



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 06:06 AM BST

PDB ID : 2RO1
Title : NMR Solution Structures of Human KAP1 PHD finger-bromodomain
Authors : Zeng, L.; Yap, K.L.; Ivanov, A.V.; Wang, X.; Mujtaba, S.; Plotnikova, O.;
Rauscher, F.J.
Deposited on : 2008-03-04

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

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

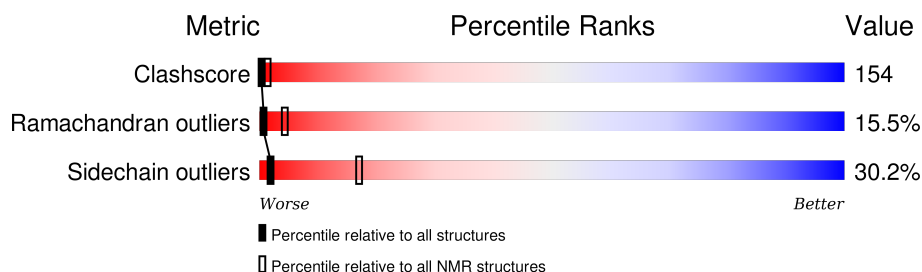
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



| Metric | Whole archive (#Entries) | NMR archive (#Entries) |
|-----------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore | 114402 | 11133 |
| Ramachandran outliers | 111179 | 9975 |
| Sidechain outliers | 111093 | 9958 |

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 189 | |

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:625-A:670, A:694-A:725, A:737-A:775, A:782-A:800 (136) | 0.58 | 12 |

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 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2907 atoms, of which 1436 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Transcription intermediary factor 1-beta.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|----|-------|
| 1 | A | 189 | Total | C | H | N | O | S | 0 |
| | | | 2905 | 919 | 1436 | 252 | 284 | 14 | |

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

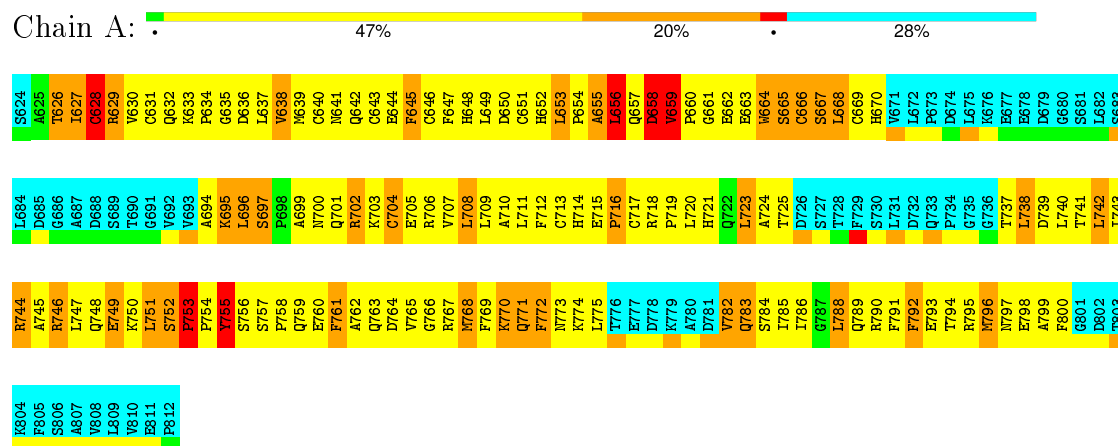
| Mol | Chain | Residues | Atoms | |
|-----|-------|----------|-------|----|
| 2 | A | 2 | Total | Zn |
| | | | 2 | 2 |

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: Transcription intermediary factor 1-beta

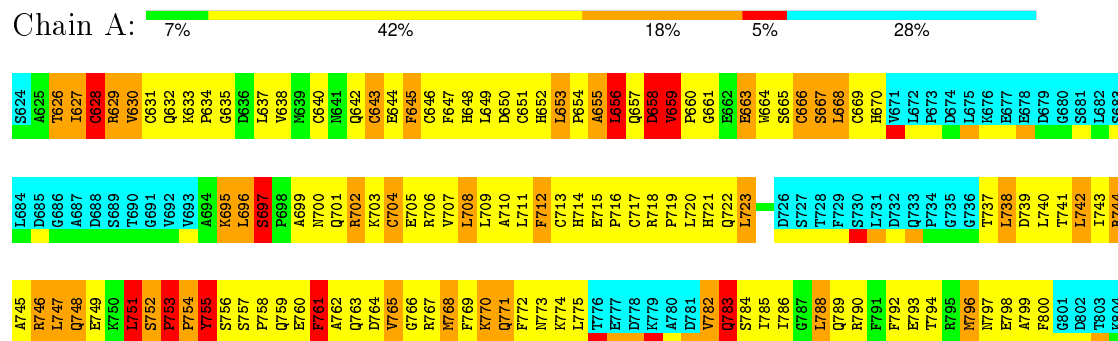


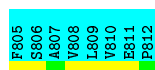
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

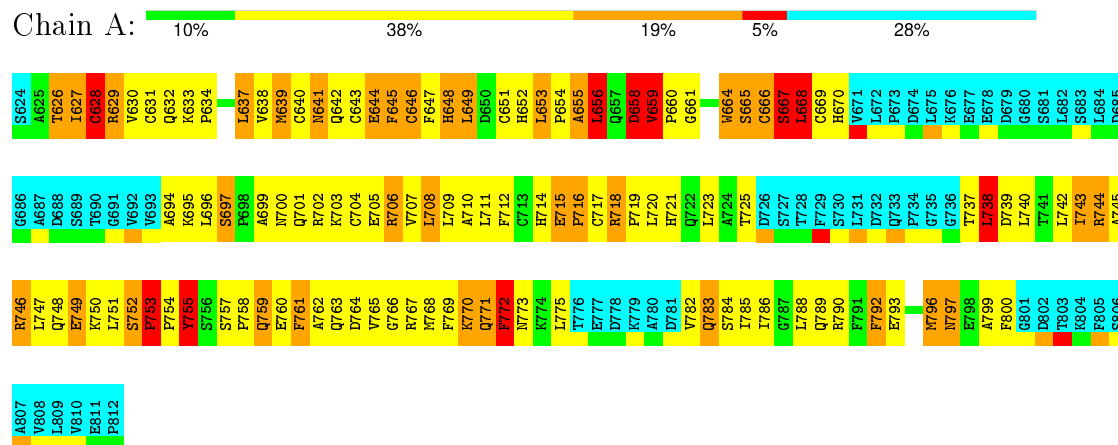
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





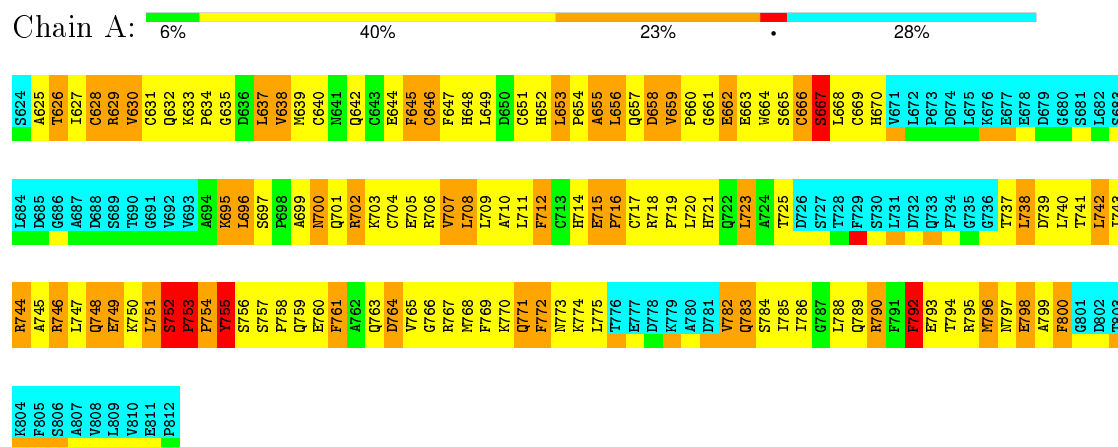
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



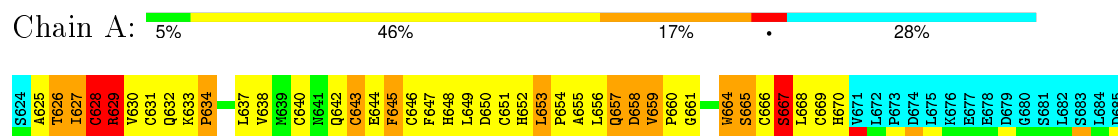
4.2.3 Score per residue for model 3

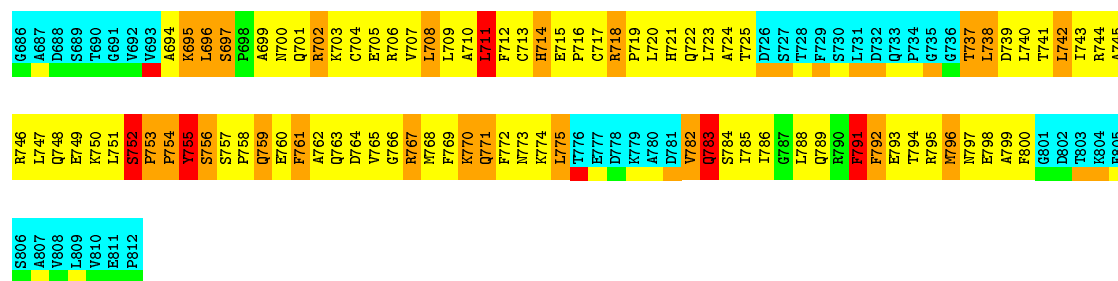
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.4 Score per residue for model 4

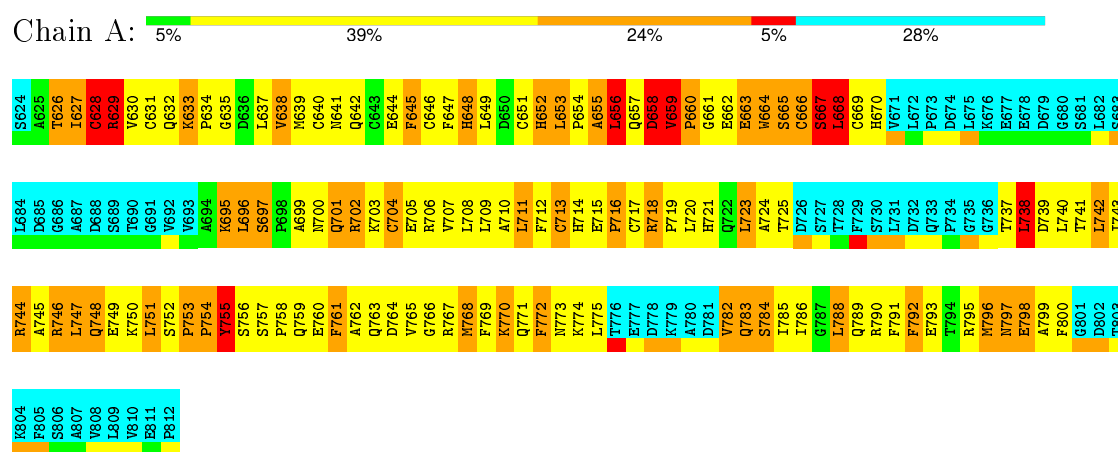
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





