



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 04:48 AM BST

PDB ID : 2QMV
Title : High Resolution Structure of Peroxisome Proliferation-Activated Receptor
gamma and Characterisation of its Interaction with the Co-activator Tran-
scriptional Intermediary Factor 2
Authors : Hartl, R.; Riepl, H.; Kauschke, S.; Kalbitzer, H.R.; Maurer, T.
Deposited on : 2007-07-17

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

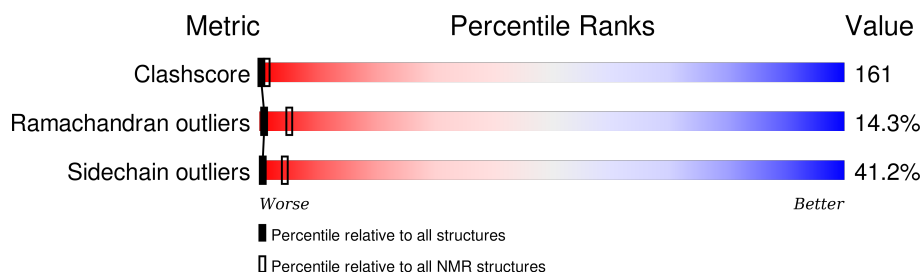
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 35%.

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	270	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 9 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:210-A:239, A:246-A:249, A:276-A:341, A:346-A:473 (228)	0.60	7

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 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4441 atoms, of which 2276 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peroxisome proliferator-activated receptor gamma.

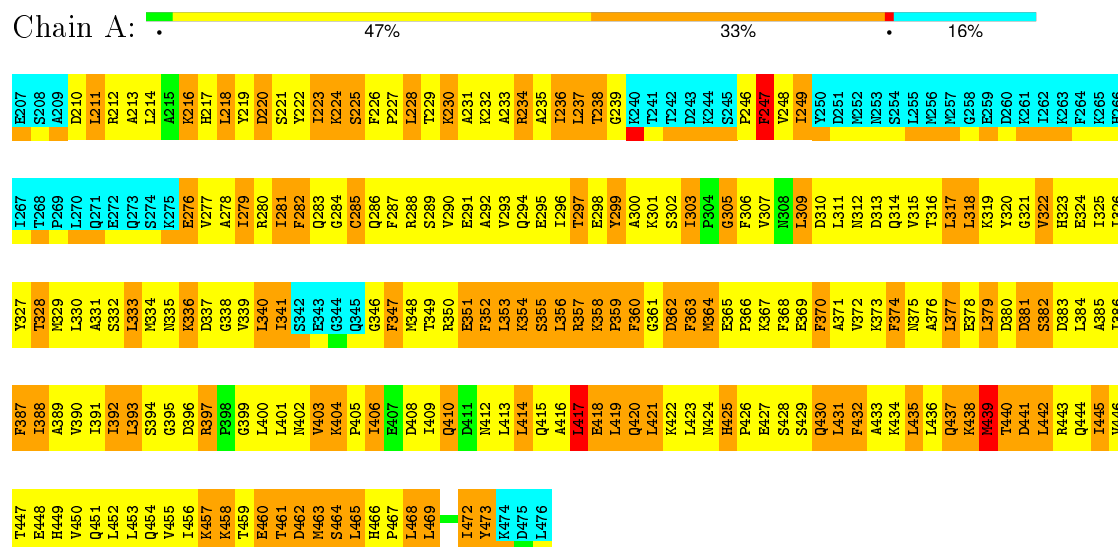
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	270	Total	C	H	N	O	S	0
			4441	1397	2276	354	404	10	

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: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma

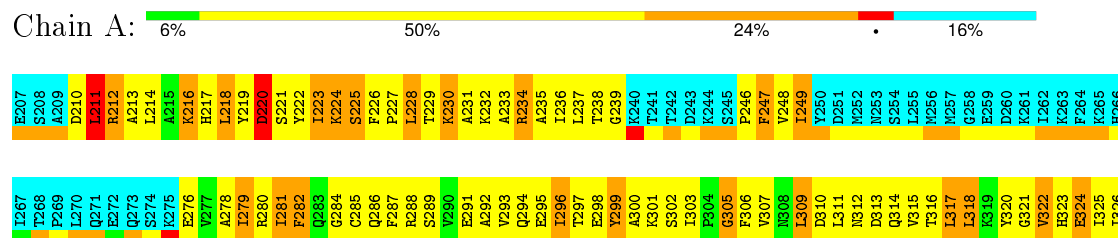


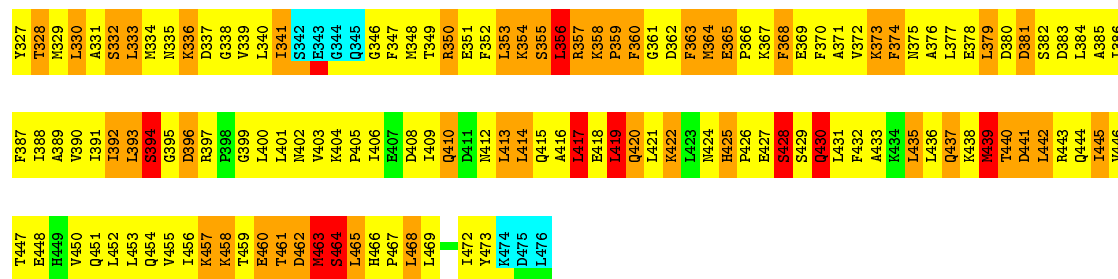
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

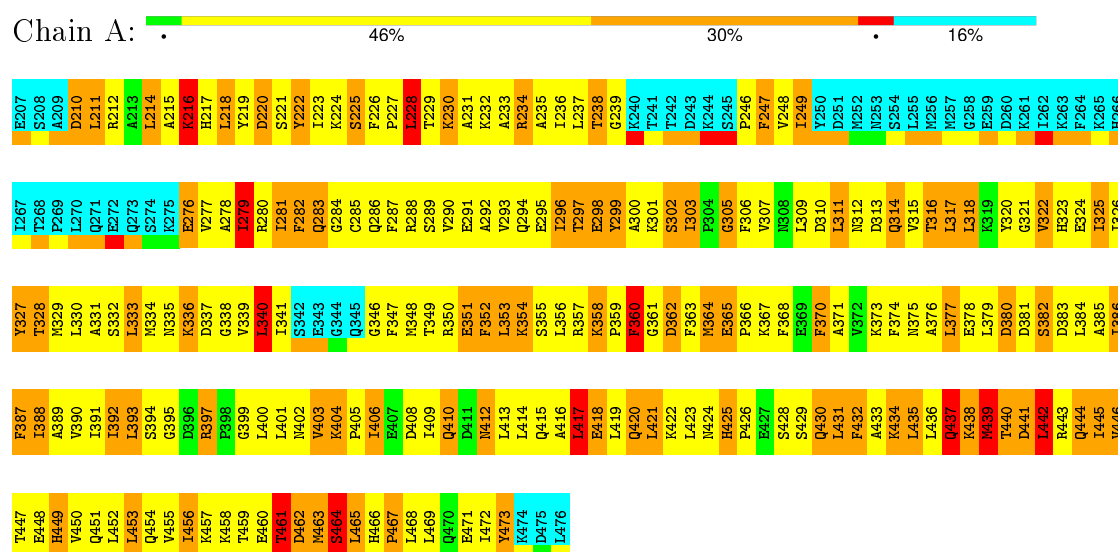
- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma





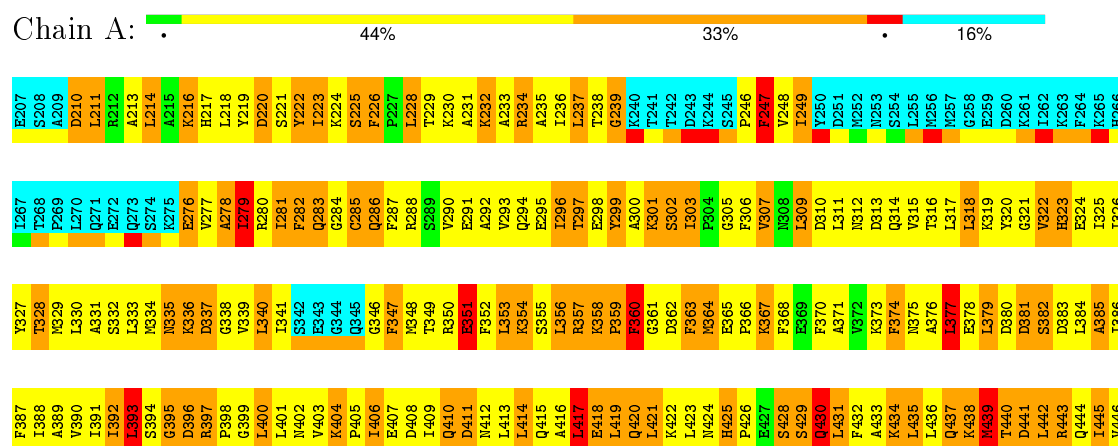
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma



4.2.3 Score per residue for model 3

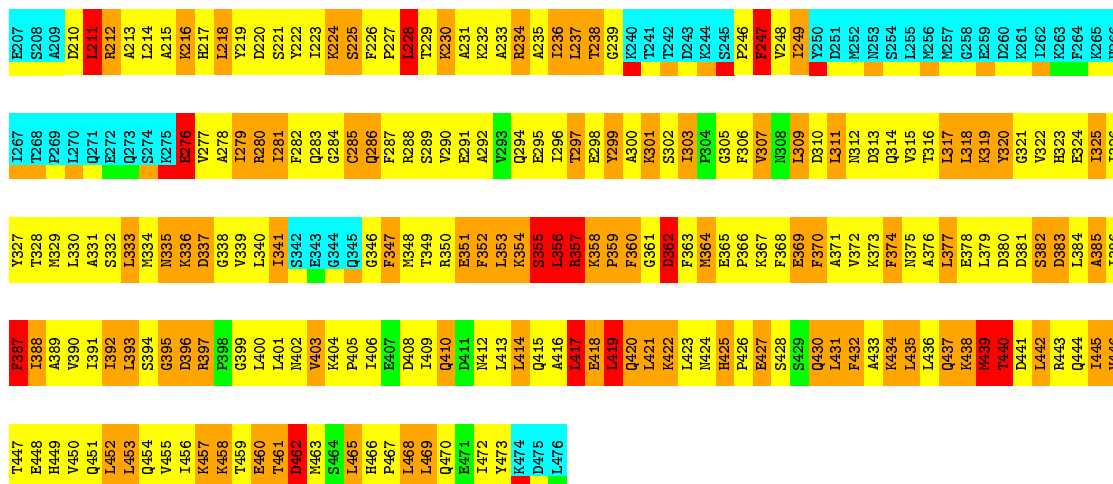
- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma





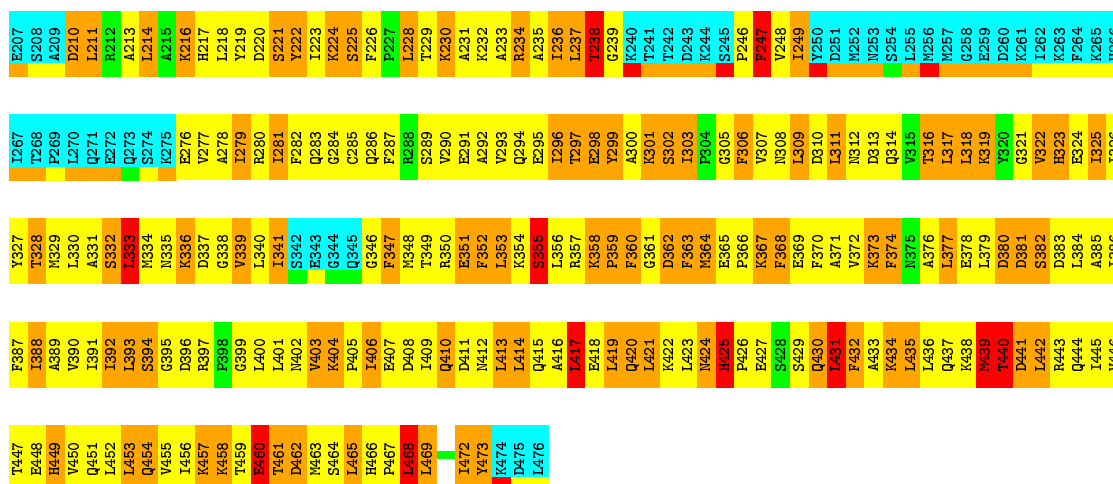
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma



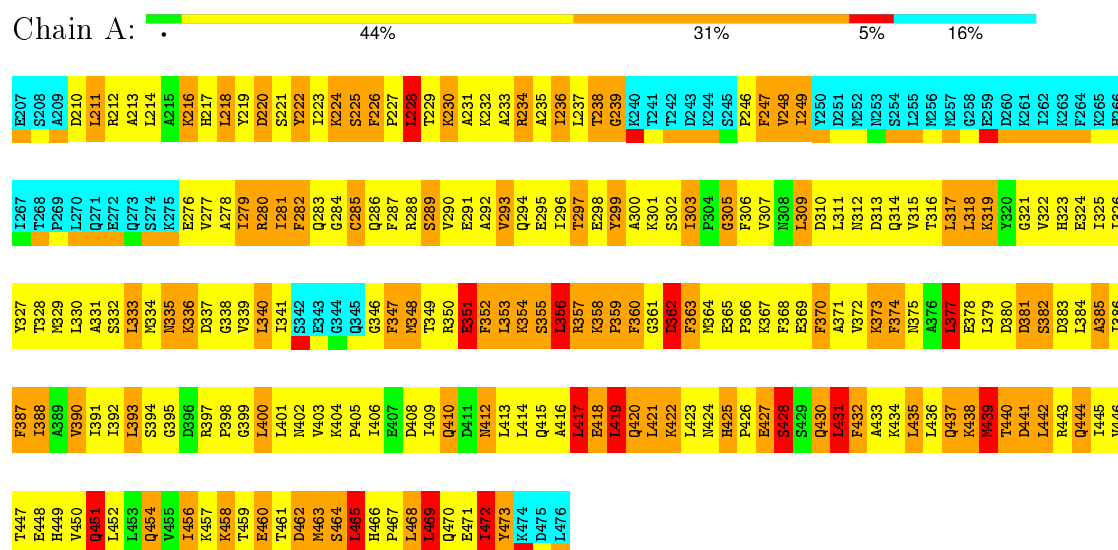
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma



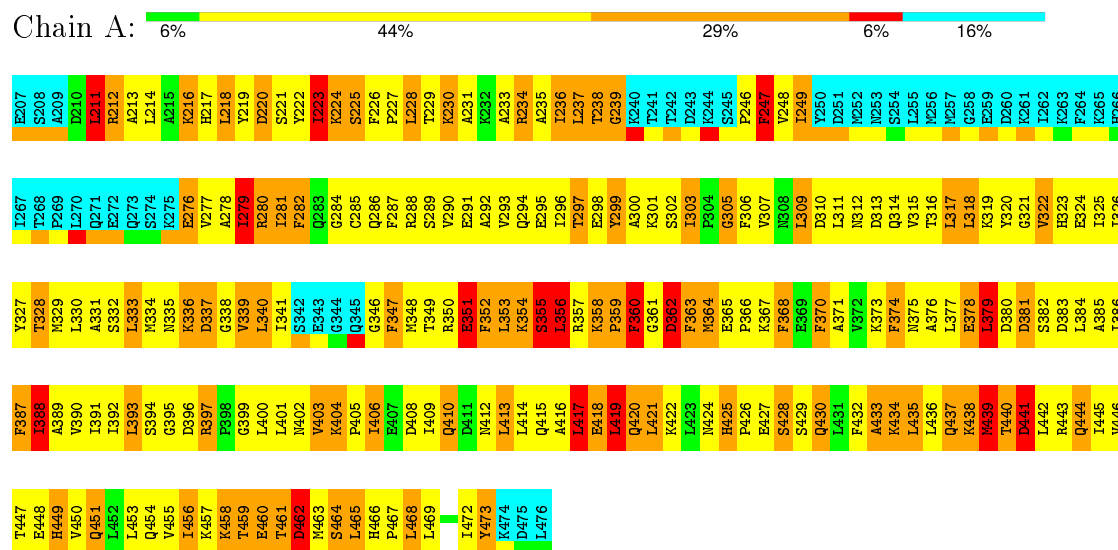
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

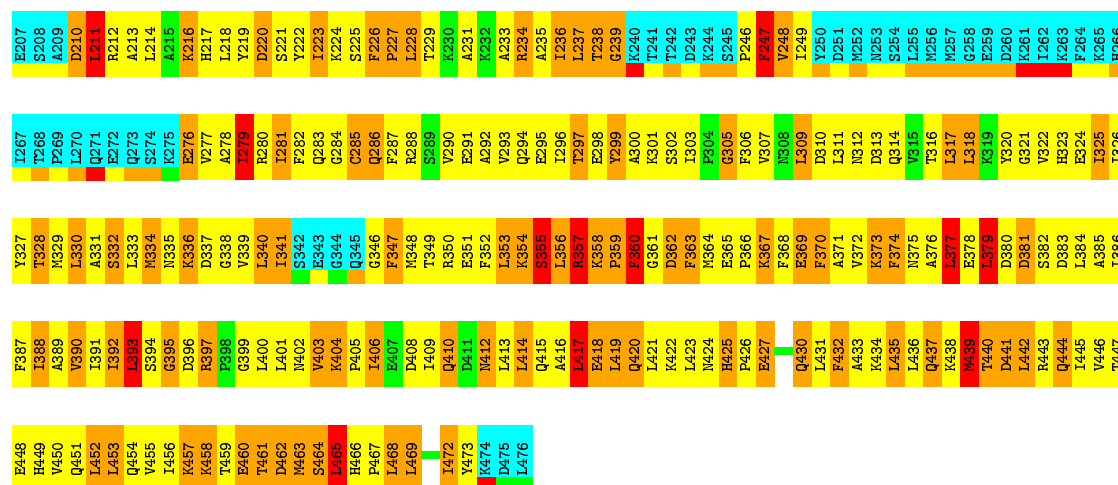
- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma

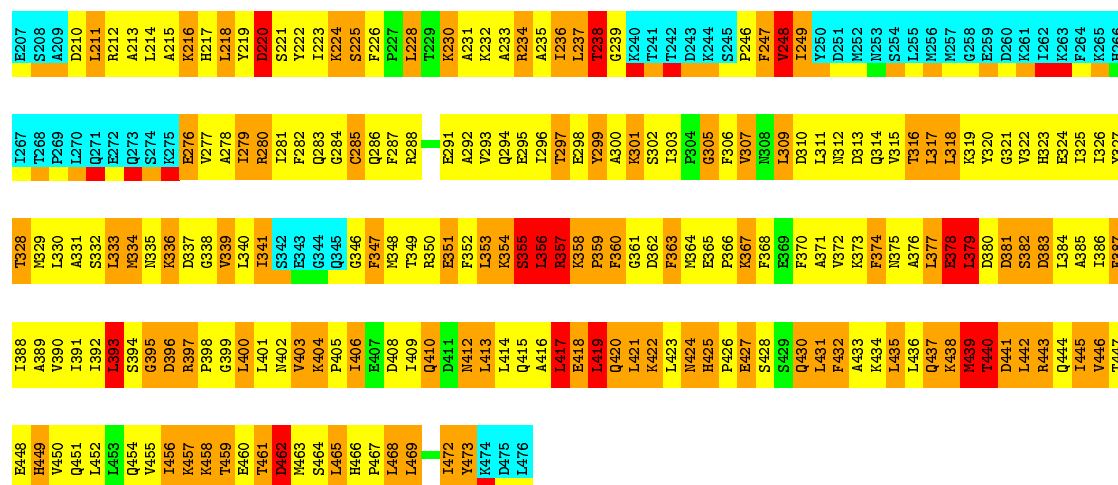




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Peroxisome proliferator-activated receptor gamma

Chain A: 5% 43% 31% 5% 16%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 1024 calculated structures, 9 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

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

Chemical shift file(s)	BMRB entry 6549
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1142
Number of shifts mapped to atoms	1142
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	35%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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	1831	1935	1901	603±40
All	All	16479	17415	17109	5423

