HB3 | 0.54 | 2.01 | 9 | 1 |
| 1:A:112:LEU:CD2 | 1:A:145:LEU:HD11 | 0.54 | 2.32 | 3 | 6 |
| 1:A:44:VAL:CG1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.54 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:97:TRP:HD1 | 1:A:97:TRP:N | 0.54 | 1.97 | 13 | 9 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:THR:HG23 | 0.54 | 2.02 | 11 | 2 |
| 1:A:120:ARG:H | 1:A:120:ARG:CD | 0.54 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:89:SER:HB2 | 0.54 | 2.02 | 19 | 4 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:115:THR:HG21 | 0.54 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:154:TYR:C | 1:A:155:VAL:CG2 | 0.54 | 2.75 | 15 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:23:TYR:O | 0.54 | 2.61 | 6 | 8 |
| 1:A:167:ASN:ND2 | 1:A:168:VAL:N | 0.54 | 2.55 | 15 | 16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:83:SER:CB | 0.54 | 2.55 | 2 | 5 |
| 1:A:8:VAL:HG22 | 1:A:79:LEU:HB3 | 0.54 | 1.80 | 4 | 4 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.54 | 2.90 | 20 | 6 |
| 1:A:132:ASN:C | 1:A:133:LYS:CD | 0.54 | 2.76 | 7 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:86:SER:OG | 0.54 | 2.02 | 11 | 1 |
| 1:A:7:VAL:O | 1:A:7:VAL:CG1 | 0.54 | 2.55 | 10 | 6 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:105:CYS:O | 0.54 | 2.61 | 12 | 4 |
| 1:A:118:ASP:N | 1:A:158:SER:HB3 | 0.54 | 2.18 | 16 | 3 |
| 1:A:86:SER:HA | 1:A:136:PRO:CA | 0.54 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:116:GLN:CB | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.54 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:24:THR:CB | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.54 | 2.33 | 4 | 2 |
| 1:A:49:GLU:O | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.54 | 2.61 | 14 | 3 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:119:LEU:CD1 | 0.54 | 2.32 | 7 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CZ | 1:A:91:GLU:HG2 | 0.54 | 2.38 | 14 | 2 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:83:SER:HB2 | 0.54 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:30:SER:OG | 1:A:31:GLU:N | 0.54 | 2.40 | 16 | 7 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:119:LEU:CB | 0.54 | 2.56 | 19 | 2 |
| 1:A:118:ASP:C | 1:A:119:LEU:HD23 | 0.54 | 2.23 | 4 | 1 |
| 1:A:112:LEU:O | 1:A:154:TYR:CA | 0.54 | 2.55 | 12 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:53:LEU:O | 0.54 | 2.26 | 2 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:42:VAL:HG22 | 0.54 | 2.38 | 2 | 2 |
| 1:A:133:LYS:C | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.54 | 2.61 | 16 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CB | 1:A:173:ILE:CG2 | 0.54 | 2.86 | 11 | 8 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:26:ASN:HA | 0.54 | 2.03 | 11 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:142:ALA:HB2 | 0.54 | 2.38 | 8 | 3 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:90:PHE:HD2 | 0.54 | 2.21 | 8 | 4 |
| 1:A:16:LYS:CA | 1:A:115:THR:HG21 | 0.54 | 2.32 | 17 | 2 |
| 1:A:78:PHE:CZ | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.54 | 2.38 | 1 | 3 |
| 1:A:87:PRO:HB3 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.54 | 2.18 | 7 | 1 |
| 1:A:160:LEU:O | 1:A:162:GLN:HG2 | 0.54 | 2.03 | 20 | 9 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.54 | 2.03 | 9 | 2 |
| 1:A:114:GLY:C | 1:A:115:THR:CG2 | 0.54 | 2.75 | 16 | 1 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:122:ASP:OD1 | 0.54 | 2.26 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:24:THR:HG23 | 0.54 | 2.38 | 14 | 1 |
| 1:A:103:HIS:O | 1:A:104:HIS:HB3 | 0.54 | 2.02 | 6 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.54 | 2.90 | 6 | 1 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:HD13 | 0.54 | 2.23 | 13 | 3 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.54 | 1.80 | 4 | 1 |
| 1:A:16:LYS:O | 1:A:17:THR:C | 0.54 | 2.45 | 12 | 5 |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:14:VAL:CG1 | 0.54 | 2.56 | 13 | 2 |
| 1:A:16:LYS:CD | 1:A:20:LEU:HD11 | 0.54 | 2.33 | 2 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:177:LEU:C | 1:A:177:LEU:CD1 | 0.53 | 2.70 | 8 | 8 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.53 | 1.81 | 8 | 1 |
| 1:A:2:GLN:HB3 | 1:A:4:ILE:HD11 | 0.53 | 1.80 | 2 | 3 |
| 1:A:120:ARG:CD | 1:A:120:ARG:N | 0.53 | 2.70 | 10 | 2 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:90:PHE:CA | 0.53 | 2.56 | 10 | 1 |
| 1:A:77:VAL:C | 1:A:78:PHE:CG | 0.53 | 2.81 | 2 | 3 |
| 1:A:18:CYS:CA | 1:A:21:ILE:HG12 | 0.53 | 2.33 | 2 | 15 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:86:SER:OG | 0.53 | 2.57 | 2 | 4 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HB2 | 0.53 | 2.38 | 8 | 6 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:115:THR:HG21 | 0.53 | 2.03 | 7 | 2 |
| 1:A:120:ARG:N | 1:A:120:ARG:CD | 0.53 | 2.71 | 13 | 1 |
| 1:A:50:PRO:O | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.53 | 2.61 | 20 | 3 |
| 1:A:108:THR:HG22 | 1:A:175:ALA:O | 0.53 | 2.03 | 3 | 1 |
| 1:A:159:ALA:HA | 1:A:165:LEU:CD2 | 0.53 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:83:SER:OG | 1:A:90:PHE:N | 0.53 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CZ | 1:A:141:THR:HG23 | 0.53 | 2.39 | 10 | 14 |
| 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:51:TYR:O | 0.53 | 2.04 | 12 | 4 |
| 1:A:169:PHE:N | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.53 | 2.74 | 7 | 6 |
| 1:A:158:SER:HB3 | 1:A:161:THR:HB | 0.53 | 1.80 | 2 | 4 |
| 1:A:154:TYR:O | 1:A:155:VAL:CG1 | 0.53 | 2.55 | 18 | 3 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:116:GLN:CB | 0.53 | 2.33 | 1 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:53:LEU:N | 0.53 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HA | 1:A:101:ILE:HG12 | 0.53 | 1.79 | 5 | 2 |
| 1:A:103:HIS:O | 1:A:104:HIS:CB | 0.53 | 2.56 | 6 | 3 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CE2 | 0.53 | 2.38 | 6 | 4 |
| 1:A:134:GLN:O | 1:A:135:LYS:HB2 | 0.53 | 2.04 | 16 | 14 |
| 1:A:49:GLU:O | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.53 | 2.62 | 14 | 6 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.53 | 2.33 | 4 | 1 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:177:LEU:N | 0.53 | 2.41 | 10 | 6 |
| 1:A:44:VAL:CG1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.53 | 2.32 | 13 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HG23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 0.53 | 1.81 | 15 | 2 |
| 1:A:99:PRO:HA | 1:A:103:HIS:CB | 0.53 | 2.33 | 15 | 8 |
| 1:A:161:THR:O | 1:A:162:GLN:CB | 0.53 | 2.56 | 14 | 13 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:40:TYR:CB | 0.53 | 2.57 | 12 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.53 | 1.79 | 1 | 1 |
| 1:A:27:LYS:O | 1:A:32:TYR:CD1 | 0.53 | 2.61 | 1 | 1 |
| 1:A:21:ILE:HG21 | 1:A:29:PRO:HG3 | 0.53 | 1.79 | 16 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:83:SER:OG | 0.53 | 2.02 | 5 | 1 |
| 1:A:108:THR:HG23 | 1:A:109:PRO:CD | 0.53 | 2.32 | 18 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HD11 | 1:A:156:GLU:CB | 0.53 | 2.28 | 15 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:172:ALA:CA | 0.53 | 2.33 | 6 | 17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:25:THR:O | 1:A:27:LYS:N | 0.53 | 2.41 | 14 | 16 |
| 1:A:122:ASP:O | 1:A:126:ILE:HD11 | 0.53 | 2.02 | 9 | 1 |
| 1:A:137:ILE:HG22 | 1:A:137:ILE:O | 0.53 | 2.04 | 16 | 2 |
| 1:A:49:GLU:CB | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.53 | 2.91 | 3 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 0.53 | 2.39 | 5 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:120:ARG:CG | 0.53 | 2.33 | 19 | 1 |
| 1:A:4:ILE:N | 1:A:52:THR:O | 0.53 | 2.42 | 17 | 10 |
| 1:A:153:LYS:CD | 1:A:171:GLU:CG | 0.53 | 2.86 | 2 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.53 | 2.32 | 2 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CG | 1:A:173:ILE:CG2 | 0.53 | 2.92 | 6 | 7 |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:16:LYS:N | 0.53 | 2.41 | 12 | 4 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:3:THR:O | 0.53 | 2.26 | 13 | 14 |
| 1:A:126:ILE:HD11 | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.53 | 2.18 | 7 | 4 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:108:THR:HB | 0.53 | 2.02 | 2 | 2 |
| 1:A:112:LEU:HG | 1:A:154:TYR:CD2 | 0.53 | 2.39 | 13 | 1 |
| 1:A:21:ILE:N | 1:A:21:ILE:HD13 | 0.53 | 2.18 | 16 | 3 |
| 1:A:80:VAL:CG1 | 1:A:94:LYS:HZ3 | 0.53 | 2.16 | 9 | 1 |
| 1:A:100:GLU:HG3 | 1:A:101:ILE:HG23 | 0.53 | 1.81 | 16 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:172:ALA:HA | 0.53 | 1.80 | 10 | 2 |
| 1:A:10:GLY:CA | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.53 | 2.92 | 3 | 2 |
| 1:A:24:THR:HB | 1:A:42:VAL:CG1 | 0.53 | 2.34 | 15 | 2 |
| 1:A:99:PRO:HA | 1:A:103:HIS:CG | 0.53 | 2.39 | 10 | 6 |
| 1:A:138:THR:CG2 | 1:A:139:PRO:HD2 | 0.53 | 2.34 | 2 | 11 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:125:THR:CG2 | 0.53 | 2.87 | 7 | 1 |
| 1:A:116:GLN:CA | 1:A:116:GLN:OE1 | 0.53 | 2.56 | 9 | 1 |
| 1:A:41:ALA:CA | 1:A:53:LEU:O | 0.53 | 2.55 | 1 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:156:GLU:OE2 | 0.53 | 2.03 | 5 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:105:CYS:N | 0.53 | 2.40 | 11 | 15 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.53 | 2.34 | 11 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.53 | 1.79 | 11 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:142:ALA:CB | 0.53 | 2.92 | 11 | 2 |
| 1:A:93:VAL:CG1 | 1:A:97:TRP:CE3 | 0.53 | 2.81 | 10 | 2 |
| 1:A:177:LEU:C | 1:A:177:LEU:CD2 | 0.53 | 2.68 | 2 | 7 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:106:PRO:CG | 0.53 | 2.56 | 15 | 5 |
| 1:A:24:THR:CG2 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.53 | 2.34 | 13 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:HD2 | 0.53 | 2.04 | 7 | 2 |
| 1:A:158:SER:O | 1:A:161:THR:N | 0.53 | 2.42 | 7 | 3 |
| 1:A:110:PHE:CD1 | 1:A:151:ALA:HB1 | 0.53 | 2.39 | 9 | 1 |
| 1:A:116:GLN:OE1 | 1:A:119:LEU:HD23 | 0.53 | 2.04 | 1 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:168:VAL:HG22 | 0.53 | 1.76 | 3 | 1 |
| 1:A:84:VAL:CG1 | 1:A:136:PRO:CB | 0.53 | 2.87 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:153:LYS:HD2 | 1:A:171:GLU:CG | 0.53 | 2.33 | 2 | 1 |
| 1:A:77:VAL:C | 1:A:78:PHE:CD2 | 0.52 | 2.83 | 11 | 2 |
| 1:A:123:PRO:HA | 1:A:126:ILE:HG13 | 0.52 | 1.80 | 9 | 11 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HG | 0.52 | 2.39 | 16 | 2 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:172:ALA:CB | 0.52 | 2.56 | 10 | 2 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:30:SER:C | 0.52 | 2.46 | 16 | 2 |
| 1:A:21:ILE:CD1 | 1:A:32:TYR:CE1 | 0.52 | 2.89 | 2 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:C | 0.52 | 2.25 | 15 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD1 | 1:A:28:PHE:C | 0.52 | 2.81 | 6 | 8 |
| 1:A:53:LEU:CG | 1:A:53:LEU:O | 0.52 | 2.57 | 6 | 2 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:120:ARG:CB | 0.52 | 2.58 | 7 | 1 |
| 1:A:10:GLY:N | 1:A:97:TRP:CE3 | 0.52 | 2.77 | 20 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:HB3 | 0.52 | 2.44 | 5 | 3 |
| 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.52 | 1.80 | 12 | 2 |
| 1:A:129:LEU:O | 1:A:131:LYS:N | 0.52 | 2.43 | 14 | 2 |
| 1:A:90:PHE:HA | 1:A:93:VAL:HG21 | 0.52 | 1.81 | 5 | 2 |
| 1:A:23:TYR:HD2 | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.52 | 1.62 | 11 | 2 |
| 1:A:49:GLU:HB2 | 1:A:51:TYR:CE2 | 0.52 | 2.39 | 11 | 5 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:40:TYR:CE1 | 0.52 | 2.40 | 13 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:154:TYR:OH | 0.52 | 2.53 | 13 | 1 |
| 1:A:19:LEU:HB2 | 1:A:115:THR:OG1 | 0.52 | 2.05 | 17 | 1 |
| 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:51:TYR:CZ | 0.52 | 2.39 | 17 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HG12 | 1:A:94:LYS:HZ3 | 0.52 | 1.64 | 9 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HG | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.52 | 2.39 | 1 | 1 |
| 1:A:53:LEU:CG | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.52 | 2.34 | 5 | 1 |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:15:GLY:C | 0.52 | 2.47 | 6 | 1 |
| 1:A:161:THR:HG22 | 1:A:162:GLN:H | 0.52 | 1.62 | 14 | 15 |
| 1:A:51:TYR:HB2 | 1:A:173:ILE:HG12 | 0.52 | 1.80 | 3 | 5 |
| 1:A:126:ILE:O | 1:A:130:ALA:CB | 0.52 | 2.58 | 10 | 3 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:123:PRO:N | 0.52 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:90:PHE:O | 1:A:93:VAL:HB | 0.52 | 2.04 | 7 | 11 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.52 | 2.33 | 5 | 6 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:89:SER:HB2 | 0.52 | 2.35 | 14 | 4 |
| 1:A:134:GLN:C | 1:A:135:LYS:HD3 | 0.52 | 2.25 | 19 | 1 |
| 1:A:158:SER:OG | 1:A:160:LEU:HD23 | 0.52 | 2.05 | 13 | 1 |
| 1:A:158:SER:O | 1:A:159:ALA:C | 0.52 | 2.46 | 2 | 7 |
| 1:A:80:VAL:CG2 | 1:A:110:PHE:CE1 | 0.52 | 2.92 | 9 | 3 |
| 1:A:100:GLU:O | 1:A:104:HIS:HB3 | 0.52 | 2.05 | 16 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:169:PHE:CD2 | 0.52 | 2.97 | 5 | 1 |
| 1:A:131:LYS:H | 1:A:131:LYS:CD | 0.52 | 2.16 | 18 | 2 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:20:LEU:C | 0.52 | 2.76 | 6 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:86:SER:CB | 0.52 | 2.35 | 11 | 1 |
| 1:A:6:CYS:HA | 1:A:77:VAL:HG22 | 0.52 | 1.82 | 4 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.52 | 1.81 | 13 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:55:LEU:HG | 0.52 | 2.39 | 20 | 4 |
| 1:A:132:ASN:O | 1:A:133:LYS:HG3 | 0.52 | 2.05 | 10 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:HG3 | 0.52 | 2.34 | 14 | 2 |
| 1:A:83:SER:HA | 1:A:115:THR:CG2 | 0.52 | 2.35 | 6 | 2 |
| 1:A:83:SER:O | 1:A:137:ILE:CD1 | 0.52 | 2.58 | 6 | 3 |
| 1:A:96:LYS:HA | 1:A:99:PRO:HG2 | 0.52 | 1.82 | 11 | 10 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:169:PHE:CE2 | 0.52 | 2.98 | 13 | 4 |
| 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:19:LEU:CB | 0.52 | 2.34 | 18 | 2 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:116:GLN:NE2 | 0.52 | 2.82 | 1 | 2 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:3:THR:OG1 | 0.52 | 2.26 | 3 | 2 |
| 1:A:155:VAL:CG2 | 1:A:164:GLY:O | 0.52 | 2.58 | 11 | 1 |