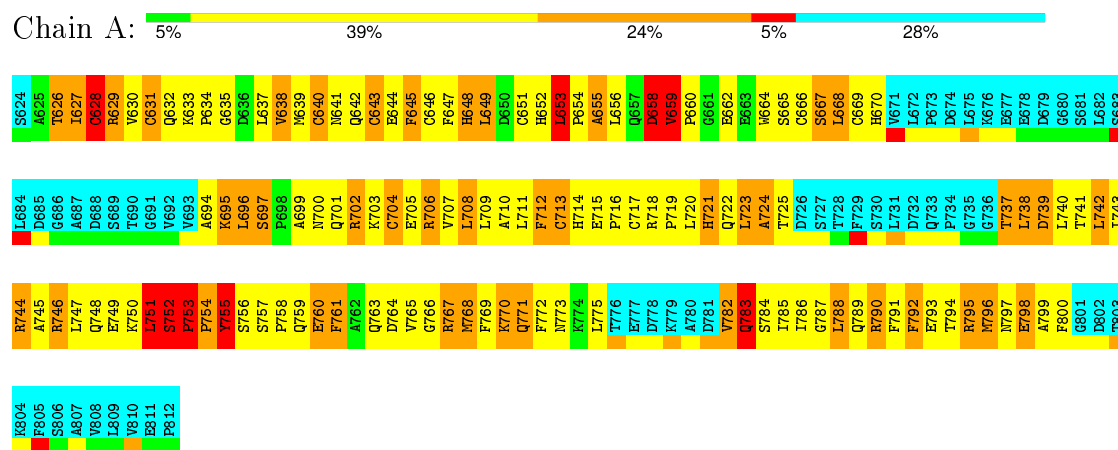
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



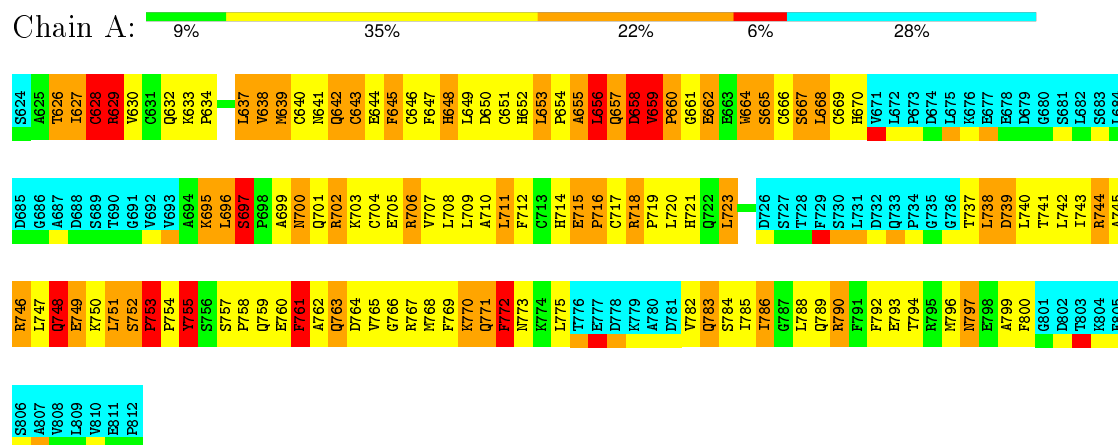
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



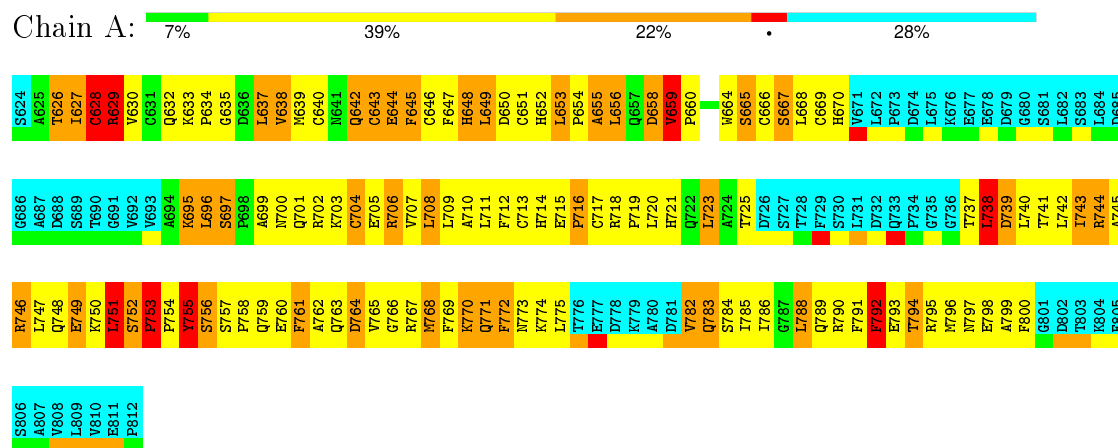
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



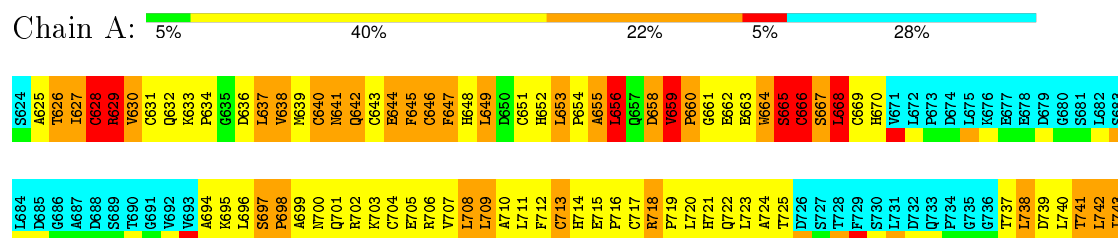
4.2.8 Score per residue for model 8

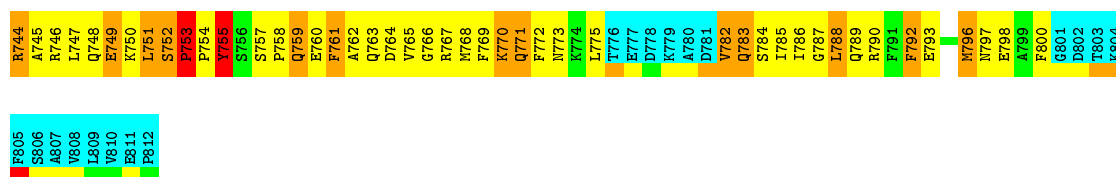
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.9 Score per residue for model 9

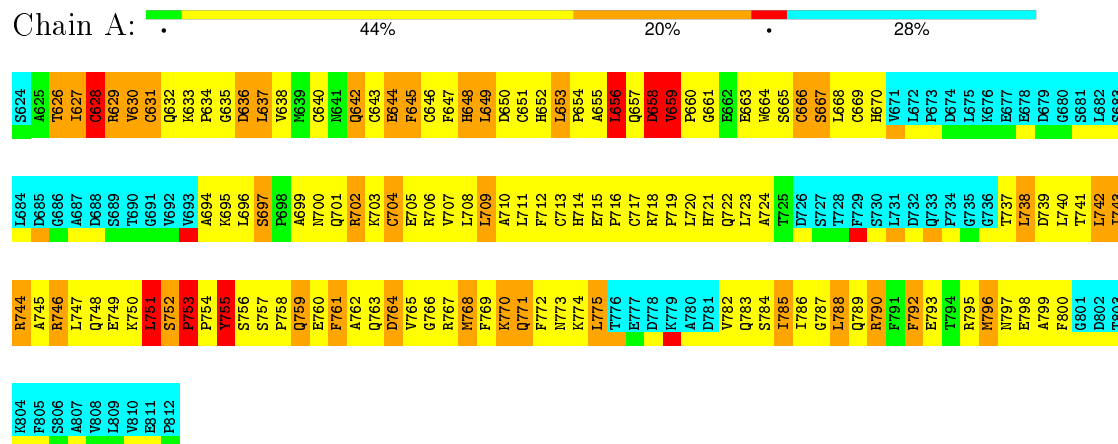
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





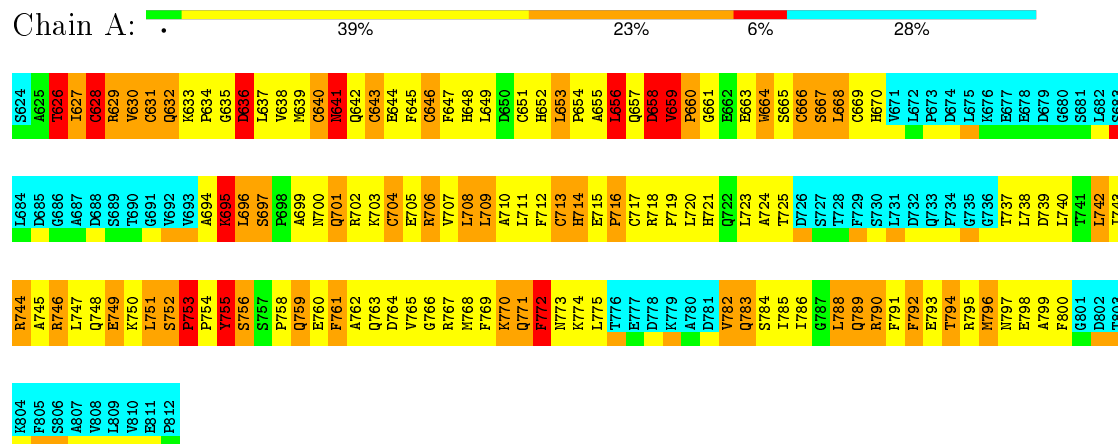
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.11 Score per residue for model 11

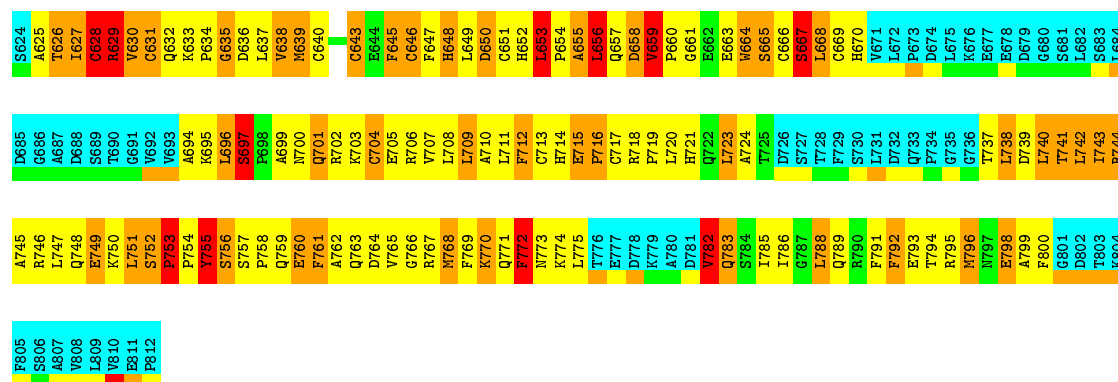
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

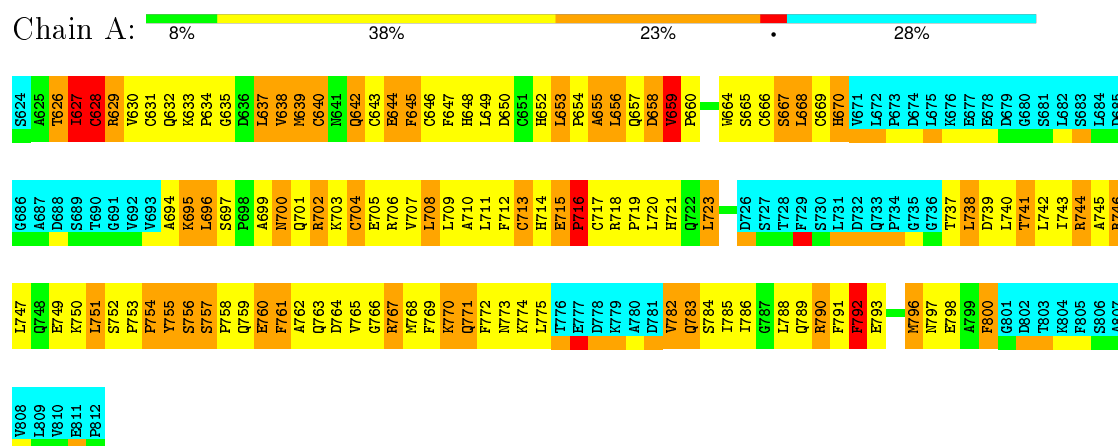
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