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 161.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:CD1	1.28	1.80	4	8
1:A:221:SER:O	1:A:299:TYR:CD2	1.26	1.88	5	1
1:A:402:ASN:O	1:A:405:PRO:HD2	1.26	1.24	4	8
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:HD13	1.22	1.34	2	3
1:A:359:PRO:O	1:A:361:GLY:N	1.16	1.78	2	9
1:A:331:ALA:HB2	1:A:370:PHE:CE2	1.14	1.77	8	5
1:A:211:LEU:HD12	1:A:419:LEU:HD22	1.12	1.13	3	2
1:A:300:ALA:O	1:A:302:SER:N	1.12	1.83	5	9
1:A:235:ALA:O	1:A:239:GLY:N	1.11	1.81	9	9
1:A:360:PHE:CE1	1:A:456:ILE:HD13	1.10	1.79	6	1
1:A:389:ALA:HB1	1:A:413:LEU:HD13	1.10	1.15	3	6
1:A:249:ILE:O	1:A:348:MET:HA	1.09	1.47	9	1
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:HD11	1.09	1.24	8	3
1:A:323:HIS:CD2	1:A:446:VAL:HG21	1.09	1.81	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:CD1	1.08	1.78	1	4
1:A:317:LEU:HD23	1:A:318:LEU:N	1.08	1.62	9	1
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:CG1	1.07	2.02	9	7
1:A:322:VAL:HG22	1:A:326:ILE:HD11	1.06	1.16	3	6
1:A:379:LEU:HD21	1:A:435:LEU:HD11	1.06	1.17	3	1
1:A:393:LEU:HD23	1:A:413:LEU:HD11	1.06	1.19	9	6
1:A:223:ILE:O	1:A:223:ILE:HD13	1.05	1.51	3	1
1:A:363:PHE:CD2	1:A:452:LEU:HD13	1.03	1.87	8	1
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:HG12	1.02	1.18	5	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:399:GLY:O	1.02	1.53	3	1
1:A:233:ALA:HB2	1:A:333:LEU:HD12	1.02	1.27	1	3
1:A:456:ILE:O	1:A:460:GLU:N	1.01	1.93	3	9
1:A:421:LEU:HD11	1:A:431:LEU:HD11	1.01	1.24	3	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ALA:HB2	1.01	1.55	5	7
1:A:313:ASP:OD2	1:A:406:ILE:HD11	1.01	1.53	4	6
1:A:445:ILE:HG22	1:A:449:HIS:CE1	1.01	1.90	6	1
1:A:370:PHE:CG	1:A:445:ILE:HD11	1.00	1.91	5	4
1:A:339:VAL:O	1:A:341:ILE:HG23	1.00	1.55	9	8
1:A:356:LEU:HD12	1:A:361:GLY:HA2	0.99	1.29	6	3
1:A:325:ILE:HD12	1:A:391:ILE:HG22	0.99	1.34	4	8
1:A:248:VAL:HG13	1:A:347:PHE:CZ	0.99	1.92	8	3
1:A:387:PHE:O	1:A:390:VAL:HG22	0.99	1.55	6	1
1:A:465:LEU:HD23	1:A:469:LEU:HD13	0.99	1.31	4	4
1:A:214:LEU:HD23	1:A:416:ALA:HB2	0.98	1.30	6	4
1:A:248:VAL:HG23	1:A:347:PHE:CZ	0.98	1.93	5	4
1:A:233:ALA:HB1	1:A:340:LEU:HD23	0.98	1.32	3	3
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:HG22	0.98	1.34	4	1
1:A:218:LEU:HD21	1:A:413:LEU:HD22	0.98	1.29	5	1
1:A:402:ASN:O	1:A:405:PRO:CD	0.98	2.10	6	5
1:A:327:TYR:CD2	1:A:446:VAL:HG22	0.98	1.94	3	8
1:A:313:ASP:OD1	1:A:400:LEU:HD23	0.98	1.58	6	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:442:LEU:HD23	0.97	1.95	1	2
1:A:393:LEU:HD23	1:A:413:LEU:CD1	0.97	1.89	9	4
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:HG13	0.97	1.56	9	6
1:A:219:TYR:CE1	1:A:382:SER:HA	0.97	1.94	2	2
1:A:235:ALA:O	1:A:239:GLY:CA	0.96	2.12	9	9
1:A:466:HIS:HB2	1:A:467:PRO:HD2	0.96	1.36	7	8
1:A:296:ILE:O	1:A:300:ALA:N	0.96	1.98	5	9
1:A:218:LEU:HD12	1:A:386:ILE:HG23	0.96	1.35	3	1
1:A:379:LEU:HD11	1:A:435:LEU:CD1	0.96	1.89	3	2
1:A:281:ILE:HD11	1:A:352:PHE:CZ	0.96	1.95	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:HD12	0.96	1.55	6	3
1:A:417:LEU:C	1:A:417:LEU:HD22	0.96	1.78	1	4
1:A:417:LEU:HD22	1:A:417:LEU:C	0.95	1.79	2	5
1:A:237:LEU:HD13	1:A:340:LEU:HD21	0.95	1.38	9	5
1:A:387:PHE:CD1	1:A:388:ILE:N	0.94	2.35	7	3
1:A:248:VAL:HG22	1:A:347:PHE:H	0.94	1.22	9	1
1:A:234:ARG:CZ	1:A:332:SER:O	0.94	2.14	9	9
1:A:370:PHE:CD2	1:A:445:ILE:HD11	0.94	1.98	7	4
1:A:355:SER:O	1:A:356:LEU:HD23	0.94	1.62	3	5
1:A:466:HIS:HB2	1:A:467:PRO:CD	0.94	1.93	7	8
1:A:313:ASP:OD1	1:A:406:ILE:HD11	0.93	1.63	3	5
1:A:453:LEU:HD13	1:A:453:LEU:C	0.93	1.84	4	1
1:A:221:SER:HA	1:A:299:TYR:CZ	0.93	1.98	5	1
1:A:324:GLU:HA	1:A:327:TYR:CE1	0.93	1.98	2	1
1:A:219:TYR:CE1	1:A:223:ILE:HD13	0.93	1.98	5	3
1:A:219:TYR:CE2	1:A:382:SER:HA	0.93	1.98	4	1
1:A:322:VAL:HG22	1:A:326:ILE:CD1	0.93	1.94	3	3
1:A:211:LEU:CD1	1:A:419:LEU:HD11	0.92	1.94	7	1
1:A:219:TYR:CE1	1:A:385:ALA:HB3	0.92	1.99	2	1
1:A:365:GLU:N	1:A:366:PRO:CD	0.92	2.30	8	9
1:A:378:GLU:O	1:A:379:LEU:HD23	0.92	1.64	5	2
1:A:300:ALA:C	1:A:302:SER:H	0.92	1.68	5	9
1:A:281:ILE:HD11	1:A:352:PHE:CE2	0.92	1.99	3	1
1:A:300:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CE2	0.92	1.99	6	4
1:A:417:LEU:HD11	1:A:432:PHE:HB2	0.91	1.41	7	3
1:A:466:HIS:CG	1:A:467:PRO:HD2	0.91	2.00	6	1
1:A:303:ILE:CG2	1:A:413:LEU:HD21	0.90	1.96	8	5
1:A:363:PHE:CG	1:A:452:LEU:HD11	0.90	2.02	2	1
1:A:211:LEU:HA	1:A:419:LEU:HD21	0.90	1.42	9	2
1:A:369:GLU:O	1:A:372:VAL:HG12	0.90	1.66	4	3
1:A:393:LEU:CD2	1:A:413:LEU:HD11	0.90	1.96	9	4
1:A:227:PRO:O	1:A:229:THR:HG23	0.89	1.67	8	4
1:A:246:PRO:O	1:A:248:VAL:N	0.89	2.05	8	8
1:A:309:LEU:HD11	1:A:393:LEU:HD11	0.89	1.43	2	1
1:A:402:ASN:C	1:A:405:PRO:HD2	0.89	1.87	6	9
1:A:353:LEU:O	1:A:361:GLY:O	0.89	1.90	3	1
1:A:221:SER:C	1:A:299:TYR:CE2	0.89	2.45	5	1
1:A:317:LEU:O	1:A:321:GLY:N	0.89	2.06	2	9
1:A:356:LEU:HB2	1:A:361:GLY:CA	0.88	1.98	2	2
1:A:328:THR:HG21	1:A:387:PHE:CE1	0.88	2.04	7	2
1:A:444:GLN:O	1:A:447:THR:HG22	0.88	1.68	5	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:350:ARG:CZ	1:A:365:GLU:OE2	0.88	2.22	3	9
1:A:326:ILE:HG22	1:A:330:LEU:CD2	0.88	1.98	1	1
1:A:296:ILE:HG21	1:A:318:LEU:HD21	0.88	1.44	6	6
1:A:331:ALA:HA	1:A:371:ALA:HB2	0.88	1.44	2	9
1:A:326:ILE:HG22	1:A:330:LEU:HD22	0.87	1.44	1	1
1:A:327:TYR:CE2	1:A:442:LEU:HB3	0.87	2.04	2	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:419:LEU:HD21	0.87	1.46	6	4
1:A:222:TYR:CD1	1:A:299:TYR:CD2	0.87	2.63	3	3
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:CG1	0.87	2.00	5	1
1:A:379:LEU:CD2	1:A:435:LEU:HD11	0.87	1.99	3	1
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:CG2	0.87	2.00	4	2
1:A:235:ALA:O	1:A:239:GLY:C	0.86	2.12	4	5
1:A:392:ILE:HG22	1:A:393:LEU:HD23	0.86	1.46	4	2
1:A:312:ASN:O	1:A:316:THR:N	0.86	2.09	3	4
1:A:466:HIS:CE1	1:A:467:PRO:O	0.86	2.28	6	1
1:A:323:HIS:CD2	1:A:446:VAL:HG11	0.86	2.05	5	1
1:A:211:LEU:CD2	1:A:419:LEU:HD11	0.86	2.00	1	4
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:HB2	0.85	1.69	1	9
1:A:318:LEU:HD11	1:A:392:ILE:HD11	0.85	1.47	2	1
1:A:233:ALA:CB	1:A:333:LEU:HD12	0.85	2.01	1	3
1:A:328:THR:N	1:A:442:LEU:HD11	0.85	1.87	7	6
1:A:325:ILE:CD1	1:A:391:ILE:HG22	0.85	2.00	1	9
1:A:453:LEU:HD13	1:A:454:GLN:N	0.85	1.87	4	1
1:A:322:VAL:CG2	1:A:326:ILE:HD11	0.85	1.99	3	1
1:A:300:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CD2	0.85	2.07	3	3
1:A:323:HIS:CG	1:A:446:VAL:HG11	0.85	2.07	5	2
1:A:237:LEU:CD1	1:A:340:LEU:HD21	0.84	2.03	1	7
1:A:222:TYR:CE1	1:A:226:PHE:CE1	0.84	2.66	3	1
1:A:347:PHE:CE1	1:A:349:THR:HG22	0.84	2.07	1	8
1:A:356:LEU:CD1	1:A:361:GLY:HA2	0.84	2.03	6	3
1:A:450:VAL:HA	1:A:453:LEU:HD12	0.84	1.49	4	1
1:A:354:LYS:CA	1:A:361:GLY:O	0.84	2.26	3	2
1:A:456:ILE:HD12	1:A:457:LYS:N	0.84	1.87	1	2
1:A:329:MET:O	1:A:333:LEU:HD22	0.84	1.71	1	1
1:A:314:GLN:OE1	1:A:317:LEU:HD21	0.83	1.72	2	1
1:A:234:ARG:NH1	1:A:237:LEU:HD22	0.83	1.88	9	6
1:A:221:SER:CB	1:A:302:SER:HB2	0.83	2.04	5	6
1:A:248:VAL:HG23	1:A:249:ILE:N	0.83	1.89	9	1
1:A:417:LEU:HD13	1:A:418:GLU:H	0.83	1.31	1	9
1:A:303:ILE:HG21	1:A:413:LEU:HD21	0.83	1.50	6	5
1:A:292:ALA:O	1:A:296:ILE:HD12	0.83	1.74	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:354:LYS:HA	1:A:361:GLY:O	0.83	1.73	3	4
1:A:394:SER:OG	1:A:406:ILE:HG21	0.83	1.74	9	1
1:A:278:ALA:O	1:A:282:PHE:N	0.82	2.12	5	9
1:A:296:ILE:HG21	1:A:392:ILE:HD12	0.82	1.51	2	1
1:A:218:LEU:O	1:A:299:TYR:CE1	0.82	2.31	3	8
1:A:218:LEU:O	1:A:222:TYR:HB2	0.82	1.74	5	9
1:A:402:ASN:C	1:A:406:ILE:HD12	0.82	1.95	1	1
1:A:282:PHE:CD1	1:A:360:PHE:CD2	0.82	2.67	4	1
1:A:222:TYR:CE1	1:A:226:PHE:CD1	0.82	2.68	3	1
1:A:384:LEU:O	1:A:387:PHE:HD1	0.82	1.56	4	1
1:A:314:GLN:O	1:A:318:LEU:HD12	0.82	1.75	9	1
1:A:417:LEU:HD13	1:A:418:GLU:N	0.82	1.89	4	9
1:A:325:ILE:HD12	1:A:391:ILE:CG2	0.82	2.05	1	7
1:A:324:GLU:O	1:A:391:ILE:HD13	0.82	1.74	2	3
1:A:282:PHE:CD1	1:A:360:PHE:CE1	0.82	2.67	3	4
1:A:450:VAL:O	1:A:454:GLN:N	0.82	2.13	1	9
1:A:224:LYS:HB2	1:A:299:TYR:CE2	0.82	2.09	5	1
1:A:331:ALA:HB2	1:A:370:PHE:CZ	0.81	2.10	2	3
1:A:378:GLU:C	1:A:379:LEU:HD22	0.81	1.95	2	2
1:A:390:VAL:HG22	1:A:413:LEU:HB2	0.81	1.50	2	2
1:A:389:ALA:CB	1:A:413:LEU:HD13	0.81	2.04	4	4
1:A:356:LEU:HB2	1:A:361:GLY:HA2	0.81	1.50	3	3
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:HB	0.81	1.52	1	7
1:A:222:TYR:CD2	1:A:299:TYR:CE2	0.81	2.68	2	3
1:A:219:TYR:OH	1:A:382:SER:O	0.81	1.98	2	1
1:A:309:LEU:HD13	1:A:406:ILE:HG23	0.81	1.49	9	1
1:A:233:ALA:HB1	1:A:340:LEU:CD2	0.81	2.04	3	1
1:A:277:VAL:O	1:A:356:LEU:HD22	0.81	1.76	6	2
1:A:331:ALA:HB1	1:A:371:ALA:CB	0.81	2.06	1	6
1:A:324:GLU:HA	1:A:327:TYR:CZ	0.81	2.11	2	1
1:A:390:VAL:HG22	1:A:410:GLN:NE2	0.81	1.89	7	1
1:A:397:ARG:CB	1:A:398:PRO:CD	0.81	2.58	3	2
1:A:327:TYR:HD1	1:A:328:THR:N	0.81	1.74	2	1
1:A:237:LEU:CG	1:A:340:LEU:HD21	0.81	2.06	1	2
1:A:248:VAL:HG22	1:A:347:PHE:N	0.80	1.90	9	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:399:GLY:C	0.80	1.96	8	5
1:A:299:TYR:O	1:A:302:SER:OG	0.80	2.00	2	6
1:A:317:LEU:HD11	1:A:400:LEU:HD21	0.80	1.54	6	1
1:A:356:LEU:HD12	1:A:361:GLY:CA	0.80	2.06	6	5
1:A:324:GLU:CA	1:A:327:TYR:CE1	0.80	2.65	2	1
1:A:314:GLN:O	1:A:317:LEU:CD2	0.80	2.29	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:LEU:HD21	1:A:415:GLN:HB3	0.80	1.53	3	2
1:A:341:ILE:HD13	1:A:341:ILE:C	0.80	1.96	4	1
1:A:282:PHE:CD2	1:A:360:PHE:CZ	0.80	2.70	1	2
1:A:414:LEU:HD12	1:A:415:GLN:N	0.80	1.92	5	1
1:A:222:TYR:CG	1:A:299:TYR:CE2	0.80	2.70	2	2
1:A:248:VAL:HG13	1:A:346:GLY:HA3	0.80	1.54	9	1
1:A:331:ALA:CA	1:A:371:ALA:HB2	0.80	2.07	1	9
1:A:385:ALA:O	1:A:388:ILE:HG22	0.80	1.77	1	2
1:A:282:PHE:CE1	1:A:360:PHE:CE2	0.80	2.69	2	2
1:A:363:PHE:CE2	1:A:452:LEU:HD21	0.80	2.12	2	1
1:A:353:LEU:HD21	1:A:364:MET:SD	0.80	2.17	1	1
1:A:225:SER:HB2	1:A:299:TYR:HB2	0.79	1.52	4	8
1:A:335:ASN:O	1:A:368:PHE:CD1	0.79	2.34	5	3
1:A:432:PHE:CE1	1:A:436:LEU:HD23	0.79	2.11	5	2
1:A:313:ASP:N	1:A:401:LEU:HD12	0.79	1.92	1	3
1:A:233:ALA:HB2	1:A:333:LEU:HD13	0.79	1.54	3	1
1:A:324:GLU:O	1:A:328:THR:HB	0.79	1.78	6	8
1:A:380:ASP:O	1:A:384:LEU:HG	0.79	1.76	4	7
1:A:341:ILE:HG23	1:A:347:PHE:HA	0.79	1.54	1	8
1:A:368:PHE:CD1	1:A:368:PHE:C	0.79	2.56	5	2
1:A:306:PHE:O	1:A:309:LEU:HG	0.79	1.78	9	9
1:A:379:LEU:CD1	1:A:421:LEU:HD22	0.79	2.08	3	2
1:A:325:ILE:HG23	1:A:388:ILE:CG1	0.79	2.08	1	6
1:A:403:VAL:HA	1:A:406:ILE:HD13	0.79	1.53	4	2
1:A:289:SER:HA	1:A:326:ILE:HG21	0.79	1.54	5	1
1:A:335:ASN:O	1:A:368:PHE:CE1	0.78	2.36	5	2
1:A:299:TYR:O	1:A:302:SER:CB	0.78	2.30	8	5
1:A:360:PHE:CE1	1:A:456:ILE:HD12	0.78	2.12	4	1
1:A:393:LEU:CB	1:A:410:GLN:HG3	0.78	2.08	3	7
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:CD1	0.78	2.32	5	7
1:A:218:LEU:HD11	1:A:303:ILE:HG23	0.78	1.52	5	1
1:A:211:LEU:HD11	1:A:416:ALA:CB	0.78	2.09	2	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:322:VAL:HG11	0.78	1.52	5	1
1:A:296:ILE:HD13	1:A:322:VAL:HG23	0.78	1.56	3	2
1:A:328:THR:HA	1:A:442:LEU:HD21	0.78	1.54	4	7
1:A:384:LEU:O	1:A:386:ILE:N	0.78	2.17	4	3
1:A:406:ILE:CD1	1:A:406:ILE:N	0.78	2.46	2	1
1:A:384:LEU:O	1:A:387:PHE:CD1	0.78	2.36	4	1
1:A:387:PHE:C	1:A:387:PHE:CD1	0.78	2.57	7	2
1:A:247:PHE:O	1:A:247:PHE:CG	0.77	2.37	7	3
1:A:325:ILE:HG23	1:A:388:ILE:HG12	0.77	1.55	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:ALA:C	1:A:302:SER:N	0.77	2.35	2	9
1:A:296:ILE:CG2	1:A:318:LEU:HD21	0.77	2.09	6	5
1:A:248:VAL:HG22	1:A:347:PHE:CE2	0.77	2.14	8	3
1:A:370:PHE:CE1	1:A:374:PHE:CD1	0.77	2.72	9	3
1:A:220:ASP:O	1:A:223:ILE:HG22	0.77	1.78	3	1
1:A:313:ASP:CG	1:A:406:ILE:HD11	0.77	1.99	7	6
1:A:303:ILE:HG23	1:A:413:LEU:HD21	0.77	1.53	8	1
1:A:393:LEU:CD1	1:A:409:ILE:HG22	0.77	2.09	4	2
1:A:441:ASP:OD2	1:A:442:LEU:HD22	0.77	1.79	7	1
1:A:236:ILE:HD12	1:A:246:PRO:HB3	0.77	1.57	8	2
1:A:393:LEU:HD11	1:A:409:ILE:HG22	0.77	1.53	8	2
1:A:453:LEU:HD12	1:A:453:LEU:O	0.77	1.79	8	1
1:A:336:LYS:O	1:A:368:PHE:CZ	0.77	2.37	1	3
1:A:358:LYS:CG	1:A:359:PRO:HD3	0.77	2.10	4	9
1:A:222:TYR:CZ	1:A:226:PHE:CE1	0.77	2.72	3	1
1:A:421:LEU:HD12	1:A:421:LEU:C	0.77	2.00	5	1
1:A:442:LEU:O	1:A:446:VAL:HG23	0.76	1.80	3	6
1:A:325:ILE:O	1:A:328:THR:HG22	0.76	1.80	6	8
1:A:404:LYS:O	1:A:408:ASP:CG	0.76	2.24	5	9
1:A:417:LEU:HD11	1:A:432:PHE:CD1	0.76	2.15	2	3
1:A:403:VAL:HA	1:A:406:ILE:HD12	0.76	1.55	5	6
1:A:364:MET:C	1:A:366:PRO:HD2	0.76	2.00	8	5
1:A:312:ASN:HB2	1:A:401:LEU:HD11	0.76	1.58	4	8
1:A:327:TYR:C	1:A:327:TYR:CD1	0.76	2.56	2	1
1:A:425:HIS:CG	1:A:425:HIS:O	0.76	2.37	9	1
1:A:328:THR:CA	1:A:442:LEU:HD11	0.76	2.10	7	3
1:A:387:PHE:CE2	1:A:436:LEU:HD23	0.76	2.15	1	1
1:A:324:GLU:HA	1:A:442:LEU:HD12	0.76	1.57	4	7
1:A:248:VAL:HG13	1:A:347:PHE:CE2	0.76	2.16	8	3
1:A:325:ILE:HG23	1:A:388:ILE:CD1	0.76	2.10	1	2
1:A:378:GLU:OE1	1:A:384:LEU:HD13	0.76	1.81	1	1
1:A:465:LEU:CD2	1:A:469:LEU:HD13	0.76	2.10	4	5
1:A:327:TYR:CD1	1:A:328:THR:N	0.76	2.54	2	1
1:A:231:ALA:HB2	1:A:381:ASP:OD2	0.76	1.80	5	1
1:A:221:SER:OG	1:A:302:SER:CB	0.76	2.34	1	5
1:A:393:LEU:C	1:A:406:ILE:HG22	0.76	2.00	9	1
1:A:365:GLU:OE1	1:A:368:PHE:CE2	0.76	2.39	5	1
1:A:233:ALA:CB	1:A:340:LEU:HD23	0.76	2.10	3	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:O	0.76	1.81	2	1
1:A:327:TYR:CE1	1:A:442:LEU:CD1	0.76	2.69	2	1
1:A:394:SER:CB	1:A:400:LEU:HD11	0.75	2.09	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:LEU:CA	1:A:419:LEU:HD21	0.75	2.10	9	2
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:HD21	0.75	2.16	1	2
1:A:276:GLU:OE1	1:A:278:ALA:HB3	0.75	1.81	3	2
1:A:318:LEU:CD1	1:A:392:ILE:HD11	0.75	2.11	2	1
1:A:218:LEU:HD12	1:A:386:ILE:HA	0.75	1.56	4	3
1:A:417:LEU:C	1:A:417:LEU:CD2	0.75	2.55	1	5
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:HD12	0.75	1.58	6	2
1:A:221:SER:OG	1:A:299:TYR:HD1	0.75	1.63	9	2
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:CD2	0.75	2.69	1	2
1:A:296:ILE:HG12	1:A:325:ILE:HG21	0.75	1.58	1	4
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:HD21	0.75	1.80	4	4
1:A:339:VAL:CG1	1:A:368:PHE:CE1	0.75	2.70	2	1
1:A:353:LEU:HD13	1:A:364:MET:HB3	0.75	1.57	9	2
1:A:281:ILE:O	1:A:285:CYS:N	0.75	2.20	5	9
1:A:453:LEU:HD12	1:A:457:LYS:HE2	0.75	1.59	3	1
1:A:377:LEU:HD11	1:A:438:LYS:CE	0.75	2.12	5	1
1:A:279:ILE:O	1:A:279:ILE:HD13	0.75	1.81	6	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:399:GLY:O	0.75	1.80	2	7
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:CD1	0.75	2.35	2	1
1:A:234:ARG:NH1	1:A:237:LEU:HD13	0.75	1.96	2	2
1:A:327:TYR:CE1	1:A:442:LEU:HD13	0.75	2.17	2	1
1:A:333:LEU:N	1:A:333:LEU:HD23	0.75	1.95	4	1
1:A:328:THR:HG23	1:A:387:PHE:CZ	0.75	2.17	4	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:392:ILE:CG2	0.75	2.70	6	1
1:A:222:TYR:HB2	1:A:299:TYR:CZ	0.74	2.16	4	8
1:A:393:LEU:HD13	1:A:409:ILE:HB	0.74	1.59	8	2
1:A:310:ASP:CG	1:A:401:LEU:HD12	0.74	2.02	4	5
1:A:292:ALA:HB1	1:A:326:ILE:HG12	0.74	1.58	9	6
1:A:359:PRO:CB	1:A:456:ILE:CD1	0.74	2.64	2	2
1:A:318:LEU:CD2	1:A:322:VAL:HG12	0.74	2.09	5	1
1:A:432:PHE:C	1:A:432:PHE:CD1	0.74	2.59	6	3
1:A:421:LEU:O	1:A:421:LEU:HD22	0.74	1.82	6	1
1:A:282:PHE:CE1	1:A:360:PHE:CE1	0.74	2.74	8	2
1:A:282:PHE:CE1	1:A:360:PHE:CZ	0.74	2.75	2	3
1:A:325:ILE:HD13	1:A:392:ILE:CD1	0.74	2.12	9	2
1:A:249:ILE:HA	1:A:349:THR:HG23	0.74	1.59	9	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:419:LEU:HD11	0.74	1.58	7	1
1:A:363:PHE:HB2	1:A:452:LEU:HD13	0.74	1.59	9	1
1:A:370:PHE:CB	1:A:445:ILE:HD11	0.74	2.12	1	4
1:A:327:TYR:CD1	1:A:442:LEU:HD13	0.74	2.17	2	1
1:A:313:ASP:OD1	1:A:400:LEU:HD22	0.74	1.83	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:LEU:CB	1:A:419:LEU:HD21	0.74	2.11	4	2
1:A:305:GLY:O	1:A:309:LEU:HG	0.74	1.83	2	9
1:A:417:LEU:CD2	1:A:417:LEU:C	0.73	2.56	2	4
1:A:249:ILE:HD12	1:A:341:ILE:HD12	0.73	1.60	8	1
1:A:299:TYR:O	1:A:302:SER:HB2	0.73	1.82	6	2
1:A:400:LEU:HD13	1:A:406:ILE:HD13	0.73	1.60	1	1
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:HD22	0.73	1.82	6	1
1:A:328:THR:CG2	1:A:387:PHE:CZ	0.73	2.71	7	2
1:A:324:GLU:CB	1:A:391:ILE:HG21	0.73	2.12	1	4
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:HB3	0.73	2.14	2	8
1:A:296:ILE:HD13	1:A:322:VAL:CG2	0.73	2.13	8	5
1:A:459:THR:O	1:A:459:THR:HG22	0.73	1.83	4	3
1:A:211:LEU:HG	1:A:419:LEU:HD13	0.73	1.58	3	3
1:A:226:PHE:CG	1:A:226:PHE:O	0.73	2.42	3	1
1:A:221:SER:CB	1:A:302:SER:CB	0.73	2.67	5	6
1:A:221:SER:O	1:A:299:TYR:CE2	0.73	2.42	5	1
1:A:278:ALA:O	1:A:280:ARG:N	0.73	2.22	3	8
1:A:339:VAL:HG13	1:A:368:PHE:CE1	0.73	2.19	2	1
1:A:445:ILE:HG22	1:A:449:HIS:NE2	0.73	1.97	6	1
1:A:354:LYS:O	1:A:356:LEU:N	0.73	2.22	8	7
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ASP:HB2	0.73	1.83	8	9
1:A:282:PHE:CZ	1:A:360:PHE:CZ	0.73	2.77	8	2
1:A:221:SER:C	1:A:299:TYR:CD2	0.72	2.62	5	1
1:A:393:LEU:HD12	1:A:406:ILE:HA	0.72	1.59	2	6
1:A:296:ILE:HG12	1:A:388:ILE:HD11	0.72	1.61	3	1
1:A:390:VAL:HG22	1:A:413:LEU:CB	0.72	2.14	2	2
1:A:237:LEU:HD11	1:A:340:LEU:HD21	0.72	1.62	1	1
1:A:248:VAL:O	1:A:249:ILE:CG2	0.72	2.38	9	1
1:A:278:ALA:HB2	1:A:357:ARG:HB2	0.72	1.61	9	1
1:A:277:VAL:HG13	1:A:356:LEU:HB3	0.72	1.61	8	1
1:A:309:LEU:CD1	1:A:393:LEU:HD11	0.72	2.14	2	1
1:A:472:ILE:HD12	1:A:473:TYR:N	0.72	1.99	2	2
1:A:370:PHE:CD2	1:A:445:ILE:CD1	0.72	2.72	1	1
1:A:219:TYR:CE1	1:A:223:ILE:CD1	0.72	2.73	5	3
1:A:331:ALA:HB1	1:A:371:ALA:HA	0.72	1.61	3	8
1:A:387:PHE:CZ	1:A:388:ILE:HD12	0.72	2.19	7	1
1:A:303:ILE:HD13	1:A:393:LEU:CD2	0.72	2.15	1	4
1:A:226:PHE:CD1	1:A:226:PHE:O	0.72	2.43	3	1
1:A:353:LEU:HD11	1:A:368:PHE:CZ	0.72	2.20	2	1
1:A:420:GLN:NE2	1:A:424:ASN:ND2	0.72	2.38	1	9
1:A:328:THR:HG23	1:A:387:PHE:CE2	0.72	2.18	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:421:LEU:C	1:A:421:LEU:HD22	0.72	2.05	9	2
1:A:379:LEU:HD12	1:A:425:HIS:CE1	0.72	2.20	7	1
1:A:451:GLN:O	1:A:455:VAL:HG23	0.72	1.84	9	6
1:A:333:LEU:HD23	1:A:333:LEU:N	0.72	2.00	2	1
1:A:450:VAL:HG12	1:A:454:GLN:HB2	0.72	1.59	1	3
1:A:325:ILE:HG23	1:A:388:ILE:HD11	0.71	1.61	1	2
1:A:211:LEU:C	1:A:211:LEU:HD12	0.71	2.04	4	3
1:A:390:VAL:HG22	1:A:410:GLN:HE21	0.71	1.44	7	1
1:A:331:ALA:CB	1:A:371:ALA:HB2	0.71	2.16	1	4
1:A:390:VAL:O	1:A:410:GLN:NE2	0.71	2.23	4	4
1:A:363:PHE:HB3	1:A:452:LEU:HD22	0.71	1.61	8	1
1:A:393:LEU:CD1	1:A:409:ILE:CG2	0.71	2.68	4	2
1:A:393:LEU:O	1:A:406:ILE:HG22	0.71	1.85	5	3
1:A:347:PHE:O	1:A:347:PHE:CD1	0.71	2.43	4	4
1:A:435:LEU:O	1:A:435:LEU:HD12	0.71	1.85	1	1
1:A:230:LYS:CG	1:A:332:SER:HB3	0.71	2.15	1	2
1:A:414:LEU:HD13	1:A:432:PHE:CE2	0.71	2.20	5	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:357:ARG:CZ	0.71	2.39	9	8
1:A:397:ARG:HB2	1:A:400:LEU:HG	0.71	1.62	5	2
1:A:247:PHE:O	1:A:347:PHE:CD1	0.71	2.44	9	1
1:A:292:ALA:HB3	1:A:326:ILE:HG12	0.71	1.61	5	1
1:A:393:LEU:HD23	1:A:393:LEU:N	0.71	2.00	4	2
1:A:287:PHE:CE1	1:A:291:GLU:CG	0.71	2.74	1	4
1:A:465:LEU:HD23	1:A:465:LEU:C	0.71	2.05	1	2
1:A:465:LEU:C	1:A:465:LEU:HD23	0.71	2.06	7	2
1:A:234:ARG:N	1:A:234:ARG:HD2	0.71	2.01	8	5
1:A:397:ARG:CB	1:A:398:PRO:HD2	0.71	2.15	3	1
1:A:214:LEU:CD2	1:A:416:ALA:HB2	0.71	2.15	6	1
1:A:467:PRO:O	1:A:468:LEU:HD12	0.71	1.84	6	1
1:A:228:LEU:HD12	1:A:333:LEU:HG	0.70	1.61	7	3
1:A:282:PHE:CG	1:A:360:PHE:CE1	0.70	2.79	1	3
1:A:325:ILE:HD11	1:A:391:ILE:O	0.70	1.84	9	1
1:A:249:ILE:CD1	1:A:352:PHE:CE1	0.70	2.74	9	1
1:A:360:PHE:CD1	1:A:456:ILE:HD13	0.70	2.21	6	1
1:A:454:GLN:O	1:A:458:LYS:CG	0.70	2.39	8	6
1:A:211:LEU:C	1:A:211:LEU:CD1	0.70	2.59	4	4
1:A:296:ILE:CG2	1:A:392:ILE:HD12	0.70	2.15	2	1
1:A:237:LEU:HG	1:A:340:LEU:HD21	0.70	1.60	1	2
1:A:312:ASN:CB	1:A:401:LEU:HD11	0.70	2.17	9	3
1:A:292:ALA:C	1:A:296:ILE:HD12	0.70	2.07	8	5
1:A:406:ILE:N	1:A:406:ILE:HD12	0.70	2.01	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:360:PHE:CZ	1:A:456:ILE:HD13	0.70	2.21	6	1
1:A:379:LEU:HD12	1:A:425:HIS:CG	0.70	2.20	7	1
1:A:293:VAL:HG22	1:A:322:VAL:HB	0.70	1.63	5	1
1:A:221:SER:OG	1:A:299:TYR:CD1	0.70	2.44	4	3
1:A:318:LEU:HD23	1:A:322:VAL:CB	0.70	2.16	8	7
1:A:402:ASN:HB2	1:A:405:PRO:HG2	0.70	1.63	1	9
1:A:296:ILE:CG1	1:A:388:ILE:HD11	0.70	2.15	3	1
1:A:377:LEU:HD22	1:A:438:LYS:HG3	0.70	1.62	1	1
1:A:374:PHE:CE2	1:A:442:LEU:HD23	0.70	2.21	1	1
1:A:328:THR:CG2	1:A:387:PHE:CE2	0.70	2.74	4	1
1:A:309:LEU:CD1	1:A:406:ILE:HG23	0.70	2.17	9	1
1:A:321:GLY:O	1:A:325:ILE:HD12	0.70	1.85	9	2
1:A:335:ASN:CG	1:A:335:ASN:O	0.70	2.30	3	1
1:A:350:ARG:NE	1:A:365:GLU:OE2	0.70	2.25	7	9
1:A:402:ASN:HB3	1:A:405:PRO:CG	0.70	2.16	2	9
1:A:384:LEU:O	1:A:387:PHE:N	0.70	2.25	4	5
1:A:219:TYR:OH	1:A:382:SER:CB	0.70	2.39	4	1
1:A:414:LEU:HD21	1:A:436:LEU:HD22	0.70	1.63	4	1
1:A:410:GLN:OE1	1:A:414:LEU:HD11	0.70	1.87	6	1
1:A:466:HIS:CG	1:A:467:PRO:CD	0.70	2.75	6	1
1:A:249:ILE:HG21	1:A:341:ILE:CD1	0.69	2.17	7	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:419:LEU:CD2	0.69	2.06	3	1
1:A:379:LEU:HD11	1:A:435:LEU:HD13	0.69	1.61	3	1
1:A:459:THR:HG22	1:A:459:THR:O	0.69	1.87	5	3
1:A:325:ILE:HD11	1:A:391:ILE:C	0.69	2.07	9	2
1:A:466:HIS:ND1	1:A:467:PRO:O	0.69	2.24	6	1
1:A:324:GLU:HB3	1:A:391:ILE:HG21	0.69	1.62	1	3
1:A:335:ASN:O	1:A:368:PHE:CZ	0.69	2.45	8	1
1:A:230:LYS:HD3	1:A:384:LEU:CD1	0.69	2.16	3	1
1:A:309:LEU:CB	1:A:314:GLN:NE2	0.69	2.55	2	1
1:A:387:PHE:CZ	1:A:388:ILE:CD1	0.69	2.75	7	1
1:A:365:GLU:N	1:A:366:PRO:HD2	0.69	2.02	8	9
1:A:414:LEU:HD23	1:A:417:LEU:HD12	0.69	1.64	3	1
1:A:394:SER:HG	1:A:406:ILE:HD13	0.69	1.48	9	1
1:A:439:MET:O	1:A:443:ARG:N	0.69	2.25	5	9
1:A:422:LYS:O	1:A:426:PRO:HB3	0.69	1.88	2	8
1:A:381:ASP:HA	1:A:384:LEU:HD12	0.69	1.64	6	3
1:A:287:PHE:O	1:A:290:VAL:HG22	0.69	1.88	6	4
1:A:234:ARG:HH12	1:A:237:LEU:HD22	0.69	1.45	3	2
1:A:416:ALA:O	1:A:420:GLN:N	0.69	2.25	5	3
1:A:313:ASP:HB3	1:A:314:GLN:NE2	0.69	2.03	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:432:PHE:CD1	1:A:436:LEU:HD23	0.69	2.23	4	3
1:A:218:LEU:HD11	1:A:303:ILE:CG2	0.69	2.17	5	1
1:A:222:TYR:CD2	1:A:385:ALA:CB	0.69	2.76	1	4
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:HG13	0.69	1.87	3	8
1:A:393:LEU:HD12	1:A:410:GLN:N	0.69	2.02	8	2
1:A:454:GLN:O	1:A:458:LYS:HG3	0.69	1.87	1	5
1:A:370:PHE:CG	1:A:445:ILE:CD1	0.69	2.76	3	3
1:A:419:LEU:HG	1:A:423:LEU:HD11	0.68	1.65	3	3
1:A:370:PHE:CZ	1:A:374:PHE:CD1	0.68	2.81	9	1
1:A:322:VAL:O	1:A:326:ILE:HD12	0.68	1.88	5	1
1:A:248:VAL:HG23	1:A:347:PHE:CE2	0.68	2.22	7	4
1:A:249:ILE:HD12	1:A:341:ILE:CD1	0.68	2.18	8	2
1:A:228:LEU:HD12	1:A:333:LEU:CD1	0.68	2.18	8	1
1:A:419:LEU:HD23	1:A:420:GLN:N	0.68	2.04	6	4
1:A:421:LEU:HD23	1:A:425:HIS:CE1	0.68	2.23	6	1
1:A:392:ILE:O	1:A:394:SER:N	0.68	2.26	9	6
1:A:441:ASP:OD1	1:A:445:ILE:HD11	0.68	1.89	8	1
1:A:313:ASP:H	1:A:401:LEU:HD12	0.68	1.46	9	3
1:A:279:ILE:HD11	1:A:465:LEU:N	0.68	2.03	4	1
1:A:338:GLY:HA2	1:A:349:THR:HA	0.68	1.66	1	9
1:A:226:PHE:CD1	1:A:295:GLU:OE1	0.68	2.47	7	1
1:A:440:THR:O	1:A:444:GLN:HB2	0.68	1.87	5	9
1:A:435:LEU:HD12	1:A:435:LEU:O	0.68	1.87	8	1
1:A:325:ILE:HD13	1:A:392:ILE:HD12	0.68	1.64	9	2
1:A:292:ALA:HB3	1:A:326:ILE:CD1	0.68	2.19	1	4
1:A:292:ALA:O	1:A:295:GLU:N	0.68	2.27	9	9
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:CD2	0.68	2.24	9	4
1:A:300:ALA:CB	1:A:306:PHE:CE2	0.68	2.77	3	3
1:A:222:TYR:CE2	1:A:388:ILE:HG21	0.68	2.23	2	1
1:A:336:LYS:O	1:A:368:PHE:CE2	0.68	2.47	1	1
1:A:419:LEU:HG	1:A:423:LEU:HD12	0.68	1.64	4	2
1:A:327:TYR:CD2	1:A:446:VAL:CG2	0.68	2.77	6	6
1:A:299:TYR:CD1	1:A:299:TYR:C	0.68	2.67	2	4
1:A:402:ASN:C	1:A:406:ILE:CD1	0.68	2.63	1	3
1:A:221:SER:OG	1:A:299:TYR:O	0.68	2.11	9	1
1:A:384:LEU:O	1:A:387:PHE:CD2	0.67	2.47	7	1
1:A:381:ASP:O	1:A:385:ALA:N	0.67	2.22	6	4
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:CB	0.67	2.42	1	9
1:A:282:PHE:CG	1:A:360:PHE:CE2	0.67	2.83	9	3
1:A:324:GLU:O	1:A:327:TYR:CE1	0.67	2.47	2	1
1:A:335:ASN:O	1:A:335:ASN:CG	0.67	2.31	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:ASP:O	1:A:214:LEU:N	0.67	2.26	2	4
1:A:300:ALA:O	1:A:303:ILE:HG13	0.67	1.89	4	2
1:A:219:TYR:CD1	1:A:385:ALA:HB3	0.67	2.23	2	2
1:A:393:LEU:HB3	1:A:410:GLN:CB	0.67	2.19	2	1
1:A:374:PHE:CD2	1:A:377:LEU:HD21	0.67	2.24	1	1
1:A:278:ALA:O	1:A:279:ILE:C	0.67	2.32	4	9
1:A:237:LEU:HD12	1:A:340:LEU:HD21	0.67	1.66	4	1
1:A:402:ASN:HB2	1:A:405:PRO:CG	0.67	2.18	6	2
1:A:234:ARG:NE	1:A:332:SER:O	0.67	2.27	7	9
1:A:246:PRO:O	1:A:247:PHE:C	0.67	2.33	3	7
1:A:237:LEU:HD13	1:A:340:LEU:CD2	0.67	2.19	8	4
1:A:394:SER:HB2	1:A:406:ILE:HG21	0.67	1.67	1	1
1:A:299:TYR:O	1:A:302:SER:HB3	0.67	1.90	7	4
1:A:310:ASP:HB3	1:A:313:ASP:HB2	0.67	1.66	6	8
1:A:374:PHE:CE1	1:A:441:ASP:OD1	0.67	2.48	5	1
1:A:347:PHE:C	1:A:347:PHE:CD1	0.67	2.68	8	2
1:A:465:LEU:HB3	1:A:469:LEU:HD22	0.67	1.65	3	4
1:A:318:LEU:CD2	1:A:322:VAL:HG22	0.67	2.15	4	1
1:A:218:LEU:CD1	1:A:303:ILE:HG23	0.67	2.19	5	1
1:A:393:LEU:CD1	1:A:409:ILE:HB	0.67	2.19	6	8
1:A:214:LEU:HG	1:A:218:LEU:HD23	0.67	1.66	8	2
1:A:362:ASP:O	1:A:362:ASP:CG	0.67	2.34	4	3
1:A:335:ASN:ND2	1:A:336:LYS:H	0.67	1.88	5	3
1:A:210:ASP:HA	1:A:213:ALA:HB3	0.67	1.66	8	4
1:A:309:LEU:HB2	1:A:314:GLN:NE2	0.67	2.04	2	1
1:A:296:ILE:CG2	1:A:300:ALA:HB2	0.67	2.20	5	1
1:A:404:LYS:N	1:A:405:PRO:CD	0.66	2.58	6	9
1:A:410:GLN:OE1	1:A:414:LEU:HD12	0.66	1.90	8	1
1:A:400:LEU:O	1:A:401:LEU:HD23	0.66	1.90	3	2
1:A:445:ILE:CG2	1:A:449:HIS:CE1	0.66	2.75	6	1
1:A:424:ASN:OD1	1:A:425:HIS:CD2	0.66	2.48	2	4
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ASP:CB	0.66	2.43	9	9
1:A:306:PHE:CE1	1:A:317:LEU:HD11	0.66	2.26	5	1
1:A:402:ASN:CB	1:A:405:PRO:CG	0.66	2.73	6	9
1:A:363:PHE:CB	1:A:452:LEU:HD22	0.66	2.20	8	1
1:A:282:PHE:CE2	1:A:360:PHE:CZ	0.66	2.82	1	2
1:A:276:GLU:OE2	1:A:278:ALA:HB3	0.66	1.90	2	1
1:A:328:THR:CG2	1:A:387:PHE:CE1	0.66	2.78	7	1
1:A:338:GLY:CA	1:A:349:THR:HA	0.66	2.21	8	9
1:A:397:ARG:HB2	1:A:398:PRO:HD2	0.66	1.68	3	1
1:A:465:LEU:CB	1:A:469:LEU:HD22	0.66	2.21	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:432:PHE:CD1	1:A:432:PHE:C	0.66	2.67	8	3
1:A:354:LYS:C	1:A:361:GLY:O	0.66	2.34	3	2
1:A:420:GLN:O	1:A:424:ASN:CG	0.66	2.34	4	3
1:A:403:VAL:CA	1:A:406:ILE:HD13	0.66	2.20	4	2
1:A:318:LEU:C	1:A:322:VAL:HG13	0.66	2.10	5	1
1:A:348:MET:HB3	1:A:353:LEU:HD21	0.66	1.67	7	1
1:A:234:ARG:CD	1:A:234:ARG:N	0.66	2.57	1	6
1:A:222:TYR:CZ	1:A:388:ILE:CG2	0.66	2.78	5	1
1:A:333:LEU:HD13	1:A:333:LEU:N	0.66	2.06	6	2
1:A:390:VAL:HG22	1:A:414:LEU:HD12	0.66	1.67	8	1
1:A:465:LEU:CG	1:A:469:LEU:HD22	0.66	2.19	9	4
1:A:387:PHE:CG	1:A:388:ILE:N	0.66	2.64	7	1
1:A:393:LEU:HB2	1:A:410:GLN:HG3	0.66	1.67	4	2
1:A:323:HIS:CD2	1:A:324:GLU:N	0.66	2.63	3	2
1:A:356:LEU:CB	1:A:361:GLY:HA2	0.66	2.21	3	2
1:A:237:LEU:HD11	1:A:340:LEU:CD2	0.66	2.20	1	2
1:A:466:HIS:ND1	1:A:467:PRO:HD2	0.66	2.04	6	1
1:A:279:ILE:HD11	1:A:465:LEU:HA	0.66	1.66	7	3
1:A:247:PHE:HB3	1:A:346:GLY:CA	0.66	2.20	3	5
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HG3	0.66	2.26	6	2
1:A:238:THR:O	1:A:239:GLY:C	0.65	2.34	8	4
1:A:465:LEU:CD1	1:A:466:HIS:CD2	0.65	2.79	9	5
1:A:334:MET:SD	1:A:339:VAL:HG12	0.65	2.30	1	1
1:A:453:LEU:HD22	1:A:457:LYS:HG3	0.65	1.68	4	1
1:A:335:ASN:CG	1:A:336:LYS:N	0.65	2.49	5	7
1:A:310:ASP:HB3	1:A:313:ASP:CB	0.65	2.22	9	9
1:A:218:LEU:HD21	1:A:413:LEU:CD2	0.65	2.16	5	1
1:A:339:VAL:HG13	1:A:353:LEU:HD11	0.65	1.67	5	1
1:A:368:PHE:C	1:A:368:PHE:CD1	0.65	2.70	7	1
1:A:327:TYR:CG	1:A:446:VAL:HG22	0.65	2.27	5	4
1:A:418:GLU:CB	1:A:432:PHE:CG	0.65	2.79	4	3
1:A:360:PHE:CE1	1:A:460:GLU:OE2	0.65	2.49	4	1
1:A:291:GLU:O	1:A:294:GLN:N	0.65	2.30	2	9
1:A:456:ILE:CG2	1:A:457:LYS:N	0.65	2.59	7	6
1:A:282:PHE:CD2	1:A:360:PHE:CE1	0.65	2.84	1	1
1:A:400:LEU:HD21	1:A:406:ILE:HG12	0.65	1.68	6	1
1:A:222:TYR:CG	1:A:385:ALA:HB1	0.65	2.26	7	2
1:A:306:PHE:O	1:A:309:LEU:CG	0.65	2.44	9	7
1:A:350:ARG:HB2	1:A:368:PHE:CE2	0.65	2.27	4	4
1:A:453:LEU:CD1	1:A:453:LEU:C	0.65	2.61	4	1
1:A:323:HIS:C	1:A:323:HIS:CD2	0.65	2.69	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:421:LEU:HD23	1:A:425:HIS:NE2	0.65	2.06	9	1
1:A:234:ARG:N	1:A:234:ARG:CD	0.65	2.60	8	3
1:A:282:PHE:CD1	1:A:360:PHE:CZ	0.65	2.85	9	3
1:A:287:PHE:CZ	1:A:291:GLU:CD	0.65	2.69	1	6
1:A:377:LEU:HD22	1:A:438:LYS:CG	0.65	2.22	1	1
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:CD2	0.65	2.20	4	2
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:HG	0.65	1.69	4	2
1:A:237:LEU:C	1:A:238:THR:HG22	0.65	2.10	5	1
1:A:359:PRO:O	1:A:360:PHE:C	0.65	2.33	2	1
1:A:221:SER:HG	1:A:299:TYR:HD1	0.65	1.34	9	2
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:CG	0.65	2.80	6	2
1:A:248:VAL:CG2	1:A:347:PHE:CZ	0.65	2.79	3	4
1:A:424:ASN:ND2	1:A:425:HIS:CD2	0.65	2.65	5	4
1:A:420:GLN:O	1:A:424:ASN:HB3	0.65	1.92	9	3
1:A:370:PHE:CE1	1:A:374:PHE:CE1	0.65	2.85	9	1
1:A:374:PHE:CE1	1:A:441:ASP:CG	0.64	2.70	5	2
1:A:414:LEU:CD2	1:A:436:LEU:HD22	0.64	2.21	4	1
1:A:394:SER:OG	1:A:406:ILE:HD13	0.64	1.91	9	1
1:A:394:SER:HB3	1:A:400:LEU:HD11	0.64	1.67	1	1
1:A:347:PHE:CD1	1:A:347:PHE:C	0.64	2.71	6	5
1:A:440:THR:O	1:A:444:GLN:N	0.64	2.29	6	5
1:A:248:VAL:CG2	1:A:249:ILE:N	0.64	2.60	9	1
1:A:350:ARG:O	1:A:354:LYS:HG3	0.64	1.92	3	1
1:A:327:TYR:CE2	1:A:446:VAL:HG22	0.64	2.27	9	4
1:A:324:GLU:C	1:A:327:TYR:CE1	0.64	2.70	2	1
1:A:417:LEU:HD21	1:A:421:LEU:HD13	0.64	1.70	1	1
1:A:221:SER:CA	1:A:299:TYR:CE2	0.64	2.80	5	1
1:A:449:HIS:O	1:A:453:LEU:HD23	0.64	1.92	3	1
1:A:323:HIS:CD2	1:A:446:VAL:CG2	0.64	2.75	5	2
1:A:278:ALA:O	1:A:281:ILE:N	0.64	2.30	2	9
1:A:310:ASP:HB3	1:A:313:ASP:HB3	0.64	1.70	2	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ALA:HB2	0.64	1.93	9	2
1:A:314:GLN:O	1:A:317:LEU:HD22	0.64	1.92	9	1
1:A:235:ALA:HA	1:A:239:GLY:HA3	0.64	1.68	9	6
1:A:421:LEU:O	1:A:421:LEU:HD12	0.64	1.93	3	1
1:A:234:ARG:HH11	1:A:237:LEU:HD22	0.64	1.52	5	1
1:A:226:PHE:CE2	1:A:228:LEU:O	0.64	2.51	3	1
1:A:421:LEU:HD22	1:A:421:LEU:O	0.64	1.91	9	1
1:A:335:ASN:HB3	1:A:338:GLY:C	0.64	2.13	8	6
1:A:316:THR:CG2	1:A:399:GLY:O	0.64	2.46	9	8
1:A:211:LEU:HD21	1:A:415:GLN:CB	0.64	2.22	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:LEU:CD1	1:A:340:LEU:HD11	0.64	2.22	9	2
1:A:328:THR:CG2	1:A:329:MET:N	0.64	2.61	7	9
1:A:348:MET:SD	1:A:352:PHE:CD2	0.64	2.91	7	2
1:A:415:GLN:O	1:A:419:LEU:CB	0.64	2.46	6	8
1:A:374:PHE:CZ	1:A:441:ASP:CG	0.64	2.72	3	2
1:A:473:TYR:C	1:A:473:TYR:CD1	0.64	2.69	2	1
1:A:303:ILE:HG21	1:A:409:ILE:CG2	0.64	2.22	9	3
1:A:446:VAL:HG12	1:A:447:THR:N	0.64	2.08	6	2
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:CB	0.63	2.76	4	8
1:A:277:VAL:HG12	1:A:356:LEU:CD2	0.63	2.23	3	2
1:A:211:LEU:HB2	1:A:419:LEU:HD21	0.63	1.68	4	1
1:A:393:LEU:HG	1:A:409:ILE:HG22	0.63	1.68	7	7
1:A:331:ALA:O	1:A:334:MET:HB2	0.63	1.92	6	8
1:A:221:SER:HB2	1:A:302:SER:CB	0.63	2.24	5	3
1:A:219:TYR:CZ	1:A:382:SER:HA	0.63	2.28	2	2