| 1:A:2:GLN:CB | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.52 | 2.92 | 17 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.52 | 1.82 | 17 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HB3 | 1:A:149:LEU:CD2 | 0.52 | 2.35 | 9 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:94:LYS:N | 0.52 | 2.20 | 1 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:124:SER:N | 0.52 | 2.41 | 10 | 2 |
| 1:A:94:LYS:HD2 | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.52 | 1.81 | 2 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.52 | 2.93 | 20 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CG | 1:A:173:ILE:HG21 | 0.52 | 2.40 | 9 | 6 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:CD | 0.52 | 2.57 | 11 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:89:SER:CB | 0.52 | 2.35 | 4 | 3 |
| 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.52 | 1.81 | 7 | 3 |
| 1:A:158:SER:HB3 | 1:A:161:THR:CB | 0.52 | 2.35 | 20 | 4 |
| 1:A:79:LEU:CD1 | 1:A:113:VAL:HG21 | 0.52 | 2.36 | 14 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:120:ARG:N | 0.52 | 2.20 | 8 | 1 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:135:LYS:CD | 0.52 | 2.58 | 14 | 1 |
| 1:A:129:LEU:CG | 1:A:129:LEU:O | 0.52 | 2.57 | 2 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:112:LEU:CD1 | 0.51 | 2.92 | 5 | 3 |
| 1:A:21:ILE:HD13 | 1:A:21:ILE:N | 0.51 | 2.20 | 11 | 3 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:14:VAL:CG1 | 0.51 | 2.57 | 14 | 3 |
| 1:A:8:VAL:CG1 | 1:A:81:CYS:SG | 0.51 | 2.98 | 12 | 3 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.51 | 2.40 | 20 | 3 |
| 1:A:45:MET:HE2 | 1:A:49:GLU:C | 0.51 | 2.25 | 3 | 3 |
| 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:131:LYS:CD | 0.51 | 2.35 | 18 | 1 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:26:ASN:ND2 | 0.51 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.51 | 1.82 | 2 | 1 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.51 | 2.73 | 6 | 4 |
| 1:A:98:VAL:O | 1:A:101:ILE:HG13 | 0.51 | 2.05 | 6 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.51 | 2.40 | 17 | 4 |
| 1:A:118:ASP:N | 1:A:158:SER:CB | 0.51 | 2.74 | 14 | 4 |
| 1:A:119:LEU:HD23 | 1:A:119:LEU:N | 0.51 | 2.19 | 4 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HD11 | 1:A:134:GLN:CG | 0.51 | 2.36 | 17 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HG | 1:A:125:THR:HG21 | 0.51 | 1.83 | 7 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:121:ASP:CG | 0.51 | 2.26 | 9 | 1 |
| 1:A:24:THR:CG2 | 1:A:25:THR:HG23 | 0.51 | 2.32 | 10 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:123:PRO:CD | 0.51 | 2.59 | 2 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:145:LEU:HD11 | 0.51 | 2.40 | 6 | 1 |
| 1:A:160:LEU:O | 1:A:162:GLN:OE1 | 0.51 | 2.27 | 11 | 10 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:142:ALA:CB | 0.51 | 2.93 | 11 | 3 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 0.51 | 2.40 | 19 | 2 |
| 1:A:123:PRO:O | 1:A:126:ILE:N | 0.51 | 2.43 | 16 | 2 |
| 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:TYR:HA | 0.51 | 1.81 | 7 | 6 |
| 1:A:24:THR:HB | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.51 | 1.83 | 4 | 1 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:92:ASN:OD1 | 0.51 | 2.29 | 4 | 2 |
| 1:A:131:LYS:HD3 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.51 | 2.21 | 8 | 5 |
| 1:A:19:LEU:CB | 1:A:115:THR:OG1 | 0.51 | 2.58 | 17 | 1 |
| 1:A:83:SER:OG | 1:A:85:VAL:HG22 | 0.51 | 2.05 | 16 | 1 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:107:LYS:CG | 0.51 | 2.59 | 8 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HA | 1:A:134:GLN:HG3 | 0.51 | 1.82 | 15 | 1 |
| 1:A:104:HIS:C | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.51 | 2.25 | 6 | 4 |
| 1:A:94:LYS:O | 1:A:99:PRO:HD3 | 0.51 | 2.06 | 20 | 4 |
| 1:A:132:ASN:ND2 | 1:A:132:ASN:N | 0.51 | 2.58 | 9 | 11 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:40:TYR:HB3 | 0.51 | 2.06 | 12 | 2 |
| 1:A:47:GLY:N | 1:A:49:GLU:OE1 | 0.51 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:105:CYS:CB | 1:A:106:PRO:CD | 0.51 | 2.88 | 8 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HG21 | 1:A:163:LYS:CE | 0.51 | 2.34 | 8 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:ILE:HG12 | 0.51 | 1.80 | 5 | 1 |
| 1:A:94:LYS:N | 1:A:94:LYS:CE | 0.51 | 2.73 | 16 | 4 |
| 1:A:132:ASN:N | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.51 | 2.59 | 4 | 7 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:21:ILE:HD13 | 0.51 | 2.34 | 13 | 2 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:23:TYR:N | 0.51 | 2.44 | 15 | 4 |
| 1:A:22:SER:HB2 | 1:A:159:ALA:O | 0.51 | 2.06 | 20 | 4 |
| 1:A:1:MET:HA | 1:A:50:PRO:O | 0.51 | 2.06 | 1 | 2 |
| 1:A:154:TYR:CD1 | 1:A:155:VAL:N | 0.51 | 2.78 | 9 | 4 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:52:THR:CA | 0.51 | 2.56 | 3 | 3 |
| 1:A:83:SER:HA | 1:A:115:THR:HB | 0.51 | 1.81 | 5 | 1 |
| 1:A:42:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.51 | 2.88 | 11 | 3 |
| 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:137:ILE:CB | 0.51 | 2.36 | 5 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.51 | 1.81 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:129:LEU:HD21 | 0.51 | 1.81 | 2 | 1 |
| 1:A:162:GLN:OE1 | 1:A:165:LEU:CD2 | 0.51 | 2.57 | 15 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CB | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.51 | 2.36 | 6 | 3 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.51 | 2.40 | 7 | 4 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:159:ALA:O | 0.51 | 2.26 | 11 | 8 |
| 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:53:LEU:O | 0.51 | 2.06 | 11 | 1 |
| 1:A:7:VAL:HB | 1:A:77:VAL:O | 0.51 | 2.06 | 2 | 2 |
| 1:A:4:ILE:HB | 1:A:52:THR:O | 0.51 | 2.06 | 3 | 11 |
| 1:A:17:THR:HA | 1:A:20:LEU:HD13 | 0.51 | 1.82 | 4 | 3 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:113:VAL:C | 0.51 | 2.84 | 15 | 2 |
| 1:A:110:PHE:O | 1:A:152:VAL:CB | 0.51 | 2.58 | 3 | 4 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.51 | 1.83 | 20 | 1 |
| 1:A:121:ASP:N | 1:A:124:SER:HB2 | 0.51 | 2.21 | 19 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:21:ILE:C | 0.51 | 2.49 | 14 | 7 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.51 | 1.83 | 4 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:84:VAL:CG2 | 0.51 | 2.93 | 15 | 2 |
| 1:A:131:LYS:HB2 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.51 | 2.21 | 17 | 5 |
| 1:A:164:GLY:O | 1:A:167:ASN:N | 0.51 | 2.43 | 15 | 4 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:89:SER:OG | 0.51 | 2.58 | 15 | 3 |
| 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:137:ILE:CB | 0.51 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:CB | 0.51 | 2.59 | 1 | 4 |
| 1:A:129:LEU:CD2 | 1:A:129:LEU:O | 0.51 | 2.58 | 2 | 1 |
| 1:A:123:PRO:CA | 1:A:126:ILE:HG12 | 0.51 | 2.32 | 19 | 3 |
| 1:A:10:GLY:CA | 1:A:97:TRP:CZ2 | 0.51 | 2.94 | 4 | 2 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:51:TYR:O | 0.51 | 2.58 | 17 | 4 |
| 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:81:CYS:HB3 | 0.51 | 1.81 | 12 | 2 |
| 1:A:153:LYS:CD | 1:A:155:VAL:CG1 | 0.51 | 2.89 | 13 | 1 |
| 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.51 | 2.41 | 10 | 4 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:162:GLN:HA | 0.51 | 2.46 | 17 | 3 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.51 | 2.36 | 7 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CB | 1:A:129:LEU:HD22 | 0.51 | 2.36 | 9 | 1 |
| 1:A:147:ARG:O | 1:A:150:LYS:CE | 0.51 | 2.59 | 9 | 2 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:172:ALA:HB2 | 0.51 | 2.06 | 10 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.51 | 1.82 | 14 | 1 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CG | 0.51 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:168:VAL:CG1 | 1:A:169:PHE:N | 0.51 | 2.74 | 16 | 15 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:109:PRO:HG3 | 0.51 | 2.06 | 4 | 2 |
| 1:A:134:GLN:CD | 1:A:134:GLN:N | 0.51 | 2.64 | 16 | 1 |
| 1:A:78:PHE:HB2 | 1:A:109:PRO:O | 0.51 | 2.06 | 8 | 1 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:77:VAL:HG23 | 0.51 | 2.46 | 14 | 1 |
| 1:A:55:LEU:N | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.51 | 2.74 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:150:LYS:HB2 | 0.50 | 2.06 | 7 | 15 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:110:PHE:CZ | 0.50 | 2.42 | 15 | 8 |
| 1:A:11:ASP:O | 1:A:12:GLY:O | 0.50 | 2.30 | 20 | 5 |
| 1:A:98:VAL:HG13 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.50 | 2.41 | 9 | 4 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.50 | 2.36 | 2 | 2 |
| 1:A:6:CYS:HB2 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.50 | 2.36 | 8 | 2 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.50 | 2.89 | 2 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:90:PHE:CB | 0.50 | 2.94 | 8 | 1 |
| 1:A:8:VAL:HG23 | 1:A:79:LEU:O | 0.50 | 2.05 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.50 | 2.41 | 18 | 1 |
| 1:A:105:CYS:N | 1:A:106:PRO:CD | 0.50 | 2.74 | 6 | 1 |
| 1:A:158:SER:O | 1:A:159:ALA:CB | 0.50 | 2.57 | 5 | 11 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:174:LEU:CD1 | 0.50 | 2.59 | 12 | 1 |
| 1:A:174:LEU:O | 1:A:178:GLU:CA | 0.50 | 2.59 | 12 | 2 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:14:VAL:HG23 | 0.50 | 2.05 | 13 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:129:LEU:N | 0.50 | 2.44 | 17 | 1 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.50 | 2.60 | 9 | 5 |
| 1:A:94:LYS:CA | 1:A:98:VAL:HG23 | 0.50 | 2.34 | 9 | 3 |
| 1:A:94:LYS:HB3 | 1:A:149:LEU:HD21 | 0.50 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:129:LEU:CG | 1:A:131:LYS:HD2 | 0.50 | 2.36 | 18 | 1 |
| 1:A:55:LEU:CD2 | 1:A:79:LEU:HD12 | 0.50 | 2.36 | 2 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CG | 1:A:132:ASN:HB3 | 0.50 | 2.36 | 2 | 1 |
| 1:A:132:ASN:O | 1:A:135:LYS:CD | 0.50 | 2.60 | 15 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HA | 1:A:125:THR:CG2 | 0.50 | 2.36 | 18 | 3 |
| 1:A:108:THR:HB | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.50 | 1.81 | 3 | 4 |
| 1:A:28:PHE:C | 1:A:28:PHE:HD1 | 0.50 | 2.08 | 11 | 1 |
| 1:A:145:LEU:HD12 | 1:A:146:ALA:CA | 0.50 | 2.35 | 13 | 14 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:129:LEU:CB | 0.50 | 2.37 | 12 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:120:ARG:CA | 0.50 | 2.36 | 1 | 2 |
| 1:A:121:ASP:CB | 1:A:125:THR:CG2 | 0.50 | 2.89 | 9 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:19:LEU:N | 0.50 | 2.84 | 1 | 1 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:115:THR:HG22 | 0.50 | 2.06 | 16 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HG21 | 1:A:157:CYS:H | 0.50 | 1.66 | 16 | 1 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.50 | 2.75 | 14 | 1 |
| 1:A:81:CYS:HB3 | 1:A:115:THR:HG22 | 0.50 | 1.83 | 15 | 1 |
| 1:A:21:ILE:O | 1:A:25:THR:N | 0.50 | 2.37 | 9 | 7 |
| 1:A:4:ILE:HD12 | 1:A:4:ILE:N | 0.50 | 2.21 | 11 | 4 |
| 1:A:116:GLN:HB3 | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.50 | 1.84 | 19 | 1 |
| 1:A:146:ALA:O | 1:A:150:LYS:N | 0.50 | 2.43 | 19 | 5 |
| 1:A:125:THR:HA | 1:A:128:LYS:HD3 | 0.50 | 1.84 | 4 | 1 |
| 1:A:158:SER:HB2 | 1:A:160:LEU:CD2 | 0.50 | 2.36 | 9 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:3:THR:CB | 0.50 | 2.59 | 3 | 3 |
| 1:A:109:PRO:HB2 | 1:A:175:ALA:HB1 | 0.50 | 1.82 | 18 | 1 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:45:MET:HG2 | 0.50 | 2.06 | 15 | 2 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:CD2 | 0.50 | 2.65 | 19 | 3 |
| 1:A:8:VAL:CG2 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.50 | 2.89 | 12 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:154:TYR:CZ | 0.50 | 2.99 | 13 | 1 |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:105:CYS:C | 0.50 | 2.50 | 17 | 4 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:92:ASN:ND2 | 0.50 | 2.44 | 10 | 5 |
| 1:A:87:PRO:CG | 1:A:129:LEU:HB3 | 0.50 | 2.37 | 10 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CA | 1:A:122:ASP:HB2 | 0.50 | 2.35 | 18 | 1 |
| 1:A:4:ILE:CG2 | 1:A:176:ALA:CB | 0.50 | 2.89 | 14 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:110:PHE:CZ | 0.50 | 2.93 | 20 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:129:LEU:HB2 | 0.50 | 1.82 | 15 | 1 |
| 1:A:118:ASP:OD2 | 1:A:158:SER:OG | 0.50 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CD1 | 1:A:101:ILE:HG22 | 0.50 | 2.41 | 11 | 1 |
| 1:A:86:SER:O | 1:A:137:ILE:CD1 | 0.50 | 2.60 | 17 | 2 |
| 1:A:159:ALA:HA | 1:A:165:LEU:HG | 0.50 | 1.82 | 12 | 1 |
| 1:A:129:LEU:O | 1:A:130:ALA:CB | 0.50 | 2.59 | 15 | 3 |
| 1:A:22:SER:CA | 1:A:26:ASN:HA | 0.50 | 2.37 | 7 | 6 |
| 1:A:158:SER:CB | 1:A:161:THR:HB | 0.50 | 2.37 | 10 | 6 |
| 1:A:84:VAL:HB | 1:A:137:ILE:HB | 0.50 | 1.81 | 5 | 2 |
| 1:A:114:GLY:C | 1:A:115:THR:HG22 | 0.50 | 2.26 | 16 | 2 |
| 1:A:110:PHE:CD2 | 1:A:151:ALA:HA | 0.50 | 2.41 | 2 | 3 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:132:ASN:CB | 0.50 | 2.36 | 14 | 1 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:122:ASP:OD2 | 0.50 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:157:CYS:HG | 1:A:165:LEU:HD12 | 0.50 | 1.63 | 20 | 1 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.50 | 2.90 | 10 | 3 |
| 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:115:THR:HB | 0.50 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:116:GLN:CB | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.50 | 2.36 | 19 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:23:TYR:N | 0.50 | 2.44 | 14 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HA | 1:A:23:TYR:HB3 | 0.50 | 1.84 | 14 | 3 |
| 1:A:79:LEU:HD13 | 1:A:113:VAL:HG21 | 0.50 | 1.83 | 9 | 4 |
| 1:A:49:GLU:CG | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.50 | 2.95 | 17 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:119:LEU:HD12 | 0.50 | 1.84 | 7 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:137:ILE:HG21 | 0.50 | 1.65 | 2 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:83:SER:CB | 0.50 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:82:PHE:C | 1:A:83:SER:OG | 0.50 | 2.48 | 10 | 3 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:178:GLU:O | 0.50 | 2.30 | 3 | 9 |
| 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:113:VAL:O | 0.50 | 2.06 | 9 | 2 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:177:LEU:CD1 | 0.50 | 2.59 | 7 | 6 |