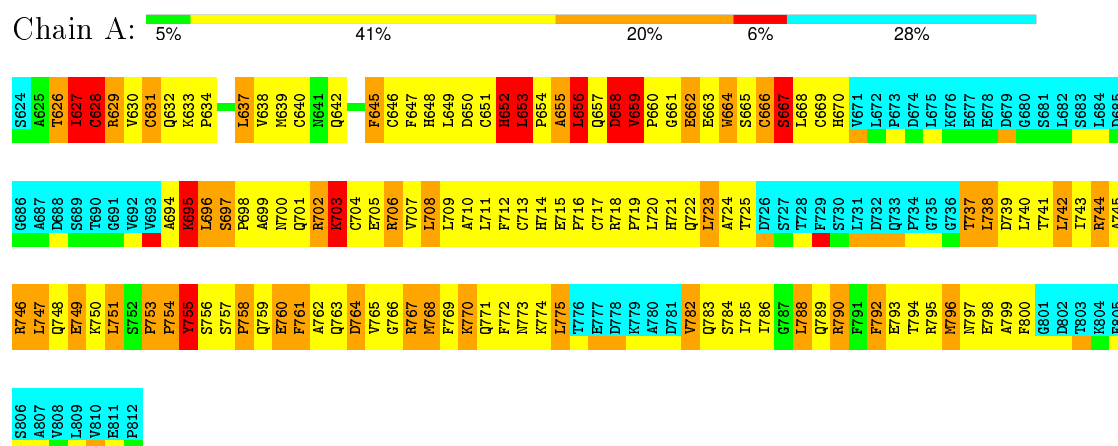
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



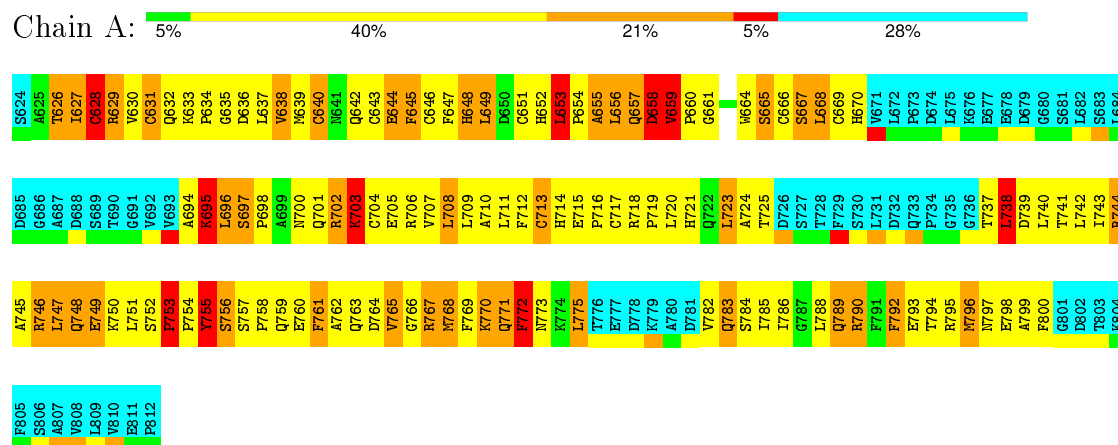
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



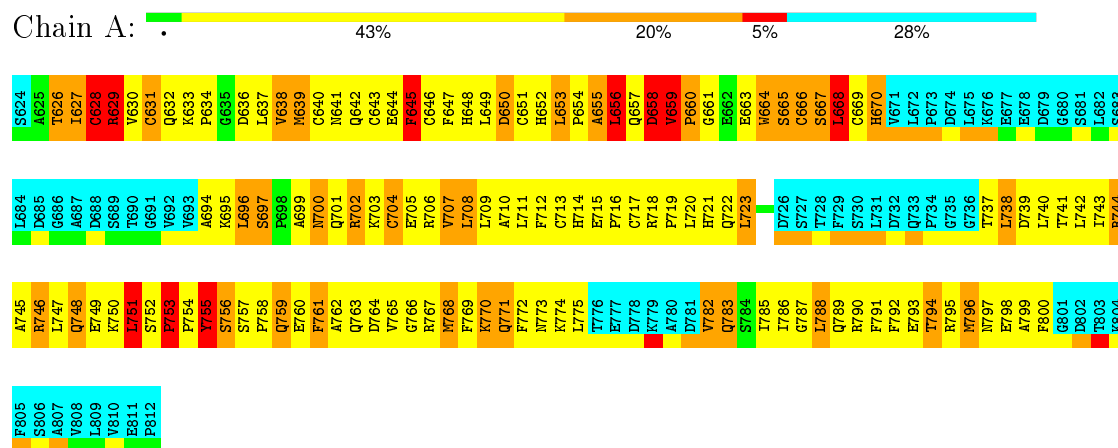
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



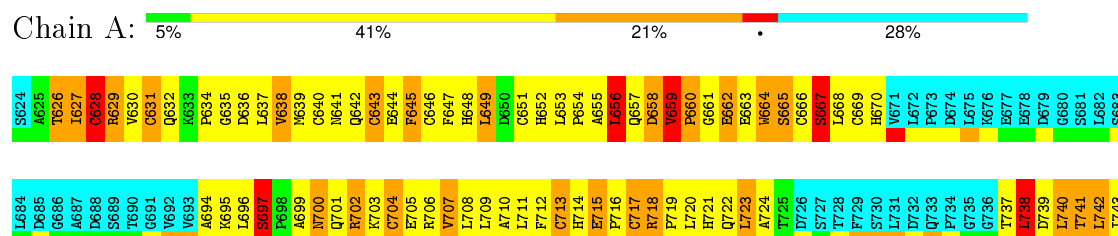
4.2.16 Score per residue for model 16

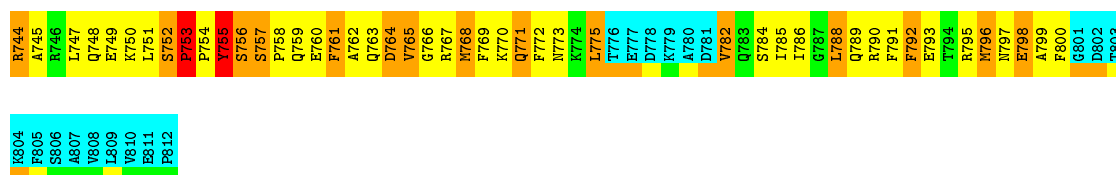
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.17 Score per residue for model 17

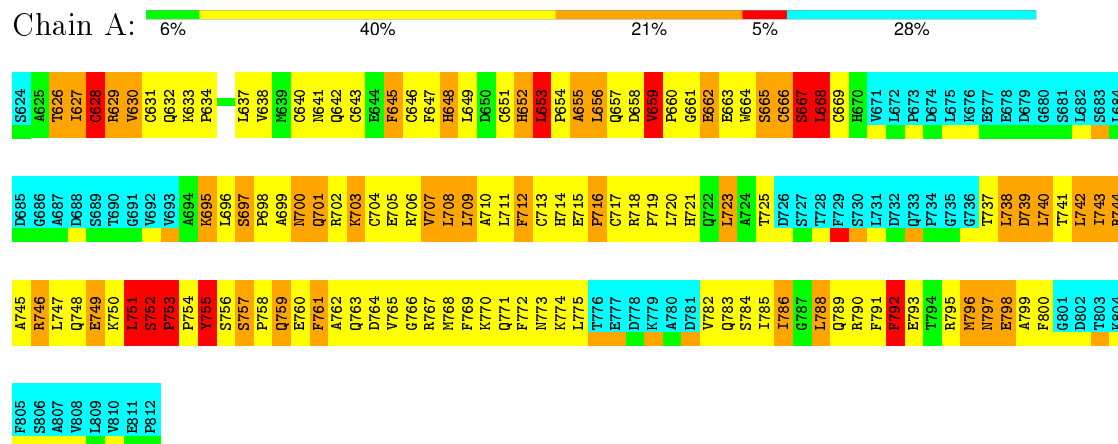
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





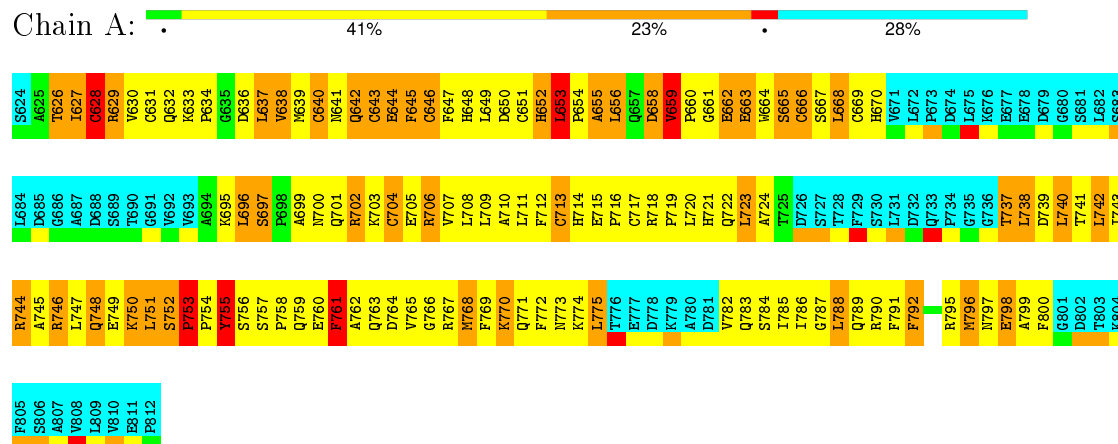
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



| | | | |
|------|------|------|------|
| K804 | R744 | L694 | S824 |
| F805 | A745 | D695 | A625 |
| S806 | R746 | G696 | T626 |
| A807 | L747 | A697 | G627 |
| V808 | T748 | D698 | G628 |
| L809 | E749 | S699 | R629 |
| V810 | L750 | T690 | V630 |
| E811 | S751 | G691 | C631 |
| P812 | S752 | V692 | Q632 |
| | P753 | V693 | K633 |
| | P754 | A694 | P634 |
| | S755 | K695 | G635 |
| | S756 | L696 | D636 |
| | S757 | S697 | L637 |
| | P758 | P698 | V638 |
| | Q759 | A699 | M639 |
| | E760 | N700 | G640 |
| | P761 | Q701 | N641 |
| | Q762 | R702 | Q642 |
| | Q763 | K703 | C643 |
| | P764 | C704 | E644 |
| | V765 | E705 | F645 |
| | G766 | R706 | G646 |
| | R767 | V707 | P647 |
| | M768 | L708 | H648 |
| | F769 | L709 | L649 |
| | K770 | A710 | D650 |
| | Q771 | L711 | C651 |
| | T772 | F712 | H652 |
| | N773 | C713 | L653 |
| | K774 | H714 | P654 |
| | L775 | E715 | A655 |
| | T776 | F716 | L656 |
| | T777 | C717 | Q657 |
| | D778 | R718 | D658 |
| | K779 | F719 | L659 |
| | A780 | L720 | P660 |
| | T781 | H721 | G661 |
| | T782 | Q722 | E662 |
| | K783 | L723 | E663 |
| | S784 | A724 | V664 |
| | L785 | T725 | S665 |
| | T786 | T726 | C666 |
| | G787 | S677 | S667 |
| | L788 | T728 | L668 |
| | Q789 | F729 | C669 |
| | R790 | S730 | H670 |
| | F791 | L731 | L671 |
| | F792 | D732 | L672 |
| | E793 | Q733 | P673 |
| | T794 | P734 | D674 |
| | R795 | G735 | L675 |
| | M796 | G736 | K676 |
| | N797 | T737 | E677 |
| | E798 | L738 | E678 |
| | A799 | T739 | D679 |
| | F800 | L740 | G680 |
| | G801 | T741 | S681 |
| | D802 | L742 | L682 |
| | T803 | T743 | S683 |

5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *simulated annealing, torsion angle dynamics*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|--------------------|---------|
| CNS | structure solution | 1.1 |
| CNS | refinement | 1.1 |