1:A:221:SER:HA	1:A:299:TYR:CE2	0.63	2.28	5	1
1:A:323:HIS:CE1	1:A:324:GLU:CD	0.63	2.72	5	1
1:A:225:SER:HG	1:A:295:GLU:C	0.63	1.96	1	2
1:A:227:PRO:O	1:A:229:THR:N	0.63	2.31	2	3
1:A:280:ARG:CG	1:A:281:ILE:N	0.63	2.61	5	1
1:A:366:PRO:HB2	1:A:445:ILE:HG23	0.63	1.70	7	2
1:A:333:LEU:N	1:A:333:LEU:HD13	0.63	2.08	9	3
1:A:325:ILE:HG23	1:A:388:ILE:HG13	0.63	1.69	1	4
1:A:219:TYR:CD2	1:A:385:ALA:CB	0.63	2.81	3	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:400:LEU:HA	0.63	1.70	9	3
1:A:421:LEU:HD12	1:A:421:LEU:O	0.63	1.94	5	1
1:A:333:LEU:CD1	1:A:333:LEU:N	0.63	2.61	6	2
1:A:417:LEU:HD22	1:A:418:GLU:N	0.63	2.07	1	9
1:A:339:VAL:O	1:A:348:MET:N	0.63	2.32	9	5
1:A:424:ASN:CG	1:A:425:HIS:CD2	0.63	2.72	3	4
1:A:296:ILE:HD13	1:A:322:VAL:HG13	0.63	1.70	4	1
1:A:416:ALA:HA	1:A:419:LEU:HD22	0.63	1.71	9	3
1:A:363:PHE:CZ	1:A:452:LEU:HB2	0.63	2.28	8	2
1:A:357:ARG:O	1:A:361:GLY:N	0.63	2.32	8	8
1:A:348:MET:HG2	1:A:353:LEU:HD23	0.63	1.71	8	2
1:A:402:ASN:CB	1:A:405:PRO:HG2	0.63	2.24	1	7
1:A:393:LEU:O	1:A:410:GLN:NE2	0.63	2.32	4	2
1:A:339:VAL:O	1:A:347:PHE:CB	0.63	2.47	9	3
1:A:417:LEU:CD2	1:A:421:LEU:HD13	0.63	2.24	1	1
1:A:296:ILE:O	1:A:299:TYR:N	0.62	2.32	5	9
1:A:359:PRO:C	1:A:361:GLY:N	0.62	2.51	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:388:ILE:HG22	1:A:389:ALA:N	0.62	2.10	7	3
1:A:432:PHE:CG	1:A:433:ALA:N	0.62	2.67	4	6
1:A:421:LEU:C	1:A:421:LEU:HD23	0.62	2.13	8	1
1:A:394:SER:O	1:A:396:ASP:N	0.62	2.32	8	4
1:A:389:ALA:HB1	1:A:413:LEU:CD1	0.62	2.09	3	1
1:A:322:VAL:HG12	1:A:326:ILE:HD11	0.62	1.71	4	1
1:A:234:ARG:HD2	1:A:234:ARG:N	0.62	2.07	7	4
1:A:356:LEU:O	1:A:357:ARG:C	0.62	2.38	8	6
1:A:331:ALA:HB1	1:A:371:ALA:CA	0.62	2.24	1	7
1:A:418:GLU:HB3	1:A:432:PHE:CG	0.62	2.29	4	5
1:A:222:TYR:CE2	1:A:385:ALA:HA	0.62	2.30	6	2
1:A:403:VAL:HA	1:A:406:ILE:CD1	0.62	2.24	9	1
1:A:400:LEU:HD22	1:A:403:VAL:HG23	0.62	1.72	6	1
1:A:325:ILE:CD1	1:A:391:ILE:CG2	0.62	2.77	7	7
1:A:310:ASP:N	1:A:314:GLN:HE21	0.62	1.91	2	9
1:A:248:VAL:CG1	1:A:347:PHE:CZ	0.62	2.79	8	1
1:A:365:GLU:N	1:A:366:PRO:HD3	0.62	2.09	8	1
1:A:380:ASP:OD2	1:A:425:HIS:CD2	0.62	2.52	9	1
1:A:466:HIS:ND1	1:A:467:PRO:CD	0.62	2.62	6	1
1:A:417:LEU:HD11	1:A:432:PHE:CB	0.62	2.22	7	2
1:A:392:ILE:C	1:A:394:SER:H	0.62	1.96	3	6
1:A:221:SER:OG	1:A:302:SER:OG	0.62	2.16	5	4
1:A:230:LYS:CE	1:A:384:LEU:HD11	0.62	2.25	3	1
1:A:279:ILE:HD11	1:A:465:LEU:H	0.62	1.54	4	1
1:A:400:LEU:HD13	1:A:403:VAL:HG22	0.62	1.69	4	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:HD2	0.62	1.53	9	1
1:A:280:ARG:NE	1:A:281:ILE:HD12	0.62	2.09	5	1
1:A:318:LEU:O	1:A:322:VAL:HG13	0.62	1.95	5	1
1:A:317:LEU:HD11	1:A:400:LEU:CD2	0.62	2.25	6	1
1:A:319:LYS:NZ	1:A:473:TYR:O	0.62	2.32	6	1
1:A:390:VAL:HG23	1:A:413:LEU:HB2	0.62	1.72	7	1
1:A:330:LEU:O	1:A:333:LEU:N	0.62	2.32	6	9
1:A:287:PHE:CD2	1:A:291:GLU:OE2	0.62	2.52	2	1
1:A:390:VAL:HB	1:A:414:LEU:HD12	0.62	1.70	6	1
1:A:211:LEU:CD2	1:A:419:LEU:CD1	0.62	2.77	7	2
1:A:226:PHE:CE1	1:A:295:GLU:OE1	0.62	2.52	7	1
1:A:217:HIS:O	1:A:220:ASP:N	0.62	2.33	2	9
1:A:420:GLN:NE2	1:A:424:ASN:HD22	0.62	1.92	1	6
1:A:303:ILE:HG23	1:A:413:LEU:CD2	0.62	2.23	8	1
1:A:317:LEU:HB3	1:A:400:LEU:HD22	0.62	1.71	3	1
1:A:432:PHE:CE1	1:A:436:LEU:CD2	0.62	2.82	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:353:LEU:HD13	1:A:364:MET:HB2	0.62	1.71	4	1
1:A:306:PHE:HE1	1:A:317:LEU:HD11	0.62	1.53	5	1
1:A:363:PHE:C	1:A:363:PHE:CD1	0.62	2.73	3	4
1:A:339:VAL:O	1:A:347:PHE:CA	0.62	2.47	9	4
1:A:377:LEU:O	1:A:378:GLU:C	0.62	2.37	9	1
1:A:350:ARG:O	1:A:352:PHE:N	0.62	2.33	3	7
1:A:314:GLN:HA	1:A:317:LEU:HD21	0.62	1.72	2	4
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:HG12	0.62	1.95	2	2
1:A:331:ALA:HB1	1:A:371:ALA:HB2	0.62	1.68	1	1
1:A:392:ILE:CG2	1:A:393:LEU:HD23	0.62	2.22	4	1
1:A:410:GLN:HG2	1:A:413:LEU:HD12	0.61	1.72	9	4
1:A:465:LEU:HD21	1:A:469:LEU:HD13	0.61	1.70	8	1
1:A:357:ARG:H	1:A:361:GLY:HA3	0.61	1.54	2	1
1:A:341:ILE:HD13	1:A:347:PHE:C	0.61	2.16	9	1
1:A:331:ALA:HB2	1:A:370:PHE:CD2	0.61	2.30	9	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:392:ILE:CG2	0.61	2.82	6	1
1:A:234:ARG:NH1	1:A:332:SER:O	0.61	2.31	9	2
1:A:450:VAL:O	1:A:454:GLN:CB	0.61	2.48	4	9
1:A:359:PRO:CG	1:A:456:ILE:HD11	0.61	2.24	2	2
1:A:306:PHE:CE2	1:A:392:ILE:HD13	0.61	2.30	5	1
1:A:211:LEU:CD1	1:A:211:LEU:C	0.61	2.69	7	2
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:CG	0.61	2.48	3	8
1:A:211:LEU:HA	1:A:419:LEU:HD11	0.61	1.72	6	2
1:A:248:VAL:CG1	1:A:346:GLY:HA3	0.61	2.24	9	1
1:A:465:LEU:HD11	1:A:466:HIS:CD2	0.61	2.30	9	2
1:A:466:HIS:ND1	1:A:468:LEU:HD12	0.61	2.10	1	1
1:A:314:GLN:C	1:A:317:LEU:HD22	0.61	2.16	9	1
1:A:282:PHE:HB2	1:A:360:PHE:CD2	0.61	2.30	9	1
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:CG	0.61	2.48	1	7
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:HB2	0.61	2.26	4	3
1:A:357:ARG:HG3	1:A:360:PHE:C	0.61	2.15	6	1
1:A:465:LEU:HG	1:A:469:LEU:HD22	0.61	1.72	5	3
1:A:394:SER:OG	1:A:397:ARG:CG	0.61	2.48	1	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:382:SER:CA	0.61	2.80	4	1
1:A:400:LEU:HD13	1:A:403:VAL:CG2	0.61	2.25	4	2
1:A:228:LEU:HD12	1:A:333:LEU:HD11	0.61	1.73	8	1
1:A:341:ILE:HD13	1:A:341:ILE:O	0.61	1.95	4	1
1:A:248:VAL:HG23	1:A:248:VAL:O	0.61	1.94	6	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:357:ARG:NE	0.61	2.34	7	8
1:A:218:LEU:O	1:A:222:TYR:CB	0.61	2.48	4	7
1:A:370:PHE:CE1	1:A:374:PHE:CG	0.61	2.89	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:331:ALA:HA	1:A:371:ALA:CB	0.61	2.24	2	5
1:A:390:VAL:HG11	1:A:414:LEU:HD12	0.61	1.72	2	2
1:A:335:ASN:N	1:A:338:GLY:O	0.61	2.34	2	6
1:A:466:HIS:CE1	1:A:468:LEU:CB	0.61	2.84	3	5
1:A:392:ILE:HG22	1:A:393:LEU:N	0.61	2.11	3	2
1:A:394:SER:HB3	1:A:400:LEU:HD13	0.61	1.71	9	1
1:A:466:HIS:ND1	1:A:467:PRO:N	0.61	2.49	6	1
1:A:321:GLY:O	1:A:324:GLU:N	0.61	2.33	2	7
1:A:378:GLU:O	1:A:379:LEU:HD22	0.61	1.96	2	2
1:A:222:TYR:CE1	1:A:388:ILE:CG2	0.61	2.84	5	1
1:A:384:LEU:O	1:A:385:ALA:C	0.60	2.39	4	8
1:A:277:VAL:HG13	1:A:356:LEU:CB	0.60	2.26	8	1
1:A:247:PHE:CG	1:A:247:PHE:O	0.60	2.50	1	1
1:A:323:HIS:O	1:A:327:TYR:CD2	0.60	2.54	1	3
1:A:211:LEU:HA	1:A:419:LEU:CD2	0.60	2.24	9	1
1:A:378:GLU:C	1:A:379:LEU:HD23	0.60	2.17	5	1
1:A:466:HIS:CG	1:A:470:GLN:HA	0.60	2.30	6	1
1:A:287:PHE:CD2	1:A:291:GLU:OE1	0.60	2.54	3	5
1:A:370:PHE:HB2	1:A:445:ILE:HD11	0.60	1.73	9	3
1:A:276:GLU:CD	1:A:357:ARG:NE	0.60	2.55	6	5
1:A:214:LEU:O	1:A:218:LEU:N	0.60	2.32	4	4
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:HD11	0.60	1.96	2	1
1:A:317:LEU:HD23	1:A:318:LEU:H	0.60	1.52	9	1
1:A:278:ALA:HA	1:A:356:LEU:HD13	0.60	1.73	6	1
1:A:334:MET:CG	1:A:368:PHE:HA	0.60	2.26	5	3
1:A:430:GLN:CB	1:A:433:ALA:HB3	0.60	2.26	2	6
1:A:324:GLU:CB	1:A:391:ILE:CG2	0.60	2.79	6	6
1:A:312:ASN:HB2	1:A:401:LEU:CD1	0.60	2.25	9	6
1:A:287:PHE:CE2	1:A:291:GLU:CD	0.60	2.74	9	6
1:A:379:LEU:HD23	1:A:435:LEU:HD11	0.60	1.73	7	1
1:A:393:LEU:CB	1:A:410:GLN:CG	0.60	2.79	7	5
1:A:237:LEU:HD21	1:A:335:ASN:HA	0.60	1.71	3	3
1:A:282:PHE:C	1:A:282:PHE:CD1	0.60	2.74	3	2
1:A:421:LEU:C	1:A:421:LEU:HD12	0.60	2.17	3	1
1:A:249:ILE:O	1:A:349:THR:HG23	0.60	1.96	6	3
1:A:211:LEU:CD1	1:A:419:LEU:HD22	0.60	2.27	2	1
1:A:226:PHE:CD2	1:A:329:MET:HE1	0.60	2.32	1	1
1:A:393:LEU:O	1:A:395:GLY:N	0.60	2.35	1	1
1:A:237:LEU:HD13	1:A:340:LEU:HD11	0.60	1.71	5	2
1:A:466:HIS:CD2	1:A:467:PRO:HD2	0.60	2.31	6	1
1:A:336:LYS:O	1:A:368:PHE:CE1	0.60	2.53	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:GLN:O	1:A:317:LEU:CD1	0.60	2.50	2	5
1:A:418:GLU:CB	1:A:432:PHE:CD2	0.60	2.85	9	3
1:A:219:TYR:O	1:A:223:ILE:N	0.60	2.30	2	4
1:A:318:LEU:O	1:A:322:VAL:HG12	0.60	1.97	9	2
1:A:393:LEU:CA	1:A:406:ILE:HG23	0.60	2.26	4	2
1:A:390:VAL:HG11	1:A:414:LEU:CD1	0.60	2.26	2	1
1:A:327:TYR:CZ	1:A:442:LEU:HB3	0.60	2.31	2	1
1:A:390:VAL:HG13	1:A:410:GLN:NE2	0.60	2.11	5	2
1:A:339:VAL:O	1:A:347:PHE:HB2	0.60	1.97	9	3
1:A:282:PHE:CD1	1:A:282:PHE:C	0.60	2.72	2	2
1:A:276:GLU:CG	1:A:278:ALA:H	0.60	2.10	6	4
1:A:248:VAL:CG2	1:A:248:VAL:O	0.60	2.49	6	1
1:A:325:ILE:CG1	1:A:388:ILE:CD1	0.60	2.79	6	1
1:A:299:TYR:CE2	1:A:388:ILE:HG21	0.60	2.32	7	3
1:A:324:GLU:C	1:A:391:ILE:HG21	0.60	2.18	8	6
1:A:332:SER:CB	1:A:378:GLU:OE2	0.60	2.50	8	1
1:A:237:LEU:CD1	1:A:340:LEU:CD2	0.60	2.80	3	5
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:CG	0.60	2.27	4	2
1:A:432:PHE:CD1	1:A:436:LEU:CD2	0.60	2.85	4	1
1:A:351:GLU:O	1:A:355:SER:CB	0.59	2.51	6	9
1:A:405:PRO:O	1:A:409:ILE:HG12	0.59	1.97	8	6
1:A:433:ALA:O	1:A:437:GLN:HG3	0.59	1.97	5	9
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:CG1	0.59	2.50	2	7
1:A:303:ILE:CG2	1:A:409:ILE:CG2	0.59	2.80	9	2
1:A:419:LEU:HD23	1:A:420:GLN:H	0.59	1.57	6	4
1:A:421:LEU:HD21	1:A:431:LEU:HD21	0.59	1.74	3	1
1:A:287:PHE:CE2	1:A:291:GLU:OE2	0.59	2.54	1	4
1:A:222:TYR:HB2	1:A:299:TYR:CE1	0.59	2.32	9	5
1:A:363:PHE:CB	1:A:452:LEU:HD11	0.59	2.26	2	1
1:A:360:PHE:CD1	1:A:456:ILE:HD12	0.59	2.32	4	1
1:A:310:ASP:N	1:A:314:GLN:NE2	0.59	2.50	4	8
1:A:466:HIS:CE1	1:A:468:LEU:HB2	0.59	2.32	3	5
1:A:350:ARG:NE	1:A:365:GLU:OE1	0.59	2.35	1	1
1:A:222:TYR:OH	1:A:229:THR:HG22	0.59	1.96	4	1
1:A:379:LEU:HD12	1:A:425:HIS:ND1	0.59	2.13	7	1
1:A:387:PHE:CE2	1:A:388:ILE:HD12	0.59	2.32	7	1
1:A:380:ASP:O	1:A:382:SER:N	0.59	2.35	6	8
1:A:299:TYR:O	1:A:299:TYR:CD1	0.59	2.55	1	4
1:A:292:ALA:CB	1:A:326:ILE:HG12	0.59	2.27	1	9
1:A:324:GLU:OE1	1:A:397:ARG:NH2	0.59	2.34	3	1
1:A:225:SER:OG	1:A:295:GLU:O	0.59	2.20	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:324:GLU:HA	1:A:327:TYR:CD1	0.59	2.32	2	1
1:A:341:ILE:CG2	1:A:348:MET:N	0.59	2.65	2	2
1:A:296:ILE:HG21	1:A:392:ILE:CD1	0.59	2.27	9	1
1:A:297:THR:HA	1:A:300:ALA:HB3	0.59	1.74	5	1
1:A:379:LEU:HD12	1:A:425:HIS:CD2	0.59	2.31	7	2
1:A:421:LEU:CD2	1:A:421:LEU:C	0.59	2.70	9	1
1:A:355:SER:O	1:A:356:LEU:O	0.59	2.20	6	1
1:A:466:HIS:CB	1:A:467:PRO:CD	0.59	2.80	3	8
1:A:211:LEU:HD13	1:A:419:LEU:CD2	0.59	2.25	6	2
1:A:449:HIS:CD2	1:A:450:VAL:HG23	0.59	2.33	2	3
1:A:358:LYS:N	1:A:359:PRO:CD	0.59	2.65	1	7
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:CD2	0.59	2.50	4	4
1:A:325:ILE:HG21	1:A:388:ILE:HG13	0.59	1.73	3	1
1:A:219:TYR:CE1	1:A:382:SER:CA	0.59	2.81	2	1
1:A:309:LEU:HB2	1:A:314:GLN:CD	0.59	2.17	2	1
1:A:330:LEU:O	1:A:334:MET:HG2	0.59	1.98	4	4
1:A:348:MET:CE	1:A:352:PHE:CD2	0.59	2.85	7	1
1:A:450:VAL:HG13	1:A:473:TYR:OH	0.59	1.97	9	1
1:A:397:ARG:NH1	1:A:443:ARG:CD	0.59	2.65	3	1
1:A:363:PHE:CZ	1:A:452:LEU:CB	0.59	2.86	1	1
1:A:414:LEU:C	1:A:414:LEU:HD12	0.59	2.18	5	1
1:A:379:LEU:CD1	1:A:425:HIS:CE1	0.59	2.86	7	1
1:A:436:LEU:O	1:A:438:LYS:N	0.59	2.36	6	9
1:A:418:GLU:HB2	1:A:432:PHE:CG	0.59	2.33	1	4
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ALA:CB	0.59	2.50	9	2
1:A:409:ILE:O	1:A:413:LEU:HG	0.59	1.98	5	9
1:A:438:LYS:O	1:A:440:THR:N	0.59	2.35	2	9
1:A:233:ALA:CB	1:A:340:LEU:CD2	0.59	2.79	3	1
1:A:287:PHE:CZ	1:A:291:GLU:OE2	0.59	2.56	1	3
1:A:211:LEU:HD11	1:A:212:ARG:NH1	0.59	2.12	4	1
1:A:287:PHE:CG	1:A:291:GLU:OE1	0.58	2.56	3	3
1:A:421:LEU:CD2	1:A:425:HIS:CE1	0.58	2.85	6	1
1:A:382:SER:CB	1:A:420:GLN:NE2	0.58	2.67	7	4
1:A:358:LYS:HG2	1:A:359:PRO:HD3	0.58	1.73	1	7
1:A:322:VAL:O	1:A:326:ILE:CD1	0.58	2.51	5	2
1:A:363:PHE:CG	1:A:452:LEU:HD22	0.58	2.33	8	1
1:A:327:TYR:C	1:A:442:LEU:HD11	0.58	2.19	3	1
1:A:357:ARG:NH1	1:A:360:PHE:CE2	0.58	2.71	1	1
1:A:232:LYS:O	1:A:236:ILE:CD1	0.58	2.51	6	2
1:A:280:ARG:HG3	1:A:281:ILE:N	0.58	2.12	5	1
1:A:418:GLU:O	1:A:422:LYS:CB	0.58	2.51	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:LEU:HD21	1:A:335:ASN:HB2	0.58	1.75	3	2
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:N	0.58	2.71	2	1
1:A:224:LYS:CB	1:A:299:TYR:CE2	0.58	2.85	5	1
1:A:384:LEU:C	1:A:386:ILE:H	0.58	2.01	6	1
1:A:353:LEU:HD12	1:A:354:LYS:CD	0.58	2.27	8	1
1:A:339:VAL:O	1:A:347:PHE:HA	0.58	1.97	4	5
1:A:365:GLU:OE1	1:A:365:GLU:O	0.58	2.22	9	2
1:A:374:PHE:CZ	1:A:442:LEU:CD2	0.58	2.80	1	2
1:A:383:ASP:OD2	1:A:425:HIS:NE2	0.58	2.37	9	5
1:A:359:PRO:C	1:A:361:GLY:H	0.58	2.02	3	7
1:A:219:TYR:OH	1:A:382:SER:CA	0.58	2.51	4	1
1:A:365:GLU:O	1:A:369:GLU:CB	0.58	2.51	5	1
1:A:222:TYR:CD1	1:A:222:TYR:C	0.58	2.77	6	1
1:A:222:TYR:CG	1:A:385:ALA:CB	0.58	2.87	7	2
1:A:229:THR:O	1:A:233:ALA:CB	0.58	2.52	5	4
1:A:350:ARG:NE	1:A:365:GLU:CD	0.58	2.57	2	7
1:A:374:PHE:CE2	1:A:441:ASP:OD1	0.58	2.57	3	1
1:A:317:LEU:HD23	1:A:317:LEU:C	0.58	2.14	9	1
1:A:356:LEU:C	1:A:361:GLY:HA3	0.58	2.19	6	1
1:A:335:ASN:OD1	1:A:337:ASP:N	0.58	2.36	1	7
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:CD2	0.58	2.52	4	4
1:A:414:LEU:HD22	1:A:432:PHE:CD2	0.58	2.34	3	1
1:A:453:LEU:HD12	1:A:457:LYS:CE	0.58	2.29	3	1
1:A:331:ALA:HA	1:A:334:MET:SD	0.58	2.39	2	2
1:A:221:SER:O	1:A:299:TYR:CG	0.58	2.52	5	1
1:A:379:LEU:CD2	1:A:379:LEU:N	0.58	2.67	7	1
1:A:334:MET:HE3	1:A:367:LYS:HB2	0.58	1.76	1	1
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:HD11	0.57	1.99	4	7
1:A:358:LYS:CB	1:A:359:PRO:HD3	0.57	2.28	5	3
1:A:226:PHE:CD2	1:A:228:LEU:O	0.57	2.56	3	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:441:ASP:OD1	0.57	2.57	3	1
1:A:393:LEU:O	1:A:406:ILE:C	0.57	2.43	3	1
1:A:379:LEU:CD1	1:A:435:LEU:CD1	0.57	2.76	3	1
1:A:331:ALA:O	1:A:371:ALA:HB1	0.57	1.99	6	4
1:A:329:MET:SD	1:A:333:LEU:HD11	0.57	2.38	2	1
1:A:231:ALA:O	1:A:235:ALA:CB	0.57	2.51	1	1
1:A:222:TYR:CE1	1:A:388:ILE:HG21	0.57	2.34	5	1
1:A:331:ALA:CB	1:A:371:ALA:CB	0.57	2.82	7	5
1:A:395:GLY:HA3	1:A:403:VAL:HG22	0.57	1.74	2	3
1:A:248:VAL:HG22	1:A:347:PHE:HE2	0.57	1.59	1	2
1:A:219:TYR:OH	1:A:382:SER:HB3	0.57	1.98	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:395:GLY:N	1:A:406:ILE:CG2	0.57	2.67	6	2
1:A:317:LEU:HD12	1:A:318:LEU:N	0.57	2.13	3	1
1:A:327:TYR:CB	1:A:442:LEU:CD1	0.57	2.83	3	1
1:A:386:ILE:O	1:A:390:VAL:HG23	0.57	1.99	2	1
1:A:248:VAL:HG23	1:A:249:ILE:H	0.57	1.58	9	1
1:A:366:PRO:O	1:A:445:ILE:CD1	0.57	2.52	9	1
1:A:334:MET:CE	1:A:368:PHE:N	0.57	2.68	5	1
1:A:379:LEU:HD22	1:A:379:LEU:N	0.57	2.14	7	1
1:A:389:ALA:HA	1:A:392:ILE:CG1	0.57	2.27	7	1
1:A:393:LEU:HG	1:A:409:ILE:CG2	0.57	2.29	7	7
1:A:370:PHE:CD1	1:A:374:PHE:CD1	0.57	2.93	8	2
1:A:393:LEU:HD11	1:A:413:LEU:HD11	0.57	1.77	4	2
1:A:370:PHE:C	1:A:370:PHE:CD1	0.57	2.77	2	1
1:A:334:MET:HE2	1:A:367:LYS:C	0.57	2.19	9	2
1:A:453:LEU:HD22	1:A:453:LEU:O	0.57	1.98	4	1
1:A:221:SER:CB	1:A:302:SER:HB3	0.57	2.28	1	6
1:A:293:VAL:HA	1:A:322:VAL:HG21	0.57	1.76	8	4
1:A:225:SER:OG	1:A:295:GLU:C	0.57	2.42	8	7
1:A:214:LEU:HD23	1:A:416:ALA:CB	0.57	2.29	9	4
1:A:338:GLY:N	1:A:368:PHE:CE2	0.57	2.72	2	3
1:A:327:TYR:HA	1:A:330:LEU:HB2	0.57	1.76	5	3
1:A:370:PHE:CB	1:A:445:ILE:CD1	0.57	2.82	3	3
1:A:368:PHE:CG	1:A:369:GLU:N	0.57	2.72	5	2
1:A:333:LEU:CD2	1:A:333:LEU:N	0.57	2.68	4	1
1:A:341:ILE:HD12	1:A:348:MET:N	0.57	2.13	4	1
1:A:282:PHE:CD1	1:A:360:PHE:CE2	0.57	2.92	4	2
1:A:360:PHE:CD1	1:A:456:ILE:CD1	0.57	2.87	6	1
1:A:246:PRO:C	1:A:346:GLY:HA2	0.57	2.19	3	6
1:A:439:MET:O	1:A:440:THR:O	0.57	2.23	2	4
1:A:363:PHE:CG	1:A:452:LEU:CD1	0.57	2.85	2	1
1:A:339:VAL:HG13	1:A:368:PHE:CZ	0.57	2.34	2	1
1:A:287:PHE:CE2	1:A:288:ARG:NH2	0.57	2.72	1	1
1:A:386:ILE:HD13	1:A:416:ALA:HB1	0.57	1.76	1	1
1:A:370:PHE:CZ	1:A:374:PHE:CE1	0.57	2.93	9	1
1:A:234:ARG:O	1:A:239:GLY:N	0.57	2.38	5	1
1:A:226:PHE:CD1	1:A:227:PRO:HD2	0.57	2.34	7	1
1:A:309:LEU:CD1	1:A:393:LEU:CD1	0.57	2.82	2	1
1:A:292:ALA:CB	1:A:326:ILE:CD1	0.57	2.83	6	2
1:A:323:HIS:CD2	1:A:446:VAL:CG1	0.57	2.86	5	1
1:A:370:PHE:CD1	1:A:441:ASP:HB2	0.57	2.35	7	2
1:A:382:SER:HB2	1:A:420:GLN:NE2	0.57	2.15	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:456:ILE:CD1	1:A:457:LYS:N	0.57	2.66	1	2
1:A:230:LYS:NZ	1:A:384:LEU:HD11	0.57	2.14	3	1
1:A:229:THR:O	1:A:233:ALA:N	0.57	2.29	1	2
1:A:341:ILE:CD1	1:A:341:ILE:C	0.57	2.68	4	1
1:A:249:ILE:HG22	1:A:349:THR:HG21	0.57	1.75	9	1
1:A:440:THR:O	1:A:444:GLN:CB	0.56	2.53	6	5
1:A:417:LEU:CD1	1:A:418:GLU:N	0.56	2.68	1	9
1:A:439:MET:O	1:A:442:LEU:N	0.56	2.38	1	8
1:A:247:PHE:N	1:A:346:GLY:HA2	0.56	2.15	5	7
1:A:358:LYS:CG	1:A:359:PRO:CD	0.56	2.83	5	4
1:A:248:VAL:O	1:A:249:ILE:HG22	0.56	1.99	9	1
1:A:318:LEU:CA	1:A:322:VAL:HG13	0.56	2.30	5	1
1:A:438:LYS:O	1:A:439:MET:C	0.56	2.44	8	9
1:A:453:LEU:O	1:A:457:LYS:HB3	0.56	2.00	1	2
1:A:357:ARG:O	1:A:361:GLY:CA	0.56	2.53	3	3
1:A:391:ILE:CG2	1:A:391:ILE:O	0.56	2.52	3	1
1:A:211:LEU:HD11	1:A:416:ALA:HA	0.56	1.76	2	1
1:A:339:VAL:HG11	1:A:364:MET:CG	0.56	2.30	1	1
1:A:347:PHE:CG	1:A:347:PHE:O	0.56	2.58	4	1
1:A:248:VAL:C	1:A:249:ILE:HG23	0.56	2.19	9	1
1:A:366:PRO:O	1:A:445:ILE:HD13	0.56	2.01	7	2
1:A:380:ASP:O	1:A:381:ASP:C	0.56	2.43	6	7
1:A:437:GLN:O	1:A:440:THR:HG23	0.56	1.99	2	4
1:A:230:LYS:CD	1:A:384:LEU:CD1	0.56	2.84	3	1
1:A:334:MET:SD	1:A:339:VAL:CG1	0.56	2.93	1	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:CB	0.56	2.30	1	1
1:A:313:ASP:N	1:A:401:LEU:CD1	0.56	2.68	1	2
1:A:400:LEU:HB3	1:A:403:VAL:HG23	0.56	1.77	4	1
1:A:282:PHE:CG	1:A:360:PHE:CD2	0.56	2.94	4	1
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:HG12	0.56	1.97	9	1
1:A:281:ILE:HG21	1:A:356:LEU:HD11	0.56	1.77	5	1
1:A:323:HIS:HD2	1:A:446:VAL:HG21	0.56	1.51	5	1
1:A:379:LEU:HD13	1:A:421:LEU:HD23	0.56	1.76	6	1
1:A:382:SER:HB3	1:A:420:GLN:NE2	0.56	2.16	1	3
1:A:350:ARG:NH2	1:A:365:GLU:OE2	0.56	2.38	1	1
1:A:339:VAL:HB	1:A:368:PHE:CE1	0.56	2.35	6	3
1:A:219:TYR:OH	1:A:386:ILE:HD12	0.56	2.00	2	1
1:A:211:LEU:HD11	1:A:416:ALA:CA	0.56	2.30	2	1
1:A:234:ARG:NH1	1:A:237:LEU:CD1	0.56	2.69	1	2
1:A:221:SER:OG	1:A:299:TYR:CE1	0.56	2.57	4	1
1:A:225:SER:N	1:A:299:TYR:CD2	0.56	2.74	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:414:LEU:CD1	1:A:415:GLN:N	0.56	2.68	5	1
1:A:386:ILE:HG21	1:A:417:LEU:N	0.56	2.15	6	1
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:HD13	0.56	2.19	3	1
1:A:348:MET:CG	1:A:353:LEU:HD21	0.56	2.30	3	1
1:A:277:VAL:CG1	1:A:356:LEU:CD2	0.56	2.84	3	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:385:ALA:CB	0.56	2.88	2	1
1:A:317:LEU:HD23	1:A:400:LEU:HD22	0.56	1.78	2	1
1:A:309:LEU:HD22	1:A:405:PRO:HB2	0.56	1.78	6	3
1:A:350:ARG:O	1:A:354:LYS:N	0.56	2.31	6	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:392:ILE:HG22	0.56	2.35	6	1
1:A:211:LEU:HD21	1:A:423:LEU:CD1	0.56	2.30	6	1
1:A:418:GLU:CB	1:A:432:PHE:CD1	0.56	2.89	7	3
1:A:377:LEU:O	1:A:379:LEU:CD2	0.56	2.54	2	2
1:A:374:PHE:CG	1:A:377:LEU:HD21	0.56	2.35	1	1
1:A:374:PHE:O	1:A:377:LEU:CD2	0.56	2.54	9	1
1:A:418:GLU:HB2	1:A:432:PHE:CD1	0.56	2.36	1	2
1:A:331:ALA:CA	1:A:371:ALA:CB	0.56	2.83	5	9
1:A:305:GLY:O	1:A:309:LEU:CD2	0.56	2.54	2	8
1:A:354:LYS:NZ	1:A:365:GLU:OE1	0.56	2.37	8	1
1:A:353:LEU:HD21	1:A:368:PHE:HZ	0.56	1.60	2	1
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ASP:CG	0.56	2.44	9	3
1:A:420:GLN:O	1:A:420:GLN:HG3	0.56	1.99	9	1
1:A:466:HIS:CE1	1:A:467:PRO:HD2	0.56	2.35	6	1
1:A:247:PHE:CD1	1:A:247:PHE:O	0.56	2.59	3	2
1:A:389:ALA:C	1:A:413:LEU:HD13	0.56	2.21	9	2
1:A:305:GLY:O	1:A:309:LEU:CG	0.56	2.53	2	2
1:A:360:PHE:CE1	1:A:456:ILE:CD1	0.56	2.72	6	2
1:A:430:GLN:HB2	1:A:433:ALA:HB3	0.56	1.76	2	6
1:A:396:ASP:O	1:A:397:ARG:NE	0.56	2.39	3	2
1:A:363:PHE:O	1:A:363:PHE:CG	0.56	2.59	9	1
1:A:317:LEU:HB3	1:A:400:LEU:HD21	0.56	1.78	5	1
1:A:388:ILE:CG2	1:A:389:ALA:N	0.55	2.69	4	5
1:A:333:LEU:O	1:A:340:LEU:N	0.55	2.39	5	3
1:A:350:ARG:HB2	1:A:368:PHE:CD2	0.55	2.36	4	2
1:A:325:ILE:HD11	1:A:392:ILE:N	0.55	2.17	1	1
1:A:249:ILE:HG22	1:A:249:ILE:O	0.55	2.00	5	2
1:A:277:VAL:C	1:A:356:LEU:HD22	0.55	2.21	6	1
1:A:393:LEU:HB3	1:A:410:GLN:HG3	0.55	1.77	3	6
1:A:296:ILE:HD13	1:A:322:VAL:HG22	0.55	1.76	8	1
1:A:281:ILE:HD13	1:A:353:LEU:HA	0.55	1.77	6	1
1:A:323:HIS:HB3	1:A:327:TYR:CE2	0.55	2.36	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:246:PRO:O	1:A:248:VAL:HG23	0.55	2.01	8	1
1:A:323:HIS:O	1:A:327:TYR:CD1	0.55	2.60	8	1
1:A:222:TYR:CG	1:A:299:TYR:CD2	0.55	2.94	3	2
1:A:247:PHE:N	1:A:346:GLY:CA	0.55	2.69	8	3
1:A:387:PHE:CD2	1:A:391:ILE:HD11	0.55	2.37	8	1
1:A:218:LEU:HD12	1:A:386:ILE:CG2	0.55	2.24	3	1
1:A:379:LEU:HD23	1:A:379:LEU:N	0.55	2.16	3	1
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:HD12	0.55	2.01	5	2
1:A:358:LYS:O	1:A:362:ASP:OD1	0.55	2.25	6	1
1:A:465:LEU:HD12	1:A:466:HIS:CD2	0.55	2.37	4	5
1:A:219:TYR:O	1:A:223:ILE:HD13	0.55	2.02	4	2
1:A:309:LEU:HB2	1:A:314:GLN:HG3	0.55	1.78	4	2
1:A:234:ARG:NH1	1:A:237:LEU:CD2	0.55	2.67	5	1
1:A:222:TYR:CD2	1:A:385:ALA:HB2	0.55	2.37	8	5
1:A:325:ILE:CD1	1:A:392:ILE:HD12	0.55	2.31	3	2
1:A:339:VAL:HB	1:A:368:PHE:CZ	0.55	2.37	6	2
1:A:330:LEU:O	1:A:334:MET:N	0.55	2.40	2	1
1:A:236:ILE:HD11	1:A:340:LEU:CD1	0.55	2.31	2	1
1:A:363:PHE:CD2	1:A:452:LEU:HD21	0.55	2.36	2	1
1:A:337:ASP:HA	1:A:350:ARG:NH1	0.55	2.15	1	1
1:A:248:VAL:C	1:A:249:ILE:CG2	0.55	2.74	9	1
1:A:333:LEU:N	1:A:333:LEU:CD1	0.55	2.70	9	1
1:A:402:ASN:C	1:A:406:ILE:HD13	0.55	2.21	4	2
1:A:323:HIS:CD2	1:A:327:TYR:CE2	0.55	2.95	7	1
1:A:221:SER:HB2	1:A:302:SER:HB2	0.55	1.78	8	2
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:C	0.55	2.74	9	3
1:A:337:ASP:O	1:A:349:THR:HA	0.55	2.00	9	5
1:A:249:ILE:HG21	1:A:348:MET:CE	0.55	2.32	3	1
1:A:393:LEU:CA	1:A:410:GLN:HG3	0.55	2.32	3	1
1:A:357:ARG:O	1:A:361:GLY:HA3	0.55	2.01	4	3
1:A:365:GLU:OE1	1:A:365:GLU:HA	0.55	2.01	9	3
1:A:222:TYR:CD2	1:A:385:ALA:HB1	0.55	2.37	1	1
1:A:237:LEU:O	1:A:238:THR:CB	0.55	2.54	5	2
1:A:332:SER:OG	1:A:333:LEU:HD13	0.55	2.02	5	1
1:A:225:SER:HB2	1:A:299:TYR:CB	0.55	2.30	4	5
1:A:393:LEU:HD12	1:A:409:ILE:HB	0.55	1.79	3	1
1:A:326:ILE:HG22	1:A:330:LEU:CD1	0.55	2.32	5	5
1:A:248:VAL:HG13	1:A:346:GLY:CA	0.55	2.31	9	1
1:A:328:THR:OG1	1:A:387:PHE:CE1	0.55	2.59	6	1
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:HG	0.54	2.36	7	2
1:A:247:PHE:CZ	1:A:249:ILE:CD1	0.54	2.91	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:396:ASP:C	1:A:397:ARG:HE	0.54	2.06	3	1
1:A:421:LEU:HD13	1:A:425:HIS:CE1	0.54	2.37	3	1
1:A:365:GLU:CA	1:A:365:GLU:OE1	0.54	2.56	2	1
1:A:296:ILE:CG2	1:A:392:ILE:CD1	0.54	2.85	2	1
1:A:431:LEU:HD13	1:A:431:LEU:O	0.54	2.02	4	1
1:A:397:ARG:HB3	1:A:398:PRO:HD2	0.54	1.77	9	1
1:A:316:THR:CG2	1:A:400:LEU:HA	0.54	2.31	9	1
1:A:222:TYR:CZ	1:A:388:ILE:HG22	0.54	2.36	5	1
1:A:467:PRO:O	1:A:469:LEU:N	0.54	2.40	9	7
1:A:436:LEU:O	1:A:439:MET:HG2	0.54	2.01	6	7
1:A:222:TYR:OH	1:A:389:ALA:HB2	0.54	2.02	5	1
1:A:389:ALA:O	1:A:413:LEU:CD1	0.54	2.56	7	2
1:A:420:GLN:CD	1:A:424:ASN:ND2	0.54	2.61	8	3
1:A:379:LEU:HG	1:A:425:HIS:CE1	0.54	2.38	2	2
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HD2	0.54	2.36	8	1
1:A:415:GLN:O	1:A:419:LEU:N	0.54	2.39	6	3
1:A:375:ASN:ND2	1:A:378:GLU:OE1	0.54	2.41	2	1
1:A:248:VAL:HG12	1:A:347:PHE:CE2	0.54	2.38	6	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:CD	0.54	2.90	8	1
1:A:392:ILE:CG2	1:A:393:LEU:N	0.54	2.71	3	4
1:A:393:LEU:HD12	1:A:406:ILE:CA	0.54	2.32	2	1
1:A:211:LEU:CD2	1:A:419:LEU:HG	0.54	2.32	9	2
1:A:314:GLN:CA	1:A:317:LEU:HD22	0.54	2.32	9	1
1:A:377:LEU:HD12	1:A:379:LEU:HD21	0.54	1.79	9	1
1:A:425:HIS:O	1:A:425:HIS:CG	0.54	2.60	5	1
1:A:380:ASP:OD1	1:A:383:ASP:CG	0.54	2.45	1	5
1:A:219:TYR:CZ	1:A:223:ILE:CD1	0.54	2.91	8	2
1:A:327:TYR:HB2	1:A:442:LEU:CD1	0.54	2.32	3	3
1:A:309:LEU:HD11	1:A:393:LEU:CD1	0.54	2.27	2	2
1:A:358:LYS:O	1:A:362:ASP:OD2	0.54	2.26	6	2
1:A:276:GLU:OE1	1:A:279:ILE:HD12	0.54	2.02	9	1
1:A:246:PRO:O	1:A:347:PHE:CZ	0.54	2.60	9	1
1:A:396:ASP:OD1	1:A:397:ARG:CZ	0.54	2.56	5	2
1:A:218:LEU:O	1:A:299:TYR:CZ	0.54	2.61	8	4
1:A:442:LEU:O	1:A:446:VAL:CG2	0.54	2.56	5	3
1:A:359:PRO:HA	1:A:452:LEU:HD22	0.54	1.80	3	1
1:A:384:LEU:C	1:A:386:ILE:N	0.54	2.59	4	3
1:A:459:THR:O	1:A:459:THR:CG2	0.54	2.53	4	4
1:A:327:TYR:O	1:A:370:PHE:CE2	0.54	2.61	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:322:VAL:CG1	0.54	2.32	5	1
1:A:383:ASP:OD1	1:A:420:GLN:NE2	0.54	2.41	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:248:VAL:CG2	1:A:347:PHE:CE2	0.54	2.90	8	4
1:A:310:ASP:O	1:A:314:GLN:CD	0.54	2.46	5	8
1:A:321:GLY:O	1:A:323:HIS:N	0.54	2.41	3	8
1:A:393:LEU:C	1:A:410:GLN:HG3	0.54	2.23	3	3
1:A:248:VAL:CG1	1:A:347:PHE:CE2	0.54	2.91	8	2
1:A:397:ARG:HB3	1:A:398:PRO:CD	0.54	2.32	3	2
1:A:276:GLU:HG2	1:A:278:ALA:HB3	0.54	1.80	5	2
1:A:368:PHE:CD1	1:A:369:GLU:N	0.54	2.76	5	1
1:A:467:PRO:C	1:A:469:LEU:N	0.54	2.61	9	8
1:A:218:LEU:HD12	1:A:299:TYR:OH	0.54	2.03	8	1
1:A:324:GLU:HB2	1:A:391:ILE:CG2	0.54	2.32	2	7
1:A:397:ARG:HB2	1:A:398:PRO:CD	0.54	2.29	3	1
1:A:400:LEU:HD13	1:A:406:ILE:CD1	0.54	2.33	1	1
1:A:377:LEU:CD1	1:A:435:LEU:CD1	0.54	2.86	1	1
1:A:354:LYS:O	1:A:361:GLY:CA	0.54	2.56	4	1
1:A:303:ILE:HG21	1:A:413:LEU:CD2	0.54	2.32	3	2
1:A:436:LEU:C	1:A:438:LYS:N	0.54	2.59	6	9
1:A:379:LEU:CB	1:A:383:ASP:OD2	0.54	2.56	5	6
1:A:403:VAL:CA	1:A:406:ILE:HD12	0.54	2.31	5	5
1:A:402:ASN:HB3	1:A:405:PRO:CD	0.54	2.33	1	7
1:A:339:VAL:HG11	1:A:368:PHE:CE1	0.54	2.38	2	1
1:A:380:ASP:CG	1:A:382:SER:HG	0.54	2.06	2	3
1:A:331:ALA:O	1:A:371:ALA:CB	0.54	2.56	1	1
1:A:219:TYR:CZ	1:A:382:SER:CA	0.54	2.91	4	1
1:A:406:ILE:HD12	1:A:406:ILE:N	0.54	2.18	6	2
1:A:281:ILE:CD1	1:A:352:PHE:CE2	0.54	2.85	3	1
1:A:323:HIS:NE2	1:A:446:VAL:HG21	0.54	2.13	3	2
1:A:393:LEU:CD1	1:A:406:ILE:HA	0.54	2.32	2	4
1:A:392:ILE:HG22	1:A:393:LEU:CD2	0.54	2.29	4	1
1:A:314:GLN:HA	1:A:317:LEU:HD22	0.54	1.80	9	1
1:A:400:LEU:CD1	1:A:403:VAL:HG23	0.54	2.34	9	1
1:A:379:LEU:HD23	1:A:425:HIS:CD2	0.53	2.38	8	1
1:A:393:LEU:HA	1:A:406:ILE:HG23	0.53	1.80	8	2
1:A:290:VAL:O	1:A:293:VAL:CG1	0.53	2.55	6	3
1:A:278:ALA:CB	1:A:360:PHE:O	0.53	2.55	2	1
1:A:246:PRO:C	1:A:346:GLY:CA	0.53	2.76	6	2
1:A:325:ILE:CG2	1:A:388:ILE:HD11	0.53	2.29	1	2
1:A:380:ASP:OD1	1:A:382:SER:CB	0.53	2.56	4	1
1:A:389:ALA:HA	1:A:392:ILE:HG22	0.53	1.80	9	1
1:A:278:ALA:CB	1:A:360:PHE:CD2	0.53	2.91	5	1
1:A:353:LEU:HA	1:A:356:LEU:HD21	0.53	1.81	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:249:ILE:CG2	1:A:341:ILE:CD1	0.53	2.86	7	1
1:A:296:ILE:CG1	1:A:325:ILE:HG21	0.53	2.31	1	3
1:A:351:GLU:O	1:A:355:SER:HB2	0.53	2.03	5	6
1:A:430:GLN:O	1:A:433:ALA:N	0.53	2.42	8	7
1:A:452:LEU:O	1:A:456:ILE:HG23	0.53	2.04	8	1
1:A:299:TYR:CD1	1:A:302:SER:OG	0.53	2.61	2	2
1:A:335:ASN:O	1:A:368:PHE:CG	0.53	2.62	1	1
1:A:377:LEU:HD12	1:A:435:LEU:CD1	0.53	2.34	1	1
1:A:421:LEU:HD11	1:A:435:LEU:CD1	0.53	2.34	4	1
1:A:406:ILE:H	1:A:406:ILE:HD12	0.53	1.63	6	1
1:A:469:LEU:O	1:A:470:GLN:CG	0.53	2.56	6	1
1:A:395:GLY:HA2	1:A:403:VAL:HG22	0.53	1.81	4	2
1:A:249:ILE:O	1:A:249:ILE:HG22	0.53	2.02	6	3
1:A:324:GLU:OE2	1:A:391:ILE:HD12	0.53	2.03	3	1
1:A:394:SER:CB	1:A:410:GLN:OE1	0.53	2.57	3	1
1:A:324:GLU:CA	1:A:327:TYR:CZ	0.53	2.89	2	1
1:A:327:TYR:CE1	1:A:442:LEU:HD12	0.53	2.38	2	1
1:A:337:ASP:CG	1:A:350:ARG:NH1	0.53	2.62	1	1
1:A:354:LYS:HA	1:A:361:GLY:C	0.53	2.24	1	1
1:A:331:ALA:HA	1:A:334:MET:HG3	0.53	1.79	5	2
1:A:362:ASP:OD1	1:A:362:ASP:O	0.53	2.26	5	2
1:A:237:LEU:HD12	1:A:340:LEU:HD11	0.53	1.81	9	1
1:A:246:PRO:HG2	1:A:347:PHE:CD2	0.53	2.38	9	1
1:A:357:ARG:O	1:A:358:LYS:C	0.53	2.45	2	7
1:A:324:GLU:O	1:A:391:ILE:HG21	0.53	2.04	9	5
1:A:418:GLU:HB2	1:A:432:PHE:CD2	0.53	2.38	2	6
1:A:218:LEU:HD11	1:A:413:LEU:HD22	0.53	1.79	3	1
1:A:306:PHE:HE2	1:A:392:ILE:HD13	0.53	1.63	5	1
1:A:282:PHE:O	1:A:286:GLN:CB	0.53	2.57	7	5
1:A:222:TYR:CD2	1:A:385:ALA:HA	0.53	2.39	3	2
1:A:323:HIS:CG	1:A:324:GLU:N	0.53	2.77	3	2
1:A:277:VAL:HG12	1:A:356:LEU:HD22	0.53	1.79	3	1
1:A:313:ASP:OD1	1:A:406:ILE:CD1	0.53	2.56	1	1
1:A:296:ILE:HD13	1:A:322:VAL:CG1	0.53	2.33	4	1
1:A:453:LEU:HD11	1:A:473:TYR:CE1	0.53	2.38	4	1
1:A:350:ARG:HA	1:A:353:LEU:HD11	0.53	1.80	9	2
1:A:347:PHE:N	1:A:347:PHE:CD1	0.53	2.71	9	1
1:A:327:TYR:CE2	1:A:446:VAL:HG13	0.53	2.38	7	1
1:A:230:LYS:O	1:A:234:ARG:HB2	0.53	2.04	1	4
1:A:219:TYR:CZ	1:A:223:ILE:HD13	0.53	2.38	8	1
1:A:327:TYR:CE2	1:A:446:VAL:HA	0.53	2.38	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:452:LEU:O	1:A:456:ILE:CG1	0.53	2.57	8	1
1:A:356:LEU:CD1	1:A:360:PHE:O	0.53	2.57	3	2
1:A:211:LEU:HD21	1:A:416:ALA:N	0.53	2.19	2	1
1:A:317:LEU:HA	1:A:394:SER:OG	0.53	2.03	1	1
1:A:318:LEU:O	1:A:322:VAL:HG23	0.53	2.04	4	1
1:A:350:ARG:CD	1:A:354:LYS:CD	0.53	2.87	9	1
1:A:219:TYR:HD1	1:A:385:ALA:HB3	0.53	1.63	6	1
1:A:454:GLN:O	1:A:458:LYS:HG2	0.53	2.03	7	4
1:A:297:THR:O	1:A:299:TYR:N	0.53	2.41	5	3
1:A:355:SER:O	1:A:356:LEU:CD2	0.53	2.52	5	3
1:A:287:PHE:HA	1:A:290:VAL:HG22	0.53	1.79	2	2
1:A:354:LYS:O	1:A:361:GLY:O	0.53	2.26	2	3
1:A:341:ILE:HG23	1:A:348:MET:N	0.53	2.19	2	3
1:A:363:PHE:CB	1:A:452:LEU:CD1	0.53	2.86	2	1
1:A:363:PHE:CB	1:A:452:LEU:HD13	0.53	2.33	9	1
1:A:229:THR:CA	1:A:333:LEU:HD11	0.53	2.34	5	1
1:A:377:LEU:HD11	1:A:438:LYS:HE2	0.53	1.80	5	1
1:A:419:LEU:CD2	1:A:423:LEU:CD1	0.53	2.87	5	1
1:A:453:LEU:CD2	1:A:473:TYR:CZ	0.53	2.92	5	1
1:A:390:VAL:CG1	1:A:390:VAL:O	0.53	2.57	7	1
1:A:317:LEU:O	1:A:321:GLY:CA	0.53	2.57	2	4
1:A:404:LYS:O	1:A:408:ASP:CB	0.53	2.57	9	6
1:A:211:LEU:HD12	1:A:211:LEU:C	0.53	2.22	9	2
1:A:223:ILE:O	1:A:223:ILE:CD1	0.53	2.43	3	1
1:A:333:LEU:N	1:A:333:LEU:CD2	0.53	2.71	2	1
1:A:457:LYS:HE3	1:A:473:TYR:CE1	0.53	2.39	2	1
1:A:393:LEU:O	1:A:394:SER:C	0.53	2.46	1	1
1:A:386:ILE:HD13	1:A:416:ALA:CB	0.53	2.34	1	1
1:A:390:VAL:C	1:A:410:GLN:NE2	0.53	2.61	4	1
1:A:327:TYR:HD2	1:A:446:VAL:HG22	0.53	1.63	4	1
1:A:367:LYS:HG2	1:A:449:HIS:CE1	0.53	2.38	6	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:419:LEU:CD1	0.53	2.32	7	1
1:A:222:TYR:C	1:A:224:LYS:N	0.53	2.61	7	9
1:A:395:GLY:HA2	1:A:400:LEU:HD13	0.53	1.80	5	3
1:A:220:ASP:O	1:A:224:LYS:CD	0.53	2.57	9	6
1:A:299:TYR:O	1:A:302:SER:N	0.53	2.42	8	4
1:A:356:LEU:HD12	1:A:360:PHE:O	0.53	2.04	3	3
1:A:317:LEU:HB3	1:A:400:LEU:CD2	0.53	2.34	3	1
1:A:211:LEU:HD21	1:A:416:ALA:CA	0.53	2.33	2	1
1:A:324:GLU:O	1:A:327:TYR:HE1	0.53	1.86	2	1
1:A:379:LEU:HB2	1:A:384:LEU:HD21	0.53	1.81	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:ASN:HB3	1:A:401:LEU:HD11	0.53	1.80	9	1
1:A:322:VAL:O	1:A:326:ILE:HG13	0.53	2.04	6	8
1:A:278:ALA:C	1:A:280:ARG:N	0.53	2.62	3	6
1:A:415:GLN:O	1:A:419:LEU:HB3	0.53	2.04	9	6
1:A:427:GLU:O	1:A:428:SER:CB	0.53	2.57	6	3
1:A:247:PHE:CD1	1:A:247:PHE:C	0.53	2.81	3	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:352:PHE:CD2	0.53	2.38	3	1
1:A:330:LEU:O	1:A:331:ALA:C	0.53	2.47	2	7
1:A:303:ILE:CG2	1:A:413:LEU:CD2	0.52	2.86	7	4
1:A:417:LEU:O	1:A:421:LEU:CB	0.52	2.56	1	5
1:A:379:LEU:HD13	1:A:421:LEU:HD22	0.52	1.77	3	1
1:A:289:SER:HA	1:A:326:ILE:HD13	0.52	1.81	2	1
1:A:335:ASN:HB3	1:A:338:GLY:O	0.52	2.04	2	4
1:A:386:ILE:HG22	1:A:387:PHE:N	0.52	2.19	2	1
1:A:388:ILE:HA	1:A:391:ILE:HD12	0.52	1.80	2	1
1:A:354:LYS:CG	1:A:361:GLY:O	0.52	2.57	1	1
1:A:219:TYR:CD2	1:A:223:ILE:CG1	0.52	2.93	9	1