| 1:A:124:SER:O | 1:A:128:LYS:HB2 | 0.50 | 2.06 | 16 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:121:ASP:OD1 | 1:A:126:ILE:N | 0.50 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CZ | 1:A:106:PRO:CB | 0.50 | 2.94 | 8 | 1 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:134:GLN:C | 0.50 | 2.49 | 10 | 1 |
| 1:A:120:ARG:C | 1:A:125:THR:OG1 | 0.50 | 2.49 | 18 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG11 | 1:A:167:ASN:CG | 0.50 | 2.26 | 15 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:154:TYR:OH | 0.50 | 2.60 | 15 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:40:TYR:CE1 | 0.50 | 2.39 | 4 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:CG | 0.50 | 2.95 | 16 | 2 |
| 1:A:11:ASP:OD1 | 1:A:11:ASP:N | 0.50 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:11:ASP:N | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.50 | 2.80 | 15 | 1 |
| 1:A:6:CYS:HA | 1:A:77:VAL:HB | 0.49 | 1.84 | 6 | 2 |
| 1:A:91:GLU:C | 1:A:93:VAL:N | 0.49 | 2.65 | 1 | 10 |
| 1:A:134:GLN:O | 1:A:135:LYS:CB | 0.49 | 2.60 | 11 | 11 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:HG23 | 0.49 | 1.84 | 19 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:152:VAL:CG1 | 0.49 | 2.37 | 13 | 7 |
| 1:A:116:GLN:C | 1:A:158:SER:HA | 0.49 | 2.28 | 10 | 5 |
| 1:A:16:LYS:O | 1:A:19:LEU:N | 0.49 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:51:TYR:HD2 | 0.49 | 1.67 | 20 | 4 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:24:THR:CG2 | 0.49 | 2.95 | 14 | 2 |
| 1:A:78:PHE:CG | 1:A:106:PRO:HB2 | 0.49 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:154:TYR:CE2 | 0.49 | 3.00 | 10 | 3 |
| 1:A:86:SER:C | 1:A:129:LEU:HD11 | 0.49 | 2.27 | 18 | 1 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:40:TYR:CE2 | 0.49 | 2.61 | 18 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:14:VAL:C | 0.49 | 2.50 | 6 | 3 |
| 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:51:TYR:CE2 | 0.49 | 2.42 | 14 | 3 |
| 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.49 | 1.81 | 4 | 1 |
| 1:A:6:CYS:CB | 1:A:77:VAL:HG22 | 0.49 | 2.37 | 4 | 1 |
| 1:A:41:ALA:CB | 1:A:54:GLY:HA2 | 0.49 | 2.36 | 10 | 3 |
| 1:A:117:ILE:N | 1:A:158:SER:CB | 0.49 | 2.76 | 5 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:113:VAL:C | 0.49 | 2.86 | 10 | 6 |
| 1:A:2:GLN:HB2 | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.49 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG21 | 1:A:167:ASN:HD21 | 0.49 | 1.66 | 3 | 3 |
| 1:A:124:SER:O | 1:A:128:LYS:HD3 | 0.49 | 2.07 | 16 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD2 | 1:A:160:LEU:CD1 | 0.49 | 2.95 | 16 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 0.49 | 1.83 | 10 | 1 |
| 1:A:12:GLY:CA | 1:A:83:SER:HB3 | 0.49 | 2.37 | 15 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:116:GLN:HB3 | 0.49 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:132:ASN:HD22 | 1:A:132:ASN:N | 0.49 | 2.05 | 9 | 9 |
| 1:A:129:LEU:HG | 1:A:131:LYS:HG3 | 0.49 | 1.84 | 17 | 2 |
| 1:A:119:LEU:HG | 1:A:125:THR:CG2 | 0.49 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:86:SER:HB3 | 0.49 | 2.38 | 16 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:22:SER:HB3 | 1:A:159:ALA:O | 0.49 | 2.06 | 8 | 1 |
| 1:A:129:LEU:O | 1:A:132:ASN:N | 0.49 | 2.36 | 10 | 1 |
| 1:A:170:ASP:O | 1:A:174:LEU:CB | 0.49 | 2.61 | 3 | 2 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:171:GLU:CB | 0.49 | 2.60 | 13 | 3 |
| 1:A:109:PRO:HB3 | 1:A:175:ALA:O | 0.49 | 2.08 | 18 | 9 |
| 1:A:91:GLU:O | 1:A:94:LYS:HB2 | 0.49 | 2.08 | 12 | 3 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:76:ASP:CA | 0.49 | 2.60 | 15 | 8 |
| 1:A:20:LEU:C | 1:A:20:LEU:CD2 | 0.49 | 2.77 | 13 | 2 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.49 | 2.38 | 17 | 2 |
| 1:A:171:GLU:HA | 1:A:174:LEU:HB3 | 0.49 | 1.84 | 20 | 6 |
| 1:A:4:ILE:HB | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.49 | 1.82 | 7 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HA | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.49 | 2.22 | 9 | 1 |
| 1:A:117:ILE:CB | 1:A:158:SER:OG | 0.49 | 2.61 | 8 | 3 |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:145:LEU:CD1 | 0.49 | 2.27 | 8 | 1 |
| 1:A:9:VAL:HG21 | 1:A:80:VAL:HG22 | 0.49 | 1.83 | 2 | 2 |
| 1:A:137:ILE:CD1 | 1:A:137:ILE:N | 0.49 | 2.75 | 14 | 2 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:CB | 0.49 | 2.38 | 15 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:40:TYR:OH | 0.49 | 2.08 | 6 | 1 |
| 1:A:109:PRO:HB3 | 1:A:175:ALA:CB | 0.49 | 2.35 | 11 | 1 |
| 1:A:116:GLN:C | 1:A:120:ARG:CG | 0.49 | 2.81 | 19 | 1 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:17:THR:N | 0.49 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:17:THR:CA | 1:A:20:LEU:HD12 | 0.49 | 2.37 | 18 | 5 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:136:PRO:CA | 0.49 | 2.60 | 15 | 4 |
| 1:A:12:GLY:O | 1:A:14:VAL:N | 0.49 | 2.45 | 2 | 8 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:114:GLY:N | 0.49 | 2.80 | 7 | 1 |
| 1:A:115:THR:HG23 | 1:A:116:GLN:N | 0.49 | 2.22 | 5 | 2 |
| 1:A:152:VAL:CG1 | 1:A:153:LYS:N | 0.49 | 2.75 | 3 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:16:LYS:CE | 0.49 | 2.61 | 3 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:116:GLN:NE2 | 0.49 | 2.22 | 14 | 3 |
| 1:A:117:ILE:CD1 | 1:A:156:GLU:HB2 | 0.49 | 2.37 | 20 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:120:ARG:CD | 0.49 | 2.37 | 20 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:23:TYR:CB | 0.49 | 2.61 | 15 | 1 |
| 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:105:CYS:N | 0.49 | 2.23 | 6 | 2 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:153:LYS:HB3 | 0.49 | 2.38 | 7 | 7 |
| 1:A:7:VAL:HG23 | 1:A:56:PHE:CE1 | 0.49 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:106:PRO:CD | 0.49 | 2.61 | 7 | 10 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:86:SER:HB2 | 0.49 | 1.84 | 17 | 1 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:121:ASP:OD1 | 0.49 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:121:ASP:OD2 | 0.49 | 2.07 | 9 | 1 |
| 1:A:115:THR:OG1 | 1:A:116:GLN:N | 0.49 | 2.45 | 16 | 3 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.49 | 2.22 | 14 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:O | 0.49 | 2.60 | 20 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:137:ILE:HG21 | 0.49 | 2.42 | 12 | 4 |
| 1:A:95:GLU:O | 1:A:99:PRO:HG3 | 0.49 | 2.07 | 8 | 7 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:117:ILE:CG1 | 0.49 | 2.61 | 19 | 1 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:91:GLU:N | 0.49 | 2.45 | 15 | 4 |
| 1:A:128:LYS:HD3 | 1:A:129:LEU:HB2 | 0.49 | 1.83 | 13 | 1 |
| 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:116:GLN:HG2 | 0.49 | 1.84 | 9 | 1 |
| 1:A:178:GLU:N | 1:A:178:GLU:OE1 | 0.49 | 2.44 | 10 | 1 |
| 1:A:12:GLY:HA2 | 1:A:83:SER:OG | 0.49 | 2.08 | 10 | 2 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:CA | 0.49 | 2.82 | 20 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HA | 1:A:109:PRO:CB | 0.49 | 2.33 | 3 | 3 |
| 1:A:90:PHE:CE1 | 1:A:141:THR:HG23 | 0.49 | 2.43 | 20 | 5 |
| 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:81:CYS:CB | 0.49 | 2.38 | 11 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:113:VAL:O | 0.49 | 2.08 | 14 | 4 |
| 1:A:24:THR:OG1 | 1:A:25:THR:HG23 | 0.49 | 2.08 | 4 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:125:THR:HG21 | 0.49 | 1.83 | 13 | 2 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:CB | 0.49 | 2.60 | 16 | 2 |
| 1:A:126:ILE:CG1 | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.49 | 2.37 | 17 | 1 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:110:PHE:CD2 | 0.49 | 2.43 | 5 | 1 |
| 1:A:18:CYS:CA | 1:A:21:ILE:HG13 | 0.49 | 2.37 | 5 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HB3 | 1:A:134:GLN:O | 0.49 | 2.07 | 2 | 2 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:CB | 0.49 | 2.61 | 20 | 1 |
| 1:A:128:LYS:HG2 | 1:A:129:LEU:N | 0.49 | 2.23 | 11 | 1 |
| 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:TYR:CA | 0.49 | 2.38 | 19 | 10 |
| 1:A:94:LYS:CG | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.49 | 2.38 | 12 | 2 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:54:GLY:HA2 | 0.49 | 1.83 | 13 | 4 |
| 1:A:126:ILE:N | 1:A:126:ILE:CD1 | 0.49 | 2.76 | 16 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CD2 | 1:A:173:ILE:CG2 | 0.49 | 2.87 | 10 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:169:PHE:CG | 0.49 | 3.00 | 5 | 1 |
| 1:A:77:VAL:CG1 | 1:A:109:PRO:HA | 0.49 | 2.36 | 5 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:THR:HG22 | 0.49 | 2.08 | 7 | 2 |
| 1:A:18:CYS:O | 1:A:159:ALA:CB | 0.49 | 2.61 | 2 | 6 |
| 1:A:129:LEU:HG | 1:A:131:LYS:HE3 | 0.49 | 1.85 | 4 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HG3 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.49 | 1.85 | 7 | 3 |
| 1:A:4:ILE:HG23 | 1:A:176:ALA:HB2 | 0.49 | 1.84 | 9 | 1 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:21:ILE:HD11 | 0.49 | 2.36 | 9 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HG | 1:A:152:VAL:CG1 | 0.49 | 2.38 | 3 | 2 |
| 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.49 | 2.43 | 5 | 1 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:177:LEU:CG | 0.49 | 2.60 | 5 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG13 | 1:A:15:GLY:N | 0.49 | 2.21 | 18 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:112:LEU:HG | 0.49 | 2.43 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:168:VAL:HA | 1:A:171:GLU:HB2 | 0.48 | 1.85 | 11 | 6 |
| 1:A:4:ILE:HD13 | 1:A:51:TYR:HB3 | 0.48 | 1.85 | 15 | 4 |
| 1:A:16:LYS:HA | 1:A:115:THR:HG23 | 0.48 | 1.85 | 4 | 1 |
| 1:A:132:ASN:N | 1:A:132:ASN:HD22 | 0.48 | 2.06 | 4 | 4 |
| 1:A:1:MET:O | 1:A:3:THR:OG1 | 0.48 | 2.31 | 14 | 2 |
| 1:A:84:VAL:C | 1:A:86:SER:N | 0.48 | 2.65 | 17 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:169:PHE:CB | 0.48 | 2.96 | 5 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 0.48 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:98:VAL:CG2 | 0.48 | 2.38 | 11 | 2 |
| 1:A:107:LYS:C | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.48 | 2.29 | 12 | 1 |
| 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:141:THR:N | 0.48 | 2.23 | 12 | 1 |
| 1:A:178:GLU:CG | 1:A:178:GLU:O | 0.48 | 2.61 | 12 | 1 |
| 1:A:49:GLU:CB | 1:A:51:TYR:OH | 0.48 | 2.61 | 5 | 5 |
| 1:A:24:THR:HA | 1:A:42:VAL:HG21 | 0.48 | 1.82 | 10 | 2 |
| 1:A:7:VAL:CG2 | 1:A:77:VAL:O | 0.48 | 2.61 | 6 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CE2 | 1:A:30:SER:CA | 0.48 | 2.96 | 19 | 6 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:HG2 | 0.48 | 2.08 | 11 | 3 |
| 1:A:98:VAL:HA | 1:A:101:ILE:HG13 | 0.48 | 1.84 | 14 | 11 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:90:PHE:CB | 0.48 | 2.62 | 7 | 3 |
| 1:A:134:GLN:NE2 | 1:A:136:PRO:HD3 | 0.48 | 2.24 | 19 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:19:LEU:HG | 0.48 | 1.85 | 19 | 1 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:89:SER:HB3 | 0.48 | 2.38 | 13 | 2 |
| 1:A:41:ALA:CB | 1:A:54:GLY:CA | 0.48 | 2.90 | 15 | 10 |
| 1:A:129:LEU:HB3 | 1:A:131:LYS:HE3 | 0.48 | 1.84 | 5 | 2 |
| 1:A:119:LEU:HD21 | 1:A:125:THR:HG22 | 0.48 | 1.84 | 7 | 1 |
| 1:A:81:CYS:HB3 | 1:A:115:THR:HG21 | 0.48 | 1.85 | 16 | 1 |
| 1:A:102:THR:CG2 | 1:A:105:CYS:HB2 | 0.48 | 2.37 | 5 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.48 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:147:ARG:O | 1:A:147:ARG:NE | 0.48 | 2.46 | 12 | 1 |
| 1:A:161:THR:HG21 | 1:A:163:LYS:HG3 | 0.48 | 1.84 | 13 | 2 |
| 1:A:128:LYS:HG2 | 1:A:129:LEU:HD12 | 0.48 | 1.84 | 7 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:81:CYS:SG | 0.48 | 2.48 | 1 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CE1 | 1:A:91:GLU:HB2 | 0.48 | 2.44 | 5 | 1 |
| 1:A:82:PHE:N | 1:A:113:VAL:O | 0.48 | 2.42 | 18 | 2 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:HB | 0.48 | 2.08 | 14 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:89:SER:HB2 | 0.48 | 1.86 | 11 | 2 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:145:LEU:CD1 | 0.48 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:6:CYS:N | 1:A:54:GLY:O | 0.48 | 2.47 | 17 | 5 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:153:LYS:HB2 | 0.48 | 2.38 | 2 | 2 |
| 1:A:1:MET:CG | 1:A:1:MET:O | 0.48 | 2.61 | 2 | 1 |
| 1:A:4:ILE:O | 1:A:54:GLY:N | 0.48 | 2.46 | 6 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:22:SER:HA | 1:A:26:ASN:HA | 0.48 | 1.84 | 20 | 6 |
| 1:A:111:LEU:CD1 | 1:A:172:ALA:N | 0.48 | 2.76 | 3 | 8 |
| 1:A:108:THR:CB | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.48 | 2.39 | 18 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HA | 1:A:83:SER:CB | 0.48 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:122:ASP:CG | 1:A:123:PRO:HD3 | 0.48 | 2.28 | 9 | 1 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:112:LEU:HD13 | 0.48 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:22:SER:OG | 0.48 | 2.25 | 20 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CD2 | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.48 | 2.43 | 7 | 4 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:108:THR:OG1 | 0.48 | 2.28 | 9 | 7 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:109:PRO:HB3 | 0.48 | 1.79 | 12 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:81:CYS:CB | 0.48 | 2.38 | 12 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:CB | 0.48 | 2.96 | 17 | 2 |
| 1:A:155:VAL:HG23 | 1:A:156:GLU:N | 0.48 | 2.23 | 7 | 2 |
| 1:A:150:LYS:CD | 1:A:150:LYS:N | 0.48 | 2.77 | 9 | 2 |
| 1:A:28:PHE:CB | 1:A:29:PRO:CD | 0.48 | 2.91 | 9 | 3 |
| 1:A:118:ASP:CB | 1:A:158:SER:CB | 0.48 | 2.90 | 16 | 1 |
| 1:A:24:THR:CG2 | 1:A:40:TYR:CE1 | 0.48 | 2.97 | 16 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HG | 1:A:173:ILE:HD11 | 0.48 | 1.85 | 5 | 2 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:165:LEU:HD21 | 0.48 | 2.09 | 18 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:169:PHE:CG | 0.48 | 3.01 | 11 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:94:LYS:CA | 0.48 | 2.92 | 4 | 5 |
| 1:A:154:TYR:C | 1:A:155:VAL:HG13 | 0.48 | 2.29 | 10 | 3 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:26:ASN:HA | 0.48 | 2.09 | 3 | 2 |