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

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ZN

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

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|-----|-------|--------------|---------------------|-------------|---------------------|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 0.96±0.02 | 1±0/1115 (0.1±0.0%) | 1.02±0.02 | 4±1/1508 (0.3±0.1%) |
| All | All | 0.96 | 16/22300 (0.1%) | 1.02 | 77/30160 (0.3%) |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models | |
|-----|-------|-----|------|--------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 755 | TYR | CG-CD1 | -6.52 | 1.30 | 1.39 | 9 | 8 |
| 1 | A | 755 | TYR | CE2-CZ | -6.27 | 1.30 | 1.38 | 20 | 1 |
| 1 | A | 755 | TYR | CG-CD2 | -5.93 | 1.31 | 1.39 | 6 | 4 |
| 1 | A | 761 | PHE | CG-CD2 | -5.33 | 1.30 | 1.38 | 7 | 2 |
| 1 | A | 761 | PHE | CG-CD1 | -5.14 | 1.31 | 1.38 | 1 | 1 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|-----------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 772 | PHE | CB-CG-CD2 | -9.07 | 114.45 | 120.80 | 8 | 8 |
| 1 | A | 755 | TYR | CB-CG-CD2 | -8.64 | 115.82 | 121.00 | 7 | 10 |
| 1 | A | 792 | PHE | CB-CG-CD1 | -8.21 | 115.05 | 120.80 | 18 | 17 |
| 1 | A | 753 | PRO | N-CA-CB | -7.77 | 93.97 | 103.30 | 16 | 13 |
| 1 | A | 772 | PHE | CB-CG-CD1 | 7.53 | 126.07 | 120.80 | 8 | 8 |
| 1 | A | 761 | PHE | CB-CG-CD1 | -6.78 | 116.06 | 120.80 | 1 | 2 |
| 1 | A | 761 | PHE | CB-CG-CD2 | -6.53 | 116.23 | 120.80 | 7 | 2 |
| 1 | A | 755 | TYR | CB-CG-CD1 | 6.51 | 124.91 | 121.00 | 7 | 6 |
| 1 | A | 792 | PHE | CB-CG-CD2 | 6.27 | 125.19 | 120.80 | 18 | 6 |
| 1 | A | 659 | VAL | N-CA-CB | -6.13 | 98.02 | 111.50 | 16 | 1 |
| 1 | A | 658 | ASP | CA-C-N | -5.49 | 105.12 | 117.20 | 16 | 1 |
| 1 | A | 791 | PHE | CB-CG-CD1 | -5.35 | 117.06 | 120.80 | 4 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|---------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 703 | LYS | N-CA-CB | -5.34 | 100.99 | 110.60 | 14 | 2 |

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 | 1089 | 1081 | 1077 | 333±21 |
| All | All | 21820 | 21620 | 21540 | 6658 |