1:A:296:ILE:HG21	1:A:318:LEU:CD2	0.52	2.25	6	1
1:A:348:MET:HE3	1:A:352:PHE:CB	0.52	2.33	6	1
1:A:457:LYS:O	1:A:465:LEU:CD1	0.52	2.57	6	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:317:LEU:HD11	0.52	2.39	7	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:357:ARG:NH2	0.52	2.42	5	3
1:A:354:LYS:HG2	1:A:354:LYS:O	0.52	2.04	6	1
1:A:404:LYS:N	1:A:405:PRO:HD2	0.52	2.18	6	7
1:A:393:LEU:HD12	1:A:409:ILE:C	0.52	2.25	8	1
1:A:453:LEU:HA	1:A:456:ILE:CG1	0.52	2.34	1	2
1:A:360:PHE:CZ	1:A:453:LEU:HB2	0.52	2.39	3	1
1:A:434:LYS:CD	1:A:435:LEU:N	0.52	2.73	3	1
1:A:327:TYR:CD2	1:A:442:LEU:C	0.52	2.83	2	1
1:A:414:LEU:CD2	1:A:432:PHE:CE2	0.52	2.93	1	1
1:A:332:SER:C	1:A:334:MET:H	0.52	2.08	5	3
1:A:450:VAL:O	1:A:452:LEU:N	0.52	2.42	6	3
1:A:341:ILE:HD12	1:A:347:PHE:CA	0.52	2.34	4	1
1:A:276:GLU:OE2	1:A:357:ARG:CD	0.52	2.57	6	2
1:A:247:PHE:O	1:A:347:PHE:CE1	0.52	2.61	9	1
1:A:367:LYS:HE3	1:A:449:HIS:CE1	0.52	2.39	6	1
1:A:354:LYS:HG3	1:A:362:ASP:HA	0.52	1.82	7	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:357:ARG:CD	0.52	2.57	3	2
1:A:331:ALA:O	1:A:334:MET:CB	0.52	2.58	5	5
1:A:303:ILE:HD13	1:A:393:LEU:HD21	0.52	1.80	1	1
1:A:353:LEU:O	1:A:356:LEU:HG	0.52	2.03	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:393:LEU:CD2	1:A:393:LEU:N	0.52	2.70	4	1
1:A:249:ILE:HD11	1:A:352:PHE:CE1	0.52	2.38	9	1
1:A:276:GLU:CG	1:A:278:ALA:HB3	0.52	2.35	9	1
1:A:225:SER:HB2	1:A:299:TYR:HD2	0.52	1.63	5	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:223:ILE:HD11	0.52	2.39	6	1
1:A:394:SER:OG	1:A:410:GLN:OE1	0.52	2.27	3	1
1:A:459:THR:CG2	1:A:459:THR:O	0.52	2.57	3	1
1:A:356:LEU:HB2	1:A:361:GLY:HA3	0.52	1.80	2	1
1:A:363:PHE:CD1	1:A:452:LEU:HD11	0.52	2.39	2	1
1:A:336:LYS:HA	1:A:368:PHE:CE1	0.52	2.40	1	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:223:ILE:CD1	0.52	2.92	6	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:382:SER:HA	0.52	2.40	5	2
1:A:279:ILE:CG1	1:A:464:SER:O	0.52	2.58	8	1
1:A:435:LEU:O	1:A:438:LYS:CG	0.52	2.57	8	2
1:A:339:VAL:O	1:A:341:ILE:CG2	0.52	2.45	9	4
1:A:220:ASP:O	1:A:223:ILE:CG2	0.52	2.54	3	1
1:A:354:LYS:CB	1:A:362:ASP:HB3	0.52	2.35	3	1
1:A:335:ASN:OD1	1:A:338:GLY:N	0.52	2.43	5	6
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:HD12	0.52	2.04	4	3
1:A:317:LEU:CB	1:A:394:SER:OG	0.52	2.58	9	2
1:A:425:HIS:O	1:A:425:HIS:ND1	0.52	2.43	6	2
1:A:296:ILE:HG23	1:A:300:ALA:HB2	0.52	1.82	5	1
1:A:387:PHE:O	1:A:390:VAL:N	0.52	2.43	7	4
1:A:420:GLN:HE21	1:A:424:ASN:ND2	0.52	2.01	3	2
1:A:387:PHE:O	1:A:391:ILE:N	0.52	2.42	2	1
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:HB2	0.52	2.40	2	1
1:A:317:LEU:HB3	1:A:394:SER:OG	0.52	2.04	1	1
1:A:363:PHE:CZ	1:A:452:LEU:HB3	0.52	2.39	1	1
1:A:333:LEU:O	1:A:340:LEU:HD22	0.52	2.05	4	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:279:ILE:CD1	0.52	2.57	9	1
1:A:329:MET:HE3	1:A:333:LEU:HD21	0.52	1.79	9	1
1:A:371:ALA:C	1:A:375:ASN:OD1	0.52	2.48	6	1
1:A:350:ARG:C	1:A:352:PHE:N	0.52	2.61	3	9
1:A:386:ILE:CG2	1:A:413:LEU:O	0.52	2.58	5	2
1:A:451:GLN:O	1:A:455:VAL:CG2	0.52	2.58	9	7
1:A:354:LYS:HA	1:A:362:ASP:CB	0.52	2.34	3	1
1:A:359:PRO:CG	1:A:456:ILE:CD1	0.52	2.88	2	1
1:A:400:LEU:CD1	1:A:406:ILE:HD13	0.52	2.34	1	1
1:A:318:LEU:C	1:A:322:VAL:HG23	0.52	2.25	4	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:382:SER:HB3	0.52	2.40	4	1
1:A:350:ARG:HD2	1:A:354:LYS:CD	0.52	2.35	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:396:ASP:CG	1:A:397:ARG:CZ	0.52	2.78	9	1
1:A:222:TYR:CE2	1:A:389:ALA:HB2	0.52	2.40	5	1
1:A:334:MET:HG3	1:A:368:PHE:HA	0.52	1.82	5	2
1:A:312:ASN:O	1:A:315:VAL:N	0.52	2.43	9	3
1:A:350:ARG:HA	1:A:353:LEU:HD12	0.52	1.82	5	2
1:A:226:PHE:CZ	1:A:228:LEU:HB3	0.52	2.40	2	1
1:A:393:LEU:CA	1:A:406:ILE:HG22	0.52	2.35	9	1
1:A:392:ILE:C	1:A:394:SER:N	0.52	2.64	3	6
1:A:353:LEU:HD12	1:A:354:LYS:HD3	0.52	1.81	8	1
1:A:325:ILE:CD1	1:A:392:ILE:CD1	0.52	2.88	3	2
1:A:354:LYS:HA	1:A:362:ASP:HB3	0.52	1.81	3	1
1:A:421:LEU:CD2	1:A:431:LEU:HD21	0.52	2.34	3	1
1:A:393:LEU:HB3	1:A:410:GLN:HB3	0.52	1.82	2	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:LEU:HB3	0.52	2.05	6	3
1:A:211:LEU:HD21	1:A:420:GLN:HA	0.52	1.82	9	1
1:A:228:LEU:HD13	1:A:232:LYS:HB2	0.52	1.80	9	1
1:A:356:LEU:CG	1:A:361:GLY:HA2	0.52	2.35	6	1
1:A:247:PHE:HB3	1:A:346:GLY:HA3	0.51	1.81	2	2
1:A:468:LEU:O	1:A:472:ILE:CG1	0.51	2.58	7	7
1:A:233:ALA:CB	1:A:333:LEU:HD13	0.51	2.32	3	2
1:A:221:SER:HB3	1:A:302:SER:CB	0.51	2.35	2	2
1:A:282:PHE:CD1	1:A:360:PHE:CD1	0.51	2.98	2	1
1:A:230:LYS:HB3	1:A:384:LEU:HD12	0.51	1.82	9	2
1:A:325:ILE:CG2	1:A:388:ILE:CG1	0.51	2.86	1	1
1:A:228:LEU:HD11	1:A:340:LEU:HG	0.51	1.82	6	2
1:A:374:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HD3	0.51	2.40	5	1
1:A:325:ILE:HG13	1:A:388:ILE:CD1	0.51	2.34	6	1
1:A:428:SER:CB	1:A:431:LEU:HD23	0.51	2.35	6	1
1:A:350:ARG:CD	1:A:365:GLU:OE2	0.51	2.58	5	2
1:A:379:LEU:HB3	1:A:383:ASP:OD2	0.51	2.04	5	5
1:A:226:PHE:CD2	1:A:295:GLU:HB2	0.51	2.40	8	1
1:A:323:HIS:O	1:A:327:TYR:CG	0.51	2.64	2	2
1:A:402:ASN:O	1:A:405:PRO:CG	0.51	2.58	6	2
1:A:394:SER:CB	1:A:406:ILE:HG21	0.51	2.35	9	1
1:A:231:ALA:HB3	1:A:381:ASP:OD2	0.51	2.05	4	6
1:A:292:ALA:C	1:A:296:ILE:CD1	0.51	2.78	9	4
1:A:453:LEU:O	1:A:457:LYS:CG	0.51	2.58	4	3
1:A:419:LEU:C	1:A:423:LEU:HD12	0.51	2.26	4	2
1:A:323:HIS:O	1:A:327:TYR:HB2	0.51	2.06	7	3
1:A:312:ASN:O	1:A:313:ASP:C	0.51	2.49	3	7
1:A:363:PHE:CE1	1:A:452:LEU:HB2	0.51	2.41	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:357:ARG:O	1:A:359:PRO:O	0.51	2.28	2	1
1:A:334:MET:HE3	1:A:367:LYS:CG	0.51	2.36	9	1
1:A:334:MET:HE3	1:A:368:PHE:N	0.51	2.20	5	1
1:A:233:ALA:O	1:A:237:LEU:HB2	0.51	2.06	8	4
1:A:358:LYS:HG2	1:A:359:PRO:CD	0.51	2.36	4	9
1:A:410:GLN:O	1:A:412:ASN:N	0.51	2.43	3	3
1:A:365:GLU:OE1	1:A:365:GLU:CA	0.51	2.59	9	3
1:A:433:ALA:O	1:A:437:GLN:CG	0.51	2.59	6	6
1:A:339:VAL:CG1	1:A:364:MET:CG	0.51	2.87	1	1
1:A:386:ILE:O	1:A:388:ILE:N	0.51	2.42	4	1
1:A:394:SER:OG	1:A:397:ARG:NH2	0.51	2.43	4	1
1:A:339:VAL:C	1:A:347:PHE:HB2	0.51	2.26	9	1
1:A:394:SER:HB3	1:A:400:LEU:CD1	0.51	2.34	9	1
1:A:392:ILE:CG2	1:A:393:LEU:HD22	0.51	2.36	5	1
1:A:323:HIS:CE1	1:A:324:GLU:HG3	0.51	2.41	3	1
1:A:317:LEU:HD12	1:A:318:LEU:HD12	0.51	1.83	4	1
1:A:331:ALA:O	1:A:334:MET:CG	0.51	2.58	5	1
1:A:290:VAL:O	1:A:293:VAL:HG13	0.51	2.05	6	1
1:A:472:ILE:O	1:A:473:TYR:C	0.51	2.49	6	1
1:A:235:ALA:O	1:A:239:GLY:HA3	0.51	2.06	7	4
1:A:369:GLU:O	1:A:373:LYS:CG	0.51	2.59	8	1
1:A:363:PHE:CG	1:A:452:LEU:HD13	0.51	2.39	8	1
1:A:221:SER:OG	1:A:299:TYR:HA	0.51	2.06	3	2
1:A:386:ILE:O	1:A:389:ALA:N	0.51	2.43	1	4
1:A:287:PHE:CE1	1:A:291:GLU:CD	0.51	2.84	1	2
1:A:390:VAL:O	1:A:410:GLN:OE1	0.51	2.28	5	3
1:A:331:ALA:CA	1:A:334:MET:HG2	0.51	2.36	4	4
1:A:314:GLN:N	1:A:314:GLN:CD	0.51	2.63	2	1
1:A:350:ARG:CZ	1:A:365:GLU:CD	0.51	2.79	2	1
1:A:424:ASN:OD1	1:A:425:HIS:CG	0.51	2.64	2	2
1:A:233:ALA:CB	1:A:333:LEU:CD1	0.51	2.82	1	1
1:A:388:ILE:O	1:A:392:ILE:N	0.51	2.44	9	1
1:A:379:LEU:CG	1:A:425:HIS:CE1	0.51	2.94	7	1
1:A:397:ARG:NH2	1:A:443:ARG:NH2	0.51	2.59	7	1
1:A:340:LEU:C	1:A:341:ILE:CG2	0.51	2.79	8	4
1:A:389:ALA:O	1:A:410:GLN:CG	0.51	2.59	3	1
1:A:393:LEU:C	1:A:406:ILE:CG2	0.51	2.79	4	4
1:A:219:TYR:CE2	1:A:223:ILE:CG1	0.51	2.94	9	1
1:A:249:ILE:CA	1:A:349:THR:HG23	0.51	2.35	9	1
1:A:277:VAL:O	1:A:281:ILE:HB	0.51	2.05	6	1
1:A:284:GLY:C	1:A:286:GLN:N	0.51	2.63	3	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:424:ASN:HB3	1:A:425:HIS:CE1	0.51	2.41	8	2
1:A:410:GLN:OE1	1:A:414:LEU:CD1	0.51	2.58	6	2
1:A:363:PHE:CG	1:A:363:PHE:O	0.51	2.63	3	1
1:A:400:LEU:C	1:A:401:LEU:HD23	0.51	2.25	3	1
1:A:414:LEU:HD22	1:A:432:PHE:CE2	0.51	2.41	3	1
1:A:323:HIS:HB3	1:A:327:TYR:CD2	0.50	2.41	7	1
1:A:440:THR:C	1:A:442:LEU:N	0.50	2.64	8	4
1:A:222:TYR:HB2	1:A:299:TYR:CE2	0.50	2.40	8	4
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:CG	0.50	2.40	1	2
1:A:310:ASP:OD1	1:A:401:LEU:HD12	0.50	2.06	2	5
1:A:338:GLY:O	1:A:339:VAL:CG1	0.50	2.59	8	1
1:A:354:LYS:HA	1:A:362:ASP:CA	0.50	2.36	3	1
1:A:211:LEU:HG	1:A:419:LEU:HD22	0.50	1.81	2	1
1:A:322:VAL:HG12	1:A:326:ILE:CD1	0.50	2.36	4	1
1:A:402:ASN:C	1:A:405:PRO:CD	0.50	2.70	6	2
1:A:230:LYS:HD3	1:A:384:LEU:HD11	0.50	1.83	6	1
1:A:387:PHE:HA	1:A:390:VAL:CG1	0.50	2.36	6	1
1:A:440:THR:OG1	1:A:441:ASP:N	0.50	2.43	7	6
1:A:430:GLN:O	1:A:432:PHE:N	0.50	2.44	9	6
1:A:226:PHE:CD1	1:A:226:PHE:N	0.50	2.79	8	2
1:A:222:TYR:CD1	1:A:299:TYR:CE2	0.50	2.98	3	3
1:A:390:VAL:HA	1:A:410:GLN:CD	0.50	2.27	3	1
1:A:233:ALA:HB1	1:A:333:LEU:HA	0.50	1.82	1	1
1:A:249:ILE:HG22	1:A:349:THR:CG2	0.50	2.36	9	1
1:A:276:GLU:O	1:A:279:ILE:HG22	0.50	2.07	5	2
1:A:357:ARG:NH1	1:A:360:PHE:CD2	0.50	2.79	7	1
1:A:247:PHE:O	1:A:346:GLY:HA3	0.50	2.06	1	4
1:A:418:GLU:HG3	1:A:432:PHE:CD1	0.50	2.40	1	1
1:A:387:PHE:CD1	1:A:388:ILE:CA	0.50	2.95	7	1
1:A:397:ARG:CB	1:A:400:LEU:HG	0.50	2.37	7	3
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:HG	0.50	2.06	9	7
1:A:291:GLU:O	1:A:292:ALA:C	0.50	2.49	2	9
1:A:374:PHE:C	1:A:376:ALA:N	0.50	2.64	1	8
1:A:393:LEU:HD13	1:A:409:ILE:CB	0.50	2.34	8	1
1:A:211:LEU:CD1	1:A:416:ALA:CB	0.50	2.88	2	1
1:A:421:LEU:CD1	1:A:435:LEU:HD12	0.50	2.36	2	1
1:A:359:PRO:HG3	1:A:456:ILE:HD11	0.50	1.83	2	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:352:PHE:CE1	0.50	2.39	1	1
1:A:402:ASN:O	1:A:406:ILE:HD11	0.50	1.95	4	2
1:A:296:ILE:HG22	1:A:297:THR:N	0.50	2.21	5	1
1:A:314:GLN:O	1:A:317:LEU:HG	0.50	2.07	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:LEU:HD21	1:A:335:ASN:CA	0.50	2.36	3	1
1:A:425:HIS:ND1	1:A:425:HIS:O	0.50	2.45	3	3
1:A:276:GLU:O	1:A:280:ARG:CD	0.50	2.60	4	1
1:A:338:GLY:HA3	1:A:347:PHE:CE1	0.50	2.41	6	2
1:A:219:TYR:CD2	1:A:223:ILE:HG12	0.50	2.41	9	1
1:A:380:ASP:OD2	1:A:424:ASN:ND2	0.50	2.44	5	1
1:A:380:ASP:C	1:A:382:SER:N	0.50	2.63	7	9
1:A:221:SER:CB	1:A:302:SER:OG	0.50	2.60	8	2
1:A:337:ASP:OD1	1:A:350:ARG:NH1	0.50	2.45	1	2
1:A:432:PHE:CD1	1:A:436:LEU:HD11	0.50	2.42	9	1
1:A:325:ILE:CG1	1:A:388:ILE:HD11	0.50	2.37	6	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:441:ASP:HB3	0.50	2.41	7	1
1:A:442:LEU:O	1:A:446:VAL:HB	0.50	2.07	7	1
1:A:340:LEU:O	1:A:341:ILE:CG2	0.50	2.59	8	3
1:A:456:ILE:HG23	1:A:457:LYS:N	0.50	2.22	3	2
1:A:363:PHE:O	1:A:367:LYS:NZ	0.50	2.45	5	3
1:A:249:ILE:HG21	1:A:348:MET:HE2	0.50	1.82	3	1
1:A:393:LEU:HD12	1:A:406:ILE:O	0.50	2.06	2	1
1:A:232:LYS:O	1:A:236:ILE:HD13	0.50	2.06	9	2
1:A:237:LEU:HA	1:A:246:PRO:HD3	0.50	1.83	9	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HG2	0.50	2.41	9	1
1:A:438:LYS:N	1:A:438:LYS:NZ	0.50	2.59	7	1
1:A:219:TYR:O	1:A:223:ILE:HG22	0.50	2.07	3	1
1:A:218:LEU:HD11	1:A:413:LEU:CD2	0.50	2.37	3	1
1:A:383:ASP:OD1	1:A:424:ASN:ND2	0.50	2.44	3	3
1:A:276:GLU:OE2	1:A:357:ARG:NE	0.50	2.45	6	3
1:A:335:ASN:O	1:A:336:LYS:HB3	0.50	2.06	4	2
1:A:453:LEU:HD22	1:A:457:LYS:CG	0.50	2.37	4	1
1:A:371:ALA:O	1:A:374:PHE:N	0.50	2.44	6	2
1:A:282:PHE:CE1	1:A:363:PHE:CE2	0.50	2.99	5	1
1:A:419:LEU:CG	1:A:423:LEU:HD11	0.50	2.34	5	1
1:A:419:LEU:CD2	1:A:423:LEU:HD11	0.50	2.36	5	1
1:A:309:LEU:CD2	1:A:405:PRO:HB2	0.50	2.37	8	7
1:A:439:MET:HA	1:A:442:LEU:HB2	0.50	1.83	2	2
1:A:359:PRO:HB2	1:A:456:ILE:CD1	0.50	2.37	2	2
1:A:387:PHE:CD1	1:A:387:PHE:C	0.50	2.84	4	1
1:A:393:LEU:HD23	1:A:393:LEU:H	0.50	1.67	4	1
1:A:296:ILE:HG21	1:A:392:ILE:HD11	0.50	1.83	9	1
1:A:279:ILE:C	1:A:279:ILE:HD13	0.50	2.27	6	1
1:A:466:HIS:CE1	1:A:469:LEU:CG	0.49	2.94	1	2
1:A:417:LEU:O	1:A:421:LEU:HB3	0.49	2.07	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:363:PHE:CE1	1:A:364:MET:HG2	0.49	2.42	3	1
1:A:211:LEU:CD1	1:A:416:ALA:HA	0.49	2.37	5	2
1:A:420:GLN:O	1:A:424:ASN:CB	0.49	2.59	4	2
1:A:327:TYR:N	1:A:327:TYR:CD1	0.49	2.78	4	1
1:A:317:LEU:HB2	1:A:394:SER:OG	0.49	2.07	9	1
1:A:224:LYS:HB2	1:A:299:TYR:CZ	0.49	2.41	5	1
1:A:296:ILE:HG22	1:A:300:ALA:HB2	0.49	1.83	5	1
1:A:393:LEU:HB2	1:A:410:GLN:CG	0.49	2.37	7	4
1:A:421:LEU:O	1:A:425:HIS:ND1	0.49	2.45	7	1
1:A:432:PHE:O	1:A:434:LYS:N	0.49	2.45	7	3
1:A:321:GLY:C	1:A:323:HIS:N	0.49	2.65	3	9
1:A:248:VAL:HB	1:A:347:PHE:CE2	0.49	2.43	3	3
1:A:301:LYS:HA	1:A:307:VAL:HG22	0.49	1.83	4	2
1:A:219:TYR:OH	1:A:382:SER:C	0.49	2.50	2	2
1:A:277:VAL:O	1:A:280:ARG:CG	0.49	2.60	2	1
1:A:417:LEU:CD1	1:A:432:PHE:CD1	0.49	2.95	5	3
1:A:316:THR:HG22	1:A:400:LEU:HD23	0.49	1.85	1	3
1:A:233:ALA:O	1:A:237:LEU:HD12	0.49	2.06	4	1
1:A:248:VAL:O	1:A:249:ILE:HG23	0.49	2.07	9	1
1:A:420:GLN:NE2	1:A:424:ASN:CG	0.49	2.66	9	1
1:A:421:LEU:CD1	1:A:421:LEU:C	0.49	2.74	5	1
1:A:402:ASN:CB	1:A:405:PRO:HG3	0.49	2.37	6	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:317:LEU:CD1	0.49	2.95	7	1
1:A:439:MET:O	1:A:440:THR:C	0.49	2.50	6	9
1:A:424:ASN:C	1:A:425:HIS:CG	0.49	2.86	8	2
1:A:402:ASN:ND2	1:A:402:ASN:N	0.49	2.60	1	5
1:A:287:PHE:CE1	1:A:291:GLU:HG3	0.49	2.42	1	2
1:A:222:TYR:CZ	1:A:388:ILE:HG21	0.49	2.43	2	1
1:A:237:LEU:O	1:A:238:THR:HB	0.49	2.08	9	3
1:A:247:PHE:CZ	1:A:249:ILE:HG12	0.49	2.42	1	1
1:A:386:ILE:O	1:A:389:ALA:HB3	0.49	2.07	1	1
1:A:296:ILE:CD1	1:A:322:VAL:HG13	0.49	2.37	4	1
1:A:337:ASP:OD1	1:A:350:ARG:CZ	0.49	2.61	9	1
1:A:421:LEU:O	1:A:424:ASN:OD1	0.49	2.30	6	1
1:A:230:LYS:NZ	1:A:384:LEU:CD1	0.49	2.75	3	1
1:A:418:GLU:O	1:A:422:LYS:N	0.49	2.43	3	1
1:A:353:LEU:CD2	1:A:364:MET:SD	0.49	2.97	1	1
1:A:402:ASN:CB	1:A:405:PRO:CD	0.49	2.91	6	3
1:A:393:LEU:CD1	1:A:413:LEU:HD11	0.49	2.37	4	1
1:A:219:TYR:CE1	1:A:223:ILE:HD11	0.49	2.41	7	1
1:A:323:HIS:CB	1:A:327:TYR:CE2	0.49	2.95	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:442:LEU:O	1:A:446:VAL:CB	0.49	2.60	7	1
1:A:339:VAL:O	1:A:340:LEU:O	0.49	2.29	2	3
1:A:218:LEU:HD11	1:A:389:ALA:CB	0.49	2.38	8	1
1:A:374:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HD2	0.49	2.42	8	1
1:A:237:LEU:HD21	1:A:335:ASN:CB	0.49	2.37	3	1
1:A:460:GLU:O	1:A:462:ASP:N	0.49	2.46	2	3
1:A:219:TYR:OH	1:A:386:ILE:CD1	0.49	2.60	2	1
1:A:225:SER:CB	1:A:299:TYR:HB2	0.49	2.38	9	3
1:A:419:LEU:O	1:A:423:LEU:HG	0.49	2.08	9	2
1:A:327:TYR:HH	1:A:449:HIS:CG	0.49	2.22	5	1
1:A:340:LEU:O	1:A:341:ILE:HG22	0.49	2.07	8	3
1:A:236:ILE:HB	1:A:246:PRO:HB3	0.49	1.84	4	2
1:A:318:LEU:CA	1:A:322:VAL:HG23	0.49	2.37	4	1
1:A:400:LEU:CD1	1:A:403:VAL:CG2	0.49	2.90	4	2
1:A:246:PRO:HG3	1:A:340:LEU:CD1	0.49	2.37	9	1
1:A:445:ILE:CG2	1:A:449:HIS:NE2	0.49	2.73	6	1
1:A:247:PHE:CB	1:A:346:GLY:HA3	0.49	2.37	8	4
1:A:450:VAL:CG1	1:A:473:TYR:OH	0.49	2.61	9	1
1:A:323:HIS:CG	1:A:327:TYR:CE2	0.49	3.00	7	1
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:HD13	0.49	1.85	7	1
1:A:436:LEU:C	1:A:438:LYS:H	0.49	2.11	9	9
1:A:299:TYR:C	1:A:299:TYR:CD1	0.49	2.84	1	4
1:A:338:GLY:N	1:A:368:PHE:CZ	0.49	2.81	8	1
1:A:393:LEU:CD1	1:A:409:ILE:CB	0.49	2.90	4	2
1:A:362:ASP:O	1:A:362:ASP:OD2	0.49	2.30	3	1
1:A:219:TYR:O	1:A:223:ILE:HB	0.49	2.08	2	2
1:A:350:ARG:O	1:A:354:LYS:HB3	0.49	2.08	2	1
1:A:348:MET:HE3	1:A:352:PHE:CD2	0.49	2.43	6	1
1:A:367:LYS:HE3	1:A:449:HIS:CD2	0.49	2.43	6	1
1:A:430:GLN:C	1:A:432:PHE:N	0.49	2.66	9	7
1:A:396:ASP:C	1:A:397:ARG:NE	0.49	2.66	3	1
1:A:393:LEU:CD2	1:A:409:ILE:HG22	0.49	2.37	2	2
1:A:469:LEU:O	1:A:472:ILE:HG13	0.49	2.07	2	2
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:HB3	0.49	2.08	9	1
1:A:285:CYS:O	1:A:364:MET:CE	0.49	2.61	5	1
1:A:211:LEU:HD21	1:A:423:LEU:HD11	0.49	1.83	6	1
1:A:219:TYR:CD2	1:A:385:ALA:HB2	0.49	2.43	3	1
1:A:317:LEU:HA	1:A:400:LEU:CD2	0.49	2.38	3	2
1:A:410:GLN:O	1:A:413:LEU:N	0.49	2.46	3	1
1:A:465:LEU:HD12	1:A:465:LEU:C	0.49	2.29	9	2
1:A:329:MET:C	1:A:333:LEU:HD22	0.49	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:394:SER:HG	1:A:397:ARG:HB2	0.49	1.67	1	1
1:A:338:GLY:HA2	1:A:348:MET:O	0.49	2.08	9	2
1:A:348:MET:CE	1:A:352:PHE:CG	0.48	2.96	7	1
1:A:433:ALA:HA	1:A:436:LEU:HD21	0.48	1.85	7	2
1:A:331:ALA:HA	1:A:334:MET:CG	0.48	2.38	1	5
1:A:234:ARG:NH2	1:A:331:ALA:O	0.48	2.46	9	2
1:A:352:PHE:O	1:A:356:LEU:HD21	0.48	2.08	3	1
1:A:465:LEU:HD23	1:A:469:LEU:CD1	0.48	2.38	9	3
1:A:293:VAL:HA	1:A:318:LEU:HD22	0.48	1.85	2	1
1:A:309:LEU:HB3	1:A:314:GLN:NE2	0.48	2.23	2	1
1:A:226:PHE:CD1	1:A:295:GLU:CD	0.48	2.86	7	1
1:A:328:THR:HG22	1:A:329:MET:N	0.48	2.23	7	5
1:A:332:SER:OG	1:A:378:GLU:OE1	0.48	2.31	1	4
1:A:364:MET:CA	1:A:366:PRO:HD2	0.48	2.37	8	1
1:A:371:ALA:O	1:A:375:ASN:CG	0.48	2.52	9	3
1:A:221:SER:HB3	1:A:302:SER:HB3	0.48	1.84	3	3
1:A:363:PHE:CE1	1:A:364:MET:CG	0.48	2.96	3	1
1:A:211:LEU:HD11	1:A:416:ALA:HB1	0.48	1.84	2	1
1:A:350:ARG:CG	1:A:354:LYS:HD3	0.48	2.38	1	2
1:A:334:MET:HE3	1:A:367:LYS:CB	0.48	2.38	4	2
1:A:221:SER:OG	1:A:302:SER:HB3	0.48	2.07	9	1
1:A:297:THR:HG23	1:A:301:LYS:CD	0.48	2.38	9	1
1:A:374:PHE:O	1:A:377:LEU:HD23	0.48	2.09	9	1
1:A:235:ALA:HA	1:A:239:GLY:CA	0.48	2.38	5	1
1:A:219:TYR:CD2	1:A:223:ILE:HD13	0.48	2.43	6	1
1:A:356:LEU:CB	1:A:361:GLY:CA	0.48	2.91	6	1
1:A:440:THR:O	1:A:442:LEU:N	0.48	2.47	6	4
1:A:436:LEU:HD12	1:A:437:GLN:N	0.48	2.24	8	2
1:A:410:GLN:C	1:A:412:ASN:N	0.48	2.66	5	7
1:A:233:ALA:HB2	1:A:333:LEU:CD1	0.48	2.19	1	3
1:A:313:ASP:OD1	1:A:400:LEU:HB3	0.48	2.08	3	3
1:A:217:HIS:NE2	1:A:302:SER:O	0.48	2.47	2	3
1:A:230:LYS:HB3	1:A:384:LEU:CD1	0.48	2.38	2	2
1:A:359:PRO:O	1:A:361:GLY:CA	0.48	2.60	2	1
1:A:292:ALA:HB1	1:A:296:ILE:CD1	0.48	2.39	1	1
1:A:358:LYS:N	1:A:359:PRO:HD2	0.48	2.23	1	2
1:A:394:SER:HA	1:A:397:ARG:CG	0.48	2.38	1	1
1:A:318:LEU:CD2	1:A:322:VAL:CG2	0.48	2.84	4	1
1:A:395:GLY:N	1:A:406:ILE:HG22	0.48	2.23	6	2
1:A:222:TYR:C	1:A:224:LYS:H	0.48	2.12	7	6
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ASP:N	0.48	2.46	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:287:PHE:CE2	1:A:291:GLU:OE1	0.48	2.67	8	2
1:A:279:ILE:HD11	1:A:464:SER:O	0.48	2.08	8	1
1:A:404:LYS:HB2	1:A:405:PRO:HD3	0.48	1.85	3	5
1:A:390:VAL:C	1:A:410:GLN:OE1	0.48	2.52	3	1
1:A:357:ARG:HB2	1:A:359:PRO:HD2	0.48	1.86	6	2
1:A:338:GLY:CA	1:A:368:PHE:CE2	0.48	2.96	4	3
1:A:370:PHE:CD2	1:A:445:ILE:CG1	0.48	2.95	1	1
1:A:328:THR:HG23	1:A:329:MET:N	0.48	2.23	6	2
1:A:276:GLU:HG2	1:A:278:ALA:H	0.48	1.66	6	1
1:A:350:ARG:CD	1:A:365:GLU:CD	0.48	2.82	7	2
1:A:387:PHE:CE1	1:A:388:ILE:HG13	0.48	2.44	7	1
1:A:393:LEU:HB3	1:A:410:GLN:CG	0.48	2.38	7	2
1:A:247:PHE:CB	1:A:346:GLY:CA	0.48	2.92	5	2
1:A:382:SER:OG	1:A:420:GLN:NE2	0.48	2.47	2	1
1:A:234:ARG:NH2	1:A:375:ASN:OD1	0.48	2.46	9	1
1:A:307:VAL:O	1:A:314:GLN:NE2	0.48	2.47	9	1
1:A:221:SER:HB2	1:A:302:SER:OG	0.48	2.08	8	2
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:HD13	0.48	2.08	1	1
1:A:379:LEU:HG	1:A:425:HIS:CD2	0.48	2.43	1	1
1:A:355:SER:O	1:A:356:LEU:CB	0.48	2.61	9	2
1:A:320:TYR:O	1:A:443:ARG:NH2	0.48	2.45	9	1
1:A:221:SER:HB2	1:A:302:SER:HB3	0.48	1.86	7	2
1:A:327:TYR:CD2	1:A:446:VAL:HG13	0.48	2.43	7	1
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:HG	0.48	2.09	3	4
1:A:228:LEU:HD22	1:A:333:LEU:CD1	0.48	2.39	3	1
1:A:424:ASN:O	1:A:425:HIS:HB3	0.48	2.08	6	3
1:A:353:LEU:CD1	1:A:364:MET:HB3	0.48	2.38	2	1
1:A:230:LYS:HB2	1:A:332:SER:CB	0.48	2.39	9	3
1:A:237:LEU:CD1	1:A:340:LEU:CD1	0.48	2.91	9	1
1:A:395:GLY:CA	1:A:403:VAL:HG22	0.48	2.38	5	1
1:A:350:ARG:NH1	1:A:368:PHE:CB	0.48	2.77	6	1
1:A:379:LEU:HD22	1:A:425:HIS:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:248:VAL:HG22	1:A:347:PHE:CD2	0.48	2.42	8	1
1:A:393:LEU:O	1:A:406:ILE:O	0.48	2.31	3	2
1:A:300:ALA:O	1:A:301:LYS:C	0.48	2.51	5	2
1:A:215:ALA:O	1:A:217:HIS:N	0.48	2.46	2	2
1:A:333:LEU:H	1:A:333:LEU:HD22	0.48	1.69	1	1
1:A:354:LYS:HG2	1:A:361:GLY:O	0.48	2.09	1	1
1:A:394:SER:OG	1:A:397:ARG:HB2	0.48	2.08	1	1
1:A:359:PRO:CB	1:A:452:LEU:HD12	0.48	2.39	4	1
1:A:296:ILE:O	1:A:297:THR:C	0.48	2.51	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:219:TYR:CE2	1:A:223:ILE:HG13	0.48	2.43	9	1
1:A:220:ASP:O	1:A:224:LYS:HD3	0.48	2.08	9	1
1:A:325:ILE:CD1	1:A:392:ILE:HG23	0.48	2.38	7	1
1:A:432:PHE:C	1:A:434:LYS:N	0.48	2.66	7	6
1:A:217:HIS:O	1:A:218:LEU:C	0.48	2.52	2	8
1:A:419:LEU:C	1:A:421:LEU:N	0.48	2.67	2	5
1:A:457:LYS:HE2	1:A:473:TYR:CE1	0.48	2.43	8	1
1:A:363:PHE:CD2	1:A:449:HIS:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:339:VAL:HG11	1:A:364:MET:HG3	0.48	1.85	1	1
1:A:282:PHE:CE1	1:A:465:LEU:HA	0.48	2.43	6	1
1:A:350:ARG:CG	1:A:354:LYS:HB3	0.48	2.39	6	1
1:A:360:PHE:CZ	1:A:456:ILE:CD1	0.48	2.96	6	1
1:A:350:ARG:HD2	1:A:365:GLU:CD	0.48	2.28	6	1
1:A:384:LEU:HA	1:A:387:PHE:CD2	0.48	2.43	6	1
1:A:222:TYR:O	1:A:224:LYS:N	0.48	2.47	7	3
1:A:222:TYR:HA	1:A:299:TYR:CG	0.48	2.44	3	5
1:A:247:PHE:CZ	1:A:249:ILE:HD11	0.48	2.43	3	1
1:A:296:ILE:CG2	1:A:318:LEU:HD11	0.48	2.39	3	2
1:A:341:ILE:O	1:A:341:ILE:CG1	0.48	2.61	3	1
1:A:419:LEU:O	1:A:422:LYS:N	0.48	2.47	5	2
1:A:318:LEU:CD2	1:A:322:VAL:CG1	0.48	2.84	5	1
1:A:446:VAL:CG1	1:A:447:THR:N	0.48	2.77	6	1
1:A:276:GLU:O	1:A:277:VAL:C	0.47	2.52	7	2
1:A:231:ALA:N	1:A:381:ASP:OD1	0.47	2.46	8	3
1:A:296:ILE:CD1	1:A:325:ILE:HG21	0.47	2.39	2	1
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:CG	0.47	2.92	9	1
1:A:421:LEU:C	1:A:421:LEU:CD2	0.47	2.81	6	1
1:A:468:LEU:O	1:A:469:LEU:HB3	0.47	2.08	6	1
1:A:226:PHE:CG	1:A:295:GLU:OE2	0.47	2.66	7	1
1:A:348:MET:HE1	1:A:352:PHE:CD2	0.47	2.43	7	1
1:A:327:TYR:HA	1:A:330:LEU:HD12	0.47	1.85	8	1
1:A:341:ILE:HG23	1:A:348:MET:H	0.47	1.69	6	2
1:A:358:LYS:CB	1:A:359:PRO:CD	0.47	2.92	5	2
1:A:293:VAL:HG22	1:A:322:VAL:HG21	0.47	1.86	9	2
1:A:318:LEU:O	1:A:321:GLY:N	0.47	2.46	4	2
1:A:350:ARG:CG	1:A:354:LYS:HD2	0.47	2.39	5	1
1:A:370:PHE:O	1:A:374:PHE:N	0.47	2.47	2	3
1:A:416:ALA:CA	1:A:419:LEU:HB3	0.47	2.39	6	5
1:A:364:MET:O	1:A:368:PHE:CD1	0.47	2.68	3	1
1:A:296:ILE:CD1	1:A:322:VAL:HG23	0.47	2.39	6	3
1:A:324:GLU:HB3	1:A:391:ILE:CG2	0.47	2.39	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:365:GLU:O	1:A:365:GLU:OE1	0.47	2.33	4	1
1:A:222:TYR:CE2	1:A:385:ALA:HB2	0.47	2.43	9	2
1:A:339:VAL:HG12	1:A:368:PHE:CB	0.47	2.39	5	1
1:A:363:PHE:O	1:A:367:LYS:CE	0.47	2.62	5	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:392:ILE:HD12	0.47	2.44	7	1
1:A:249:ILE:HG21	1:A:341:ILE:HD11	0.47	1.84	7	2
1:A:456:ILE:O	1:A:459:THR:N	0.47	2.48	9	3
1:A:318:LEU:O	1:A:322:VAL:N	0.47	2.44	5	5
1:A:393:LEU:HB2	1:A:413:LEU:CD1	0.47	2.39	3	2
1:A:422:LYS:CE	1:A:428:SER:O	0.47	2.62	3	1
1:A:283:GLN:HG3	1:A:284:GLY:N	0.47	2.24	2	2
1:A:393:LEU:CG	1:A:409:ILE:HG22	0.47	2.40	9	2
1:A:324:GLU:OE1	1:A:443:ARG:NH2	0.47	2.48	9	1
1:A:396:ASP:OD2	1:A:397:ARG:NH1	0.47	2.47	9	1
1:A:237:LEU:O	1:A:238:THR:HG22	0.47	2.08	5	1
1:A:386:ILE:O	1:A:387:PHE:C	0.47	2.52	7	5
1:A:231:ALA:CB	1:A:381:ASP:OD2	0.47	2.63	3	3
1:A:434:LYS:O	1:A:437:GLN:N	0.47	2.47	2	5
1:A:438:LYS:C	1:A:440:THR:N	0.47	2.67	2	2
1:A:463:MET:O	1:A:464:SER:CB	0.47	2.62	1	2
1:A:377:LEU:HD13	1:A:435:LEU:HD12	0.47	1.87	1	1
1:A:393:LEU:HD11	1:A:409:ILE:CG2	0.47	2.29	4	1
1:A:350:ARG:CD	1:A:354:LYS:HD2	0.47	2.38	9	1
1:A:374:PHE:CE1	1:A:438:LYS:CG	0.47	2.97	9	1
1:A:317:LEU:CB	1:A:400:LEU:HD22	0.47	2.39	9	1
1:A:387:PHE:HA	1:A:390:VAL:HG13	0.47	1.86	6	1
1:A:234:ARG:NE	1:A:375:ASN:OD1	0.47	2.45	7	1
1:A:390:VAL:HG13	1:A:390:VAL:O	0.47	2.09	7	1
1:A:210:ASP:O	1:A:213:ALA:N	0.47	2.48	3	1
1:A:293:VAL:N	1:A:322:VAL:HG21	0.47	2.24	2	1
1:A:422:LYS:O	1:A:426:PRO:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:429:SER:C	1:A:430:GLN:CG	0.47	2.83	7	1
1:A:395:GLY:HA2	1:A:400:LEU:CD1	0.47	2.40	5	3
1:A:448:GLU:O	1:A:451:GLN:N	0.47	2.47	7	2
1:A:363:PHE:CE1	1:A:452:LEU:CB	0.47	2.97	8	1
1:A:321:GLY:C	1:A:325:ILE:HD12	0.47	2.29	3	2
1:A:223:ILE:HG23	1:A:224:LYS:HD2	0.47	1.87	3	1
1:A:393:LEU:C	1:A:406:ILE:HG23	0.47	2.29	3	2
1:A:358:LYS:O	1:A:363:PHE:CD2	0.47	2.67	2	1
1:A:211:LEU:HG	1:A:419:LEU:CD1	0.47	2.38	2	1
1:A:380:ASP:CG	1:A:382:SER:OG	0.47	2.52	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:403:VAL:N	1:A:406:ILE:HD12	0.47	2.24	1	1
1:A:374:PHE:CE2	1:A:442:LEU:CD2	0.47	2.94	1	1
1:A:393:LEU:CG	1:A:413:LEU:HD11	0.47	2.39	9	2
1:A:306:PHE:HA	1:A:309:LEU:HD11	0.47	1.86	4	1
1:A:419:LEU:O	1:A:423:LEU:CG	0.47	2.63	4	2
1:A:396:ASP:OD1	1:A:397:ARG:HB2	0.47	2.09	9	1
1:A:359:PRO:O	1:A:362:ASP:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:456:ILE:HG22	1:A:457:LYS:H	0.47	1.69	7	6
1:A:338:GLY:O	1:A:368:PHE:CE2	0.47	2.68	8	1
1:A:390:VAL:O	1:A:410:GLN:CD	0.47	2.53	8	3
1:A:233:ALA:CB	1:A:340:LEU:HG	0.47	2.40	9	2
1:A:326:ILE:C	1:A:330:LEU:HD12	0.47	2.30	6	4
1:A:337:ASP:O	1:A:350:ARG:N	0.47	2.46	9	3
1:A:310:ASP:O	1:A:314:GLN:HG2	0.47	2.09	2	1
1:A:230:LYS:CG	1:A:332:SER:CB	0.47	2.91	1	1
1:A:233:ALA:O	1:A:237:LEU:CD1	0.47	2.63	4	1
1:A:281:ILE:HG22	1:A:282:PHE:N	0.47	2.25	4	1
1:A:360:PHE:HE1	1:A:456:ILE:HD12	0.47	1.66	4	1
1:A:249:ILE:CA	1:A:347:PHE:O	0.47	2.63	9	1
1:A:226:PHE:CE1	1:A:228:LEU:HB2	0.47	2.45	1	1
1:A:247:PHE:CZ	1:A:249:ILE:CG1	0.47	2.98	1	1
1:A:293:VAL:HG22	1:A:322:VAL:HG11	0.47	1.87	9	2
1:A:416:ALA:HA	1:A:419:LEU:CD2	0.47	2.39	9	2
1:A:317:LEU:HD13	1:A:317:LEU:N	0.47	2.25	6	1
1:A:416:ALA:HA	1:A:419:LEU:HB3	0.47	1.86	7	6
1:A:415:GLN:O	1:A:419:LEU:HB2	0.47	2.10	3	2
1:A:393:LEU:HB2	1:A:413:LEU:HD12	0.47	1.87	6	2
1:A:336:LYS:CG	1:A:337:ASP:OD2	0.47	2.63	1	1
1:A:248:VAL:CG2	1:A:347:PHE:N	0.47	2.71	9	1
1:A:277:VAL:HG22	1:A:356:LEU:HD22	0.47	1.86	9	1
1:A:328:THR:HG22	1:A:329:MET:H	0.46	1.69	7	5
1:A:395:GLY:O	1:A:396:ASP:C	0.46	2.54	3	1
1:A:232:LYS:O	1:A:235:ALA:HB3	0.46	2.10	3	1
1:A:457:LYS:HD2	1:A:473:TYR:CE2	0.46	2.44	2	1
1:A:329:MET:O	1:A:330:LEU:C	0.46	2.54	1	3
1:A:247:PHE:O	1:A:247:PHE:CD1	0.46	2.68	4	1
1:A:316:THR:CG2	1:A:399:GLY:C	0.46	2.80	4	1
1:A:421:LEU:HD23	1:A:425:HIS:CD2	0.46	2.45	9	1
1:A:387:PHE:CZ	1:A:435:LEU:HD22	0.46	2.46	9	1
1:A:392:ILE:HG22	1:A:393:LEU:HD22	0.46	1.85	5	1
1:A:219:TYR:CZ	1:A:223:ILE:HD11	0.46	2.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:386:ILE:CG2	1:A:417:LEU:N	0.46	2.78	6	1
1:A:395:GLY:CA	1:A:406:ILE:HG21	0.46	2.40	6	1
1:A:316:THR:HG23	1:A:398:PRO:O	0.46	2.10	6	1
1:A:210:ASP:N	1:A:210:ASP:OD2	0.46	2.48	3	1
1:A:299:TYR:O	1:A:300:ALA:C	0.46	2.53	3	2
1:A:410:GLN:O	1:A:411:ASP:C	0.46	2.53	3	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:249:ILE:O	0.46	2.64	5	2
1:A:331:ALA:C	1:A:334:MET:HG2	0.46	2.31	1	1
1:A:325:ILE:CG1	1:A:388:ILE:HG12	0.46	2.40	1	2
1:A:317:LEU:HB2	1:A:394:SER:HA	0.46	1.88	9	1
1:A:211:LEU:HB2	1:A:419:LEU:HD11	0.46	1.85	9	1
1:A:367:LYS:HD3	1:A:445:ILE:CG2	0.46	2.41	9	1
1:A:339:VAL:N	1:A:348:MET:O	0.46	2.48	6	2
1:A:439:MET:O	1:A:442:LEU:CB	0.46	2.63	6	3
1:A:461:THR:O	1:A:462:ASP:HB2	0.46	2.09	2	6
1:A:421:LEU:CD1	1:A:435:LEU:CD2	0.46	2.93	8	1
1:A:393:LEU:O	1:A:410:GLN:HB2	0.46	2.10	3	1
1:A:430:GLN:N	1:A:430:GLN:OE1	0.46	2.48	3	1
1:A:215:ALA:O	1:A:216:LYS:C	0.46	2.53	2	3
1:A:363:PHE:CE2	1:A:452:LEU:CD2	0.46	2.94	2	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:348:MET:HG2	0.46	2.40	6	3
1:A:394:SER:N	1:A:406:ILE:CG2	0.46	2.78	4	1
1:A:436:LEU:HD12	1:A:437:GLN:HG2	0.46	1.86	8	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:223:ILE:HB	0.46	2.46	3	1
1:A:228:LEU:HD11	1:A:340:LEU:HB3	0.46	1.86	3	1
1:A:230:LYS:HD2	1:A:332:SER:OG	0.46	2.11	3	1
1:A:450:VAL:C	1:A:452:LEU:N	0.46	2.67	6	6
1:A:288:ARG:CZ	1:A:291:GLU:OE1	0.46	2.63	1	1
1:A:324:GLU:OE2	1:A:397:ARG:NH2	0.46	2.49	1	2
1:A:276:GLU:C	1:A:278:ALA:N	0.46	2.68	9	2
1:A:211:LEU:CD1	1:A:211:LEU:O	0.46	2.63	9	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:392:ILE:HG13	0.46	2.45	9	1
1:A:377:LEU:O	1:A:379:LEU:N	0.46	2.48	9	1
1:A:312:ASN:CB	1:A:401:LEU:CD1	0.46	2.90	9	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:LEU:CB	0.46	2.63	6	1
1:A:367:LYS:HE3	1:A:449:HIS:CG	0.46	2.45	6	1
1:A:419:LEU:O	1:A:423:LEU:HD12	0.46	2.10	6	1
1:A:320:TYR:HB2	1:A:397:ARG:CG	0.46	2.40	7	2
1:A:339:VAL:O	1:A:340:LEU:C	0.46	2.54	8	3
1:A:281:ILE:HG21	1:A:356:LEU:HD21	0.46	1.87	8	1
1:A:364:MET:C	1:A:366:PRO:CD	0.46	2.80	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:429:SER:C	1:A:431:LEU:N	0.46	2.67	3	2
1:A:221:SER:HB3	1:A:302:SER:OG	0.46	2.11	2	2
1:A:394:SER:OG	1:A:397:ARG:HG3	0.46	2.09	1	1
1:A:329:MET:O	1:A:332:SER:N	0.46	2.48	5	2
1:A:324:GLU:OE2	1:A:397:ARG:CZ	0.46	2.64	4	1
1:A:386:ILE:C	1:A:388:ILE:N	0.46	2.67	4	1
1:A:211:LEU:CD2	1:A:420:GLN:HA	0.46	2.41	9	1
1:A:323:HIS:ND1	1:A:324:GLU:OE2	0.46	2.49	5	1
1:A:397:ARG:N	1:A:397:ARG:HD3	0.46	2.25	6	2
1:A:357:ARG:NH2	1:A:464:SER:OG	0.46	2.47	7	1
1:A:306:PHE:O	1:A:314:GLN:HG2	0.46	2.10	6	7
1:A:310:ASP:O	1:A:314:GLN:CG	0.46	2.64	5	3
1:A:459:THR:O	1:A:460:GLU:O	0.46	2.34	7	3
1:A:456:ILE:O	1:A:460:GLU:CA	0.46	2.61	3	3
1:A:276:GLU:OE2	1:A:357:ARG:HD3	0.46	2.11	4	2
1:A:406:ILE:HD12	1:A:406:ILE:H	0.46	1.71	4	1
1:A:280:ARG:HE	1:A:281:ILE:HD12	0.46	1.68	5	1
1:A:214:LEU:O	1:A:217:HIS:N	0.46	2.49	7	3
1:A:306:PHE:CZ	1:A:392:ILE:HB	0.46	2.46	7	1
1:A:380:ASP:OD1	1:A:383:ASP:OD2	0.46	2.34	5	4
1:A:369:GLU:O	1:A:372:VAL:N	0.46	2.49	8	1
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:HD23	0.46	2.11	5	3
1:A:442:LEU:C	1:A:444:GLN:N	0.46	2.68	2	3
1:A:350:ARG:HA	1:A:353:LEU:CD1	0.46	2.40	9	2
1:A:419:LEU:O	1:A:423:LEU:CB	0.46	2.64	9	1
1:A:306:PHE:CE2	1:A:392:ILE:HG21	0.46	2.45	5	1
1:A:276:GLU:O	1:A:280:ARG:HG2	0.46	2.11	6	1
1:A:292:ALA:HB3	1:A:326:ILE:HD11	0.46	1.86	6	1
1:A:402:ASN:N	1:A:402:ASN:ND2	0.46	2.64	8	4
1:A:297:THR:C	1:A:299:TYR:N	0.46	2.67	5	7
1:A:468:LEU:O	1:A:472:ILE:HG13	0.46	2.11	8	6
1:A:246:PRO:O	1:A:248:VAL:CG2	0.46	2.64	8	1
1:A:223:ILE:HG23	1:A:224:LYS:CD	0.46	2.41	3	1
1:A:323:HIS:NE2	1:A:324:GLU:CG	0.46	2.79	3	1
1:A:331:ALA:O	1:A:334:MET:HG2	0.46	2.11	3	2
1:A:388:ILE:HG23	1:A:389:ALA:H	0.46	1.70	3	1
1:A:211:LEU:HD11	1:A:416:ALA:N	0.46	2.25	3	2
1:A:429:SER:O	1:A:431:LEU:N	0.46	2.49	3	2
1:A:331:ALA:CA	1:A:334:MET:SD	0.46	3.04	2	1
1:A:363:PHE:CD2	1:A:452:LEU:CD2	0.46	2.99	2	1
1:A:371:ALA:O	1:A:375:ASN:OD1	0.46	2.33	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:441:ASP:OD2	1:A:441:ASP:N	0.46	2.46	5	1
1:A:296:ILE:CB	1:A:318:LEU:HD21	0.46	2.40	6	1
1:A:289:SER:O	1:A:293:VAL:HG23	0.46	2.11	5	2
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:O	0.46	2.64	2	1
1:A:339:VAL:CG1	1:A:364:MET:HG3	0.46	2.40	1	1
1:A:325:ILE:CG1	1:A:388:ILE:CG1	0.46	2.94	1	1
1:A:430:GLN:N	1:A:430:GLN:CD	0.46	2.69	9	2
1:A:403:VAL:O	1:A:403:VAL:CG1	0.46	2.64	4	2
1:A:211:LEU:HD11	1:A:419:LEU:HD11	0.46	1.80	7	1
1:A:432:PHE:CD2	1:A:433:ALA:N	0.46	2.84	7	1
1:A:357:ARG:CB	1:A:360:PHE:HB2	0.46	2.40	8	2
1:A:210:ASP:O	1:A:211:LEU:C	0.46	2.54	8	1
1:A:321:GLY:O	1:A:322:VAL:C	0.46	2.53	3	4
1:A:283:GLN:O	1:A:287:PHE:HB2	0.46	2.10	5	3
1:A:329:MET:O	1:A:333:LEU:CD2	0.46	2.57	1	2
1:A:340:LEU:CD1	1:A:346:GLY:O	0.46	2.64	2	1
1:A:236:ILE:CG1	1:A:246:PRO:HB3	0.46	2.41	1	1
1:A:248:VAL:CG2	1:A:341:ILE:HD11	0.46	2.41	9	1