| 1:A:157:CYS:CB | 1:A:165:LEU:HB3 | 0.48 | 2.39 | 12 | 3 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:113:VAL:C | 0.48 | 2.29 | 1 | 2 |
| 1:A:175:ALA:O | 1:A:178:GLU:OE1 | 0.48 | 2.31 | 10 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:112:LEU:CG | 0.48 | 2.97 | 20 | 1 |
| 1:A:105:CYS:SG | 1:A:110:PHE:CG | 0.48 | 3.07 | 6 | 1 |
| 1:A:90:PHE:HA | 1:A:93:VAL:CG2 | 0.48 | 2.39 | 6 | 2 |
| 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:154:TYR:OH | 0.48 | 2.09 | 19 | 9 |
| 1:A:118:ASP:OD1 | 1:A:119:LEU:N | 0.48 | 2.45 | 4 | 1 |
| 1:A:6:CYS:CA | 1:A:77:VAL:HG22 | 0.48 | 2.39 | 4 | 1 |
| 1:A:21:ILE:HG22 | 1:A:25:THR:OG1 | 0.48 | 2.08 | 9 | 2 |
| 1:A:14:VAL:CG1 | 1:A:14:VAL:O | 0.48 | 2.61 | 1 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:HB | 0.48 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:116:GLN:CD | 0.48 | 2.29 | 20 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HB | 1:A:109:PRO:HB2 | 0.48 | 1.86 | 4 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.48 | 1.85 | 12 | 1 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:121:ASP:CG | 0.48 | 2.52 | 13 | 2 |
| 1:A:16:LYS:N | 1:A:115:THR:HG21 | 0.48 | 2.24 | 17 | 1 |
| 1:A:121:ASP:HA | 1:A:125:THR:H | 0.48 | 1.69 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.48 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB3 | 1:A:28:PHE:HB2 | 0.48 | 1.85 | 20 | 1 |
| 1:A:26:ASN:ND2 | 1:A:162:GLN:OE1 | 0.48 | 2.47 | 15 | 1 |
| 1:A:2:GLN:CG | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.48 | 2.97 | 15 | 1 |
| 1:A:92:ASN:OD1 | 1:A:93:VAL:N | 0.47 | 2.47 | 1 | 2 |
| 1:A:80:VAL:HG21 | 1:A:110:PHE:HE1 | 0.47 | 1.66 | 4 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.47 | 2.77 | 13 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:29:PRO:HG2 | 0.47 | 2.49 | 16 | 1 |
| 1:A:2:GLN:HB2 | 1:A:4:ILE:HD11 | 0.47 | 1.85 | 18 | 2 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:102:THR:HG21 | 0.47 | 2.39 | 15 | 3 |
| 1:A:106:PRO:CA | 1:A:110:PHE:CD2 | 0.47 | 2.96 | 5 | 1 |
| 1:A:150:LYS:N | 1:A:150:LYS:CD | 0.47 | 2.76 | 15 | 4 |
| 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:110:PHE:CE2 | 0.47 | 2.44 | 11 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HG | 0.47 | 1.85 | 4 | 1 |
| 1:A:122:ASP:CG | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.47 | 2.29 | 12 | 2 |
| 1:A:55:LEU:N | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.47 | 2.68 | 13 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.47 | 2.26 | 9 | 2 |
| 1:A:53:LEU:H | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.47 | 2.15 | 16 | 1 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:110:PHE:CB | 0.47 | 2.38 | 5 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:109:PRO:HA | 0.47 | 1.85 | 5 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.47 | 3.02 | 5 | 1 |
| 1:A:25:THR:O | 1:A:26:ASN:C | 0.47 | 2.52 | 14 | 9 |
| 1:A:4:ILE:HG12 | 1:A:173:ILE:HA | 0.47 | 1.85 | 16 | 4 |
| 1:A:78:PHE:N | 1:A:78:PHE:CD2 | 0.47 | 2.81 | 17 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.47 | 1.85 | 9 | 1 |
| 1:A:53:LEU:O | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.47 | 2.61 | 8 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CD2 | 1:A:106:PRO:CB | 0.47 | 2.98 | 8 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:29:PRO:CD | 0.47 | 3.01 | 20 | 1 |
| 1:A:138:THR:CB | 1:A:139:PRO:HD2 | 0.47 | 2.40 | 15 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CA | 1:A:94:LYS:CE | 0.47 | 2.92 | 17 | 5 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:77:VAL:CG2 | 0.47 | 3.02 | 11 | 5 |
| 1:A:117:ILE:HD12 | 1:A:156:GLU:HB3 | 0.47 | 1.86 | 19 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:40:TYR:CG | 0.47 | 2.67 | 19 | 1 |
| 1:A:81:CYS:SG | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.47 | 3.07 | 19 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HA | 1:A:109:PRO:CG | 0.47 | 2.39 | 17 | 3 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.47 | 1.86 | 12 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:171:GLU:CG | 0.47 | 2.39 | 13 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:N | 0.47 | 2.47 | 3 | 2 |
| 1:A:90:PHE:C | 1:A:90:PHE:CD1 | 0.47 | 2.88 | 5 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.47 | 2.88 | 9 | 1 |
| 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:154:TYR:OH | 0.47 | 2.09 | 14 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:101:ILE:O | 1:A:106:PRO:CD | 0.47 | 2.62 | 8 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.47 | 2.39 | 18 | 1 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.47 | 2.24 | 13 | 3 |
| 1:A:157:CYS:HB2 | 1:A:164:GLY:N | 0.47 | 2.24 | 11 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG12 | 1:A:15:GLY:N | 0.47 | 2.24 | 16 | 2 |
| 1:A:116:GLN:HB2 | 1:A:120:ARG:CB | 0.47 | 2.40 | 12 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:145:LEU:HD22 | 0.47 | 2.39 | 8 | 1 |
| 1:A:130:ALA:CA | 1:A:135:LYS:HE3 | 0.47 | 2.39 | 20 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:116:GLN:CG | 0.47 | 2.40 | 20 | 2 |
| 1:A:55:LEU:O | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.47 | 2.61 | 15 | 2 |
| 1:A:93:VAL:C | 1:A:94:LYS:HE3 | 0.47 | 2.30 | 10 | 3 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.47 | 2.09 | 20 | 2 |
| 1:A:165:LEU:CD2 | 1:A:169:PHE:CE1 | 0.47 | 2.97 | 1 | 1 |
| 1:A:16:LYS:CG | 1:A:81:CYS:SG | 0.47 | 3.03 | 1 | 1 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:115:THR:CG2 | 0.47 | 2.63 | 8 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CD | 1:A:129:LEU:CD2 | 0.47 | 2.92 | 2 | 1 |
| 1:A:18:CYS:CB | 1:A:116:GLN:HG2 | 0.47 | 2.39 | 20 | 1 |
| 1:A:108:THR:CB | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.47 | 2.39 | 5 | 3 |
| 1:A:118:ASP:N | 1:A:158:SER:HB2 | 0.47 | 2.25 | 14 | 4 |
| 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:171:GLU:HB3 | 0.47 | 1.87 | 8 | 7 |
| 1:A:111:LEU:CG | 1:A:152:VAL:HG12 | 0.47 | 2.40 | 5 | 3 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:135:LYS:CG | 0.47 | 2.40 | 19 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:HD2 | 0.47 | 2.08 | 19 | 1 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:117:ILE:HG13 | 0.47 | 2.10 | 19 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:HB2 | 0.47 | 2.10 | 1 | 2 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:N | 0.47 | 2.88 | 5 | 2 |
| 1:A:145:LEU:CD1 | 1:A:149:LEU:CD1 | 0.47 | 2.92 | 5 | 4 |
| 1:A:153:LYS:CD | 1:A:155:VAL:HG13 | 0.47 | 2.40 | 13 | 1 |
| 1:A:9:VAL:HG21 | 1:A:101:ILE:HG21 | 0.47 | 1.86 | 13 | 2 |
| 1:A:158:SER:OG | 1:A:161:THR:HB | 0.47 | 2.10 | 13 | 1 |
| 1:A:41:ALA:O | 1:A:52:THR:HG23 | 0.47 | 2.10 | 17 | 1 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:86:SER:N | 0.47 | 2.47 | 17 | 1 |
| 1:A:99:PRO:HA | 1:A:103:HIS:HB3 | 0.47 | 1.86 | 7 | 3 |
| 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:121:ASP:HB2 | 0.47 | 1.87 | 9 | 1 |
| 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LYS:CD | 0.47 | 2.83 | 10 | 4 |
| 1:A:23:TYR:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.47 | 1.65 | 16 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:172:ALA:HA | 0.47 | 1.84 | 3 | 1 |
| 1:A:49:GLU:HB3 | 1:A:51:TYR:OH | 0.47 | 2.10 | 2 | 2 |
| 1:A:40:TYR:CE2 | 1:A:42:VAL:HG13 | 0.47 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.47 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:153:LYS:HB3 | 0.47 | 1.87 | 7 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:LEU:CD1 | 1:A:53:LEU:O | 0.47 | 2.63 | 11 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:HB3 | 0.47 | 2.10 | 7 | 2 |
| 1:A:109:PRO:CB | 1:A:175:ALA:CB | 0.47 | 2.93 | 18 | 2 |
| 1:A:13:ALA:CA | 1:A:83:SER:HB3 | 0.47 | 2.40 | 19 | 2 |
| 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:136:PRO:CB | 0.47 | 2.39 | 16 | 2 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:83:SER:O | 0.47 | 2.33 | 12 | 3 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:135:LYS:N | 0.47 | 2.48 | 12 | 2 |
| 1:A:41:ALA:CA | 1:A:54:GLY:HA2 | 0.47 | 2.40 | 13 | 3 |
| 1:A:126:ILE:HG23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 0.47 | 1.86 | 13 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HB | 1:A:158:SER:OG | 0.47 | 2.09 | 8 | 2 |
| 1:A:177:LEU:O | 1:A:178:GLU:CB | 0.47 | 2.61 | 16 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:104:HIS:CA | 0.47 | 2.93 | 3 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:21:ILE:HB | 0.47 | 1.87 | 5 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HA | 1:A:129:LEU:HD11 | 0.47 | 1.87 | 18 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:16:LYS:NZ | 0.47 | 2.45 | 14 | 1 |
| 1:A:155:VAL:CG1 | 1:A:167:ASN:HD21 | 0.47 | 2.20 | 15 | 1 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:52:THR:N | 0.47 | 2.47 | 6 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HD3 | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.47 | 1.85 | 6 | 2 |
| 1:A:117:ILE:HB | 1:A:158:SER:N | 0.47 | 2.24 | 20 | 7 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:124:SER:HB3 | 0.47 | 2.39 | 11 | 1 |
| 1:A:138:THR:OG1 | 1:A:141:THR:OG1 | 0.47 | 2.26 | 4 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CD2 | 1:A:142:ALA:HA | 0.47 | 2.44 | 3 | 2 |
| 1:A:49:GLU:HB2 | 1:A:51:TYR:CZ | 0.47 | 2.45 | 13 | 3 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:85:VAL:CG2 | 0.47 | 2.40 | 17 | 1 |
| 1:A:125:THR:CG2 | 1:A:126:ILE:N | 0.47 | 2.78 | 7 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:28:PHE:CD2 | 0.47 | 3.08 | 9 | 1 |
| 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:149:LEU:HD12 | 0.47 | 1.86 | 16 | 3 |
| 1:A:17:THR:HG21 | 1:A:32:TYR:CG | 0.47 | 2.45 | 8 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:125:THR:CB | 0.47 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:113:VAL:O | 0.47 | 2.68 | 18 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HA | 1:A:120:ARG:HB2 | 0.47 | 1.87 | 18 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.47 | 2.40 | 18 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:24:THR:HG23 | 0.47 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:115:THR:OG1 | 0.47 | 2.10 | 20 | 1 |
| 1:A:16:LYS:CD | 1:A:81:CYS:HB3 | 0.47 | 2.40 | 19 | 1 |
| 1:A:109:PRO:CA | 1:A:175:ALA:HB1 | 0.47 | 2.39 | 4 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CZ | 1:A:105:CYS:O | 0.47 | 2.68 | 4 | 2 |
| 1:A:126:ILE:HD11 | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.47 | 1.86 | 17 | 1 |
| 1:A:125:THR:HG23 | 1:A:126:ILE:N | 0.47 | 2.24 | 7 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:N | 0.47 | 2.32 | 7 | 2 |
| 1:A:87:PRO:CA | 1:A:129:LEU:HD11 | 0.47 | 2.40 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.47 | 2.44 | 2 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CG | 1:A:90:PHE:HB2 | 0.46 | 2.45 | 6 | 2 |
| 1:A:18:CYS:HB3 | 1:A:28:PHE:CD2 | 0.46 | 2.45 | 11 | 1 |
| 1:A:152:VAL:HG11 | 1:A:175:ALA:HB2 | 0.46 | 1.86 | 2 | 2 |
| 1:A:83:SER:CB | 1:A:89:SER:OG | 0.46 | 2.63 | 18 | 2 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:126:ILE:C | 0.46 | 2.53 | 7 | 2 |
| 1:A:121:ASP:HA | 1:A:125:THR:N | 0.46 | 2.25 | 9 | 1 |
| 1:A:103:HIS:O | 1:A:104:HIS:HB2 | 0.46 | 2.10 | 5 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.46 | 2.63 | 5 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HA | 1:A:137:ILE:CD1 | 0.46 | 2.28 | 5 | 1 |
| 1:A:130:ALA:HA | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.46 | 2.25 | 2 | 2 |
| 1:A:51:TYR:CB | 1:A:173:ILE:HG21 | 0.46 | 2.39 | 11 | 3 |
| 1:A:129:LEU:HB3 | 1:A:131:LYS:CE | 0.46 | 2.39 | 17 | 2 |
| 1:A:21:ILE:HG13 | 1:A:29:PRO:HG3 | 0.46 | 1.87 | 16 | 1 |
| 1:A:173:ILE:O | 1:A:176:ALA:N | 0.46 | 2.46 | 10 | 3 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:104:HIS:HA | 0.46 | 2.40 | 5 | 1 |
| 1:A:17:THR:HG21 | 1:A:32:TYR:CD2 | 0.46 | 2.45 | 2 | 1 |
| 1:A:76:ASP:OD1 | 1:A:78:PHE:CZ | 0.46 | 2.68 | 20 | 1 |
| 1:A:2:GLN:C | 1:A:3:THR:OG1 | 0.46 | 2.52 | 11 | 3 |
| 1:A:77:VAL:O | 1:A:78:PHE:CG | 0.46 | 2.69 | 11 | 2 |
| 1:A:134:GLN:C | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.46 | 2.30 | 7 | 3 |
| 1:A:22:SER:CB | 1:A:159:ALA:C | 0.46 | 2.84 | 2 | 3 |
| 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:CD | 0.46 | 2.40 | 9 | 1 |
| 1:A:148:ASP:OD1 | 1:A:149:LEU:HD23 | 0.46 | 2.10 | 1 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HG12 | 1:A:102:THR:CG2 | 0.46 | 2.40 | 15 | 2 |
| 1:A:55:LEU:C | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.46 | 2.30 | 10 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HA | 1:A:98:VAL:HG21 | 0.46 | 1.86 | 20 | 1 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:76:ASP:HA | 0.46 | 2.11 | 19 | 5 |
| 1:A:126:ILE:HD11 | 1:A:134:GLN:CA | 0.46 | 2.39 | 17 | 1 |
| 1:A:83:SER:N | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.46 | 2.26 | 10 | 2 |
| 1:A:87:PRO:C | 1:A:89:SER:H | 0.46 | 2.13 | 9 | 1 |
| 1:A:18:CYS:CB | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.46 | 2.41 | 1 | 1 |
| 1:A:97:TRP:O | 1:A:100:GLU:HG2 | 0.46 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG23 | 1:A:85:VAL:HG21 | 0.46 | 1.86 | 16 | 2 |
| 1:A:6:CYS:CB | 1:A:77:VAL:HG23 | 0.46 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:104:HIS:N | 0.46 | 2.76 | 3 | 1 |
| 1:A:2:GLN:CB | 1:A:4:ILE:HD11 | 0.46 | 2.40 | 18 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.46 | 2.46 | 2 | 1 |
| 1:A:105:CYS:N | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.46 | 2.25 | 6 | 1 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:20:LEU:C | 0.46 | 2.53 | 20 | 11 |
| 1:A:80:VAL:HG21 | 1:A:110:PHE:CZ | 0.46 | 2.44 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:94:LYS:HE3 | 1:A:94:LYS:CA | 0.46 | 2.40 | 4 | 2 |
| 1:A:49:GLU:OE2 | 1:A:51:TYR:CZ | 0.46 | 2.69 | 4 | 1 |
| 1:A:152:VAL:HG12 | 1:A:153:LYS:N | 0.46 | 2.25 | 3 | 4 |
| 1:A:169:PHE:O | 1:A:173:ILE:HD12 | 0.46 | 2.10 | 7 | 2 |
| 1:A:21:ILE:CG2 | 1:A:27:LYS:O | 0.46 | 2.64 | 1 | 3 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:135:LYS:NZ | 0.46 | 2.44 | 1 | 1 |
| 1:A:108:THR:CG2 | 1:A:178:GLU:OE2 | 0.46 | 2.63 | 10 | 1 |
| 1:A:80:VAL:HG12 | 1:A:93:VAL:CG1 | 0.46 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:55:LEU:N | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.46 | 2.25 | 20 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE1 | 1:A:145:LEU:CD2 | 0.46 | 2.88 | 5 | 2 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:19:LEU:N | 0.46 | 2.49 | 5 | 4 |