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 154.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:716:PRO:HB2 | 1:A:788:LEU:HD13 | 1.06 | 1.27 | 11 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HG22 | 1.05 | 1.26 | 18 | 9 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:HD11 | 1.04 | 1.28 | 13 | 4 |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:HB2 | 1.04 | 1.23 | 19 | 13 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE3 | 1.03 | 1.27 | 19 | 5 |
| 1:A:628:CYS:SG | 1:A:630:VAL:HG13 | 1.02 | 1.93 | 9 | 4 |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:HD11 | 1.01 | 1.25 | 18 | 8 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:HB3 | 1.01 | 1.29 | 9 | 1 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:HD11 | 1.01 | 1.05 | 18 | 3 |
| 1:A:626:THR:HB | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.97 | 1.34 | 6 | 11 |
| 1:A:720:LEU:HA | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.95 | 1.38 | 12 | 14 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:767:ARG:HD2 | 0.95 | 1.36 | 4 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.94 | 1.39 | 17 | 2 |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:CD | 0.93 | 1.93 | 16 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.93 | 1.63 | 18 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.93 | 1.41 | 7 | 5 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.92 | 1.62 | 2 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.92 | 2.05 | 5 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.92 | 1.37 | 12 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:HD12 | 0.92 | 1.39 | 4 | 2 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.91 | 1.81 | 1 | 11 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.91 | 1.66 | 16 | 13 |
| 1:A:765:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CE1 | 0.91 | 2.01 | 16 | 15 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.91 | 1.43 | 19 | 5 |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:SD | 0.90 | 2.06 | 3 | 5 |
| 1:A:720:LEU:HA | 1:A:723:LEU:HD13 | 0.89 | 1.45 | 11 | 5 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.89 | 1.41 | 10 | 11 |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.89 | 1.44 | 5 | 11 |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:795:ARG:NH2 | 0.89 | 1.80 | 6 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.89 | 2.08 | 20 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.89 | 1.43 | 15 | 2 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.88 | 1.67 | 16 | 9 |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CG | 0.88 | 2.03 | 18 | 3 |
| 1:A:703:LYS:HB3 | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.88 | 1.43 | 3 | 5 |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:H | 0.88 | 1.26 | 18 | 3 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:660:PRO:HD3 | 0.88 | 1.45 | 10 | 14 |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.88 | 2.04 | 5 | 9 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:N | 0.88 | 1.84 | 3 | 18 |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.88 | 2.03 | 3 | 9 |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:N | 0.88 | 1.84 | 18 | 4 |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:CB | 0.87 | 2.00 | 1 | 13 |
| 1:A:739:ASP:N | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.87 | 1.84 | 18 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.87 | 1.45 | 7 | 6 |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.87 | 2.04 | 3 | 10 |
| 1:A:626:THR:HB | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.87 | 1.44 | 19 | 6 |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:792:PHE:CE2 | 0.87 | 2.04 | 16 | 1 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.86 | 1.85 | 13 | 7 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:N | 0.86 | 1.85 | 10 | 4 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:N | 0.86 | 1.85 | 13 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:751:LEU:N | 0.86 | 1.85 | 8 | 10 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.86 | 2.05 | 9 | 8 |
| 1:A:755:TYR:CE1 | 1:A:761:PHE:HB3 | 0.85 | 2.07 | 11 | 8 |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:HB2 | 0.85 | 1.48 | 20 | 5 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:HG3 | 0.85 | 1.47 | 14 | 7 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:HB3 | 0.85 | 1.48 | 12 | 12 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.85 | 1.45 | 9 | 8 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:N | 0.84 | 1.87 | 6 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:HG2 | 0.84 | 1.48 | 16 | 3 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.84 | 2.01 | 18 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:N | 0.84 | 1.87 | 15 | 5 |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.84 | 1.47 | 9 | 1 |
| 1:A:711:LEU:O | 1:A:717:CYS:SG | 0.84 | 2.35 | 4 | 19 |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.83 | 2.08 | 12 | 4 |
| 1:A:773:ASN:HB3 | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.83 | 1.50 | 20 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.83 | 1.50 | 16 | 1 |
| 1:A:721:HIS:O | 1:A:741:THR:HG23 | 0.83 | 1.74 | 4 | 9 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:O | 0.83 | 1.72 | 1 | 11 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.83 | 1.49 | 5 | 10 |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CZ | 0.83 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE | 0.83 | 2.04 | 20 | 7 |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:HB2 | 0.83 | 1.49 | 5 | 4 |
| 1:A:740:LEU:N | 1:A:768:MET:SD | 0.83 | 2.52 | 19 | 11 |
| 1:A:711:LEU:HG | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.83 | 1.50 | 4 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.83 | 1.48 | 20 | 4 |
| 1:A:720:LEU:HB3 | 1:A:768:MET:SD | 0.83 | 2.14 | 5 | 8 |
| 1:A:667:SER:HB3 | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.82 | 1.50 | 11 | 2 |
| 1:A:656:LEU:CG | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.82 | 2.04 | 16 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.82 | 1.51 | 14 | 9 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD13 | 0.82 | 1.51 | 10 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:SD | 0.81 | 2.15 | 3 | 6 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.81 | 2.10 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.81 | 1.50 | 18 | 3 |
| 1:A:769:PHE:CZ | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.81 | 2.10 | 11 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD2 | 1:A:789:GLN:HG3 | 0.81 | 2.11 | 15 | 2 |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:HD3 | 0.81 | 1.52 | 10 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HA | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.81 | 1.53 | 5 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HB3 | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.81 | 1.52 | 6 | 14 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:764:ASP:O | 0.80 | 1.77 | 1 | 6 |
| 1:A:755:TYR:CG | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.80 | 2.11 | 3 | 6 |
| 1:A:755:TYR:HA | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.80 | 1.53 | 13 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:HA | 0.80 | 1.54 | 3 | 4 |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HE3 | 0.80 | 1.54 | 16 | 9 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:SD | 0.80 | 2.15 | 16 | 8 |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.80 | 2.11 | 5 | 2 |
| 1:A:716:PRO:CB | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.80 | 2.06 | 11 | 2 |
| 1:A:757:SER:HB3 | 1:A:758:PRO:HD2 | 0.80 | 1.54 | 20 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.80 | 2.12 | 4 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:HG3 | 0.79 | 1.51 | 4 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD1 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.79 | 2.12 | 6 | 7 |
| 1:A:659:VAL:HG22 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.79 | 1.52 | 16 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.79 | 1.54 | 8 | 2 |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.79 | 2.11 | 12 | 13 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HB3 | 0.79 | 1.52 | 11 | 3 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:C | 0.79 | 1.97 | 20 | 6 |
| 1:A:773:ASN:HB2 | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.79 | 1.55 | 19 | 10 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NE | 0.79 | 1.92 | 2 | 1 |
| 1:A:659:VAL:CG2 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.78 | 2.08 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:N | 0.78 | 1.92 | 16 | 3 |
| 1:A:634:PRO:HA | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.78 | 1.55 | 1 | 11 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HG | 0.78 | 1.55 | 3 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HA | 0.78 | 1.54 | 10 | 4 |
| 1:A:696:LEU:CB | 1:A:757:SER:HB2 | 0.78 | 2.08 | 20 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HG | 1:A:755:TYR:OH | 0.78 | 1.78 | 20 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:647:PHE:O | 0.78 | 1.79 | 10 | 7 |
| 1:A:703:LYS:C | 1:A:703:LYS:HD2 | 0.78 | 2.00 | 15 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:767:ARG:HB2 | 0.78 | 1.78 | 1 | 10 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.78 | 2.08 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HA | 0.77 | 1.54 | 17 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CB | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.77 | 2.09 | 6 | 6 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.77 | 1.55 | 18 | 2 |
| 1:A:791:PHE:CD2 | 1:A:792:PHE:N | 0.77 | 2.53 | 4 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:O | 0.77 | 1.78 | 15 | 6 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:659:VAL:HG21 | 0.77 | 1.56 | 16 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HB2 | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.77 | 1.55 | 4 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.77 | 2.14 | 4 | 12 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CG | 0.77 | 2.15 | 16 | 6 |
| 1:A:737:THR:C | 1:A:738:LEU:HD23 | 0.76 | 2.00 | 7 | 5 |
| 1:A:628:CYS:SG | 1:A:630:VAL:HB | 0.76 | 2.21 | 10 | 14 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.76 | 2.10 | 20 | 11 |
| 1:A:755:TYR:CE1 | 1:A:760:GLU:HB3 | 0.76 | 2.16 | 9 | 8 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.76 | 1.55 | 6 | 5 |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.76 | 1.58 | 19 | 1 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:720:LEU:N | 0.76 | 2.19 | 2 | 19 |
| 1:A:711:LEU:CD1 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.76 | 2.11 | 4 | 1 |
| 1:A:747:LEU:N | 1:A:755:TYR:OH | 0.76 | 2.19 | 20 | 2 |
| 1:A:752:SER:HB2 | 1:A:753:PRO:HD3 | 0.76 | 1.58 | 12 | 11 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:CB | 0.76 | 2.10 | 17 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.76 | 2.15 | 2 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.76 | 1.57 | 10 | 7 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:744:ARG:HA | 0.76 | 2.11 | 19 | 7 |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:CE | 0.75 | 2.11 | 16 | 11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:712:PHE:HA | 1:A:721:HIS:HE2 | 0.75 | 1.40 | 19 | 7 |
| 1:A:640:CYS:HB2 | 1:A:666:CYS:HB3 | 0.75 | 1.58 | 3 | 7 |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:CE | 0.75 | 2.10 | 7 | 9 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.75 | 2.16 | 9 | 2 |
| 1:A:765:VAL:O | 1:A:768:MET:HB2 | 0.75 | 1.82 | 15 | 16 |
| 1:A:717:CYS:HB2 | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.75 | 1.57 | 7 | 9 |
| 1:A:638:VAL:O | 1:A:646:CYS:HA | 0.75 | 1.82 | 5 | 17 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.75 | 2.17 | 11 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:HG | 0.75 | 1.57 | 6 | 2 |
| 1:A:772:PHE:HE2 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.75 | 1.40 | 18 | 5 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:HB2 | 0.75 | 1.58 | 16 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:HD13 | 0.74 | 1.82 | 16 | 13 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.74 | 1.59 | 3 | 3 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.74 | 2.17 | 16 | 2 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:739:ASP:HB2 | 0.74 | 1.82 | 8 | 18 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:656:LEU:HD21 | 0.74 | 1.57 | 17 | 1 |
| 1:A:751:LEU:HD22 | 1:A:752:SER:N | 0.74 | 1.97 | 11 | 2 |
| 1:A:751:LEU:HD13 | 1:A:752:SER:H | 0.74 | 1.43 | 11 | 2 |
| 1:A:627:ILE:HB | 1:A:632:GLN:C | 0.74 | 2.02 | 19 | 17 |
| 1:A:628:CYS:SG | 1:A:628:CYS:O | 0.74 | 2.44 | 16 | 10 |
| 1:A:724:ALA:HB2 | 1:A:737:THR:HG22 | 0.74 | 1.56 | 6 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.74 | 1.58 | 6 | 4 |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:651:CYS:HB3 | 0.74 | 1.58 | 10 | 8 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.74 | 1.57 | 8 | 6 |
| 1:A:701:GLN:HA | 1:A:704:CYS:SG | 0.74 | 2.22 | 15 | 7 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.74 | 2.13 | 20 | 2 |
| 1:A:761:PHE:CD1 | 1:A:762:ALA:N | 0.74 | 2.55 | 7 | 8 |
| 1:A:656:LEU:CD2 | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.74 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:659:VAL:CB | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.74 | 2.12 | 16 | 1 |
| 1:A:739:ASP:C | 1:A:768:MET:SD | 0.74 | 2.66 | 20 | 11 |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:791:PHE:CE2 | 0.74 | 2.18 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HG | 1:A:659:VAL:N | 0.74 | 1.98 | 15 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CB | 0.74 | 2.11 | 10 | 1 |
| 1:A:758:PRO:HB3 | 1:A:800:PHE:CZ | 0.74 | 2.18 | 14 | 4 |
| 1:A:701:GLN:O | 1:A:704:CYS:SG | 0.74 | 2.45 | 20 | 3 |
| 1:A:765:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CD1 | 0.74 | 2.18 | 4 | 14 |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:HB2 | 0.74 | 1.60 | 9 | 4 |
| 1:A:711:LEU:HA | 1:A:714:HIS:CE1 | 0.74 | 2.17 | 6 | 18 |
| 1:A:707:VAL:CG2 | 1:A:708:LEU:N | 0.74 | 2.50 | 5 | 2 |
| 1:A:742:LEU:HD13 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.74 | 1.57 | 5 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.74 | 2.17 | 13 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:711:LEU:CB | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.73 | 2.13 | 11 | 6 |
| 1:A:784:SER:O | 1:A:788:LEU:HB3 | 0.73 | 1.83 | 11 | 6 |
| 1:A:628:CYS:O | 1:A:630:VAL:N | 0.73 | 2.21 | 2 | 20 |
| 1:A:740:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.73 | 1.60 | 5 | 4 |
| 1:A:762:ALA:HA | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.73 | 1.59 | 5 | 2 |