1:A:297:THR:O	1:A:298:GLU:C	0.46	2.55	5	1
1:A:421:LEU:HG	1:A:425:HIS:CE1	0.45	2.47	7	1
1:A:277:VAL:CG1	1:A:356:LEU:HB3	0.45	2.38	8	2
1:A:306:PHE:HA	1:A:309:LEU:CD1	0.45	2.41	6	4
1:A:399:GLY:C	1:A:400:LEU:HG	0.45	2.31	3	1
1:A:456:ILE:CG2	1:A:457:LYS:H	0.45	2.24	3	1
1:A:394:SER:CA	1:A:397:ARG:HG2	0.45	2.41	1	1
1:A:292:ALA:HB1	1:A:296:ILE:HD11	0.45	1.88	9	2
1:A:210:ASP:OD2	1:A:211:LEU:N	0.45	2.49	4	1
1:A:318:LEU:O	1:A:319:LYS:C	0.45	2.53	4	2
1:A:305:GLY:HA3	1:A:409:ILE:CD1	0.45	2.41	5	3
1:A:282:PHE:CB	1:A:360:PHE:CE2	0.45	2.99	9	1
1:A:394:SER:O	1:A:395:GLY:C	0.45	2.54	9	1
1:A:214:LEU:HG	1:A:218:LEU:HD22	0.45	1.87	6	2
1:A:223:ILE:HG22	1:A:224:LYS:HD2	0.45	1.88	8	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:352:PHE:CE2	0.45	2.99	8	1
1:A:217:HIS:O	1:A:220:ASP:HB2	0.45	2.11	3	2
1:A:317:LEU:HA	1:A:400:LEU:HD23	0.45	1.87	3	1
1:A:418:GLU:O	1:A:422:LYS:HB2	0.45	2.11	3	2
1:A:323:HIS:C	1:A:325:ILE:H	0.45	2.15	1	2
1:A:311:LEU:O	1:A:315:VAL:HG23	0.45	2.11	4	2
1:A:216:LYS:CD	1:A:220:ASP:OD2	0.45	2.64	1	1
1:A:329:MET:C	1:A:333:LEU:CD2	0.45	2.85	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:317:LEU:HG	1:A:392:ILE:O	0.45	2.11	9	1
1:A:355:SER:C	1:A:356:LEU:O	0.45	2.55	6	1
1:A:390:VAL:HA	1:A:410:GLN:NE2	0.45	2.27	3	1
1:A:410:GLN:HA	1:A:413:LEU:HD12	0.45	1.88	3	1
1:A:419:LEU:HG	1:A:423:LEU:CD1	0.45	2.39	3	3
1:A:357:ARG:NH2	1:A:460:GLU:OE2	0.45	2.47	3	1
1:A:424:ASN:OD1	1:A:425:HIS:N	0.45	2.49	2	3
1:A:309:LEU:HD23	1:A:405:PRO:HB2	0.45	1.88	4	1
1:A:390:VAL:CG1	1:A:414:LEU:HD12	0.45	2.41	9	1
1:A:404:LYS:O	1:A:408:ASP:HB2	0.45	2.11	9	2
1:A:219:TYR:CZ	1:A:223:ILE:HG12	0.45	2.46	5	1
1:A:420:GLN:HG3	1:A:421:LEU:N	0.45	2.25	5	1
1:A:313:ASP:OD1	1:A:401:LEU:N	0.45	2.47	6	1
1:A:210:ASP:OD1	1:A:210:ASP:N	0.45	2.48	8	1
1:A:218:LEU:CD1	1:A:299:TYR:OH	0.45	2.63	8	1
1:A:388:ILE:O	1:A:391:ILE:N	0.45	2.48	8	1
1:A:323:HIS:C	1:A:325:ILE:N	0.45	2.70	1	2
1:A:353:LEU:HD11	1:A:368:PHE:CE1	0.45	2.46	2	1
1:A:455:VAL:O	1:A:455:VAL:HG12	0.45	2.11	2	1
1:A:364:MET:HE2	1:A:368:PHE:HB3	0.45	1.88	1	1
1:A:222:TYR:OH	1:A:229:THR:CG2	0.45	2.63	4	1
1:A:318:LEU:HB3	1:A:322:VAL:CG2	0.45	2.41	4	1
1:A:326:ILE:O	1:A:330:LEU:CD1	0.45	2.65	4	2
1:A:424:ASN:OD1	1:A:424:ASN:O	0.45	2.34	5	1
1:A:374:PHE:CD1	1:A:441:ASP:OD1	0.45	2.69	5	1
1:A:358:LYS:O	1:A:362:ASP:CG	0.45	2.54	6	1
1:A:390:VAL:HG12	1:A:413:LEU:CB	0.45	2.42	6	1
1:A:350:ARG:HD3	1:A:365:GLU:OE2	0.45	2.11	7	2
1:A:247:PHE:C	1:A:247:PHE:CD1	0.45	2.86	4	2
1:A:313:ASP:O	1:A:317:LEU:CG	0.45	2.64	3	1
1:A:277:VAL:HG13	1:A:280:ARG:NH2	0.45	2.25	2	1
1:A:457:LYS:HD3	1:A:473:TYR:CE2	0.45	2.47	1	1
1:A:247:PHE:O	1:A:248:VAL:HG22	0.45	2.12	9	1
1:A:317:LEU:CD2	1:A:318:LEU:N	0.45	2.57	9	1
1:A:422:LYS:CA	1:A:426:PRO:HB3	0.45	2.42	9	1
1:A:229:THR:CB	1:A:381:ASP:OD1	0.45	2.64	5	1
1:A:230:LYS:CG	1:A:332:SER:HB2	0.45	2.42	5	1
1:A:412:ASN:O	1:A:413:LEU:C	0.45	2.55	5	1
1:A:377:LEU:CD1	1:A:438:LYS:HE2	0.45	2.42	5	1
1:A:289:SER:O	1:A:293:VAL:HG12	0.45	2.10	6	1
1:A:363:PHE:CE1	1:A:364:MET:HB2	0.45	2.47	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:246:PRO:HB2	1:A:346:GLY:HA2	0.45	1.86	2	1
1:A:328:THR:HA	1:A:442:LEU:HD11	0.45	1.88	2	1
1:A:350:ARG:HG3	1:A:354:LYS:CD	0.45	2.41	1	1
1:A:457:LYS:HD3	1:A:473:TYR:CZ	0.45	2.47	1	1
1:A:318:LEU:CB	1:A:322:VAL:CG2	0.45	2.94	4	1
1:A:348:MET:CB	1:A:353:LEU:HD21	0.45	2.40	7	1
1:A:351:GLU:O	1:A:355:SER:OG	0.45	2.29	1	5
1:A:338:GLY:HA3	1:A:349:THR:HA	0.45	1.86	8	1
1:A:363:PHE:CE2	1:A:452:LEU:HB2	0.45	2.46	8	1
1:A:396:ASP:OD2	1:A:443:ARG:NH1	0.45	2.50	3	1
1:A:465:LEU:HD12	1:A:469:LEU:HG	0.45	1.87	2	1
1:A:387:PHE:O	1:A:391:ILE:HD12	0.45	2.11	1	1
1:A:281:ILE:O	1:A:284:GLY:N	0.45	2.50	4	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:318:LEU:HD11	0.45	2.47	4	1
1:A:325:ILE:CD1	1:A:391:ILE:O	0.45	2.63	9	1
1:A:365:GLU:O	1:A:369:GLU:HB2	0.45	2.10	5	1
1:A:348:MET:CE	1:A:352:PHE:CB	0.45	2.94	6	1
1:A:355:SER:C	1:A:356:LEU:HG	0.45	2.32	7	4
1:A:397:ARG:HB2	1:A:400:LEU:CG	0.45	2.42	8	2
1:A:424:ASN:O	1:A:425:HIS:ND1	0.45	2.49	8	2
1:A:317:LEU:CB	1:A:400:LEU:CD2	0.45	2.95	3	1
1:A:230:LYS:HZ2	1:A:384:LEU:CD1	0.45	2.23	3	1
1:A:363:PHE:CZ	1:A:452:LEU:HD21	0.45	2.45	2	1
1:A:216:LYS:NZ	1:A:220:ASP:OD2	0.45	2.49	1	1
1:A:230:LYS:HG3	1:A:332:SER:CB	0.45	2.41	1	1
1:A:418:GLU:C	1:A:418:GLU:CD	0.45	2.76	1	1
1:A:216:LYS:CA	1:A:216:LYS:HE2	0.45	2.41	4	2
1:A:330:LEU:C	1:A:334:MET:SD	0.45	2.95	9	1
1:A:280:ARG:HG3	1:A:281:ILE:H	0.45	1.72	6	1
1:A:325:ILE:HG13	1:A:388:ILE:HG12	0.45	1.87	6	1
1:A:466:HIS:CE1	1:A:471:GLU:H	0.45	2.30	6	1
1:A:236:ILE:HG21	1:A:246:PRO:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:439:MET:O	1:A:442:LEU:HB2	0.45	2.12	7	1
1:A:437:GLN:C	1:A:439:MET:HG3	0.45	2.32	8	6
1:A:230:LYS:HG2	1:A:384:LEU:HD11	0.45	1.88	2	1
1:A:380:ASP:OD1	1:A:382:SER:OG	0.45	2.33	5	4
1:A:377:LEU:HD11	1:A:438:LYS:HG2	0.45	1.88	4	1
1:A:230:LYS:CB	1:A:332:SER:HB3	0.45	2.42	9	1
1:A:387:PHE:CE1	1:A:436:LEU:HD23	0.45	2.46	9	1
1:A:351:GLU:HA	1:A:354:LYS:CG	0.45	2.42	3	1
1:A:379:LEU:HD11	1:A:421:LEU:HD22	0.45	1.88	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:LEU:HD12	1:A:333:LEU:HD13	0.45	1.89	2	1
1:A:421:LEU:HD21	1:A:431:LEU:HB3	0.45	1.87	2	1
1:A:324:GLU:O	1:A:328:THR:CB	0.45	2.62	1	1
1:A:360:PHE:HA	1:A:363:PHE:CE1	0.45	2.47	4	1
1:A:238:THR:O	1:A:238:THR:OG1	0.45	2.34	9	1
1:A:384:LEU:O	1:A:388:ILE:HD12	0.45	2.12	9	1
1:A:384:LEU:O	1:A:387:PHE:CB	0.45	2.64	9	1
1:A:419:LEU:CG	1:A:420:GLN:N	0.45	2.79	9	1
1:A:421:LEU:CD2	1:A:421:LEU:O	0.45	2.63	9	1
1:A:419:LEU:CG	1:A:423:LEU:HD12	0.45	2.42	9	1
1:A:357:ARG:NH2	1:A:360:PHE:CE2	0.45	2.84	5	1
1:A:386:ILE:HG21	1:A:417:LEU:CA	0.45	2.42	6	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:212:ARG:N	0.44	2.27	7	3
1:A:357:ARG:HB2	1:A:360:PHE:CB	0.44	2.42	8	1
1:A:215:ALA:C	1:A:217:HIS:N	0.44	2.69	2	2
1:A:277:VAL:O	1:A:280:ARG:HG2	0.44	2.12	2	1
1:A:331:ALA:N	1:A:334:MET:SD	0.44	2.91	2	1
1:A:456:ILE:HD13	1:A:460:GLU:OE1	0.44	2.13	1	1
1:A:377:LEU:HD12	1:A:379:LEU:CD2	0.44	2.42	9	1
1:A:316:THR:HG23	1:A:399:GLY:O	0.44	2.12	9	1
1:A:341:ILE:CG1	1:A:341:ILE:O	0.44	2.65	5	1
1:A:400:LEU:HD22	1:A:406:ILE:HD13	0.44	1.88	5	1
1:A:214:LEU:HG	1:A:218:LEU:CD2	0.44	2.42	7	1
1:A:338:GLY:C	1:A:339:VAL:HG13	0.44	2.32	8	1
1:A:439:MET:O	1:A:442:LEU:CA	0.44	2.65	6	2
1:A:219:TYR:CE1	1:A:223:ILE:HB	0.44	2.47	3	1
1:A:350:ARG:O	1:A:353:LEU:N	0.44	2.51	3	1
1:A:390:VAL:HG21	1:A:417:LEU:CB	0.44	2.41	3	1
1:A:380:ASP:OD1	1:A:380:ASP:O	0.44	2.35	6	3
1:A:219:TYR:CZ	1:A:386:ILE:HG13	0.44	2.47	2	1
1:A:370:PHE:CE1	1:A:442:LEU:CD2	0.44	3.00	2	1
1:A:292:ALA:O	1:A:296:ILE:N	0.44	2.43	1	3
1:A:210:ASP:OD2	1:A:210:ASP:C	0.44	2.55	4	1
1:A:396:ASP:CG	1:A:397:ARG:NH1	0.44	2.70	9	1
1:A:377:LEU:CD1	1:A:438:LYS:CE	0.44	2.92	5	1
1:A:325:ILE:HD13	1:A:392:ILE:HG23	0.44	1.89	7	1
1:A:370:PHE:CG	1:A:441:ASP:HB2	0.44	2.47	7	1
1:A:247:PHE:CA	1:A:346:GLY:HA3	0.44	2.42	2	3
1:A:222:TYR:CE1	1:A:385:ALA:HA	0.44	2.47	9	2
1:A:217:HIS:HA	1:A:220:ASP:HB2	0.44	1.89	3	2
1:A:331:ALA:CB	1:A:371:ALA:HA	0.44	2.39	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:414:LEU:HD21	1:A:432:PHE:HZ	0.44	1.72	2	1
1:A:276:GLU:HG3	1:A:277:VAL:N	0.44	2.27	5	2
1:A:432:PHE:CE1	1:A:436:LEU:HD11	0.44	2.48	9	1
1:A:329:MET:O	1:A:332:SER:HB3	0.44	2.13	5	1
1:A:335:ASN:ND2	1:A:336:LYS:N	0.44	2.58	5	1
1:A:395:GLY:N	1:A:406:ILE:HG21	0.44	2.27	6	1
1:A:467:PRO:O	1:A:468:LEU:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:354:LYS:HG3	1:A:361:GLY:O	0.44	2.12	7	1
1:A:340:LEU:C	1:A:341:ILE:HG23	0.44	2.32	8	3
1:A:317:LEU:CD1	1:A:392:ILE:HG12	0.44	2.43	3	2
1:A:359:PRO:HB2	1:A:456:ILE:HD13	0.44	1.88	2	1
1:A:370:PHE:CE1	1:A:374:PHE:HB2	0.44	2.47	2	1
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ASP:OD2	0.44	2.36	1	1
1:A:218:LEU:O	1:A:222:TYR:HB3	0.44	2.12	9	1
1:A:380:ASP:OD2	1:A:383:ASP:OD2	0.44	2.34	9	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:392:ILE:HG13	0.44	2.48	9	1
1:A:281:ILE:HG23	1:A:285:CYS:SG	0.44	2.52	5	1
1:A:453:LEU:HD22	1:A:473:TYR:CZ	0.44	2.48	5	1
1:A:317:LEU:HD21	1:A:406:ILE:CG1	0.44	2.43	6	1
1:A:299:TYR:CE2	1:A:388:ILE:CG2	0.44	3.01	7	2
1:A:282:PHE:CG	1:A:360:PHE:CZ	0.44	3.03	7	1
1:A:465:LEU:HG	1:A:469:LEU:HD12	0.44	1.89	7	2
1:A:456:ILE:C	1:A:458:LYS:N	0.44	2.70	2	4
1:A:233:ALA:HB1	1:A:340:LEU:HG	0.44	1.90	8	2
1:A:311:LEU:O	1:A:315:VAL:CG2	0.44	2.66	2	1
1:A:417:LEU:CD2	1:A:418:GLU:N	0.44	2.79	1	1
1:A:370:PHE:CD2	1:A:445:ILE:HG12	0.44	2.47	1	1
1:A:446:VAL:C	1:A:448:GLU:N	0.44	2.71	4	4
1:A:453:LEU:O	1:A:457:LYS:HB2	0.44	2.13	4	1
1:A:216:LYS:C	1:A:216:LYS:CD	0.44	2.86	9	1
1:A:282:PHE:CB	1:A:360:PHE:CD2	0.44	3.01	9	1
1:A:432:PHE:CD1	1:A:433:ALA:N	0.44	2.85	9	2
1:A:325:ILE:CG2	1:A:388:ILE:HG12	0.44	2.41	5	1
1:A:393:LEU:O	1:A:410:GLN:HG3	0.44	2.11	6	2
1:A:222:TYR:CE2	1:A:388:ILE:CG2	0.44	2.99	2	1
1:A:306:PHE:CA	1:A:309:LEU:HG	0.44	2.42	2	1
1:A:351:GLU:HA	1:A:354:LYS:HD2	0.44	1.89	2	1
1:A:444:GLN:O	1:A:445:ILE:C	0.44	2.55	2	1
1:A:236:ILE:HD11	1:A:340:LEU:HD12	0.44	1.89	1	1
1:A:233:ALA:HA	1:A:340:LEU:HG	0.44	1.90	9	1
1:A:214:LEU:HG	1:A:218:LEU:HD13	0.44	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:327:TYR:CG	1:A:446:VAL:CG2	0.44	3.00	5	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HD3	0.44	2.48	5	1
1:A:370:PHE:HD2	1:A:445:ILE:HD11	0.44	1.63	7	1
1:A:371:ALA:O	1:A:375:ASN:N	0.44	2.31	8	1
1:A:423:LEU:O	1:A:426:PRO:HD3	0.44	2.13	8	1
1:A:276:GLU:CD	1:A:278:ALA:HB3	0.44	2.32	3	1
1:A:460:GLU:CD	1:A:464:SER:CB	0.44	2.86	3	1
1:A:293:VAL:CA	1:A:322:VAL:HG21	0.44	2.42	2	1
1:A:211:LEU:CG	1:A:419:LEU:HD22	0.44	2.42	2	1
1:A:278:ALA:HB1	1:A:360:PHE:HB3	0.44	1.89	1	1
1:A:370:PHE:CE2	1:A:445:ILE:HG12	0.44	2.48	1	1
1:A:237:LEU:HD13	1:A:340:LEU:CD1	0.44	2.42	5	1
1:A:360:PHE:CE1	1:A:456:ILE:HG21	0.44	2.47	5	1
1:A:453:LEU:HD12	1:A:457:LYS:HB3	0.44	1.88	5	1
1:A:277:VAL:O	1:A:280:ARG:HG3	0.44	2.12	6	1
1:A:306:PHE:O	1:A:314:GLN:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:226:PHE:CE2	1:A:329:MET:SD	0.44	3.11	3	1
1:A:282:PHE:O	1:A:282:PHE:CD1	0.44	2.71	2	1
1:A:366:PRO:HB2	1:A:445:ILE:CG2	0.44	2.42	2	1
1:A:419:LEU:C	1:A:421:LEU:H	0.44	2.15	2	1
1:A:357:ARG:C	1:A:359:PRO:HD2	0.44	2.33	1	2
1:A:325:ILE:HG12	1:A:388:ILE:CD1	0.44	2.42	6	1
1:A:390:VAL:HG22	1:A:410:GLN:OE1	0.44	2.13	8	1
1:A:226:PHE:CZ	1:A:229:THR:HG22	0.44	2.48	3	1
1:A:335:ASN:O	1:A:335:ASN:OD1	0.44	2.36	3	1
1:A:406:ILE:C	1:A:408:ASP:N	0.44	2.71	3	2
1:A:276:GLU:OE1	1:A:357:ARG:HD3	0.44	2.12	2	1
1:A:430:GLN:O	1:A:431:LEU:C	0.44	2.56	2	5
1:A:439:MET:CA	1:A:442:LEU:HB2	0.44	2.43	2	1
1:A:393:LEU:HB2	1:A:406:ILE:O	0.44	2.13	4	1
1:A:419:LEU:O	1:A:423:LEU:HB2	0.44	2.13	9	1
1:A:397:ARG:N	1:A:397:ARG:CD	0.44	2.78	6	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:211:LEU:C	0.43	2.33	7	1
1:A:453:LEU:O	1:A:457:LYS:CB	0.43	2.66	8	4
1:A:350:ARG:O	1:A:351:GLU:C	0.43	2.56	3	1
1:A:368:PHE:N	1:A:368:PHE:CD1	0.43	2.86	2	1
1:A:394:SER:OG	1:A:397:ARG:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:313:ASP:CA	1:A:401:LEU:HD12	0.43	2.42	1	1
1:A:400:LEU:HD13	1:A:403:VAL:HG23	0.43	1.89	9	1
1:A:422:LYS:HA	1:A:426:PRO:HA	0.43	1.90	9	1
1:A:223:ILE:CG2	1:A:224:LYS:HD2	0.43	2.43	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:TYR:HD2	1:A:299:TYR:CE2	0.43	2.31	6	1
1:A:360:PHE:CD1	1:A:456:ILE:CG1	0.43	3.01	6	1
1:A:299:TYR:OH	1:A:385:ALA:O	0.43	2.27	7	2
1:A:306:PHE:CE1	1:A:392:ILE:HB	0.43	2.48	7	1
1:A:287:PHE:CD1	1:A:291:GLU:HG3	0.43	2.48	3	2
1:A:437:GLN:O	1:A:439:MET:HG3	0.43	2.12	2	1
1:A:288:ARG:NH2	1:A:291:GLU:OE2	0.43	2.51	1	1
1:A:325:ILE:HG13	1:A:388:ILE:CG1	0.43	2.42	1	3
1:A:219:TYR:CE2	1:A:382:SER:CB	0.43	3.01	4	1
1:A:300:ALA:HB1	1:A:306:PHE:CZ	0.43	2.48	4	1
1:A:355:SER:C	1:A:356:LEU:CG	0.43	2.86	4	1
1:A:417:LEU:O	1:A:417:LEU:HD22	0.43	2.13	5	2
1:A:357:ARG:CD	1:A:360:PHE:HB2	0.43	2.43	6	1
1:A:320:TYR:HB2	1:A:397:ARG:CD	0.43	2.44	7	1
1:A:355:SER:OG	1:A:355:SER:O	0.43	2.30	8	1
1:A:356:LEU:HD12	1:A:361:GLY:HA3	0.43	1.90	8	1
1:A:247:PHE:N	1:A:346:GLY:HA3	0.43	2.27	6	2
1:A:334:MET:CE	1:A:367:LYS:HG2	0.43	2.43	3	1
1:A:414:LEU:CD2	1:A:417:LEU:HD12	0.43	2.41	3	1
1:A:460:GLU:C	1:A:462:ASP:N	0.43	2.69	2	3
1:A:217:HIS:O	1:A:220:ASP:HB3	0.43	2.13	2	1
1:A:406:ILE:O	1:A:408:ASP:N	0.43	2.52	9	1
1:A:334:MET:HE2	1:A:367:LYS:O	0.43	2.13	8	1
1:A:421:LEU:HD23	1:A:422:LYS:N	0.43	2.29	8	1
1:A:247:PHE:HB3	1:A:346:GLY:HA2	0.43	1.90	3	1
1:A:354:LYS:C	1:A:354:LYS:HD3	0.43	2.34	3	1
1:A:421:LEU:HD11	1:A:431:LEU:CD1	0.43	2.18	3	1
1:A:299:TYR:CG	1:A:300:ALA:N	0.43	2.84	2	2
1:A:394:SER:HB2	1:A:406:ILE:CG2	0.43	2.42	1	1
1:A:223:ILE:O	1:A:223:ILE:CG2	0.43	2.67	1	1
1:A:276:GLU:O	1:A:278:ALA:N	0.43	2.50	9	1
1:A:353:LEU:HD13	1:A:364:MET:CB	0.43	2.37	9	1
1:A:389:ALA:HA	1:A:392:ILE:CG2	0.43	2.42	9	1
1:A:218:LEU:O	1:A:222:TYR:CD2	0.43	2.70	5	1
1:A:435:LEU:HA	1:A:438:LYS:CE	0.43	2.43	6	1
1:A:444:GLN:C	1:A:444:GLN:CD	0.43	2.76	6	1
1:A:450:VAL:O	1:A:451:GLN:C	0.43	2.57	6	1
1:A:347:PHE:O	1:A:347:PHE:CG	0.43	2.71	7	2
1:A:341:ILE:CG2	1:A:348:MET:H	0.43	2.26	7	4
1:A:379:LEU:CD1	1:A:425:HIS:ND1	0.43	2.81	7	1
1:A:374:PHE:O	1:A:377:LEU:HG	0.43	2.13	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:457:LYS:HE3	1:A:473:TYR:CE2	0.43	2.48	3	1
1:A:309:LEU:HB3	1:A:406:ILE:HD11	0.43	1.91	2	1
1:A:313:ASP:OD2	1:A:402:ASN:O	0.43	2.37	2	1
1:A:317:LEU:HA	1:A:397:ARG:CD	0.43	2.44	2	1
1:A:434:LYS:O	1:A:435:LEU:C	0.43	2.56	6	5
1:A:393:LEU:HB2	1:A:410:GLN:HG2	0.43	1.91	9	2
1:A:317:LEU:O	1:A:321:GLY:HA3	0.43	2.14	9	1
1:A:317:LEU:CD1	1:A:392:ILE:O	0.43	2.66	9	1
1:A:229:THR:O	1:A:333:LEU:CD1	0.43	2.67	5	1
1:A:237:LEU:O	1:A:238:THR:CG2	0.43	2.67	5	1
1:A:414:LEU:HD13	1:A:432:PHE:CZ	0.43	2.49	5	1
1:A:414:LEU:CD2	1:A:432:PHE:CD2	0.43	3.01	3	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:348:MET:HG3	0.43	2.43	4	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:TYR:N	0.43	2.45	9	1
1:A:371:ALA:O	1:A:375:ASN:CB	0.43	2.67	9	1
1:A:411:ASP:O	1:A:415:GLN:NE2	0.43	2.46	5	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:392:ILE:HG21	0.43	2.47	6	1
1:A:218:LEU:CD1	1:A:389:ALA:CB	0.43	2.97	8	1
1:A:284:GLY:O	1:A:286:GLN:N	0.43	2.51	3	1
1:A:387:PHE:O	1:A:390:VAL:HB	0.43	2.13	3	1
1:A:406:ILE:HG22	1:A:407:GLU:N	0.43	2.29	3	1
1:A:364:MET:O	1:A:367:LYS:N	0.43	2.52	1	1
1:A:374:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HB3	0.43	2.48	1	2
1:A:379:LEU:HB3	1:A:425:HIS:CE1	0.43	2.49	5	1
1:A:314:GLN:HA	1:A:317:LEU:CD2	0.43	2.43	3	1
1:A:464:SER:O	1:A:465:LEU:C	0.43	2.55	9	3
1:A:277:VAL:HG13	1:A:280:ARG:CZ	0.43	2.43	2	1
1:A:216:LYS:HZ3	1:A:220:ASP:CG	0.43	2.16	1	1
1:A:381:ASP:O	1:A:385:ALA:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:453:LEU:HA	1:A:456:ILE:CD1	0.43	2.44	4	1
1:A:444:GLN:O	1:A:447:THR:CG2	0.43	2.64	9	1
1:A:390:VAL:CG1	1:A:410:GLN:NE2	0.43	2.80	5	1
1:A:367:LYS:NZ	1:A:449:HIS:CB	0.43	2.82	7	1
1:A:441:ASP:O	1:A:445:ILE:HB	0.43	2.14	8	2
1:A:234:ARG:NH1	1:A:340:LEU:CD2	0.43	2.82	8	1
1:A:369:GLU:O	1:A:373:LYS:HG3	0.43	2.14	8	1
1:A:383:ASP:OD1	1:A:420:GLN:HG3	0.43	2.13	1	2
1:A:230:LYS:HD2	1:A:332:SER:CB	0.43	2.44	3	1
1:A:305:GLY:HA3	1:A:409:ILE:HD12	0.43	1.90	4	1
1:A:320:TYR:CB	1:A:397:ARG:HG3	0.43	2.42	4	1
1:A:383:ASP:OD2	1:A:425:HIS:CD2	0.43	2.72	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:469:LEU:HD23	1:A:473:TYR:H	0.43	1.74	6	1
1:A:370:PHE:HB2	1:A:445:ILE:CD1	0.43	2.44	8	2
1:A:351:GLU:O	1:A:355:SER:HB3	0.43	2.14	6	2
1:A:228:LEU:HD22	1:A:333:LEU:HD11	0.43	1.90	3	1
1:A:325:ILE:CG2	1:A:388:ILE:HG13	0.43	2.43	3	2
1:A:230:LYS:O	1:A:234:ARG:HD3	0.43	2.14	2	1
1:A:247:PHE:HB3	1:A:346:GLY:N	0.43	2.29	2	1
1:A:293:VAL:HB	1:A:322:VAL:HG21	0.43	1.90	2	1
1:A:341:ILE:HG21	1:A:348:MET:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:393:LEU:CG	1:A:409:ILE:CG2	0.43	2.96	9	2
1:A:233:ALA:CA	1:A:340:LEU:HG	0.43	2.44	9	1
1:A:390:VAL:CG1	1:A:410:GLN:OE1	0.43	2.66	9	1
1:A:449:HIS:C	1:A:449:HIS:CD2	0.43	2.91	5	1
1:A:453:LEU:CD2	1:A:473:TYR:CE2	0.43	3.01	5	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:223:ILE:HD13	0.42	2.49	7	1
1:A:276:GLU:OE1	1:A:278:ALA:CB	0.42	2.66	7	1
1:A:299:TYR:CD1	1:A:299:TYR:O	0.42	2.71	8	1
1:A:452:LEU:HG	1:A:453:LEU:N	0.42	2.29	8	1
1:A:313:ASP:HB2	1:A:401:LEU:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:331:ALA:C	1:A:371:ALA:CB	0.42	2.87	1	1
1:A:374:PHE:O	1:A:376:ALA:N	0.42	2.52	1	1
1:A:320:TYR:O	1:A:324:GLU:OE2	0.42	2.37	4	1
1:A:296:ILE:HD12	1:A:296:ILE:H	0.42	1.74	9	1
1:A:354:LYS:CE	1:A:365:GLU:HB2	0.42	2.44	9	1
1:A:396:ASP:OD1	1:A:397:ARG:CD	0.42	2.66	9	1
1:A:389:ALA:O	1:A:413:LEU:HD13	0.42	2.14	9	1
1:A:367:LYS:HG3	1:A:445:ILE:CG2	0.42	2.44	5	1
1:A:348:MET:CE	1:A:352:PHE:HB3	0.42	2.43	6	1
1:A:278:ALA:CA	1:A:356:LEU:HD13	0.42	2.43	6	1
1:A:378:GLU:OE1	1:A:384:LEU:CD1	0.42	2.67	7	1
1:A:309:LEU:CB	1:A:314:GLN:CD	0.42	2.86	2	1
1:A:318:LEU:C	1:A:320:TYR:N	0.42	2.71	2	1
1:A:357:ARG:C	1:A:362:ASP:OD1	0.42	2.58	2	1
1:A:466:HIS:ND1	1:A:469:LEU:N	0.42	2.67	2	1
1:A:295:GLU:O	1:A:296:ILE:C	0.42	2.56	1	2
1:A:365:GLU:HA	1:A:365:GLU:OE1	0.42	2.14	4	1
1:A:453:LEU:HA	1:A:456:ILE:HD11	0.42	1.90	4	1
1:A:353:LEU:HD21	1:A:368:PHE:CZ	0.42	2.49	9	1
1:A:339:VAL:CG1	1:A:353:LEU:HD11	0.42	2.40	5	1
1:A:306:PHE:C	1:A:309:LEU:HG	0.42	2.34	6	1
1:A:387:PHE:O	1:A:390:VAL:CG2	0.42	2.48	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:323:HIS:O	1:A:327:TYR:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:221:SER:HB3	1:A:302:SER:HB2	0.42	1.91	4	3
1:A:456:ILE:HG22	1:A:457:LYS:N	0.42	2.27	7	3
1:A:211:LEU:CG	1:A:419:LEU:HD13	0.42	2.40	5	2
1:A:236:ILE:O	1:A:246:PRO:HD3	0.42	2.13	2	1
1:A:232:LYS:O	1:A:236:ILE:HG12	0.42	2.15	1	1
1:A:394:SER:HA	1:A:397:ARG:HG2	0.42	1.89	1	1
1:A:327:TYR:O	1:A:370:PHE:CZ	0.42	2.72	4	1
1:A:279:ILE:O	1:A:283:GLN:NE2	0.42	2.49	5	1
1:A:350:ARG:CG	1:A:354:LYS:CD	0.42	2.97	5	1
1:A:378:GLU:OE2	1:A:384:LEU:CD2	0.42	2.67	5	1
1:A:354:LYS:CG	1:A:362:ASP:HA	0.42	2.44	8	1
1:A:354:LYS:CE	1:A:365:GLU:OE1	0.42	2.68	8	1
1:A:247:PHE:CE1	1:A:249:ILE:HG13	0.42	2.49	3	1
1:A:283:GLN:C	1:A:283:GLN:OE1	0.42	2.58	2	1
1:A:442:LEU:C	1:A:444:GLN:H	0.42	2.17	2	1
1:A:359:PRO:HB3	1:A:456:ILE:HD12	0.42	1.91	2	1
1:A:432:PHE:HA	1:A:435:LEU:HB3	0.42	1.90	1	1
1:A:418:GLU:HB2	1:A:432:PHE:CB	0.42	2.43	4	2
1:A:446:VAL:O	1:A:448:GLU:N	0.42	2.53	6	2
1:A:248:VAL:HG22	1:A:346:GLY:HA3	0.42	1.90	9	1
1:A:402:ASN:C	1:A:406:ILE:HD11	0.42	2.35	9	1
1:A:317:LEU:HD12	1:A:406:ILE:HG21	0.42	1.91	9	1
1:A:326:ILE:HG22	1:A:330:LEU:HD11	0.42	1.91	5	1
1:A:416:ALA:O	1:A:417:LEU:C	0.42	2.57	5	1
1:A:421:LEU:HA	1:A:425:HIS:CE1	0.42	2.48	7	1
1:A:348:MET:HG2	1:A:353:LEU:HD21	0.42	1.91	3	1
1:A:388:ILE:HG23	1:A:389:ALA:N	0.42	2.30	3	1
1:A:453:LEU:HA	1:A:456:ILE:HG22	0.42	1.91	3	2
1:A:306:PHE:CZ	1:A:318:LEU:HD11	0.42	2.50	4	1
1:A:453:LEU:CD2	1:A:457:LYS:HG3	0.42	2.40	4	1
1:A:225:SER:HB2	1:A:299:TYR:CD2	0.42	2.48	5	1
1:A:290:VAL:O	1:A:294:GLN:HG3	0.42	2.14	5	1
1:A:234:ARG:NH1	1:A:334:MET:O	0.42	2.51	5	1
1:A:370:PHE:CE1	1:A:441:ASP:HB2	0.42	2.49	7	1
1:A:465:LEU:CD2	1:A:465:LEU:C	0.42	2.78	1	2
1:A:292:ALA:O	1:A:293:VAL:C	0.42	2.58	9	4
1:A:300:ALA:O	1:A:303:ILE:N	0.42	2.52	3	1
1:A:472:ILE:CD1	1:A:473:TYR:N	0.42	2.77	2	2
1:A:320:TYR:O	1:A:397:ARG:HD2	0.42	2.15	1	1
1:A:448:GLU:C	1:A:450:VAL:N	0.42	2.72	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:403:VAL:HA	1:A:406:ILE:CG1	0.42	2.45	9	1
1:A:221:SER:OG	1:A:302:SER:HB2	0.42	2.10	5	1
1:A:293:VAL:HG22	1:A:322:VAL:CB	0.42	2.39	5	1
1:A:412:ASN:O	1:A:415:GLN:N	0.42	2.53	5	1
1:A:465:LEU:HG	1:A:466:HIS:N	0.42	2.30	1	3
1:A:220:ASP:O	1:A:224:LYS:HD2	0.42	2.13	8	2
1:A:222:TYR:CD1	1:A:385:ALA:HA	0.42	2.49	8	1
1:A:418:GLU:O	1:A:418:GLU:CD	0.42	2.57	1	1
1:A:363:PHE:CD1	1:A:363:PHE:O	0.42	2.73	9	1
1:A:236:ILE:C	1:A:238:THR:N	0.42	2.71	5	1
1:A:311:LEU:HD12	1:A:312:ASN:ND2	0.42	2.29	5	1
1:A:341:ILE:HG23	1:A:347:PHE:CA	0.42	2.39	5	1
1:A:473:TYR:CD1	1:A:473:TYR:C	0.42	2.92	7	1
1:A:214:LEU:O	1:A:217:HIS:HB3	0.42	2.14	3	2
1:A:362:ASP:OD1	1:A:365:GLU:HB3	0.42	2.14	3	1
1:A:379:LEU:CG	1:A:435:LEU:HD11	0.42	2.45	3	1
1:A:422:LYS:CG	1:A:426:PRO:HB3	0.42	2.44	9	2
1:A:353:LEU:CD1	1:A:364:MET:CB	0.42	2.97	2	1
1:A:359:PRO:HB3	1:A:456:ILE:CD1	0.42	2.42	2	1
1:A:460:GLU:O	1:A:461:THR:C	0.42	2.58	2	1
1:A:326:ILE:HG22	1:A:330:LEU:HD21	0.42	1.85	1	1
1:A:278:ALA:CB	1:A:360:PHE:CB	0.42	2.98	1	1
1:A:462:ASP:O	1:A:463:MET:O	0.42	2.38	1	1
1:A:211:LEU:HD22	1:A:419:LEU:HD21	0.42	1.87	4	1
1:A:432:PHE:CE1	1:A:436:LEU:CD1	0.42	3.02	9	1
1:A:348:MET:HE3	1:A:352:PHE:HB3	0.42	1.92	6	1
1:A:328:THR:HG21	1:A:387:PHE:CD1	0.42	2.50	3	1
1:A:397:ARG:NH1	1:A:443:ARG:HD2	0.42	2.30	3	1
1:A:230:LYS:HG3	1:A:332:SER:HB3	0.42	1.89	1	1
1:A:374:PHE:C	1:A:376:ALA:H	0.42	2.18	1	2
1:A:317:LEU:CD2	1:A:317:LEU:C	0.42	2.86	9	1
1:A:222:TYR:HB3	1:A:385:ALA:HB1	0.42	1.90	5	1
1:A:285:CYS:SG	1:A:348:MET:SD	0.42	3.17	5	1
1:A:285:CYS:HB3	1:A:363:PHE:CE1	0.42	2.50	6	1
1:A:327:TYR:OH	1:A:449:HIS:NE2	0.42	2.51	7	1
1:A:390:VAL:HA	1:A:410:GLN:OE1	0.42	2.14	8	1
1:A:230:LYS:NZ	1:A:379:LEU:O	0.42	2.52	3	1
1:A:323:HIS:NE2	1:A:324:GLU:HG2	0.42	2.30	3	1
1:A:334:MET:SD	1:A:368:PHE:CE1	0.42	3.12	3	1
1:A:320:TYR:O	1:A:396:ASP:OD2	0.42	2.37	3	2
1:A:335:ASN:O	1:A:336:LYS:CB	0.42	2.68	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:422:LYS:CD	1:A:426:PRO:HB3	0.42	2.45	4	2
1:A:350:ARG:HA	1:A:353:LEU:CG	0.42	2.45	9	1
1:A:391:ILE:O	1:A:391:ILE:HG22	0.42	2.14	9	1
1:A:282:PHE:CD2	1:A:360:PHE:CE2	0.41	3.08	8	1
1:A:369:GLU:O	1:A:370:PHE:C	0.41	2.59	8	1
1:A:425:HIS:N	1:A:426:PRO:HD3	0.41	2.30	8	1
1:A:456:ILE:HG13	1:A:460:GLU:HA	0.41	1.92	3	1
1:A:393:LEU:HA	1:A:393:LEU:HD13	0.41	1.73	2	1
1:A:471:GLU:O	1:A:472:ILE:C	0.41	2.56	2	1
1:A:380:ASP:C	1:A:382:SER:H	0.41	2.17	4	1
1:A:375:ASN:HD22	1:A:375:ASN:N	0.41	2.13	9	1
1:A:380:ASP:OD1	1:A:383:ASP:OD1	0.41	2.37	9	1
1:A:317:LEU:HA	1:A:397:ARG:HG3	0.41	1.91	6	1
1:A:466:HIS:ND1	1:A:469:LEU:HG	0.41	2.31	7	2
1:A:452:LEU:O	1:A:456:ILE:HG13	0.41	2.14	8	1
1:A:287:PHE:O	1:A:291:GLU:OE1	0.41	2.38	3	2
1:A:354:LYS:CB	1:A:362:ASP:CB	0.41	2.98	3	1
1:A:276:GLU:HG2	1:A:279:ILE:H	0.41	1.76	2	1
1:A:374:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HG2	0.41	2.50	2	1
1:A:467:PRO:C	1:A:469:LEU:H	0.41	2.18	2	1
1:A:247:PHE:C	1:A:346:GLY:HA3	0.41	2.35	6	2
1:A:315:VAL:HG12	1:A:316:THR:N	0.41	2.30	1	1
1:A:364:MET:CE	1:A:368:PHE:HB3	0.41	2.45	1	1
1:A:334:MET:CE	1:A:368:PHE:CD1	0.41	3.03	4	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:341:ILE:HD11	0.41	2.45	4	1
1:A:356:LEU:O	1:A:357:ARG:O	0.41	2.38	4	1
1:A:289:SER:OG	1:A:326:ILE:HD13	0.41	2.15	5	1
1:A:393:LEU:O	1:A:406:ILE:CG2	0.41	2.65	5	1
1:A:394:SER:OG	1:A:396:ASP:OD1	0.41	2.38	5	1
1:A:296:ILE:HG22	1:A:318:LEU:HD11	0.41	1.92	6	1
1:A:379:LEU:HD13	1:A:421:LEU:CD2	0.41	2.45	6	1
1:A:334:MET:HE2	1:A:367:LYS:HB3	0.41	1.90	1	3
1:A:338:GLY:O	1:A:339:VAL:HG13	0.41	2.15	8	1
1:A:332:SER:OG	1:A:378:GLU:OE2	0.41	2.37	8	1
1:A:435:LEU:C	1:A:435:LEU:HD12	0.41	2.36	8	1
1:A:320:TYR:HB3	1:A:397:ARG:CZ	0.41	2.45	8	1
1:A:230:LYS:HB3	1:A:332:SER:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:332:SER:OG	1:A:378:GLU:CD	0.41	2.58	4	1
1:A:339:VAL:HG12	1:A:348:MET:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:323:HIS:CE1	1:A:324:GLU:OE2	0.41	2.73	5	1
1:A:379:LEU:HD13	1:A:425:HIS:CE1	0.41	2.49	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:THR:O	1:A:233:ALA:HB2	0.41	2.16	8	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:348:MET:SD	0.41	3.08	2	1
1:A:455:VAL:O	1:A:455:VAL:CG1	0.41	2.69	2	1
1:A:421:LEU:O	1:A:425:HIS:CD2	0.41	2.73	1	1
1:A:371:ALA:C	1:A:373:LYS:N	0.41	2.72	6	2
1:A:282:PHE:CZ	1:A:360:PHE:CE2	0.41	3.08	4	1
1:A:393:LEU:HD21	1:A:409:ILE:CG2	0.41	2.46	9	1
1:A:397:ARG:H	1:A:400:LEU:HD12	0.41	1.75	6	1
1:A:387:PHE:O	1:A:388:ILE:C	0.41	2.59	7	1
1:A:276:GLU:CD	1:A:357:ARG:HG3	0.41	2.35	8	1
1:A:393:LEU:CD2	1:A:409:ILE:CG2	0.41	2.98	2	1
1:A:249:ILE:HG23	1:A:348:MET:CG	0.41	2.45	4	1
1:A:363:PHE:CD2	1:A:449:HIS:CE1	0.41	3.09	4	1
1:A:297:THR:HG23	1:A:301:LYS:HD2	0.41	1.92	9	1
1:A:306:PHE:O	1:A:309:LEU:CD1	0.41	2.68	9	1
1:A:465:LEU:CD2	1:A:465:LEU:N	0.41	2.83	6	1
1:A:314:GLN:O	1:A:317:LEU:CG	0.41	2.69	7	1
1:A:352:PHE:O	1:A:355:SER:HB3	0.41	2.15	8	1
1:A:309:LEU:O	1:A:402:ASN:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:364:MET:N	1:A:366:PRO:HD2	0.41	2.31	1	1
1:A:374:PHE:HA	1:A:377:LEU:HD23	0.41	1.93	1	1
1:A:387:PHE:CE2	1:A:436:LEU:CD2	0.41	2.98	1	1
1:A:418:GLU:CB	1:A:432:PHE:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:390:VAL:HG13	1:A:410:GLN:OE1	0.41	2.15	9	1
1:A:439:MET:HA	1:A:442:LEU:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:323:HIS:NE2	1:A:324:GLU:HG3	0.41	2.31	5	1
1:A:228:LEU:CD1	1:A:233:ALA:HB2	0.41	2.45	6	1
1:A:249:ILE:O	1:A:249:ILE:CG2	0.41	2.69	6	1
1:A:325:ILE:HG12	1:A:388:ILE:HD11	0.41	1.92	6	1
1:A:315:VAL:O	1:A:319:LYS:N	0.41	2.41	7	1
1:A:389:ALA:HA	1:A:392:ILE:HD12	0.41	1.92	8	1
1:A:222:TYR:CD2	1:A:299:TYR:CZ	0.41	3.08	2	1
1:A:420:GLN:O	1:A:420:GLN:CG	0.41	2.67	6	2
1:A:396:ASP:OD2	1:A:443:ARG:NH2	0.41	2.54	7	1
1:A:284:GLY:O	1:A:287:PHE:N	0.41	2.54	3	1
1:A:301:LYS:HA	1:A:307:VAL:CG2	0.41	2.46	3	1
1:A:293:VAL:HA	1:A:318:LEU:CD2	0.41	2.46	2	1
1:A:367:LYS:HE3	1:A:445:ILE:HG22	0.41	1.91	2	1
1:A:325:ILE:HG22	1:A:326:ILE:N	0.41	2.30	1	1
1:A:338:GLY:C	1:A:368:PHE:CZ	0.41	2.94	4	1
1:A:384:LEU:C	1:A:387:PHE:CD1	0.41	2.94	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:374:PHE:CE1	1:A:438:LYS:HB3	0.41	2.50	4	1
1:A:377:LEU:HD12	1:A:379:LEU:CG	0.41	2.46	9	1
1:A:224:LYS:O	1:A:225:SER:C	0.41	2.59	5	1
1:A:318:LEU:CB	1:A:322:VAL:CG1	0.41	2.99	5	1
1:A:249:ILE:HG23	1:A:348:MET:HA	0.41	1.93	7	1
1:A:350:ARG:HD3	1:A:365:GLU:CD	0.41	2.36	7	1
1:A:379:LEU:HD12	1:A:425:HIS:NE2	0.41	2.31	7	1
1:A:358:LYS:O	1:A:362:ASP:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:393:LEU:CD1	1:A:409:ILE:C	0.41	2.89	8	1
1:A:379:LEU:CD2	1:A:421:LEU:HG	0.41	2.45	8	1
1:A:397:ARG:HB2	1:A:400:LEU:HD11	0.41	1.92	8	1
1:A:218:LEU:HD23	1:A:218:LEU:N	0.41	2.31	3	1
1:A:323:HIS:CE1	1:A:443:ARG:NH1	0.41	2.89	3	1
1:A:325:ILE:HG13	1:A:391:ILE:CG2	0.41	2.46	3	1
1:A:394:SER:OG	1:A:410:GLN:CD	0.41	2.59	3	1
1:A:236:ILE:CD1	1:A:340:LEU:HD11	0.41	2.45	2	1
1:A:449:HIS:NE2	1:A:450:VAL:HG23	0.41	2.30	2	1
1:A:235:ALA:CA	1:A:239:GLY:O	0.41	2.69	4	1
1:A:249:ILE:HA	1:A:347:PHE:O	0.41	2.15	9	1
1:A:277:VAL:HG13	1:A:356:LEU:HB2	0.41	1.92	9	1
1:A:339:VAL:HG23	1:A:368:PHE:CE1	0.41	2.50	9	1
1:A:375:ASN:O	1:A:378:GLU:HG2	0.41	2.15	9	1
1:A:230:LYS:CB	1:A:384:LEU:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:435:LEU:O	1:A:438:LYS:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:456:ILE:O	1:A:457:LYS:C	0.41	2.59	9	1
1:A:380:ASP:CG	1:A:383:ASP:OD2	0.41	2.59	9	1
1:A:317:LEU:CA	1:A:400:LEU:CD2	0.41	2.99	9	1
1:A:460:GLU:OE2	1:A:464:SER:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:422:LYS:HA	1:A:426:PRO:CA	0.41	2.45	9	1
1:A:237:LEU:C	1:A:238:THR:CG2	0.41	2.78	5	1
1:A:418:GLU:O	1:A:422:LYS:HG3	0.41	2.16	5	1
1:A:292:ALA:CB	1:A:326:ILE:CG1	0.41	2.98	6	1
1:A:403:VAL:HG13	1:A:403:VAL:O	0.41	2.15	6	1
1:A:431:LEU:HA	1:A:431:LEU:HD22	0.41	1.82	6	1
1:A:325:ILE:HD11	1:A:391:ILE:HG22	0.41	1.91	7	1
1:A:390:VAL:HG22	1:A:414:LEU:HA	0.41	1.93	3	1
1:A:286:GLN:NE2	1:A:449:HIS:CE1	0.41	2.89	2	1
1:A:456:ILE:CG1	1:A:460:GLU:HA	0.41	2.46	2	1
1:A:230:LYS:HG2	1:A:332:SER:HB3	0.41	1.91	1	1
1:A:359:PRO:HA	1:A:452:LEU:CD1	0.41	2.46	4	1
1:A:228:LEU:HD12	1:A:333:LEU:HD12	0.41	1.91	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:LEU:CG	1:A:419:LEU:HD11	0.41	2.45	6	1
1:A:325:ILE:HG21	1:A:388:ILE:CG1	0.40	2.45	3	1
1:A:218:LEU:CD1	1:A:413:LEU:HD22	0.40	2.46	3	1
1:A:320:TYR:HB3	1:A:397:ARG:CG	0.40	2.45	4	1
1:A:237:LEU:HD12	1:A:246:PRO:HG3	0.40	1.93	5	1
1:A:318:LEU:HB3	1:A:322:VAL:CG1	0.40	2.46	5	1
1:A:378:GLU:OE2	1:A:384:LEU:HD22	0.40	2.16	5	1
1:A:421:LEU:O	1:A:425:HIS:C	0.40	2.60	5	1
1:A:280:ARG:O	1:A:283:GLN:HG2	0.40	2.16	8	1
1:A:417:LEU:HD21	1:A:435:LEU:HD23	0.40	1.93	8	1
1:A:249:ILE:CG2	1:A:348:MET:HE2	0.40	2.47	3	1
1:A:334:MET:HE1	1:A:367:LYS:HG2	0.40	1.92	3	1
1:A:292:ALA:CA	1:A:295:GLU:HG3	0.40	2.46	2	1
1:A:328:THR:HA	1:A:442:LEU:CD1	0.40	2.45	2	1
1:A:227:PRO:O	1:A:232:LYS:HG3	0.40	2.15	2	1
1:A:282:PHE:CE2	1:A:360:PHE:CE1	0.40	3.09	1	1
1:A:394:SER:HB2	1:A:400:LEU:HD11	0.40	1.91	1	1
1:A:214:LEU:HD11	1:A:218:LEU:HD21	0.40	1.93	4	1
1:A:330:LEU:C	1:A:334:MET:HG2	0.40	2.37	4	1
1:A:332:SER:C	1:A:334:MET:N	0.40	2.74	5	1
1:A:356:LEU:HG	1:A:361:GLY:O	0.40	2.16	6	1
1:A:282:PHE:O	1:A:286:GLN:HB3	0.40	2.17	7	1
1:A:441:ASP:OD2	1:A:441:ASP:C	0.40	2.59	7	1
1:A:397:ARG:HB2	1:A:400:LEU:CD1	0.40	2.46	8	1
1:A:354:LYS:CA	1:A:362:ASP:HB3	0.40	2.45	3	1
1:A:313:ASP:OD2	1:A:406:ILE:CD1	0.40	2.68	1	1
1:A:287:PHE:C	1:A:289:SER:N	0.40	2.73	4	1
1:A:335:ASN:OD1	1:A:335:ASN:O	0.40	2.38	4	1
1:A:418:GLU:OE1	1:A:418:GLU:O	0.40	2.39	4	1
1:A:317:LEU:HD12	1:A:394:SER:OG	0.40	2.16	9	1
1:A:282:PHE:CE1	1:A:363:PHE:CZ	0.40	3.09	5	1
1:A:373:LYS:HG3	1:A:373:LYS:O	0.40	2.17	5	1
1:A:233:ALA:O	1:A:237:LEU:CG	0.40	2.69	6	1
1:A:467:PRO:O	1:A:468:LEU:CD1	0.40	2.63	6	1
1:A:327:TYR:CD2	1:A:446:VAL:CG1	0.40	3.04	7	1
1:A:318:LEU:CD2	1:A:322:VAL:HB	0.40	2.43	3	1
1:A:353:LEU:C	1:A:361:GLY:O	0.40	2.58	3	1
1:A:341:ILE:HG21	1:A:348:MET:N	0.40	2.31	2	1
1:A:316:THR:CG2	1:A:400:LEU:HD23	0.40	2.46	1	1
1:A:328:THR:CG2	1:A:329:MET:H	0.40	2.29	4	1
1:A:249:ILE:CB	1:A:349:THR:HG23	0.40	2.46	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:396:ASP:OD1	1:A:397:ARG:N	0.40	2.55	9	1
1:A:303:ILE:H	1:A:303:ILE:CD1	0.40	2.27	5	1
1:A:278:ALA:HB2	1:A:356:LEU:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:468:LEU:O	1:A:469:LEU:CB	0.40	2.70	6	1
1:A:306:PHE:CE1	1:A:317:LEU:CD1	0.40	3.04	7	1
1:A:356:LEU:HB2	1:A:361:GLY:C	0.40	2.36	2	1
1:A:385:ALA:O	1:A:386:ILE:C	0.40	2.60	2	1
1:A:324:GLU:HA	1:A:442:LEU:CD1	0.40	2.46	1	1
1:A:417:LEU:CG	1:A:418:GLU:N	0.40	2.83	1	1
1:A:212:ARG:NE	1:A:212:ARG:HA	0.40	2.32	4	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:400:LEU:N	0.40	2.30	4	1
1:A:356:LEU:HD12	1:A:360:PHE:C	0.40	2.37	4	1
1:A:249:ILE:HG13	1:A:341:ILE:HD11	0.40	1.91	5	1
1:A:351:GLU:HA	1:A:354:LYS:CD	0.40	2.47	6	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	228/270 (84%)	137±2 (60±1%)	59±3 (26±1%)	33±3 (14±1%)	1 5
All	All	2052/2430 (84%)	1230 (60%)	528 (26%)	294 (14%)	1 5