| 1:A:147:ARG:O | 1:A:150:LYS:HD2 | 0.46 | 2.11 | 2 | 5 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:86:SER:CB | 0.46 | 2.93 | 11 | 2 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:89:SER:OG | 0.46 | 2.11 | 15 | 3 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:HG3 | 0.46 | 2.10 | 5 | 2 |
| 1:A:15:GLY:CA | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.46 | 2.41 | 17 | 1 |
| 1:A:159:ALA:C | 1:A:162:GLN:HE22 | 0.46 | 2.14 | 17 | 3 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:CB | 0.46 | 2.93 | 20 | 2 |
| 1:A:87:PRO:CB | 1:A:134:GLN:O | 0.46 | 2.64 | 2 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:16:LYS:HD3 | 0.46 | 2.10 | 15 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:131:LYS:CD | 0.46 | 2.41 | 17 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:145:LEU:CD1 | 0.46 | 2.37 | 7 | 2 |
| 1:A:5:LYS:CD | 1:A:54:GLY:HA3 | 0.46 | 2.41 | 1 | 2 |
| 1:A:96:LYS:C | 1:A:99:PRO:HD2 | 0.46 | 2.31 | 16 | 4 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:128:LYS:CB | 0.46 | 2.64 | 20 | 2 |
| 1:A:167:ASN:HA | 1:A:170:ASP:OD2 | 0.46 | 2.09 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.46 | 2.64 | 5 | 1 |
| 1:A:56:PHE:CD1 | 1:A:56:PHE:C | 0.46 | 2.89 | 5 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CB | 1:A:173:ILE:HG23 | 0.46 | 2.40 | 18 | 2 |
| 1:A:126:ILE:HD13 | 1:A:134:GLN:HB3 | 0.46 | 1.87 | 2 | 2 |
| 1:A:18:CYS:N | 1:A:116:GLN:NE2 | 0.46 | 2.64 | 6 | 1 |
| 1:A:94:LYS:O | 1:A:99:PRO:CD | 0.46 | 2.64 | 11 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:145:LEU:HD11 | 0.46 | 1.70 | 19 | 2 |
| 1:A:45:MET:HA | 1:A:49:GLU:O | 0.46 | 2.10 | 1 | 5 |
| 1:A:117:ILE:CD1 | 1:A:156:GLU:HB3 | 0.46 | 2.40 | 4 | 1 |
| 1:A:170:ASP:OD1 | 1:A:170:ASP:C | 0.46 | 2.55 | 7 | 2 |
| 1:A:52:THR:O | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.46 | 2.59 | 7 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:119:LEU:HB3 | 0.46 | 2.40 | 7 | 1 |
| 1:A:116:GLN:C | 1:A:118:ASP:H | 0.46 | 2.13 | 9 | 2 |
| 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:116:GLN:CG | 0.46 | 2.40 | 1 | 1 |
| 1:A:4:ILE:HB | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.46 | 1.88 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:53:LEU:O | 0.46 | 2.10 | 18 | 2 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:77:VAL:O | 0.46 | 2.34 | 14 | 1 |
| 1:A:9:VAL:HG23 | 1:A:10:GLY:N | 0.46 | 2.25 | 20 | 1 |
| 1:A:158:SER:HB2 | 1:A:160:LEU:HD23 | 0.46 | 1.88 | 17 | 3 |
| 1:A:112:LEU:O | 1:A:112:LEU:HG | 0.46 | 2.11 | 7 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:93:VAL:CG2 | 0.46 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:132:ASN:HB3 | 0.46 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:46:ILE:HG13 | 1:A:170:ASP:OD1 | 0.46 | 2.11 | 12 | 4 |
| 1:A:88:SER:HA | 1:A:90:PHE:CE1 | 0.46 | 2.45 | 2 | 4 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:94:LYS:HA | 0.46 | 2.41 | 5 | 2 |
| 1:A:16:LYS:N | 1:A:115:THR:CG2 | 0.46 | 2.79 | 12 | 1 |
| 1:A:158:SER:OG | 1:A:161:THR:CB | 0.46 | 2.64 | 13 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:115:THR:CB | 0.46 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:46:ILE:CG2 | 1:A:47:GLY:N | 0.46 | 2.78 | 1 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:N | 0.46 | 2.79 | 8 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CE1 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.46 | 2.46 | 10 | 1 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.46 | 2.11 | 18 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:89:SER:HB2 | 0.46 | 1.88 | 14 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:C | 0.46 | 2.84 | 20 | 1 |
| 1:A:55:LEU:O | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.46 | 2.11 | 15 | 1 |
| 1:A:93:VAL:O | 1:A:97:TRP:CD1 | 0.45 | 2.70 | 6 | 1 |
| 1:A:118:ASP:N | 1:A:118:ASP:OD1 | 0.45 | 2.49 | 4 | 1 |
| 1:A:18:CYS:CA | 1:A:21:ILE:CG1 | 0.45 | 2.93 | 3 | 2 |
| 1:A:131:LYS:HB2 | 1:A:132:ASN:HD22 | 0.45 | 1.71 | 5 | 2 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:55:LEU:HB2 | 0.45 | 2.12 | 7 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:109:PRO:HB3 | 0.45 | 1.88 | 9 | 2 |
| 1:A:85:VAL:C | 1:A:121:ASP:HB3 | 0.45 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:118:ASP:C | 1:A:119:LEU:CD2 | 0.45 | 2.83 | 2 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:172:ALA:CB | 0.45 | 2.64 | 15 | 1 |
| 1:A:16:LYS:CE | 1:A:113:VAL:HB | 0.45 | 2.42 | 6 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:CG | 0.45 | 2.94 | 20 | 2 |
| 1:A:16:LYS:CB | 1:A:81:CYS:SG | 0.45 | 3.04 | 2 | 4 |
| 1:A:91:GLU:CA | 1:A:91:GLU:OE1 | 0.45 | 2.65 | 17 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.45 | 1.88 | 1 | 1 |
| 1:A:12:GLY:C | 1:A:83:SER:OG | 0.45 | 2.55 | 5 | 1 |
| 1:A:84:VAL:CG1 | 1:A:137:ILE:HB | 0.45 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:133:LYS:C | 1:A:134:GLN:CG | 0.45 | 2.83 | 14 | 2 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:171:GLU:N | 0.45 | 2.48 | 2 | 1 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.45 | 2.51 | 15 | 1 |
| 1:A:55:LEU:HD22 | 1:A:55:LEU:N | 0.45 | 2.25 | 15 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:116:GLN:HG2 | 0.45 | 1.87 | 4 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:HG | 0.45 | 2.51 | 8 | 4 |
| 1:A:165:LEU:O | 1:A:169:PHE:N | 0.45 | 2.49 | 7 | 4 |
| 1:A:133:LYS:N | 1:A:133:LYS:CD | 0.45 | 2.80 | 7 | 1 |
| 1:A:44:VAL:CG1 | 1:A:53:LEU:CD2 | 0.45 | 2.94 | 7 | 1 |
| 1:A:128:LYS:N | 1:A:128:LYS:HD2 | 0.45 | 2.25 | 5 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:131:LYS:CG | 0.45 | 2.41 | 18 | 1 |
| 1:A:83:SER:HB3 | 1:A:89:SER:OG | 0.45 | 2.10 | 18 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:HD3 | 0.45 | 2.11 | 20 | 1 |
| 1:A:21:ILE:N | 1:A:21:ILE:HD12 | 0.45 | 2.26 | 20 | 1 |
| 1:A:46:ILE:N | 1:A:46:ILE:HD12 | 0.45 | 2.26 | 6 | 1 |
| 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:146:ALA:CB | 0.45 | 2.38 | 20 | 6 |
| 1:A:135:LYS:CD | 1:A:135:LYS:N | 0.45 | 2.79 | 19 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:THR:N | 0.45 | 2.25 | 17 | 1 |
| 1:A:116:GLN:O | 1:A:120:ARG:HB2 | 0.45 | 2.11 | 9 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CD1 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.45 | 2.47 | 10 | 2 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:105:CYS:HB2 | 0.45 | 2.47 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HG | 0.45 | 2.46 | 3 | 1 |
| 1:A:2:GLN:NE2 | 1:A:177:LEU:HB2 | 0.45 | 2.27 | 2 | 1 |
| 1:A:153:LYS:CB | 1:A:171:GLU:OE1 | 0.45 | 2.64 | 20 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:119:LEU:HD21 | 0.45 | 1.89 | 15 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG11 | 1:A:167:ASN:OD1 | 0.45 | 2.11 | 15 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HB3 | 0.45 | 2.47 | 6 | 1 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:125:THR:OG1 | 0.45 | 2.35 | 18 | 2 |
| 1:A:137:ILE:HG13 | 1:A:141:THR:CG2 | 0.45 | 2.42 | 2 | 3 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:83:SER:HB3 | 0.45 | 2.41 | 12 | 3 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:125:THR:OG1 | 0.45 | 2.58 | 4 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CB | 1:A:90:PHE:HB2 | 0.45 | 2.41 | 12 | 2 |
| 1:A:87:PRO:CG | 1:A:131:LYS:HD3 | 0.45 | 2.41 | 5 | 2 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:28:PHE:HB2 | 0.45 | 2.52 | 9 | 1 |
| 1:A:115:THR:O | 1:A:117:ILE:N | 0.45 | 2.49 | 1 | 1 |
| 1:A:135:LYS:N | 1:A:135:LYS:HD2 | 0.45 | 2.26 | 1 | 1 |
| 1:A:27:LYS:O | 1:A:28:PHE:C | 0.45 | 2.55 | 16 | 1 |
| 1:A:93:VAL:C | 1:A:94:LYS:CE | 0.45 | 2.85 | 15 | 2 |
| 1:A:94:LYS:CE | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.45 | 2.29 | 8 | 1 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:129:LEU:CD1 | 0.45 | 2.65 | 8 | 1 |
| 1:A:94:LYS:N | 1:A:94:LYS:HD3 | 0.45 | 2.22 | 8 | 1 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:23:TYR:HB3 | 0.45 | 2.11 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CD1 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.45 | 2.99 | 18 | 1 |
| 1:A:93:VAL:CA | 1:A:97:TRP:CD1 | 0.45 | 2.96 | 20 | 1 |
| 1:A:123:PRO:O | 1:A:126:ILE:HB | 0.45 | 2.11 | 18 | 2 |
| 1:A:16:LYS:CG | 1:A:19:LEU:CB | 0.45 | 2.94 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:83:SER:OG | 1:A:89:SER:OG | 0.45 | 2.32 | 4 | 2 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:116:GLN:OE1 | 0.45 | 2.35 | 12 | 1 |
| 1:A:88:SER:HB2 | 1:A:132:ASN:OD1 | 0.45 | 2.12 | 9 | 1 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:122:ASP:O | 0.45 | 2.34 | 1 | 1 |
| 1:A:135:LYS:O | 1:A:135:LYS:CD | 0.45 | 2.65 | 1 | 1 |
| 1:A:18:CYS:CB | 1:A:28:PHE:HB2 | 0.45 | 2.38 | 1 | 2 |
| 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:136:PRO:HB2 | 0.45 | 1.89 | 18 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:122:ASP:HB2 | 0.45 | 1.88 | 9 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:122:ASP:C | 0.45 | 2.54 | 10 | 1 |
| 1:A:6:CYS:HB3 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.45 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:120:ARG:HD2 | 1:A:120:ARG:N | 0.45 | 2.26 | 14 | 1 |
| 1:A:10:GLY:N | 1:A:97:TRP:CD2 | 0.45 | 2.84 | 20 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:30:SER:CA | 0.45 | 2.99 | 6 | 1 |
| 1:A:119:LEU:C | 1:A:125:THR:OG1 | 0.45 | 2.55 | 11 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:24:THR:HG22 | 0.45 | 2.47 | 4 | 1 |
| 1:A:91:GLU:O | 1:A:91:GLU:OE2 | 0.45 | 2.35 | 13 | 1 |
| 1:A:131:LYS:HD2 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.45 | 2.27 | 17 | 1 |
| 1:A:15:GLY:CA | 1:A:116:GLN:CD | 0.45 | 2.85 | 17 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:125:THR:OG1 | 0.45 | 2.11 | 1 | 2 |
| 1:A:143:GLU:O | 1:A:147:ARG:HB2 | 0.45 | 2.11 | 1 | 2 |
| 1:A:4:ILE:HG22 | 1:A:4:ILE:O | 0.45 | 2.11 | 14 | 2 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.45 | 1.88 | 14 | 1 |
| 1:A:171:GLU:OE1 | 1:A:171:GLU:CA | 0.45 | 2.65 | 2 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.45 | 2.41 | 19 | 1 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:159:ALA:CA | 0.45 | 2.64 | 7 | 2 |
| 1:A:84:VAL:HA | 1:A:137:ILE:HB | 0.45 | 1.87 | 15 | 5 |
| 1:A:115:THR:HG23 | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.45 | 1.88 | 17 | 1 |
| 1:A:21:ILE:CG1 | 1:A:29:PRO:HG3 | 0.45 | 2.41 | 16 | 1 |
| 1:A:137:ILE:HG21 | 1:A:154:TYR:OH | 0.45 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HG | 1:A:152:VAL:HG12 | 0.45 | 1.87 | 3 | 2 |
| 1:A:94:LYS:NZ | 1:A:94:LYS:HA | 0.45 | 2.27 | 5 | 1 |
| 1:A:100:GLU:O | 1:A:104:HIS:HB2 | 0.45 | 2.11 | 20 | 1 |
| 1:A:174:LEU:CD2 | 1:A:174:LEU:C | 0.45 | 2.79 | 18 | 3 |
| 1:A:96:LYS:O | 1:A:99:PRO:HG2 | 0.45 | 2.12 | 16 | 9 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:79:LEU:CD2 | 0.45 | 3.03 | 5 | 2 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:122:ASP:HB2 | 0.45 | 2.12 | 13 | 3 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:HD13 | 0.45 | 2.52 | 17 | 1 |
| 1:A:4:ILE:CG2 | 1:A:6:CYS:SG | 0.45 | 3.03 | 17 | 1 |
| 1:A:93:VAL:C | 1:A:94:LYS:HD3 | 0.45 | 2.31 | 7 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:117:ILE:HG13 | 0.45 | 1.88 | 16 | 1 |
| 1:A:98:VAL:HA | 1:A:101:ILE:CD1 | 0.45 | 2.42 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:108:THR:CG2 | 0.45 | 2.93 | 18 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:122:ASP:OD2 | 0.45 | 2.65 | 14 | 1 |
| 1:A:130:ALA:C | 1:A:132:ASN:N | 0.45 | 2.70 | 2 | 2 |
| 1:A:51:TYR:HB2 | 1:A:173:ILE:HG21 | 0.44 | 1.89 | 11 | 4 |
| 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:46:ILE:N | 0.44 | 2.26 | 5 | 4 |
| 1:A:153:LYS:CB | 1:A:171:GLU:HG2 | 0.44 | 2.42 | 10 | 2 |
| 1:A:130:ALA:H | 1:A:135:LYS:NZ | 0.44 | 2.10 | 19 | 1 |
| 1:A:42:VAL:CG2 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.44 | 2.95 | 16 | 3 |
| 1:A:23:TYR:CA | 1:A:169:PHE:CZ | 0.44 | 2.99 | 12 | 2 |
| 1:A:117:ILE:CD1 | 1:A:157:CYS:H | 0.44 | 2.24 | 8 | 4 |
| 1:A:87:PRO:HG2 | 1:A:129:LEU:CD2 | 0.44 | 2.41 | 13 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.44 | 1.89 | 17 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:119:LEU:HB3 | 0.44 | 1.89 | 7 | 1 |
| 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:173:ILE:HG12 | 0.44 | 1.89 | 10 | 3 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:171:GLU:CB | 0.44 | 2.39 | 9 | 1 |
| 1:A:8:VAL:HG13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 0.44 | 1.87 | 1 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CE1 | 1:A:91:GLU:HG2 | 0.44 | 2.46 | 1 | 2 |
| 1:A:14:VAL:CG1 | 1:A:115:THR:OG1 | 0.44 | 2.66 | 18 | 1 |
| 1:A:8:VAL:CG2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.44 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HA | 1:A:134:GLN:CG | 0.44 | 2.42 | 15 | 1 |
| 1:A:177:LEU:CD1 | 1:A:177:LEU:C | 0.44 | 2.77 | 6 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:128:LYS:HG3 | 0.44 | 2.11 | 11 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:97:TRP:CH2 | 0.44 | 2.47 | 19 | 2 |
| 1:A:127:GLU:O | 1:A:128:LYS:C | 0.44 | 2.56 | 12 | 2 |
| 1:A:91:GLU:OE1 | 1:A:91:GLU:HA | 0.44 | 2.13 | 17 | 1 |
| 1:A:2:GLN:O | 1:A:3:THR:HB | 0.44 | 2.13 | 7 | 1 |
| 1:A:116:GLN:OE1 | 1:A:116:GLN:N | 0.44 | 2.51 | 9 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:THR:CG2 | 0.44 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:164:GLY:O | 1:A:167:ASN:HB3 | 0.44 | 2.12 | 10 | 3 |
| 1:A:129:LEU:CD2 | 1:A:131:LYS:CE | 0.44 | 2.95 | 8 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:169:PHE:CG | 0.44 | 3.05 | 5 | 1 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:125:THR:OG1 | 0.44 | 2.34 | 18 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD21 | 0.44 | 1.63 | 20 | 1 |
| 1:A:16:LYS:O | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.44 | 2.65 | 19 | 3 |
| 1:A:119:LEU:O | 1:A:125:THR:HB | 0.44 | 2.13 | 4 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:89:SER:HB3 | 0.44 | 1.89 | 4 | 1 |
| 1:A:12:GLY:C | 1:A:83:SER:CB | 0.44 | 2.86 | 17 | 1 |
| 1:A:122:ASP:O | 1:A:126:ILE:CD1 | 0.44 | 2.64 | 9 | 1 |
| 1:A:121:ASP:CB | 1:A:124:SER:HB2 | 0.44 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:90:PHE:CB | 0.44 | 3.00 | 8 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:21:ILE:CB | 0.44 | 2.42 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:154:TYR:OH | 0.44 | 2.66 | 18 | 1 |