| 1:A:752:SER:C | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.73 | 2.04 | 20 | 2 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:CG | 0.73 | 2.36 | 6 | 1 |
| 1:A:749:GLU:HA | 1:A:754:PRO:HG3 | 0.73 | 1.60 | 1 | 1 |
| 1:A:658:ASP:O | 1:A:659:VAL:HG22 | 0.73 | 1.84 | 2 | 4 |
| 1:A:716:PRO:O | 1:A:719:PRO:HD2 | 0.73 | 1.82 | 4 | 19 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.73 | 1.60 | 6 | 6 |
| 1:A:711:LEU:HA | 1:A:714:HIS:NE2 | 0.73 | 1.99 | 11 | 12 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.73 | 1.59 | 5 | 11 |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:738:LEU:O | 0.73 | 1.82 | 3 | 8 |
| 1:A:765:VAL:HA | 1:A:768:MET:HE2 | 0.73 | 1.59 | 7 | 5 |
| 1:A:649:LEU:O | 1:A:652:HIS:HB3 | 0.73 | 1.82 | 3 | 18 |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:HE2 | 0.73 | 1.59 | 7 | 6 |
| 1:A:645:PHE:CE2 | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.73 | 2.19 | 7 | 4 |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE | 0.73 | 2.14 | 17 | 2 |
| 1:A:659:VAL:CG1 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.73 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:H | 0.72 | 1.44 | 6 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:738:LEU:O | 0.72 | 2.07 | 17 | 5 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.72 | 2.19 | 5 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HB2 | 1:A:756:SER:O | 0.72 | 1.84 | 20 | 2 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:768:MET:HG2 | 0.72 | 1.85 | 15 | 3 |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:HD2 | 0.72 | 1.58 | 16 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.72 | 2.15 | 19 | 4 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.72 | 2.18 | 11 | 3 |
| 1:A:769:PHE:CZ | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.72 | 2.20 | 11 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HB2 | 0.72 | 1.61 | 12 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HG2 | 0.72 | 1.59 | 2 | 1 |
| 1:A:628:CYS:O | 1:A:628:CYS:SG | 0.72 | 2.48 | 7 | 10 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:O | 0.72 | 1.84 | 10 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.72 | 2.20 | 19 | 2 |
| 1:A:712:PHE:HA | 1:A:721:HIS:NE2 | 0.72 | 1.99 | 19 | 17 |
| 1:A:721:HIS:CD2 | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.72 | 2.20 | 19 | 5 |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:738:LEU:N | 0.71 | 1.99 | 6 | 1 |
| 1:A:652:HIS:ND1 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.71 | 2.00 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:HD2 | 0.71 | 1.43 | 16 | 1 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:711:LEU:HG | 0.71 | 1.84 | 11 | 12 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.71 | 2.25 | 15 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:665:SER:HA | 0.71 | 2.24 | 4 | 17 |
| 1:A:649:LEU:O | 1:A:655:ALA:HA | 0.71 | 1.85 | 5 | 16 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:HD2 | 0.71 | 1.43 | 7 | 5 |
| 1:A:717:CYS:HA | 1:A:720:LEU:HD12 | 0.71 | 1.62 | 8 | 8 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.71 | 1.61 | 13 | 3 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:HB2 | 0.71 | 1.60 | 10 | 1 |
| 1:A:668:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.71 | 1.45 | 20 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CG | 0.71 | 2.16 | 19 | 1 |
| 1:A:717:CYS:N | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.71 | 2.00 | 3 | 3 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:651:CYS:N | 0.71 | 2.23 | 9 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.71 | 1.61 | 1 | 2 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:718:ARG:N | 0.70 | 2.24 | 3 | 20 |
| 1:A:772:PHE:HE2 | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.70 | 1.46 | 19 | 8 |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.70 | 1.63 | 7 | 5 |
| 1:A:765:VAL:HG13 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.70 | 1.63 | 9 | 5 |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.70 | 1.59 | 16 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:HE2 | 0.70 | 1.44 | 4 | 2 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:633:LYS:C | 0.70 | 2.05 | 3 | 7 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.70 | 2.17 | 9 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:CG2 | 0.70 | 2.16 | 9 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.70 | 1.63 | 8 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HA | 0.70 | 1.62 | 15 | 8 |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:CG | 0.70 | 2.16 | 16 | 1 |
| 1:A:792:PHE:HA | 1:A:795:ARG:NH2 | 0.70 | 2.02 | 6 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HA | 0.70 | 1.62 | 19 | 2 |
| 1:A:653:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.70 | 1.47 | 13 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:HB3 | 0.70 | 1.63 | 9 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:765:VAL:N | 0.70 | 2.02 | 12 | 3 |
| 1:A:761:PHE:CD1 | 1:A:761:PHE:C | 0.70 | 2.65 | 5 | 7 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:HG12 | 0.70 | 1.87 | 3 | 2 |
| 1:A:761:PHE:C | 1:A:761:PHE:HD1 | 0.70 | 1.90 | 18 | 6 |
| 1:A:765:VAL:HA | 1:A:768:MET:HG3 | 0.70 | 1.64 | 20 | 2 |
| 1:A:792:PHE:HA | 1:A:795:ARG:CZ | 0.70 | 2.16 | 6 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HG2 | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.70 | 2.22 | 13 | 6 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:745:ALA:HB3 | 0.69 | 1.87 | 11 | 9 |
| 1:A:737:THR:C | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.69 | 2.08 | 15 | 2 |
| 1:A:660:PRO:HG3 | 1:A:664:TRP:CD1 | 0.69 | 2.22 | 16 | 2 |
| 1:A:745:ALA:C | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.69 | 2.07 | 11 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.69 | 2.22 | 17 | 5 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:CG | 0.69 | 2.22 | 9 | 4 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CA | 0.69 | 2.17 | 13 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:CB | 0.69 | 2.17 | 13 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.69 | 2.22 | 13 | 1 |
| 1:A:755:TYR:O | 1:A:756:SER:HB2 | 0.69 | 1.87 | 4 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:N | 0.69 | 2.03 | 5 | 4 |
| 1:A:740:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CE | 0.69 | 2.17 | 5 | 2 |
| 1:A:769:PHE:O | 1:A:773:ASN:HB2 | 0.69 | 1.87 | 8 | 12 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HD3 | 0.69 | 1.64 | 15 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.69 | 2.18 | 12 | 1 |
| 1:A:703:LYS:CE | 1:A:799:ALA:HB3 | 0.69 | 2.18 | 18 | 2 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:718:ARG:HB2 | 0.69 | 1.88 | 5 | 10 |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:660:PRO:HG3 | 0.69 | 1.63 | 9 | 3 |
| 1:A:786:ILE:HD12 | 1:A:789:GLN:NE2 | 0.69 | 2.03 | 7 | 2 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:668:LEU:N | 0.69 | 2.26 | 11 | 11 |
| 1:A:746:ARG:HG2 | 1:A:755:TYR:CG | 0.69 | 2.23 | 3 | 1 |
| 1:A:717:CYS:HB2 | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.69 | 2.17 | 19 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:CD | 0.69 | 2.17 | 11 | 6 |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.69 | 2.22 | 17 | 3 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.69 | 1.88 | 5 | 6 |
| 1:A:766:GLY:HA2 | 1:A:769:PHE:CD2 | 0.69 | 2.23 | 5 | 4 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.68 | 2.22 | 19 | 6 |
| 1:A:740:LEU:O | 1:A:744:ARG:HB3 | 0.68 | 1.88 | 8 | 12 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.68 | 2.23 | 20 | 7 |
| 1:A:768:MET:O | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.68 | 1.88 | 6 | 11 |
| 1:A:660:PRO:HB2 | 1:A:664:TRP:HB2 | 0.68 | 1.64 | 3 | 12 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.68 | 1.63 | 2 | 5 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HD2 | 0.68 | 1.66 | 6 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.68 | 1.47 | 17 | 1 |
| 1:A:665:SER:HB2 | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.68 | 1.66 | 4 | 6 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.68 | 1.64 | 14 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.68 | 1.64 | 16 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CD2 | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.68 | 2.24 | 6 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.68 | 1.88 | 10 | 2 |
| 1:A:724:ALA:HB2 | 1:A:737:THR:O | 0.68 | 1.88 | 11 | 3 |
| 1:A:742:LEU:HD22 | 1:A:746:ARG:NH2 | 0.68 | 2.04 | 11 | 1 |
| 1:A:654:PRO:HA | 1:A:748:GLN:NE2 | 0.68 | 2.04 | 6 | 10 |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.68 | 2.23 | 8 | 6 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:HB3 | 0.68 | 1.88 | 7 | 7 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.68 | 2.19 | 13 | 1 |
| 1:A:628:CYS:SG | 1:A:630:VAL:CG1 | 0.68 | 2.78 | 9 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.68 | 2.17 | 9 | 6 |
| 1:A:738:LEU:HB2 | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.68 | 1.66 | 7 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:766:GLY:O | 1:A:770:LYS:HG2 | 0.68 | 1.89 | 18 | 3 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.68 | 1.89 | 18 | 3 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.68 | 2.19 | 5 | 4 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.68 | 1.64 | 19 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:769:PHE:CE1 | 0.68 | 2.24 | 11 | 1 |
| 1:A:703:LYS:CB | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.68 | 2.18 | 3 | 8 |
| 1:A:637:LEU:HG | 1:A:646:CYS:HB3 | 0.68 | 1.65 | 10 | 2 |
| 1:A:716:PRO:HG2 | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.67 | 1.66 | 9 | 1 |
| 1:A:788:LEU:HD13 | 1:A:788:LEU:N | 0.67 | 2.02 | 8 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:HG | 0.67 | 1.88 | 3 | 3 |
| 1:A:755:TYR:CE2 | 1:A:760:GLU:HB3 | 0.67 | 2.24 | 13 | 3 |
| 1:A:746:ARG:HD3 | 1:A:751:LEU:HG | 0.67 | 1.65 | 18 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.67 | 2.18 | 16 | 1 |
| 1:A:703:LYS:O | 1:A:707:VAL:HG23 | 0.67 | 1.89 | 7 | 7 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.67 | 1.65 | 5 | 8 |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:CA | 0.67 | 2.19 | 17 | 6 |
| 1:A:767:ARG:HA | 1:A:770:LYS:HB2 | 0.67 | 1.67 | 11 | 7 |
| 1:A:740:LEU:O | 1:A:744:ARG:CB | 0.67 | 2.43 | 16 | 10 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:739:ASP:CB | 0.67 | 2.42 | 6 | 7 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:CE | 0.67 | 2.18 | 16 | 4 |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:795:ARG:HH21 | 0.67 | 1.45 | 6 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HG | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.67 | 2.20 | 4 | 1 |
| 1:A:628:CYS:O | 1:A:631:CYS:N | 0.67 | 2.27 | 9 | 10 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.67 | 2.25 | 11 | 4 |
| 1:A:761:PHE:C | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.67 | 2.68 | 18 | 9 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.67 | 1.65 | 6 | 3 |
| 1:A:721:HIS:CD2 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.67 | 2.24 | 4 | 8 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.67 | 1.65 | 3 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:CD1 | 0.67 | 2.15 | 18 | 6 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:761:PHE:O | 0.67 | 1.90 | 2 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HE2 | 1:A:789:GLN:N | 0.66 | 1.87 | 15 | 1 |
| 1:A:712:PHE:CE2 | 1:A:740:LEU:HB3 | 0.66 | 2.24 | 6 | 5 |
| 1:A:721:HIS:O | 1:A:741:THR:HG22 | 0.66 | 1.90 | 14 | 3 |
| 1:A:744:ARG:O | 1:A:747:LEU:HB2 | 0.66 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.66 | 1.65 | 7 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:CG1 | 0.66 | 2.20 | 19 | 1 |
| 1:A:660:PRO:HG2 | 1:A:664:TRP:CG | 0.66 | 2.26 | 3 | 6 |
| 1:A:762:ALA:HA | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.66 | 1.68 | 1 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:H | 0.66 | 1.50 | 17 | 1 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.66 | 1.89 | 16 | 9 |
| 1:A:666:CYS:SG | 1:A:668:LEU:HD13 | 0.66 | 2.31 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:696:LEU:H | 0.66 | 1.48 | 8 | 1 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:718:ARG:C | 0.66 | 2.34 | 3 | 19 |
| 1:A:630:VAL:HG12 | 1:A:631:CYS:N | 0.66 | 2.05 | 20 | 7 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.66 | 2.21 | 18 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:654:PRO:HG2 | 0.66 | 2.05 | 15 | 4 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:647:PHE:O | 0.66 | 1.90 | 5 | 10 |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.66 | 1.67 | 17 | 2 |
| 1:A:703:LYS:HG2 | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.66 | 1.67 | 5 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.66 | 2.25 | 18 | 3 |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:708:LEU:H | 0.66 | 1.51 | 5 | 1 |
| 1:A:701:GLN:N | 1:A:757:SER:HB3 | 0.66 | 2.05 | 13 | 1 |
| 1:A:756:SER:O | 1:A:757:SER:OG | 0.66 | 2.14 | 13 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:N | 0.66 | 2.06 | 17 | 4 |
| 1:A:769:PHE:CD2 | 1:A:789:GLN:HG2 | 0.66 | 2.25 | 17 | 13 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.66 | 1.66 | 15 | 1 |
| 1:A:784:SER:O | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.66 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:746:ARG:NE | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.66 | 2.06 | 2 | 2 |
| 1:A:710:ALA:HB1 | 1:A:795:ARG:HD2 | 0.66 | 1.67 | 6 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:HG2 | 0.66 | 1.67 | 13 | 2 |
| 1:A:755:TYR:HE1 | 1:A:761:PHE:HB3 | 0.66 | 1.51 | 18 | 6 |
| 1:A:785:ILE:HA | 1:A:788:LEU:HD12 | 0.66 | 1.67 | 7 | 4 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HB3 | 0.66 | 2.25 | 13 | 2 |
| 1:A:653:LEU:N | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.66 | 2.05 | 13 | 3 |
| 1:A:745:ALA:O | 1:A:748:GLN:N | 0.66 | 2.29 | 9 | 2 |
| 1:A:772:PHE:HA | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.66 | 1.66 | 7 | 5 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:669:CYS:N | 0.66 | 2.29 | 16 | 11 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:CG | 0.66 | 2.21 | 15 | 9 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:705:GLU:HG3 | 0.66 | 2.06 | 7 | 3 |
| 1:A:647:PHE:C | 1:A:649:LEU:H | 0.65 | 1.94 | 2 | 17 |
| 1:A:746:ARG:HG2 | 1:A:755:TYR:CD1 | 0.65 | 2.26 | 3 | 2 |
| 1:A:706:ARG:HD3 | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.65 | 1.66 | 2 | 2 |
| 1:A:717:CYS:HB3 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.65 | 1.68 | 13 | 2 |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:708:LEU:N | 0.65 | 2.06 | 5 | 1 |