All 73 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	462	ASP	9
1	A	439	MET	9
1	A	463	MET	9
1	A	360	PHE	9
1	A	301	LYS	9
1	A	417	LEU	9
1	A	440	THR	9
1	A	359	PRO	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	437	GLN	8
1	A	309	LEU	8
1	A	225	SER	8
1	A	247	PHE	8
1	A	279	ILE	7
1	A	351	GLU	7
1	A	362	ASP	7
1	A	393	LEU	7
1	A	238	THR	6
1	A	355	SER	6
1	A	381	ASP	6
1	A	468	LEU	6
1	A	377	LEU	6
1	A	305	GLY	6
1	A	460	GLU	5
1	A	425	HIS	5
1	A	464	SER	5
1	A	431	LEU	5
1	A	419	LEU	5
1	A	356	LEU	5
1	A	322	VAL	5
1	A	239	GLY	4
1	A	395	GLY	4
1	A	220	ASP	4
1	A	379	LEU	4
1	A	296	ILE	4
1	A	406	ILE	4
1	A	427	GLU	4
1	A	211	LEU	4
1	A	461	THR	3
1	A	248	VAL	3
1	A	446	VAL	3
1	A	428	SER	3
1	A	228	LEU	3
1	A	385	ALA	3
1	A	441	ASP	3
1	A	340	LEU	3
1	A	357	ARG	3
1	A	430	GLN	2
1	A	429	SER	2
1	A	396	ASP	2
1	A	298	GLU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	465	LEU	2
1	A	392	ILE	2
1	A	451	GLN	1
1	A	387	PHE	1
1	A	378	GLU	1
1	A	444	GLN	1
1	A	411	ASP	1
1	A	386	ILE	1
1	A	278	ALA	1
1	A	333	LEU	1
1	A	388	ILE	1
1	A	473	TYR	1
1	A	227	PRO	1
1	A	394	SER	1
1	A	442	LEU	1
1	A	467	PRO	1
1	A	216	LYS	1
1	A	276	GLU	1
1	A	249	ILE	1
1	A	472	ILE	1
1	A	433	ALA	1
1	A	469	LEU	1
1	A	223	ILE	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	204/243 (84%)	120±7 (59±4%)	84±7 (41±4%)	0	4
All	All	1836/2187 (84%)	1080 (59%)	756 (41%)	0	4