| 1:A:122:ASP:HB2 | 1:A:123:PRO:CD | 0.44 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:81:CYS:O | 0.44 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:89:SER:C | 1:A:91:GLU:N | 0.44 | 2.70 | 15 | 1 |
| 1:A:162:GLN:NE2 | 1:A:162:GLN:CA | 0.44 | 2.81 | 9 | 3 |
| 1:A:28:PHE:CZ | 1:A:160:LEU:CD1 | 0.44 | 2.96 | 11 | 1 |
| 1:A:154:TYR:O | 1:A:155:VAL:HG12 | 0.44 | 2.12 | 7 | 1 |
| 1:A:174:LEU:CD2 | 1:A:174:LEU:O | 0.44 | 2.55 | 7 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:119:LEU:CG | 0.44 | 2.42 | 7 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HA | 1:A:134:GLN:CD | 0.44 | 2.32 | 15 | 2 |
| 1:A:129:LEU:O | 1:A:132:ASN:HB2 | 0.44 | 2.13 | 14 | 2 |
| 1:A:9:VAL:CG2 | 1:A:80:VAL:HA | 0.44 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:90:PHE:HB3 | 0.44 | 2.47 | 18 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:23:TYR:HB3 | 0.44 | 2.11 | 15 | 1 |
| 1:A:46:ILE:CG1 | 1:A:170:ASP:HA | 0.44 | 2.43 | 6 | 2 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:109:PRO:HB3 | 0.44 | 2.12 | 6 | 1 |
| 1:A:149:LEU:O | 1:A:150:LYS:CB | 0.44 | 2.63 | 7 | 2 |
| 1:A:46:ILE:CD1 | 1:A:46:ILE:N | 0.44 | 2.81 | 5 | 2 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:93:VAL:CG2 | 0.44 | 2.95 | 7 | 1 |
| 1:A:40:TYR:CE2 | 1:A:42:VAL:HG12 | 0.44 | 2.48 | 7 | 1 |
| 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LYS:HD3 | 0.44 | 2.33 | 20 | 4 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:HB2 | 0.44 | 2.13 | 14 | 2 |
| 1:A:158:SER:HB2 | 1:A:161:THR:HB | 0.44 | 1.90 | 10 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CD2 | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.44 | 2.98 | 3 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HB3 | 1:A:173:ILE:CD1 | 0.44 | 2.34 | 5 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:24:THR:HG23 | 0.44 | 2.47 | 14 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB2 | 1:A:129:LEU:CD1 | 0.44 | 2.43 | 14 | 1 |
| 1:A:86:SER:OG | 1:A:87:PRO:HD2 | 0.44 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:153:LYS:HB2 | 0.44 | 1.87 | 2 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:135:LYS:CG | 0.44 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:98:VAL:O | 1:A:103:HIS:N | 0.44 | 2.48 | 6 | 1 |
| 1:A:25:THR:C | 1:A:27:LYS:N | 0.44 | 2.69 | 14 | 7 |
| 1:A:53:LEU:CD2 | 1:A:53:LEU:O | 0.44 | 2.51 | 9 | 2 |
| 1:A:1:MET:O | 1:A:3:THR:N | 0.44 | 2.50 | 17 | 1 |
| 1:A:122:ASP:HB2 | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.44 | 1.88 | 16 | 3 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:124:SER:HB2 | 0.44 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:86:SER:HB3 | 1:A:89:SER:CB | 0.44 | 2.42 | 5 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG11 | 1:A:120:ARG:CD | 0.44 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:CD | 0.44 | 2.65 | 2 | 1 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:163:LYS:HD3 | 0.44 | 2.12 | 2 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HG22 | 1:A:168:VAL:CG2 | 0.44 | 2.42 | 6 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:134:GLN:HG3 | 1:A:134:GLN:O | 0.44 | 2.12 | 19 | 1 |
| 1:A:132:ASN:HB2 | 1:A:135:LYS:HD3 | 0.44 | 1.89 | 19 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:81:CYS:SG | 0.44 | 2.75 | 19 | 1 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:92:ASN:CG | 0.44 | 2.56 | 4 | 2 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:175:ALA:HB2 | 0.44 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HB3 | 1:A:124:SER:OG | 0.44 | 2.13 | 17 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:125:THR:HG22 | 0.44 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:130:ALA:H | 1:A:134:GLN:HG3 | 0.44 | 1.72 | 16 | 1 |
| 1:A:84:VAL:CG2 | 1:A:117:ILE:HB | 0.44 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:149:LEU:HD13 | 0.44 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:51:TYR:N | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.44 | 2.85 | 15 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.44 | 2.48 | 13 | 1 |
| 1:A:12:GLY:CA | 1:A:83:SER:HB2 | 0.44 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:147:ARG:CZ | 1:A:148:ASP:OD1 | 0.44 | 2.66 | 7 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HB | 1:A:117:ILE:HB | 0.44 | 1.89 | 16 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 0.44 | 2.48 | 10 | 1 |
| 1:A:76:ASP:O | 1:A:78:PHE:CZ | 0.44 | 2.71 | 2 | 2 |
| 1:A:106:PRO:HB3 | 1:A:110:PHE:CG | 0.44 | 2.48 | 3 | 1 |
| 1:A:8:VAL:HG11 | 1:A:16:LYS:HD3 | 0.44 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:21:ILE:HD12 | 1:A:32:TYR:CD1 | 0.44 | 2.47 | 2 | 1 |
| 1:A:17:THR:CG2 | 1:A:32:TYR:CD2 | 0.44 | 3.01 | 2 | 1 |
| 1:A:6:CYS:HB2 | 1:A:55:LEU:HG | 0.44 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.44 | 1.89 | 6 | 1 |
| 1:A:93:VAL:CG1 | 1:A:94:LYS:HE3 | 0.44 | 2.42 | 6 | 1 |
| 1:A:22:SER:HA | 1:A:26:ASN:H | 0.44 | 1.73 | 19 | 5 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:119:LEU:HG | 0.44 | 1.90 | 7 | 1 |
| 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:HD23 | 0.44 | 2.28 | 1 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CD | 1:A:149:LEU:CD2 | 0.44 | 2.94 | 1 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:162:GLN:N | 0.44 | 2.89 | 8 | 1 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:118:ASP:CB | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.44 | 2.43 | 20 | 2 |
| 1:A:8:VAL:HG21 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.44 | 1.88 | 20 | 1 |
| 1:A:133:LYS:CB | 1:A:135:LYS:HD2 | 0.44 | 2.42 | 15 | 1 |
| 1:A:165:LEU:CG | 1:A:169:PHE:CZ | 0.44 | 3.01 | 15 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG22 | 1:A:15:GLY:N | 0.43 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:156:GLU:OE1 | 1:A:156:GLU:N | 0.43 | 2.51 | 12 | 1 |
| 1:A:117:ILE:N | 1:A:158:SER:HB3 | 0.43 | 2.28 | 13 | 2 |
| 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:156:GLU:HG2 | 0.43 | 1.88 | 13 | 1 |
| 1:A:22:SER:CA | 1:A:26:ASN:CA | 0.43 | 2.96 | 7 | 3 |
| 1:A:134:GLN:O | 1:A:135:LYS:HD2 | 0.43 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:76:ASP:OD1 | 1:A:76:ASP:O | 0.43 | 2.35 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:4:ILE:HG22 | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.43 | 1.90 | 2 | 2 |
| 1:A:19:LEU:CD1 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.43 | 3.01 | 5 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:114:GLY:CA | 0.43 | 3.00 | 18 | 1 |
| 1:A:96:LYS:O | 1:A:100:GLU:CD | 0.43 | 2.57 | 14 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 0.43 | 2.47 | 11 | 1 |
| 1:A:7:VAL:O | 1:A:78:PHE:HA | 0.43 | 2.12 | 11 | 3 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:142:ALA:HB1 | 0.43 | 2.48 | 11 | 1 |
| 1:A:99:PRO:O | 1:A:103:HIS:HB2 | 0.43 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:6:CYS:HA | 1:A:77:VAL:HG23 | 0.43 | 1.90 | 9 | 4 |
| 1:A:118:ASP:OD1 | 1:A:158:SER:OG | 0.43 | 2.32 | 2 | 3 |
| 1:A:76:ASP:C | 1:A:77:VAL:HG12 | 0.43 | 2.33 | 4 | 1 |
| 1:A:114:GLY:C | 1:A:115:THR:HG23 | 0.43 | 2.34 | 12 | 2 |
| 1:A:156:GLU:HB2 | 1:A:163:LYS:HD3 | 0.43 | 1.90 | 9 | 1 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:171:GLU:HB2 | 0.43 | 2.13 | 1 | 1 |
| 1:A:134:GLN:NE2 | 1:A:134:GLN:CA | 0.43 | 2.77 | 16 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HA | 1:A:29:PRO:CG | 0.43 | 2.44 | 16 | 1 |
| 1:A:24:THR:O | 1:A:42:VAL:HG11 | 0.43 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:174:LEU:CA | 1:A:177:LEU:HB3 | 0.43 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CA | 1:A:101:ILE:HG12 | 0.43 | 2.43 | 5 | 1 |
| 1:A:121:ASP:OD2 | 1:A:125:THR:CA | 0.43 | 2.65 | 20 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CD2 | 1:A:109:PRO:HG2 | 0.43 | 2.48 | 8 | 2 |
| 1:A:56:PHE:CE2 | 1:A:57:ASP:O | 0.43 | 2.71 | 11 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HD11 | 1:A:163:LYS:HD3 | 0.43 | 1.90 | 19 | 1 |
| 1:A:29:PRO:C | 1:A:31:GLU:H | 0.43 | 2.16 | 12 | 1 |
| 1:A:145:LEU:O | 1:A:148:ASP:HB3 | 0.43 | 2.13 | 10 | 2 |
| 1:A:16:LYS:HA | 1:A:115:THR:OG1 | 0.43 | 2.12 | 17 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CG | 1:A:137:ILE:CG1 | 0.43 | 3.02 | 9 | 1 |
| 1:A:123:PRO:HA | 1:A:126:ILE:HB | 0.43 | 1.88 | 16 | 1 |
| 1:A:88:SER:O | 1:A:91:GLU:HB3 | 0.43 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:121:ASP:O | 1:A:125:THR:CG2 | 0.43 | 2.49 | 20 | 1 |
| 1:A:121:ASP:C | 1:A:124:SER:HB3 | 0.43 | 2.34 | 20 | 1 |
| 1:A:108:THR:HB | 1:A:109:PRO:HD2 | 0.43 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:131:LYS:CD | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.43 | 2.82 | 12 | 1 |
| 1:A:89:SER:HA | 1:A:92:ASN:OD1 | 0.43 | 2.14 | 12 | 3 |
| 1:A:164:GLY:O | 1:A:167:ASN:CB | 0.43 | 2.67 | 15 | 4 |
| 1:A:126:ILE:HA | 1:A:134:GLN:HG2 | 0.43 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:80:VAL:HG12 | 1:A:93:VAL:HG11 | 0.43 | 1.89 | 10 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HG | 1:A:129:LEU:O | 0.43 | 2.12 | 2 | 1 |
| 1:A:116:GLN:OE1 | 1:A:120:ARG:NE | 0.43 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:160:LEU:C | 1:A:162:GLN:NE2 | 0.43 | 2.72 | 6 | 3 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:153:LYS:CB | 0.43 | 2.96 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:134:GLN:C | 1:A:135:LYS:CD | 0.43 | 2.86 | 13 | 1 |
| 1:A:15:GLY:C | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.43 | 2.34 | 17 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD2 | 1:A:29:PRO:CD | 0.43 | 3.01 | 1 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HB | 1:A:94:LYS:HE2 | 0.43 | 1.90 | 1 | 1 |
| 1:A:169:PHE:N | 1:A:169:PHE:HD1 | 0.43 | 2.11 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:53:LEU:HB3 | 0.43 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:53:LEU:C | 0.43 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:86:SER:O | 1:A:89:SER:HB2 | 0.43 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:107:LYS:O | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.43 | 2.14 | 2 | 1 |
| 1:A:104:HIS:O | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.43 | 2.14 | 6 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:128:LYS:HD3 | 0.43 | 2.44 | 6 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:114:GLY:CA | 0.43 | 3.02 | 13 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CE1 | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.43 | 2.49 | 17 | 1 |
| 1:A:120:ARG:NH1 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.43 | 2.29 | 7 | 1 |
| 1:A:132:ASN:O | 1:A:133:LYS:C | 0.43 | 2.57 | 7 | 2 |
| 1:A:161:THR:CG2 | 1:A:163:LYS:HB3 | 0.43 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:136:PRO:HB3 | 0.43 | 2.13 | 2 | 3 |
| 1:A:110:PHE:CG | 1:A:151:ALA:HA | 0.43 | 2.49 | 14 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HB3 | 0.43 | 1.91 | 2 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.43 | 1.90 | 6 | 1 |
| 1:A:145:LEU:O | 1:A:148:ASP:HB2 | 0.43 | 2.13 | 19 | 2 |
| 1:A:52:THR:C | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.43 | 2.76 | 4 | 1 |
| 1:A:22:SER:OG | 1:A:165:LEU:CD2 | 0.43 | 2.67 | 12 | 1 |
| 1:A:139:PRO:O | 1:A:143:GLU:HB2 | 0.43 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.43 | 2.48 | 13 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:18:CYS:C | 0.43 | 2.57 | 9 | 6 |
| 1:A:110:PHE:CD1 | 1:A:151:ALA:CB | 0.43 | 3.02 | 9 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:14:VAL:HB | 0.43 | 2.13 | 9 | 1 |
| 1:A:14:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.43 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:118:ASP:OD1 | 1:A:118:ASP:N | 0.43 | 2.51 | 3 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CA | 1:A:122:ASP:OD2 | 0.43 | 2.66 | 2 | 1 |
| 1:A:22:SER:CB | 1:A:159:ALA:CB | 0.43 | 2.96 | 2 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG23 | 1:A:85:VAL:CG2 | 0.43 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:1:MET:O | 0.43 | 2.13 | 2 | 2 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:169:PHE:CD1 | 0.43 | 3.07 | 11 | 1 |
| 1:A:124:SER:O | 1:A:128:LYS:HG2 | 0.43 | 2.13 | 19 | 1 |
| 1:A:87:PRO:O | 1:A:90:PHE:CD1 | 0.43 | 2.71 | 17 | 2 |
| 1:A:9:VAL:CG1 | 1:A:101:ILE:CG2 | 0.43 | 2.88 | 13 | 1 |
| 1:A:108:THR:HG22 | 1:A:109:PRO:N | 0.43 | 2.28 | 17 | 6 |
| 1:A:134:GLN:C | 1:A:135:LYS:HG3 | 0.43 | 2.34 | 1 | 1 |
| 1:A:8:VAL:CG1 | 1:A:16:LYS:HE2 | 0.43 | 2.44 | 1 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.43 | 2.43 | 8 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:125:THR:HB | 0.43 | 2.44 | 8 | 1 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:152:VAL:CG1 | 0.43 | 2.95 | 3 | 1 |
| 1:A:51:TYR:CE2 | 1:A:177:LEU:HG | 0.43 | 2.48 | 3 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:81:CYS:SG | 0.43 | 2.54 | 5 | 2 |
| 1:A:106:PRO:O | 1:A:107:LYS:CB | 0.43 | 2.66 | 2 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HA | 1:A:121:ASP:HB2 | 0.43 | 1.90 | 2 | 1 |
| 1:A:130:ALA:C | 1:A:132:ASN:H | 0.43 | 2.17 | 2 | 1 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:135:LYS:O | 0.43 | 2.37 | 20 | 1 |
| 1:A:102:THR:C | 1:A:104:HIS:N | 0.43 | 2.71 | 6 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.43 | 2.97 | 11 | 2 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:118:ASP:OD1 | 0.43 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:133:LYS:CD | 1:A:133:LYS:N | 0.43 | 2.81 | 12 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:83:SER:HB2 | 0.43 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:21:ILE:CB | 1:A:28:PHE:HA | 0.43 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:123:PRO:O | 1:A:124:SER:C | 0.43 | 2.57 | 16 | 1 |
| 1:A:172:ALA:O | 1:A:175:ALA:HB3 | 0.43 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HB | 1:A:94:LYS:HE3 | 0.43 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:116:GLN:C | 1:A:158:SER:OG | 0.43 | 2.57 | 14 | 1 |
| 1:A:132:ASN:C | 1:A:133:LYS:HD2 | 0.43 | 2.33 | 12 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CG | 1:A:24:THR:HG22 | 0.43 | 2.48 | 17 | 1 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.43 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:135:LYS:N | 1:A:135:LYS:CD | 0.43 | 2.81 | 1 | 1 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:170:ASP:HB2 | 0.43 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:107:LYS:CD | 1:A:107:LYS:N | 0.43 | 2.82 | 10 | 1 |
| 1:A:159:ALA:HA | 1:A:165:LEU:HD23 | 0.43 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:53:LEU:HD12 | 0.43 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:21:ILE:HD13 | 0.43 | 2.14 | 20 | 1 |