| 1:A:648:HIS:HB2 | 1:A:651:CYS:SG | 0.65 | 2.31 | 19 | 11 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:705:GLU:HA | 0.65 | 2.21 | 13 | 3 |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.65 | 1.68 | 3 | 2 |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CG | 0.65 | 2.25 | 5 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HB3 | 1:A:717:CYS:SG | 0.65 | 2.31 | 20 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.65 | 2.26 | 13 | 1 |
| 1:A:753:PRO:HB2 | 1:A:754:PRO:CD | 0.65 | 2.21 | 6 | 15 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:767:ARG:HD2 | 0.65 | 2.22 | 3 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:746:ARG:HD3 | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.65 | 1.69 | 14 | 1 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:670:HIS:N | 0.65 | 2.30 | 5 | 10 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.65 | 2.05 | 17 | 1 |
| 1:A:695:LYS:C | 1:A:756:SER:HA | 0.65 | 2.11 | 5 | 5 |
| 1:A:765:VAL:HG23 | 1:A:769:PHE:CE2 | 0.65 | 2.26 | 19 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HG | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.65 | 1.69 | 4 | 1 |
| 1:A:667:SER:HB3 | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.65 | 1.68 | 4 | 2 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:649:LEU:HB3 | 0.65 | 1.90 | 12 | 1 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:789:GLN:C | 0.65 | 2.35 | 18 | 7 |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.65 | 2.26 | 18 | 7 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CB | 0.65 | 2.21 | 18 | 1 |
| 1:A:712:PHE:CE1 | 1:A:740:LEU:HB3 | 0.65 | 2.26 | 9 | 7 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:CD2 | 0.65 | 2.26 | 18 | 6 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.65 | 2.84 | 20 | 1 |
| 1:A:645:PHE:CE1 | 1:A:666:CYS:SG | 0.65 | 2.90 | 19 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CE1 | 1:A:760:GLU:CB | 0.65 | 2.80 | 12 | 2 |
| 1:A:711:LEU:HD22 | 1:A:792:PHE:CD2 | 0.65 | 2.26 | 16 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HB2 | 1:A:761:PHE:HD2 | 0.65 | 1.52 | 5 | 1 |
| 1:A:659:VAL:CG1 | 1:A:660:PRO:CD | 0.65 | 2.73 | 16 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:767:ARG:N | 0.65 | 2.30 | 6 | 8 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.65 | 1.69 | 17 | 1 |
| 1:A:705:GLU:N | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.65 | 2.07 | 3 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.65 | 1.66 | 2 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.64 | 1.68 | 4 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:CG | 0.64 | 2.21 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:H | 0.64 | 1.52 | 19 | 4 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HB3 | 0.64 | 1.69 | 8 | 2 |
| 1:A:740:LEU:O | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.64 | 1.92 | 9 | 7 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:C | 0.64 | 2.13 | 7 | 3 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.64 | 2.80 | 3 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CA | 0.64 | 2.22 | 19 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.64 | 2.26 | 9 | 5 |
| 1:A:714:HIS:CE1 | 1:A:791:PHE:CE1 | 0.64 | 2.85 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.64 | 2.23 | 18 | 6 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:H | 0.64 | 1.48 | 13 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HB3 | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.64 | 1.68 | 11 | 3 |
| 1:A:786:ILE:HA | 1:A:789:GLN:HB2 | 0.64 | 1.68 | 7 | 20 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:HB | 0.64 | 1.93 | 6 | 9 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:705:GLU:N | 0.64 | 2.70 | 20 | 2 |
| 1:A:739:ASP:HA | 1:A:768:MET:SD | 0.64 | 2.31 | 1 | 4 |
| 1:A:755:TYR:HB3 | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.64 | 1.69 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:758:PRO:HB3 | 0.64 | 1.68 | 2 | 2 |
| 1:A:757:SER:CB | 1:A:758:PRO:HD2 | 0.64 | 2.23 | 13 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.64 | 2.22 | 8 | 7 |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CE1 | 0.64 | 2.28 | 19 | 6 |
| 1:A:703:LYS:HD2 | 1:A:704:CYS:N | 0.64 | 2.07 | 15 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HG | 1:A:768:MET:SD | 0.64 | 2.33 | 10 | 5 |
| 1:A:755:TYR:CE2 | 1:A:761:PHE:HB3 | 0.64 | 2.27 | 20 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HG13 | 1:A:792:PHE:CZ | 0.64 | 2.26 | 16 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:751:LEU:H | 0.64 | 1.52 | 9 | 5 |
| 1:A:628:CYS:O | 1:A:632:GLN:N | 0.64 | 2.30 | 8 | 12 |
| 1:A:652:HIS:ND1 | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.64 | 2.07 | 12 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.64 | 2.21 | 17 | 3 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.64 | 2.23 | 3 | 4 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:758:PRO:HG3 | 0.64 | 1.93 | 1 | 8 |
| 1:A:747:LEU:CG | 1:A:755:TYR:OH | 0.64 | 2.45 | 20 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:775:LEU:HD11 | 0.64 | 1.69 | 17 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.64 | 2.28 | 18 | 4 |
| 1:A:653:LEU:HB3 | 1:A:654:PRO:CD | 0.63 | 2.23 | 14 | 6 |
| 1:A:714:HIS:O | 1:A:717:CYS:SG | 0.63 | 2.56 | 5 | 18 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:O | 0.63 | 1.92 | 15 | 2 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:660:PRO:CD | 0.63 | 2.23 | 19 | 11 |
| 1:A:785:ILE:C | 1:A:789:GLN:HG3 | 0.63 | 2.12 | 1 | 4 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:HG | 0.63 | 1.70 | 18 | 2 |
| 1:A:653:LEU:O | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.63 | 1.92 | 20 | 9 |
| 1:A:762:ALA:HA | 1:A:765:VAL:CG1 | 0.63 | 2.23 | 5 | 5 |
| 1:A:649:LEU:HG | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.63 | 1.70 | 12 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:762:ALA:N | 0.63 | 2.32 | 20 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.63 | 1.69 | 8 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:658:ASP:CA | 0.63 | 2.23 | 12 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:664:TRP:CE3 | 0.63 | 2.27 | 9 | 9 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.63 | 1.71 | 9 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.63 | 2.28 | 8 | 2 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.63 | 1.54 | 15 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:CG | 0.63 | 2.23 | 6 | 2 |
| 1:A:757:SER:HB3 | 1:A:758:PRO:CD | 0.63 | 2.23 | 20 | 1 |
| 1:A:758:PRO:HB2 | 1:A:762:ALA:HB2 | 0.63 | 1.70 | 20 | 1 |
| 1:A:652:HIS:HB2 | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.63 | 1.71 | 16 | 2 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:786:ILE:HD13 | 0.63 | 1.94 | 19 | 5 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:H | 0.63 | 1.54 | 1 | 2 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.63 | 2.23 | 19 | 3 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.63 | 2.23 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.63 | 2.17 | 19 | 3 |
| 1:A:738:LEU:C | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.63 | 2.14 | 7 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:CB | 0.63 | 2.18 | 9 | 1 |
| 1:A:794:THR:O | 1:A:798:GLU:HG3 | 0.63 | 1.94 | 20 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:HB2 | 0.63 | 1.69 | 13 | 2 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:CG | 0.63 | 2.22 | 7 | 6 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.63 | 2.28 | 2 | 5 |
| 1:A:711:LEU:C | 1:A:717:CYS:SG | 0.62 | 2.77 | 17 | 3 |
| 1:A:746:ARG:HE | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.62 | 1.54 | 2 | 2 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:768:MET:HG3 | 0.62 | 1.94 | 6 | 1 |
| 1:A:665:SER:HB3 | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.62 | 1.70 | 11 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CG2 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.62 | 2.82 | 17 | 8 |
| 1:A:718:ARG:HG3 | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.62 | 1.71 | 4 | 2 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CB | 0.62 | 2.24 | 8 | 3 |
| 1:A:765:VAL:HA | 1:A:768:MET:HB2 | 0.62 | 1.69 | 16 | 14 |
| 1:A:759:GLN:O | 1:A:763:GLN:HB2 | 0.62 | 1.94 | 8 | 13 |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:CE | 0.62 | 2.23 | 3 | 4 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.62 | 1.95 | 5 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:647:PHE:CE2 | 0.62 | 2.29 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:CA | 0.62 | 2.24 | 16 | 2 |
| 1:A:769:PHE:HB3 | 1:A:785:ILE:CG2 | 0.62 | 2.23 | 11 | 3 |
| 1:A:755:TYR:CE2 | 1:A:758:PRO:HA | 0.62 | 2.30 | 16 | 7 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:656:LEU:CD2 | 0.62 | 2.24 | 17 | 2 |
| 1:A:628:CYS:N | 1:A:637:LEU:HG | 0.62 | 2.09 | 3 | 5 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.62 | 1.70 | 18 | 1 |
| 1:A:666:CYS:SG | 1:A:668:LEU:CD1 | 0.62 | 2.87 | 20 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.62 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD23 | 1:A:659:VAL:HG11 | 0.62 | 1.70 | 16 | 1 |
| 1:A:785:ILE:HA | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.62 | 1.69 | 11 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HB2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.62 | 2.25 | 8 | 2 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:646:CYS:SG | 0.62 | 2.55 | 2 | 13 |
| 1:A:703:LYS:HG3 | 1:A:800:PHE:CD1 | 0.62 | 2.30 | 15 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.62 | 2.08 | 17 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:758:PRO:N | 0.62 | 2.09 | 7 | 1 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.62 | 2.10 | 5 | 1 |
| 1:A:755:TYR:HE2 | 1:A:761:PHE:HB3 | 0.62 | 1.54 | 20 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CD1 | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.62 | 2.24 | 19 | 1 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.62 | 1.95 | 14 | 4 |
| 1:A:746:ARG:HH11 | 1:A:746:ARG:HA | 0.62 | 1.54 | 3 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.62 | 1.69 | 2 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.62 | 1.71 | 7 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.62 | 2.30 | 5 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HD2 | 0.62 | 1.53 | 8 | 2 |
| 1:A:656:LEU:HB3 | 1:A:659:VAL:HB | 0.62 | 1.71 | 16 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.62 | 2.24 | 1 | 4 |
| 1:A:755:TYR:H | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.62 | 1.55 | 4 | 1 |
| 1:A:665:SER:CB | 1:A:669:CYS:SG | 0.62 | 2.87 | 7 | 5 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:705:GLU:O | 0.62 | 2.48 | 17 | 6 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:760:GLU:OE2 | 0.62 | 1.95 | 6 | 1 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:711:LEU:N | 0.62 | 2.33 | 18 | 1 |
| 1:A:740:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.62 | 2.25 | 2 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.62 | 1.72 | 15 | 2 |
| 1:A:645:PHE:CD2 | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.62 | 2.29 | 16 | 2 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:652:HIS:CG | 0.62 | 2.53 | 14 | 2 |
| 1:A:639:MET:HA | 1:A:645:PHE:O | 0.62 | 1.93 | 2 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.62 | 1.70 | 7 | 2 |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:HG2 | 0.62 | 1.72 | 16 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CG | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.62 | 2.25 | 14 | 4 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:CD1 | 0.62 | 2.23 | 4 | 2 |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:HB | 0.62 | 1.55 | 18 | 3 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:759:GLN:C | 0.62 | 2.36 | 20 | 2 |
| 1:A:668:LEU:CD2 | 1:A:710:ALA:HB2 | 0.61 | 2.22 | 5 | 3 |
| 1:A:717:CYS:HB3 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.61 | 1.72 | 9 | 2 |
| 1:A:652:HIS:HD1 | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.61 | 1.54 | 12 | 1 |
| 1:A:696:LEU:N | 1:A:756:SER:HA | 0.61 | 2.10 | 3 | 3 |
| 1:A:755:TYR:CE2 | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.61 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.61 | 2.29 | 11 | 5 |
| 1:A:768:MET:O | 1:A:772:PHE:CB | 0.61 | 2.48 | 4 | 10 |
| 1:A:660:PRO:O | 1:A:662:GLU:N | 0.61 | 2.33 | 19 | 8 |
| 1:A:717:CYS:HB2 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.61 | 2.25 | 5 | 5 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:NE2 | 0.61 | 2.10 | 1 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HA | 1:A:796:MET:HE3 | 0.61 | 1.71 | 13 | 5 |
| 1:A:745:ALA:CB | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.61 | 2.25 | 17 | 7 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.61 | 2.17 | 3 | 5 |
| 1:A:710:ALA:HB2 | 1:A:795:ARG:HB2 | 0.61 | 1.71 | 3 | 2 |
| 1:A:629:ARG:CZ | 1:A:647:PHE:CD1 | 0.61 | 2.83 | 9 | 1 |
| 1:A:668:LEU:O | 1:A:668:LEU:HD22 | 0.61 | 1.95 | 20 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:697:SER:N | 0.61 | 2.08 | 16 | 2 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.61 | 1.72 | 19 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HE22 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.61 | 1.54 | 1 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:758:PRO:HA | 0.61 | 2.34 | 3 | 7 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.61 | 1.96 | 4 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:703:LYS:HG3 | 1:A:800:PHE:CE1 | 0.61 | 2.30 | 15 | 2 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:HG2 | 0.61 | 1.71 | 14 | 3 |
| 1:A:701:GLN:HG3 | 1:A:704:CYS:SG | 0.61 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:669:CYS:HB2 | 0.61 | 1.96 | 1 | 9 |
| 1:A:630:VAL:HA | 1:A:713:CYS:HA | 0.61 | 1.72 | 14 | 6 |
| 1:A:720:LEU:CA | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.61 | 2.22 | 12 | 5 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CZ | 0.61 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:742:LEU:N | 0.61 | 2.33 | 10 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:CB | 0.61 | 2.25 | 16 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CZ | 1:A:761:PHE:HB3 | 0.61 | 2.31 | 11 | 4 |
| 1:A:765:VAL:CG1 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.61 | 2.84 | 13 | 13 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:659:VAL:H | 0.61 | 2.08 | 1 | 5 |
| 1:A:667:SER:C | 1:A:669:CYS:H | 0.61 | 1.98 | 9 | 10 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:CA | 0.61 | 2.23 | 11 | 3 |
| 1:A:745:ALA:O | 1:A:749:GLU:N | 0.61 | 2.34 | 11 | 15 |
| 1:A:653:LEU:HB3 | 1:A:654:PRO:HD3 | 0.61 | 1.73 | 5 | 15 |
| 1:A:793:GLU:O | 1:A:797:ASN:HB2 | 0.61 | 1.96 | 13 | 12 |