All 157 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	336	LYS	9
1	A	353	LEU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	420	GLN	9
1	A	435	LEU	9
1	A	461	THR	9
1	A	439	MET	9
1	A	465	LEU	9
1	A	211	LEU	9
1	A	297	THR	9
1	A	311	LEU	9
1	A	299	TYR	9
1	A	373	LYS	9
1	A	318	LEU	9
1	A	410	GLN	9
1	A	358	LYS	9
1	A	430	GLN	9
1	A	234	ARG	9
1	A	216	LYS	9
1	A	417	LEU	9
1	A	228	LEU	9
1	A	307	VAL	9
1	A	317	LEU	8
1	A	374	PHE	8
1	A	354	LYS	8
1	A	298	GLU	8
1	A	419	LEU	8
1	A	442	LEU	8
1	A	281	ILE	8
1	A	363	PHE	7
1	A	230	LYS	7
1	A	458	LYS	7
1	A	249	ILE	7
1	A	288	ARG	7
1	A	418	GLU	7
1	A	421	LEU	7
1	A	236	ILE	7
1	A	328	THR	7
1	A	333	LEU	7
1	A	347	PHE	7
1	A	356	LEU	7
1	A	279	ILE	6
1	A	397	ARG	6
1	A	357	ARG	6
1	A	276	GLU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	224	LYS	6
1	A	218	LEU	6
1	A	441	ASP	6
1	A	404	LYS	6
1	A	303	ILE	6
1	A	438	LYS	6
1	A	449	HIS	6
1	A	388	ILE	6
1	A	428	SER	6
1	A	226	PHE	6
1	A	382	SER	6
1	A	403	VAL	6
1	A	457	LYS	6
1	A	247	PHE	6
1	A	237	LEU	6
1	A	414	LEU	6
1	A	469	LEU	6
1	A	432	PHE	6
1	A	434	LYS	6
1	A	364	MET	6
1	A	355	SER	6
1	A	412	ASN	6
1	A	370	PHE	5
1	A	285	CYS	5
1	A	393	LEU	5
1	A	425	HIS	5
1	A	352	PHE	5
1	A	341	ILE	5
1	A	212	ARG	5
1	A	453	LEU	5
1	A	445	ILE	5
1	A	238	THR	5
1	A	319	LYS	5
1	A	377	LEU	5
1	A	387	PHE	5
1	A	220	ASP	5
1	A	282	PHE	5
1	A	472	ILE	5
1	A	427	GLU	4
1	A	473	TYR	4
1	A	392	ILE	4
1	A	280	ARG	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	325	ILE	4
1	A	456	ILE	4
1	A	360	PHE	4
1	A	222	TYR	4
1	A	462	ASP	4
1	A	451	GLN	4
1	A	422	LYS	4
1	A	362	ASP	4
1	A	210	ASP	4
1	A	223	ILE	4
1	A	413	LEU	4
1	A	367	LYS	4
1	A	431	LEU	4
1	A	468	LEU	4
1	A	379	LEU	4
1	A	286	GLN	3
1	A	463	MET	3
1	A	396	ASP	3
1	A	335	ASN	3
1	A	332	SER	3
1	A	448	GLU	3
1	A	302	SER	3
1	A	440	THR	3
1	A	351	GLU	3
1	A	444	GLN	3
1	A	337	ASP	3
1	A	400	LEU	3
1	A	459	THR	3
1	A	340	LEU	3
1	A	464	SER	3
1	A	339	VAL	3
1	A	316	THR	3
1	A	283	GLN	3
1	A	214	LEU	3
1	A	368	PHE	3
1	A	369	GLU	2
1	A	378	GLU	2
1	A	460	GLU	2
1	A	289	SER	2
1	A	380	ASP	2
1	A	394	SER	2
1	A	372	VAL	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	383	ASP	2
1	A	323	HIS	2
1	A	424	ASN	2
1	A	390	VAL	2
1	A	454	GLN	2
1	A	406	ILE	2
1	A	334	MET	2
1	A	443	ARG	2
1	A	232	LYS	2
1	A	452	LEU	2
1	A	330	LEU	2
1	A	365	GLU	2
1	A	308	ASN	1
1	A	437	GLN	1
1	A	375	ASN	1
1	A	381	ASP	1
1	A	314	GLN	1
1	A	293	VAL	1
1	A	324	GLU	1
1	A	429	SER	1
1	A	221	SER	1
1	A	407	GLU	1
1	A	350	ARG	1
1	A	248	VAL	1
1	A	470	GLN	1
1	A	306	PHE	1
1	A	327	TYR	1
1	A	320	TYR	1
1	A	348	MET	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 35% for the well-defined parts and 33% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 6549