| 1:A:117:ILE:CA | 1:A:158:SER:HB2 | 0.42 | 2.43 | 6 | 2 |
| 1:A:168:VAL:O | 1:A:169:PHE:C | 0.42 | 2.57 | 7 | 2 |
| 1:A:162:GLN:CA | 1:A:162:GLN:NE2 | 0.42 | 2.82 | 11 | 3 |
| 1:A:49:GLU:O | 1:A:51:TYR:CE2 | 0.42 | 2.72 | 12 | 2 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:120:ARG:CD | 0.42 | 2.44 | 4 | 1 |
| 1:A:140:GLU:O | 1:A:144:LYS:CG | 0.42 | 2.66 | 12 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:16:LYS:O | 0.42 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:5:LYS:C | 1:A:76:ASP:HA | 0.42 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:111:LEU:CD2 | 1:A:171:GLU:CB | 0.42 | 2.97 | 14 | 3 |
| 1:A:118:ASP:H | 1:A:158:SER:HB3 | 0.42 | 1.72 | 16 | 1 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:133:LYS:HG3 | 0.42 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.42 | 1.73 | 3 | 1 |
| 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:55:LEU:HD13 | 0.42 | 1.90 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:87:PRO:N | 1:A:129:LEU:HD13 | 0.42 | 2.29 | 18 | 1 |
| 1:A:15:GLY:O | 1:A:116:GLN:CD | 0.42 | 2.57 | 15 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:128:LYS:HD2 | 0.42 | 2.14 | 11 | 1 |
| 1:A:100:GLU:O | 1:A:104:HIS:CB | 0.42 | 2.67 | 19 | 2 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:122:ASP:CG | 0.42 | 2.58 | 4 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:121:ASP:N | 0.42 | 2.29 | 9 | 1 |
| 1:A:143:GLU:O | 1:A:147:ARG:CB | 0.42 | 2.68 | 1 | 2 |
| 1:A:134:GLN:HE21 | 1:A:135:LYS:N | 0.42 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:155:VAL:HG22 | 0.42 | 1.87 | 10 | 1 |
| 1:A:96:LYS:O | 1:A:100:GLU:HG3 | 0.42 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HZ3 | 1:A:19:LEU:HD23 | 0.42 | 1.68 | 18 | 1 |
| 1:A:174:LEU:C | 1:A:174:LEU:CD2 | 0.42 | 2.86 | 2 | 1 |
| 1:A:117:ILE:N | 1:A:158:SER:HB2 | 0.42 | 2.28 | 6 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:ILE:H | 0.42 | 1.67 | 6 | 1 |
| 1:A:158:SER:HB3 | 1:A:160:LEU:CD2 | 0.42 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.42 | 2.50 | 4 | 1 |
| 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.42 | 1.90 | 17 | 1 |
| 1:A:4:ILE:O | 1:A:4:ILE:HG22 | 0.42 | 2.12 | 17 | 1 |
| 1:A:147:ARG:NE | 1:A:148:ASP:OD1 | 0.42 | 2.52 | 7 | 1 |
| 1:A:10:GLY:HA2 | 1:A:97:TRP:CE3 | 0.42 | 2.50 | 7 | 1 |
| 1:A:130:ALA:CA | 1:A:134:GLN:OE1 | 0.42 | 2.67 | 9 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:THR:HG22 | 0.42 | 1.90 | 9 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:125:THR:HG22 | 0.42 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:HB2 | 0.42 | 2.54 | 10 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CD1 | 1:A:137:ILE:HG12 | 0.42 | 2.49 | 10 | 1 |
| 1:A:111:LEU:CG | 1:A:152:VAL:CG1 | 0.42 | 2.97 | 3 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:17:THR:N | 0.42 | 2.29 | 3 | 1 |
| 1:A:2:GLN:CG | 1:A:50:PRO:O | 0.42 | 2.67 | 3 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:169:PHE:HB3 | 0.42 | 2.49 | 5 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:106:PRO:O | 0.42 | 2.72 | 2 | 1 |
| 1:A:116:GLN:HB2 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.42 | 1.89 | 2 | 1 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:121:ASP:CB | 0.42 | 2.66 | 2 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:155:VAL:CG2 | 0.42 | 2.44 | 20 | 1 |
| 1:A:46:ILE:HG13 | 1:A:170:ASP:HA | 0.42 | 1.91 | 6 | 1 |
| 1:A:108:THR:CG2 | 1:A:109:PRO:HD3 | 0.42 | 2.37 | 11 | 1 |
| 1:A:123:PRO:O | 1:A:125:THR:N | 0.42 | 2.52 | 19 | 2 |
| 1:A:83:SER:OG | 1:A:85:VAL:HG23 | 0.42 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG2 | 1:A:116:GLN:CB | 0.42 | 2.95 | 19 | 1 |
| 1:A:171:GLU:O | 1:A:173:ILE:N | 0.42 | 2.52 | 2 | 4 |
| 1:A:2:GLN:HB2 | 1:A:51:TYR:CD1 | 0.42 | 2.50 | 13 | 2 |
| 1:A:125:THR:CG2 | 1:A:125:THR:O | 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:135:LYS:HD2 | 1:A:135:LYS:O | 0.42 | 2.14 | 1 | 1 |
| 1:A:120:ARG:O | 1:A:120:ARG:NE | 0.42 | 2.52 | 16 | 1 |
| 1:A:91:GLU:OE1 | 1:A:91:GLU:CA | 0.42 | 2.66 | 10 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.42 | 2.28 | 3 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:24:THR:HG21 | 0.42 | 2.49 | 14 | 1 |
| 1:A:21:ILE:CD1 | 1:A:32:TYR:CD1 | 0.42 | 3.02 | 2 | 1 |
| 1:A:53:LEU:CD2 | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.42 | 2.96 | 20 | 1 |
| 1:A:108:THR:O | 1:A:110:PHE:N | 0.42 | 2.52 | 15 | 1 |
| 1:A:104:HIS:O | 1:A:104:HIS:CG | 0.42 | 2.72 | 6 | 1 |
| 1:A:14:VAL:O | 1:A:115:THR:HG22 | 0.42 | 2.15 | 6 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:124:SER:CB | 0.42 | 2.98 | 6 | 2 |
| 1:A:87:PRO:O | 1:A:88:SER:CB | 0.42 | 2.67 | 6 | 1 |
| 1:A:119:LEU:N | 1:A:119:LEU:CD2 | 0.42 | 2.82 | 11 | 3 |
| 1:A:134:GLN:O | 1:A:135:LYS:HB3 | 0.42 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:76:ASP:C | 1:A:77:VAL:CG1 | 0.42 | 2.86 | 4 | 1 |
| 1:A:166:LYS:O | 1:A:170:ASP:HB2 | 0.42 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:53:LEU:N | 0.42 | 2.52 | 7 | 1 |
| 1:A:87:PRO:O | 1:A:88:SER:C | 0.42 | 2.58 | 7 | 1 |
| 1:A:3:THR:OG1 | 1:A:3:THR:O | 0.42 | 2.37 | 16 | 1 |
| 1:A:105:CYS:H | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.42 | 1.74 | 8 | 1 |
| 1:A:6:CYS:CB | 1:A:77:VAL:HB | 0.42 | 2.45 | 3 | 1 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:171:GLU:HG2 | 0.42 | 2.14 | 5 | 2 |
| 1:A:118:ASP:HB2 | 1:A:158:SER:OG | 0.42 | 2.14 | 5 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:131:LYS:HD2 | 0.42 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:21:ILE:HG21 | 1:A:27:LYS:C | 0.42 | 2.35 | 20 | 1 |
| 1:A:154:TYR:O | 1:A:155:VAL:HG22 | 0.42 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HE2 | 1:A:98:VAL:HG21 | 0.42 | 1.91 | 11 | 2 |
| 1:A:124:SER:O | 1:A:128:LYS:HG3 | 0.42 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HA | 1:A:115:THR:HG21 | 0.42 | 1.91 | 17 | 2 |
| 1:A:13:ALA:C | 1:A:14:VAL:HG12 | 0.42 | 2.35 | 20 | 2 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:162:GLN:CA | 0.42 | 3.07 | 17 | 1 |
| 1:A:88:SER:HA | 1:A:137:ILE:HD11 | 0.42 | 1.90 | 9 | 1 |
| 1:A:130:ALA:H | 1:A:134:GLN:CG | 0.42 | 2.28 | 16 | 1 |
| 1:A:17:THR:HA | 1:A:57:ASP:OD2 | 0.42 | 2.14 | 3 | 1 |
| 1:A:140:GLU:O | 1:A:144:LYS:HG3 | 0.42 | 2.15 | 5 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CG | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.42 | 2.50 | 18 | 1 |
| 1:A:114:GLY:C | 1:A:115:THR:O | 0.42 | 2.57 | 18 | 1 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:23:TYR:C | 0.42 | 2.58 | 18 | 1 |
| 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:155:VAL:CA | 0.42 | 2.45 | 15 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:15:GLY:N | 0.42 | 2.53 | 4 | 2 |
| 1:A:11:ASP:O | 1:A:14:VAL:CG1 | 0.42 | 2.67 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:131:LYS:CE | 0.42 | 2.44 | 17 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:CG | 0.42 | 2.45 | 7 | 1 |
| 1:A:118:ASP:HB2 | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.42 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG13 | 1:A:14:VAL:O | 0.42 | 2.14 | 14 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:11:ASP:C | 0.42 | 2.56 | 20 | 1 |
| 1:A:125:THR:O | 1:A:125:THR:HG23 | 0.42 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:51:TYR:HB2 | 1:A:173:ILE:CG2 | 0.42 | 2.45 | 15 | 1 |
| 1:A:120:ARG:HA | 1:A:125:THR:CB | 0.42 | 2.45 | 4 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG22 | 1:A:14:VAL:O | 0.42 | 2.15 | 4 | 2 |
| 1:A:19:LEU:HB2 | 1:A:116:GLN:OE1 | 0.42 | 2.15 | 4 | 1 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:85:VAL:C | 0.42 | 2.57 | 17 | 1 |
| 1:A:128:LYS:CD | 1:A:129:LEU:N | 0.42 | 2.82 | 7 | 1 |
| 1:A:8:VAL:HG23 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.42 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:21:ILE:CG2 | 1:A:32:TYR:CG | 0.42 | 3.03 | 1 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HG21 | 1:A:157:CYS:N | 0.42 | 2.29 | 16 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HG | 1:A:131:LYS:HD2 | 0.42 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:93:VAL:HG13 | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.42 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:118:ASP:H | 1:A:158:SER:HG | 0.42 | 1.58 | 2 | 1 |
| 1:A:121:ASP:OD2 | 1:A:125:THR:HB | 0.42 | 2.14 | 20 | 1 |
| 1:A:76:ASP:OD1 | 1:A:76:ASP:N | 0.42 | 2.53 | 11 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CG | 1:A:149:LEU:HD11 | 0.42 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:165:LEU:CB | 0.42 | 3.08 | 12 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CB | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.42 | 2.83 | 7 | 1 |
| 1:A:132:ASN:C | 1:A:133:LYS:HD3 | 0.42 | 2.34 | 7 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CZ | 1:A:105:CYS:CB | 0.42 | 3.03 | 9 | 2 |
| 1:A:178:GLU:O | 1:A:178:GLU:CG | 0.42 | 2.68 | 3 | 1 |
| 1:A:92:ASN:OD1 | 1:A:97:TRP:NE1 | 0.42 | 2.53 | 3 | 1 |
| 1:A:43:THR:CG2 | 1:A:50:PRO:HB2 | 0.42 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:123:PRO:N | 0.42 | 2.53 | 2 | 1 |
| 1:A:81:CYS:HB2 | 1:A:97:TRP:CZ3 | 0.42 | 2.50 | 2 | 1 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:121:ASP:OD2 | 0.42 | 2.68 | 9 | 1 |
| 1:A:53:LEU:CD1 | 1:A:53:LEU:H | 0.42 | 2.15 | 9 | 1 |
| 1:A:85:VAL:O | 1:A:121:ASP:HB3 | 0.42 | 2.15 | 9 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:90:PHE:HB2 | 0.42 | 2.50 | 8 | 1 |
| 1:A:119:LEU:N | 1:A:119:LEU:HD22 | 0.42 | 2.29 | 14 | 1 |
| 1:A:9:VAL:O | 1:A:10:GLY:C | 0.42 | 2.57 | 20 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:121:ASP:HB3 | 0.41 | 1.91 | 9 | 1 |
| 1:A:88:SER:O | 1:A:91:GLU:HB2 | 0.41 | 2.15 | 1 | 1 |
| 1:A:153:LYS:HD3 | 1:A:154:TYR:N | 0.41 | 2.30 | 10 | 1 |
| 1:A:77:VAL:CG1 | 1:A:109:PRO:CA | 0.41 | 2.96 | 5 | 1 |
| 1:A:137:ILE:N | 1:A:137:ILE:CD1 | 0.41 | 2.82 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:122:ASP:N | 0.41 | 2.30 | 19 | 1 |
| 1:A:173:ILE:HD12 | 1:A:173:ILE:N | 0.41 | 2.30 | 4 | 1 |
| 1:A:157:CYS:O | 1:A:159:ALA:N | 0.41 | 2.44 | 18 | 2 |
| 1:A:30:SER:O | 1:A:31:GLU:CG | 0.41 | 2.68 | 12 | 1 |
| 1:A:32:TYR:CD2 | 1:A:32:TYR:O | 0.41 | 2.72 | 17 | 1 |
| 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.41 | 2.38 | 17 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:115:THR:HG22 | 0.41 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:28:PHE:CD1 | 1:A:160:LEU:HB3 | 0.41 | 2.51 | 16 | 1 |
| 1:A:92:ASN:HA | 1:A:95:GLU:HG2 | 0.41 | 1.91 | 3 | 1 |
| 1:A:102:THR:O | 1:A:103:HIS:C | 0.41 | 2.57 | 18 | 1 |
| 1:A:122:ASP:O | 1:A:126:ILE:HG12 | 0.41 | 2.14 | 20 | 1 |
| 1:A:98:VAL:CG1 | 1:A:102:THR:CG2 | 0.41 | 2.97 | 15 | 2 |
| 1:A:118:ASP:O | 1:A:119:LEU:CD2 | 0.41 | 2.66 | 6 | 1 |
| 1:A:110:PHE:O | 1:A:111:LEU:HG | 0.41 | 2.15 | 18 | 2 |
| 1:A:125:THR:HA | 1:A:128:LYS:CG | 0.41 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CE1 | 1:A:24:THR:HB | 0.41 | 2.50 | 12 | 1 |
| 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:32:TYR:N | 0.41 | 2.30 | 12 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:82:PHE:C | 0.41 | 2.35 | 12 | 1 |
| 1:A:134:GLN:CD | 1:A:135:LYS:H | 0.41 | 2.19 | 12 | 1 |
| 1:A:110:PHE:C | 1:A:110:PHE:CD1 | 0.41 | 2.93 | 9 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HA | 1:A:121:ASP:HB3 | 0.41 | 1.93 | 10 | 1 |
| 1:A:77:VAL:HA | 1:A:108:THR:HG23 | 0.41 | 1.91 | 18 | 1 |
| 1:A:129:LEU:C | 1:A:131:LYS:N | 0.41 | 2.73 | 14 | 1 |
| 1:A:57:ASP:OD1 | 1:A:57:ASP:O | 0.41 | 2.38 | 14 | 1 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:171:GLU:CD | 0.41 | 2.58 | 2 | 1 |
| 1:A:6:CYS:O | 1:A:56:PHE:N | 0.41 | 2.52 | 20 | 1 |
| 1:A:118:ASP:C | 1:A:118:ASP:OD1 | 0.41 | 2.59 | 6 | 1 |
| 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:40:TYR:CZ | 0.41 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:7:VAL:HG23 | 1:A:78:PHE:CD1 | 0.41 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:88:SER:HA | 1:A:90:PHE:CD1 | 0.41 | 2.51 | 11 | 2 |
| 1:A:12:GLY:C | 1:A:14:VAL:N | 0.41 | 2.73 | 12 | 4 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:145:LEU:HD11 | 0.41 | 2.50 | 17 | 2 |
| 1:A:91:GLU:HA | 1:A:91:GLU:OE1 | 0.41 | 2.15 | 10 | 2 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:170:ASP:OD2 | 0.41 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HD3 | 0.41 | 1.92 | 9 | 1 |
| 1:A:115:THR:O | 1:A:116:GLN:C | 0.41 | 2.58 | 8 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HG3 | 1:A:129:LEU:HB3 | 0.41 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HD21 | 1:A:169:PHE:CZ | 0.41 | 2.48 | 10 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CD | 1:A:129:LEU:CB | 0.41 | 2.98 | 10 | 1 |
| 1:A:23:TYR:OH | 1:A:53:LEU:HG | 0.41 | 2.15 | 3 | 1 |
| 1:A:174:LEU:O | 1:A:177:LEU:CD1 | 0.41 | 2.68 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.41 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:129:LEU:CD2 | 0.41 | 2.45 | 2 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 0.41 | 2.49 | 20 | 1 |
| 1:A:16:LYS:NZ | 1:A:19:LEU:CD2 | 0.41 | 2.83 | 6 | 1 |
| 1:A:113:VAL:CG1 | 1:A:168:VAL:CG2 | 0.41 | 2.87 | 19 | 1 |
| 1:A:120:ARG:HB2 | 1:A:124:SER:CB | 0.41 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:HG2 | 0.41 | 1.92 | 12 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG13 | 1:A:120:ARG:CD | 0.41 | 2.39 | 9 | 1 |
| 1:A:132:ASN:HB2 | 1:A:135:LYS:CG | 0.41 | 2.45 | 1 | 1 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:77:VAL:HB | 0.41 | 2.56 | 3 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:115:THR:HG21 | 0.41 | 1.93 | 5 | 1 |
| 1:A:83:SER:HA | 1:A:115:THR:CB | 0.41 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HA | 1:A:122:ASP:CB | 0.41 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HZ1 | 1:A:145:LEU:HD21 | 0.41 | 1.76 | 14 | 1 |
| 1:A:23:TYR:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 0.41 | 1.75 | 14 | 1 |
| 1:A:155:VAL:HA | 1:A:156:GLU:OE1 | 0.41 | 2.16 | 2 | 1 |
| 1:A:4:ILE:CG2 | 1:A:53:LEU:CD1 | 0.41 | 2.98 | 2 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HG23 | 1:A:158:SER:CA | 0.41 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:79:LEU:CG | 0.41 | 3.09 | 19 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HB3 | 1:A:135:LYS:CG | 0.41 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:157:CYS:HB3 | 1:A:164:GLY:N | 0.41 | 2.30 | 12 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:81:CYS:SG | 0.41 | 2.56 | 13 | 1 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:83:SER:HB2 | 0.41 | 2.16 | 17 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:90:PHE:HD2 | 0.41 | 2.34 | 9 | 1 |