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1142
Number of shifts mapped to atoms	1142
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	3

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	245	0.48 ± 0.15	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	233	1.77 ± 0.11	Should be applied
$^{13}\text{C}'$	214	-0.40 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	225	-0.26 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 35%, i.e. 1036 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2921. 0 out of 49 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	828/1122 (74%)	206/447 (46%)	416/456 (91%)	206/219 (94%)
Sidechain	208/1585 (13%)	0/923 (0%)	208/601 (35%)	0/61 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	0/214 (0%)	0/114 (0%)	0/90 (0%)	0/10 (0%)
Overall	1036/2921 (35%)	206/1484 (14%)	624/1147 (54%)	206/290 (71%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 33%, i.e. 1142 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3442. 0 out of 52 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	909/1330 (68%)	225/530 (42%)	459/540 (85%)	225/260 (87%)
Sidechain	233/1873 (12%)	0/1094 (0%)	233/707 (33%)	0/72 (0%)
Aromatic	0/239 (0%)	0/127 (0%)	0/100 (0%)	0/12 (0%)
Overall	1142/3442 (33%)	225/1751 (13%)	692/1347 (51%)	225/344 (65%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	221	SER	CB	38.68	71.24 – 56.34	-16.9
1	A	346	GLY	N	136.67	129.07 – 90.27	7.0
1	A	401	LEU	H	11.54	11.47 – 4.97	5.1

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