| 1:A:1:MET:CG | 1:A:50:PRO:HB2 | 0.41 | 2.46 | 1 | 1 |
| 1:A:98:VAL:O | 1:A:101:ILE:HG12 | 0.41 | 2.14 | 3 | 1 |
| 1:A:120:ARG:CD | 1:A:121:ASP:N | 0.41 | 2.83 | 3 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:123:PRO:HD2 | 0.41 | 2.15 | 5 | 1 |
| 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:101:ILE:CG2 | 0.41 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:129:LEU:CD1 | 1:A:131:LYS:HD2 | 0.41 | 2.45 | 18 | 1 |
| 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:89:SER:HB3 | 0.41 | 1.91 | 14 | 1 |
| 1:A:147:ARG:O | 1:A:150:LYS:NZ | 0.41 | 2.51 | 20 | 2 |
| 1:A:21:ILE:HG21 | 1:A:27:LYS:O | 0.41 | 2.15 | 20 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:135:LYS:HG2 | 0.41 | 1.93 | 20 | 1 |
| 1:A:81:CYS:HB3 | 1:A:115:THR:CG2 | 0.41 | 2.44 | 15 | 1 |
| 1:A:110:PHE:CD1 | 1:A:110:PHE:C | 0.41 | 2.94 | 11 | 1 |
| 1:A:14:VAL:C | 1:A:16:LYS:N | 0.41 | 2.73 | 12 | 1 |
| 1:A:6:CYS:SG | 1:A:77:VAL:HG22 | 0.41 | 2.55 | 13 | 1 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:16:LYS:HD2 | 0.41 | 2.16 | 14 | 1 |
| 1:A:174:LEU:HD22 | 1:A:178:GLU:HA | 0.41 | 1.92 | 20 | 1 |
| 1:A:126:ILE:O | 1:A:127:GLU:C | 0.41 | 2.58 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:16:LYS:CD | 1:A:81:CYS:HB2 | 0.41 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:79:LEU:CD2 | 1:A:111:LEU:HB2 | 0.41 | 2.46 | 17 | 1 |
| 1:A:117:ILE:O | 1:A:120:ARG:N | 0.41 | 2.53 | 7 | 1 |
| 1:A:115:THR:C | 1:A:116:GLN:OE1 | 0.41 | 2.59 | 9 | 1 |
| 1:A:83:SER:OG | 1:A:89:SER:HB2 | 0.41 | 2.15 | 8 | 1 |
| 1:A:17:THR:O | 1:A:20:LEU:CG | 0.41 | 2.68 | 5 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:137:ILE:HB | 0.41 | 1.92 | 5 | 1 |
| 1:A:133:LYS:C | 1:A:134:GLN:CD | 0.41 | 2.79 | 14 | 1 |
| 1:A:22:SER:O | 1:A:24:THR:N | 0.41 | 2.54 | 14 | 1 |
| 1:A:126:ILE:HD13 | 1:A:134:GLN:CB | 0.41 | 2.46 | 2 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CZ | 1:A:112:LEU:CG | 0.41 | 3.03 | 20 | 1 |
| 1:A:86:SER:CA | 1:A:135:LYS:HB3 | 0.41 | 2.46 | 20 | 1 |
| 1:A:80:VAL:HG13 | 1:A:93:VAL:HG12 | 0.41 | 1.93 | 20 | 1 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:115:THR:HG23 | 0.41 | 2.16 | 15 | 1 |
| 1:A:91:GLU:OE1 | 1:A:94:LYS:CG | 0.41 | 2.69 | 15 | 1 |
| 1:A:104:HIS:C | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.41 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:103:HIS:O | 1:A:104:HIS:ND1 | 0.41 | 2.54 | 6 | 1 |
| 1:A:7:VAL:HG21 | 1:A:78:PHE:CE1 | 0.41 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:17:THR:CA | 1:A:20:LEU:CD1 | 0.41 | 2.97 | 12 | 1 |
| 1:A:55:LEU:C | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.41 | 2.89 | 13 | 1 |
| 1:A:85:VAL:HB | 1:A:120:ARG:C | 0.41 | 2.37 | 13 | 1 |
| 1:A:110:PHE:HB3 | 1:A:151:ALA:CA | 0.41 | 2.46 | 13 | 2 |
| 1:A:32:TYR:CD1 | 1:A:32:TYR:O | 0.41 | 2.74 | 13 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HG2 | 1:A:131:LYS:HD3 | 0.41 | 1.92 | 17 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CE2 | 1:A:141:THR:CG2 | 0.41 | 3.04 | 17 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HA | 0.41 | 1.76 | 17 | 1 |
| 1:A:92:ASN:ND2 | 1:A:93:VAL:N | 0.41 | 2.69 | 7 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HA | 1:A:94:LYS:HZ2 | 0.41 | 1.75 | 9 | 1 |
| 1:A:116:GLN:CD | 1:A:116:GLN:N | 0.41 | 2.74 | 9 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HB | 1:A:117:ILE:CB | 0.41 | 2.45 | 16 | 1 |
| 1:A:101:ILE:CB | 1:A:106:PRO:HG2 | 0.41 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:29:PRO:O | 1:A:30:SER:HB3 | 0.41 | 2.15 | 10 | 1 |
| 1:A:7:VAL:HA | 1:A:56:PHE:O | 0.41 | 2.15 | 10 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:83:SER:N | 0.41 | 2.13 | 18 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG12 | 1:A:115:THR:OG1 | 0.41 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HG21 | 1:A:120:ARG:NH1 | 0.41 | 2.28 | 18 | 1 |
| 1:A:86:SER:CB | 1:A:89:SER:CB | 0.41 | 2.99 | 18 | 1 |
| 1:A:87:PRO:CA | 1:A:129:LEU:CD1 | 0.41 | 2.99 | 18 | 1 |
| 1:A:93:VAL:C | 1:A:94:LYS:CD | 0.41 | 2.90 | 14 | 1 |
| 1:A:118:ASP:CG | 1:A:119:LEU:N | 0.41 | 2.74 | 2 | 1 |
| 1:A:22:SER:CA | 1:A:26:ASN:N | 0.41 | 2.78 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:119:LEU:CG | 1:A:124:SER:HB3 | 0.41 | 2.46 | 11 | 1 |
| 1:A:144:LYS:O | 1:A:148:ASP:OD2 | 0.41 | 2.38 | 12 | 1 |
| 1:A:49:GLU:O | 1:A:51:TYR:CD2 | 0.41 | 2.74 | 12 | 1 |
| 1:A:49:GLU:HB3 | 1:A:51:TYR:CE1 | 0.41 | 2.50 | 3 | 2 |
| 1:A:82:PHE:CE2 | 1:A:154:TYR:HE1 | 0.41 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:130:ALA:O | 1:A:133:LYS:HE2 | 0.41 | 2.16 | 3 | 1 |
| 1:A:90:PHE:CZ | 1:A:141:THR:O | 0.41 | 2.73 | 5 | 1 |
| 1:A:91:GLU:OE1 | 1:A:91:GLU:O | 0.41 | 2.39 | 5 | 1 |
| 1:A:157:CYS:SG | 1:A:163:LYS:CG | 0.41 | 3.09 | 18 | 1 |
| 1:A:161:THR:O | 1:A:162:GLN:HG2 | 0.41 | 2.16 | 14 | 1 |
| 1:A:28:PHE:HA | 1:A:29:PRO:HD3 | 0.41 | 1.84 | 14 | 1 |
| 1:A:14:VAL:CG2 | 1:A:85:VAL:CG2 | 0.41 | 2.99 | 2 | 1 |
| 1:A:85:VAL:CG1 | 1:A:120:ARG:HG3 | 0.41 | 2.46 | 20 | 1 |
| 1:A:155:VAL:C | 1:A:156:GLU:CG | 0.41 | 2.89 | 15 | 1 |
| 1:A:117:ILE:HG23 | 1:A:157:CYS:C | 0.40 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:78:PHE:CE2 | 1:A:105:CYS:HB3 | 0.40 | 2.51 | 1 | 1 |
| 1:A:105:CYS:N | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.40 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:167:ASN:O | 1:A:171:GLU:OE1 | 0.40 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:126:ILE:CD1 | 1:A:134:GLN:OE1 | 0.40 | 2.69 | 10 | 1 |
| 1:A:170:ASP:OD2 | 1:A:171:GLU:OE1 | 0.40 | 2.39 | 2 | 1 |
| 1:A:135:LYS:N | 1:A:136:PRO:CD | 0.40 | 2.83 | 20 | 1 |
| 1:A:7:VAL:CG2 | 1:A:78:PHE:CD1 | 0.40 | 3.04 | 6 | 1 |
| 1:A:128:LYS:CG | 1:A:129:LEU:N | 0.40 | 2.84 | 11 | 1 |
| 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:19:LEU:HB3 | 0.40 | 1.93 | 11 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HA | 1:A:94:LYS:CE | 0.40 | 2.46 | 9 | 1 |
| 1:A:94:LYS:CA | 1:A:98:VAL:CG2 | 0.40 | 2.94 | 9 | 1 |
| 1:A:167:ASN:OD1 | 1:A:171:GLU:OE1 | 0.40 | 2.39 | 8 | 1 |
| 1:A:122:ASP:OD1 | 1:A:124:SER:HB3 | 0.40 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:111:LEU:CD1 | 1:A:175:ALA:HB2 | 0.40 | 2.46 | 10 | 1 |
| 1:A:82:PHE:CD2 | 1:A:114:GLY:HA2 | 0.40 | 2.51 | 18 | 1 |
| 1:A:156:GLU:O | 1:A:157:CYS:SG | 0.40 | 2.79 | 18 | 1 |
| 1:A:159:ALA:C | 1:A:162:GLN:NE2 | 0.40 | 2.74 | 18 | 1 |
| 1:A:129:LEU:HA | 1:A:131:LYS:HD2 | 0.40 | 1.93 | 2 | 1 |
| 1:A:21:ILE:CG2 | 1:A:27:LYS:C | 0.40 | 2.90 | 20 | 1 |
| 1:A:133:LYS:HB2 | 1:A:135:LYS:HD2 | 0.40 | 1.93 | 15 | 1 |
| 1:A:22:SER:C | 1:A:26:ASN:H | 0.40 | 2.20 | 15 | 1 |
| 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:53:LEU:HD23 | 0.40 | 1.91 | 15 | 1 |
| 1:A:132:ASN:HB2 | 1:A:135:LYS:CD | 0.40 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:18:CYS:HB2 | 1:A:116:GLN:HG3 | 0.40 | 1.93 | 12 | 1 |
| 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.40 | 2.22 | 13 | 1 |
| 1:A:125:THR:HA | 1:A:128:LYS:HB2 | 0.40 | 1.94 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:8:VAL:CG2 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.40 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:121:ASP:CB | 1:A:125:THR:CB | 0.40 | 2.99 | 9 | 1 |
| 1:A:134:GLN:HA | 1:A:134:GLN:NE2 | 0.40 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:18:CYS:C | 1:A:159:ALA:CB | 0.40 | 2.90 | 1 | 1 |
| 1:A:27:LYS:CE | 1:A:31:GLU:HB2 | 0.40 | 2.46 | 1 | 1 |
| 1:A:101:ILE:C | 1:A:106:PRO:HG2 | 0.40 | 2.36 | 8 | 1 |
| 1:A:166:LYS:O | 1:A:170:ASP:HB3 | 0.40 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:11:ASP:O | 1:A:15:GLY:HA2 | 0.40 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:5:LYS:O | 1:A:77:VAL:N | 0.40 | 2.54 | 14 | 1 |
| 1:A:132:ASN:O | 1:A:133:LYS:HB2 | 0.40 | 2.16 | 15 | 2 |
| 1:A:10:GLY:O | 1:A:81:CYS:HB2 | 0.40 | 2.17 | 20 | 1 |
| 1:A:116:GLN:C | 1:A:120:ARG:HB3 | 0.40 | 2.37 | 20 | 1 |
| 1:A:132:ASN:HB2 | 1:A:135:LYS:HE2 | 0.40 | 1.93 | 20 | 1 |
| 1:A:102:THR:OG1 | 1:A:103:HIS:N | 0.40 | 2.54 | 15 | 1 |
| 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:142:ALA:HB1 | 0.40 | 1.75 | 6 | 1 |
| 1:A:14:VAL:HA | 1:A:81:CYS:SG | 0.40 | 2.56 | 19 | 1 |
| 1:A:83:SER:CB | 1:A:89:SER:HG | 0.40 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:20:LEU:O | 1:A:24:THR:CG2 | 0.40 | 2.69 | 17 | 1 |
| 1:A:165:LEU:C | 1:A:167:ASN:N | 0.40 | 2.74 | 7 | 1 |
| 1:A:23:TYR:HD1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 0.40 | 1.71 | 9 | 1 |
| 1:A:5:LYS:HD3 | 1:A:54:GLY:HA3 | 0.40 | 1.92 | 5 | 1 |
| 1:A:173:ILE:HG22 | 1:A:174:LEU:N | 0.40 | 2.32 | 18 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.40 | 2.57 | 20 | 1 |
| 1:A:166:LYS:O | 1:A:170:ASP:CG | 0.40 | 2.60 | 15 | 1 |
| 1:A:23:TYR:CZ | 1:A:55:LEU:CB | 0.40 | 3.03 | 6 | 1 |
| 1:A:92:ASN:O | 1:A:95:GLU:HB2 | 0.40 | 2.16 | 6 | 1 |
| 1:A:132:ASN:CB | 1:A:135:LYS:HB3 | 0.40 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:118:ASP:OD1 | 1:A:160:LEU:HD21 | 0.40 | 2.16 | 19 | 1 |
| 1:A:94:LYS:HG2 | 1:A:145:LEU:HD13 | 0.40 | 1.92 | 12 | 1 |
| 1:A:165:LEU:HD13 | 1:A:166:LYS:H | 0.40 | 1.67 | 12 | 1 |
| 1:A:174:LEU:O | 1:A:178:GLU:HA | 0.40 | 2.17 | 13 | 1 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:115:THR:HB | 0.40 | 2.15 | 17 | 1 |
| 1:A:18:CYS:SG | 1:A:159:ALA:HB3 | 0.40 | 2.57 | 9 | 1 |
| 1:A:131:LYS:CB | 1:A:132:ASN:ND2 | 0.40 | 2.84 | 1 | 1 |
| 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:129:LEU:HB2 | 0.40 | 1.94 | 10 | 1 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:115:THR:CG2 | 0.40 | 2.69 | 15 | 1 |

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------|
| 1 | A | 153/194 (79%) | 104±4 (68±3%) | 30±4 (20±2%) | 18±3 (12±2%) | 1 | 8 |
| All | All | 3060/3880 (79%) | 2089 (68%) | 609 (20%) | 362 (12%) | 1 | 8 |

All 50 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 | 178 | GLU | 20 |
| 1 | A | 151 | ALA | 20 |
| 1 | A | 134 | GLN | 19 |
| 1 | A | 108 | THR | 19 |
| 1 | A | 164 | GLY | 19 |
| 1 | A | 157 | CYS | 17 |
| 1 | A | 3 | THR | 16 |
| 1 | A | 32 | TYR | 16 |
| 1 | A | 135 | LYS | 14 |
| 1 | A | 162 | GLN | 14 |
| 1 | A | 26 | ASN | 14 |
| 1 | A | 117 | ILE | 12 |
| 1 | A | 115 | THR | 11 |
| 1 | A | 12 | GLY | 11 |
| 1 | A | 1 | MET | 10 |
| 1 | A | 83 | SER | 9 |
| 1 | A | 114 | GLY | 9 |
| 1 | A | 77 | VAL | 9 |
| 1 | A | 13 | ALA | 7 |
| 1 | A | 158 | SER | 7 |
| 1 | A | 88 | SER | 7 |
| 1 | A | 122 | ASP | 5 |
| 1 | A | 137 | ILE | 5 |
| 1 | A | 30 | SER | 5 |
| 1 | A | 14 | VAL | 5 |
| 1 | A | 126 | ILE | 4 |
| 1 | A | 87 | PRO | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 29 | PRO | 4 |
| 1 | A | 90 | PHE | 4 |
| 1 | A | 116 | GLN | 4 |
| 1 | A | 109 | PRO | 3 |
| 1 | A | 159 | ALA | 3 |
| 1 | A | 119 | LEU | 3 |
| 1 | A | 121 | ASP | 3 |
| 1 | A | 124 | SER | 3 |
| 1 | A | 82 | PHE | 3 |
| 1 | A | 15 | GLY | 3 |
| 1 | A | 28 | PHE | 3 |
| 1 | A | 101 | ILE | 2 |
| 1 | A | 106 | PRO | 2 |
| 1 | A | 155 | VAL | 2 |
| 1 | A | 16 | LYS | 2 |
| 1 | A | 130 | ALA | 2 |
| 1 | A | 105 | CYS | 2 |
| 1 | A | 86 | SER | 1 |
| 1 | A | 2 | GLN | 1 |
| 1 | A | 9 | VAL | 1 |
| 1 | A | 120 | ARG | 1 |
| 1 | A | 104 | HIS | 1 |
| 1 | A | 136 | PRO | 1 |

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|-------------|
| 1 | A | 135/172 (78%) | 85±5 (63±4%) | 50±5 (37±4%) | 1 8 |
| All | All | 2700/3440 (78%) | 1707 (63%) | 993 (37%) | 1 8 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 177 | LEU | 20 |
| 1 | A | 160 | LEU | 20 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 161 | THR | 20 |
| 1 | A | 19 | LEU | 20 |
| 1 | A | 165 | LEU | 20 |
| 1 | A | 149 | LEU | 20 |
| 1 | A | 174 | LEU | 20 |
| 1 | A | 145 | LEU | 20 |
| 1 | A | 167 | ASN | 20 |
| 1 | A | 138 | THR | 20 |
| 1 | A | 30 | SER | 19 |
| 1 | A | 53 | LEU | 19 |
| 1 | A | 23 | TYR | 19 |
| 1 | A | 101 | ILE | 18 |
| 1 | A | 28 | PHE | 18 |
| 1 | A | 134 | GLN | 18 |
| 1 | A | 110 | PHE | 18 |
| 1 | A | 163 | LYS | 17 |
| 1 | A | 108 | THR | 17 |
| 1 | A | 117 | ILE | 17 |
| 1 | A | 173 | ILE | 16 |
| 1 | A | 131 | LYS | 16 |
| 1 | A | 77 | VAL | 15 |
| 1 | A | 90 | PHE | 15 |
| 1 | A | 94 | LYS | 15 |
| 1 | A | 129 | LEU | 14 |
| 1 | A | 92 | ASN | 14 |
| 1 | A | 168 | VAL | 14 |
| 1 | A | 7 | VAL | 13 |
| 1 | A | 45 | MET | 12 |
| 1 | A | 82 | PHE | 12 |
| 1 | A | 113 | VAL | 12 |
| 1 | A | 144 | LYS | 12 |
| 1 | A | 32 | TYR | 12 |
| 1 | A | 25 | THR | 11 |
| 1 | A | 137 | ILE | 11 |
| 1 | A | 152 | VAL | 11 |
| 1 | A | 40 | TYR | 11 |
| 1 | A | 128 | LYS | 11 |
| 1 | A | 55 | LEU | 11 |
| 1 | A | 16 | LYS | 11 |
| 1 | A | 122 | ASP | 10 |
| 1 | A | 120 | ARG | 10 |
| 1 | A | 98 | VAL | 10 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 171 | GLU | 10 |
| 1 | A | 147 | ARG | 10 |
| 1 | A | 153 | LYS | 10 |
| 1 | A | 162 | GLN | 10 |
| 1 | A | 20 | LEU | 10 |
| 1 | A | 119 | LEU | 9 |
| 1 | A | 83 | SER | 9 |
| 1 | A | 79 | LEU | 9 |
| 1 | A | 158 | SER | 9 |
| 1 | A | 3 | THR | 8 |
| 1 | A | 125 | THR | 8 |
| 1 | A | 1 | MET | 8 |
| 1 | A | 17 | THR | 8 |
| 1 | A | 121 | ASP | 8 |
| 1 | A | 26 | ASN | 8 |
| 1 | A | 24 | THR | 7 |
| 1 | A | 88 | SER | 7 |
| 1 | A | 2 | GLN | 7 |
| 1 | A | 27 | LYS | 7 |
| 1 | A | 166 | LYS | 7 |
| 1 | A | 150 | LYS | 7 |
| 1 | A | 91 | GLU | 7 |
| 1 | A | 170 | ASP | 7 |
| 1 | A | 135 | LYS | 6 |
| 1 | A | 56 | PHE | 6 |
| 1 | A | 133 | LYS | 6 |
| 1 | A | 104 | HIS | 6 |
| 1 | A | 44 | VAL | 6 |
| 1 | A | 96 | LYS | 6 |
| 1 | A | 100 | GLU | 6 |
| 1 | A | 5 | LYS | 6 |
| 1 | A | 154 | TYR | 6 |
| 1 | A | 49 | GLU | 5 |
| 1 | A | 107 | LYS | 5 |
| 1 | A | 127 | GLU | 5 |
| 1 | A | 155 | VAL | 5 |
| 1 | A | 116 | GLN | 5 |
| 1 | A | 178 | GLU | 5 |
| 1 | A | 85 | VAL | 4 |
| 1 | A | 105 | CYS | 4 |
| 1 | A | 124 | SER | 3 |
| 1 | A | 86 | SER | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 115 | THR | 3 |
| 1 | A | 11 | ASP | 3 |
| 1 | A | 14 | VAL | 3 |
| 1 | A | 103 | HIS | 3 |
| 1 | A | 140 | GLU | 2 |
| 1 | A | 157 | CYS | 2 |
| 1 | A | 156 | GLU | 2 |
| 1 | A | 143 | GLU | 2 |
| 1 | A | 18 | CYS | 1 |
| 1 | A | 95 | GLU | 1 |
| 1 | A | 118 | ASP | 1 |
| 1 | A | 81 | CYS | 1 |
| 1 | A | 102 | THR | 1 |
| 1 | A | 126 | 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 carbohydrates 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