| 1:A:712:PHE:O | 1:A:717:CYS:SG | 0.61 | 2.58 | 18 | 11 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.61 | 1.73 | 20 | 4 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.61 | 2.35 | 17 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:SD | 0.61 | 2.35 | 6 | 3 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:666:CYS:C | 0.61 | 2.38 | 9 | 8 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:712:PHE:HB2 | 0.61 | 1.96 | 12 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:HB2 | 0.61 | 1.73 | 14 | 6 |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:HA | 0.61 | 1.72 | 7 | 1 |
| 1:A:702:ARG:HG3 | 1:A:703:LYS:HD3 | 0.61 | 1.73 | 19 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:N | 0.61 | 2.33 | 13 | 10 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.61 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:788:LEU:HD23 | 1:A:789:GLN:N | 0.61 | 2.11 | 11 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:CD | 0.61 | 2.26 | 1 | 16 |
| 1:A:712:PHE:CZ | 1:A:744:ARG:HD3 | 0.61 | 2.30 | 13 | 7 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:718:ARG:HB3 | 0.61 | 1.96 | 2 | 3 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CD2 | 0.61 | 2.31 | 16 | 4 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:647:PHE:HB2 | 0.61 | 1.71 | 17 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE2 | 1:A:799:ALA:HB3 | 0.61 | 1.71 | 18 | 2 |
| 1:A:667:SER:HB3 | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.61 | 2.26 | 9 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB3 | 1:A:756:SER:HB2 | 0.61 | 1.72 | 13 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HD2 | 1:A:751:LEU:HB3 | 0.60 | 1.72 | 3 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CD1 | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.60 | 2.31 | 7 | 4 |
| 1:A:753:PRO:N | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.60 | 2.10 | 1 | 2 |
| 1:A:645:PHE:CB | 1:A:666:CYS:SG | 0.60 | 2.90 | 1 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:758:PRO:HB3 | 1:A:800:PHE:HZ | 0.60 | 1.55 | 4 | 2 |
| 1:A:627:ILE:O | 1:A:629:ARG:N | 0.60 | 2.34 | 5 | 13 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:711:LEU:HB2 | 0.60 | 1.96 | 17 | 2 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:634:PRO:HA | 0.60 | 1.96 | 3 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HD12 | 1:A:647:PHE:C | 0.60 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HE1 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.60 | 1.53 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:757:SER:C | 0.60 | 2.15 | 13 | 1 |
| 1:A:752:SER:CB | 1:A:753:PRO:HD3 | 0.60 | 2.25 | 12 | 5 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:742:LEU:HD13 | 0.60 | 1.73 | 18 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:660:PRO:C | 0.60 | 2.17 | 16 | 1 |
| 1:A:655:ALA:HB1 | 1:A:657:GLN:HG3 | 0.60 | 1.73 | 15 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HB2 | 0.60 | 1.72 | 15 | 4 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CZ | 0.60 | 2.27 | 17 | 1 |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HG12 | 0.60 | 1.56 | 10 | 2 |
| 1:A:761:PHE:CD2 | 1:A:762:ALA:N | 0.60 | 2.70 | 1 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CD2 | 1:A:664:TRP:CH2 | 0.60 | 2.89 | 2 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:CG2 | 0.60 | 2.26 | 2 | 3 |
| 1:A:744:ARG:C | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.60 | 2.17 | 6 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CB | 0.60 | 2.26 | 13 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:HD23 | 0.60 | 1.72 | 14 | 6 |
| 1:A:720:LEU:CG | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.60 | 2.26 | 7 | 3 |
| 1:A:710:ALA:HB2 | 1:A:795:ARG:CG | 0.60 | 2.26 | 3 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:O | 0.60 | 1.96 | 1 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.60 | 1.74 | 6 | 4 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:CD2 | 0.60 | 2.27 | 16 | 4 |
| 1:A:762:ALA:CA | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.60 | 2.26 | 5 | 2 |
| 1:A:627:ILE:HA | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.60 | 1.72 | 8 | 2 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:656:LEU:CB | 0.60 | 2.80 | 12 | 4 |
| 1:A:762:ALA:O | 1:A:765:VAL:HB | 0.60 | 1.97 | 8 | 12 |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:703:LYS:HG3 | 0.60 | 1.97 | 8 | 10 |
| 1:A:708:LEU:N | 1:A:761:PHE:HZ | 0.60 | 1.94 | 13 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.60 | 2.25 | 13 | 3 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:647:PHE:O | 0.60 | 2.49 | 11 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CB | 0.60 | 2.25 | 12 | 10 |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:HE2 | 0.60 | 1.72 | 13 | 4 |
| 1:A:744:ARG:HE | 1:A:750:LYS:HZ3 | 0.60 | 1.39 | 4 | 2 |
| 1:A:795:ARG:HA | 1:A:798:GLU:HB2 | 0.60 | 1.73 | 6 | 8 |
| 1:A:771:GLN:C | 1:A:775:LEU:HD13 | 0.60 | 2.17 | 7 | 2 |
| 1:A:702:ARG:O | 1:A:706:ARG:HG3 | 0.60 | 1.97 | 10 | 2 |
| 1:A:703:LYS:HZ3 | 1:A:799:ALA:HB3 | 0.60 | 1.57 | 18 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.60 | 1.74 | 14 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.60 | 1.72 | 11 | 4 |
| 1:A:649:LEU:CA | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.60 | 2.27 | 16 | 3 |
| 1:A:629:ARG:HH22 | 1:A:666:CYS:HB2 | 0.60 | 1.57 | 9 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HG11 | 1:A:647:PHE:CD2 | 0.60 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:765:VAL:CG2 | 1:A:792:PHE:CE1 | 0.60 | 2.85 | 19 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CD2 | 0.60 | 2.26 | 8 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG21 | 1:A:660:PRO:CG | 0.59 | 2.27 | 14 | 5 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CA | 0.59 | 2.27 | 10 | 1 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.59 | 2.12 | 9 | 1 |
| 1:A:635:GLY:C | 1:A:637:LEU:H | 0.59 | 2.00 | 11 | 1 |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:702:ARG:HB2 | 0.59 | 1.97 | 20 | 12 |
| 1:A:626:THR:C | 1:A:627:ILE:HG13 | 0.59 | 2.17 | 6 | 14 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:N | 0.59 | 2.12 | 13 | 7 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:649:LEU:HB2 | 0.59 | 1.97 | 20 | 12 |
| 1:A:709:LEU:HA | 1:A:712:PHE:HB2 | 0.59 | 1.73 | 8 | 10 |
| 1:A:746:ARG:N | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.59 | 2.11 | 7 | 4 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59 | 1.72 | 5 | 1 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:764:ASP:N | 0.59 | 2.35 | 20 | 2 |
| 1:A:666:CYS:SG | 1:A:666:CYS:O | 0.59 | 2.61 | 11 | 3 |
| 1:A:772:PHE:HE2 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.59 | 1.54 | 4 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.59 | 2.27 | 2 | 4 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:703:LYS:CE | 0.59 | 2.51 | 15 | 1 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:650:ASP:N | 0.59 | 2.35 | 19 | 3 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:742:LEU:HG | 0.59 | 1.97 | 18 | 1 |
| 1:A:773:ASN:ND2 | 1:A:782:VAL:HG12 | 0.59 | 2.13 | 11 | 2 |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.59 | 1.73 | 4 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HD3 | 1:A:800:PHE:HA | 0.59 | 1.73 | 13 | 4 |
| 1:A:773:ASN:ND2 | 1:A:782:VAL:HA | 0.59 | 2.13 | 1 | 12 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:CG | 0.59 | 2.09 | 15 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:714:HIS:NE2 | 0.59 | 2.12 | 17 | 2 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:748:GLN:HG3 | 0.59 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:656:LEU:CG | 1:A:660:PRO:HD3 | 0.59 | 2.27 | 18 | 6 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.59 | 1.72 | 5 | 1 |
| 1:A:717:CYS:CB | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59 | 2.27 | 13 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:757:SER:HA | 0.59 | 1.75 | 8 | 1 |
| 1:A:755:TYR:OH | 1:A:761:PHE:CG | 0.59 | 2.55 | 17 | 5 |
| 1:A:701:GLN:HG3 | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.59 | 1.74 | 16 | 2 |
| 1:A:761:PHE:HA | 1:A:764:ASP:OD1 | 0.59 | 1.96 | 3 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HA | 1:A:743:ILE:CD1 | 0.59 | 2.28 | 10 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:666:CYS:SG | 0.59 | 2.60 | 9 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:638:VAL:O | 0.59 | 1.97 | 1 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:656:LEU:C | 1:A:658:ASP:H | 0.59 | 1.99 | 4 | 7 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:789:GLN:HA | 0.59 | 2.32 | 12 | 10 |
| 1:A:757:SER:HB3 | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.59 | 1.75 | 7 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.59 | 1.73 | 13 | 2 |
| 1:A:740:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:SD | 0.59 | 2.90 | 16 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CE2 | 0.59 | 2.32 | 4 | 10 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:710:ALA:HB3 | 0.59 | 1.97 | 16 | 6 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:O | 0.59 | 1.97 | 13 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HB3 | 1:A:755:TYR:CZ | 0.59 | 2.33 | 5 | 3 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:659:VAL:CG2 | 0.59 | 2.27 | 16 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CB | 0.59 | 2.27 | 11 | 2 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:655:ALA:N | 0.59 | 2.36 | 18 | 13 |
| 1:A:695:LYS:HG3 | 1:A:755:TYR:C | 0.59 | 2.18 | 4 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HD3 | 1:A:796:MET:HE2 | 0.59 | 1.74 | 15 | 1 |
| 1:A:737:THR:HA | 1:A:771:GLN:HG3 | 0.59 | 1.74 | 13 | 5 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:721:HIS:CE1 | 0.59 | 2.33 | 9 | 2 |
| 1:A:751:LEU:HD21 | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.59 | 1.74 | 11 | 1 |
| 1:A:626:THR:HA | 1:A:646:CYS:SG | 0.59 | 2.38 | 16 | 3 |
| 1:A:710:ALA:O | 1:A:714:HIS:CE1 | 0.59 | 2.56 | 4 | 1 |
| 1:A:761:PHE:CG | 1:A:762:ALA:N | 0.59 | 2.70 | 7 | 4 |
| 1:A:710:ALA:HB2 | 1:A:795:ARG:CB | 0.59 | 2.28 | 3 | 2 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CE2 | 0.59 | 2.32 | 13 | 5 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:666:CYS:O | 0.59 | 2.21 | 16 | 4 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:792:PHE:CE2 | 0.59 | 2.84 | 16 | 1 |
| 1:A:752:SER:HB2 | 1:A:753:PRO:CD | 0.59 | 2.27 | 17 | 11 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:792:PHE:N | 0.59 | 2.35 | 18 | 8 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.59 | 1.72 | 15 | 2 |
| 1:A:665:SER:HB3 | 1:A:669:CYS:SG | 0.59 | 2.38 | 8 | 3 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:700:ASN:HB2 | 0.59 | 1.98 | 15 | 10 |
| 1:A:707:VAL:HB | 1:A:761:PHE:CZ | 0.59 | 2.32 | 6 | 5 |
| 1:A:720:LEU:HA | 1:A:723:LEU:CD2 | 0.59 | 2.23 | 12 | 10 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CB | 0.59 | 2.27 | 16 | 6 |
| 1:A:723:LEU:HB2 | 1:A:737:THR:CG2 | 0.59 | 2.28 | 1 | 10 |
| 1:A:759:GLN:O | 1:A:763:GLN:HG3 | 0.59 | 1.98 | 1 | 7 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:790:ARG:HD2 | 0.59 | 1.97 | 6 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.59 | 1.98 | 14 | 1 |
| 1:A:660:PRO:HG2 | 1:A:664:TRP:HB2 | 0.58 | 1.72 | 11 | 9 |
| 1:A:719:PRO:HB2 | 1:A:772:PHE:CZ | 0.58 | 2.33 | 15 | 6 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.58 | 2.32 | 13 | 5 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:764:ASP:OD1 | 0.58 | 2.21 | 3 | 1 |
| 1:A:637:LEU:CB | 1:A:646:CYS:HB3 | 0.58 | 2.28 | 13 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:718:ARG:HG2 | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.58 | 1.73 | 9 | 1 |
| 1:A:789:GLN:O | 1:A:793:GLU:HB2 | 0.58 | 1.97 | 16 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:750:LYS:HB3 | 0.58 | 1.74 | 19 | 1 |
| 1:A:710:ALA:HB1 | 1:A:795:ARG:HG3 | 0.58 | 1.75 | 16 | 5 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:710:ALA:N | 0.58 | 2.36 | 1 | 5 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:660:PRO:HG3 | 0.58 | 1.74 | 3 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.58 | 1.75 | 7 | 3 |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.58 | 1.74 | 14 | 2 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:760:GLU:N | 0.58 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:HG22 | 0.58 | 1.97 | 14 | 2 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:627:ILE:HG13 | 0.58 | 1.98 | 19 | 6 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.58 | 2.33 | 16 | 4 |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:HB2 | 0.58 | 1.74 | 7 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD2 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.58 | 2.84 | 9 | 2 |
| 1:A:627:ILE:C | 1:A:646:CYS:SG | 0.58 | 2.81 | 19 | 1 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.58 | 2.66 | 15 | 2 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.58 | 2.14 | 12 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.58 | 2.28 | 16 | 1 |
| 1:A:717:CYS:HB2 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.58 | 1.73 | 11 | 3 |
| 1:A:753:PRO:O | 1:A:754:PRO:O | 0.58 | 2.21 | 4 | 4 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.58 | 1.98 | 19 | 3 |
| 1:A:628:CYS:HA | 1:A:646:CYS:O | 0.58 | 1.99 | 15 | 14 |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HB2 | 0.58 | 1.76 | 15 | 4 |
| 1:A:738:LEU:N | 1:A:738:LEU:CD1 | 0.58 | 2.61 | 6 | 3 |
| 1:A:749:GLU:HG3 | 1:A:753:PRO:HA | 0.58 | 1.75 | 19 | 2 |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:712:PHE:CD1 | 0.58 | 2.34 | 3 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CG | 0.58 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:721:HIS:HA | 1:A:740:LEU:HB2 | 0.58 | 1.75 | 18 | 11 |
| 1:A:644:GLU:O | 1:A:645:PHE:C | 0.58 | 2.42 | 17 | 8 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:738:LEU:HD22 | 0.58 | 1.98 | 15 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HG | 1:A:768:MET:SD | 0.58 | 2.38 | 15 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.58 | 2.29 | 9 | 3 |
| 1:A:747:LEU:CD1 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.58 | 2.86 | 12 | 3 |
| 1:A:628:CYS:CA | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.58 | 2.28 | 10 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HA | 1:A:757:SER:HA | 0.58 | 1.73 | 20 | 2 |
| 1:A:712:PHE:HA | 1:A:721:HIS:CE1 | 0.58 | 2.34 | 11 | 2 |
| 1:A:769:PHE:CD1 | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.58 | 2.33 | 11 | 1 |
| 1:A:664:TRP:CG | 1:A:665:SER:N | 0.58 | 2.71 | 4 | 17 |
| 1:A:792:PHE:O | 1:A:796:MET:HB3 | 0.58 | 1.98 | 8 | 6 |
| 1:A:653:LEU:O | 1:A:744:ARG:NE | 0.58 | 2.37 | 12 | 2 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:762:ALA:HB2 | 0.58 | 2.39 | 13 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:HA | 0.58 | 1.76 | 12 | 5 |
| 1:A:707:VAL:CG2 | 1:A:796:MET:HB2 | 0.58 | 2.28 | 9 | 5 |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:795:ARG:HH12 | 0.58 | 1.59 | 6 | 1 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.58 | 2.28 | 7 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:761:PHE:HE2 | 0.58 | 2.21 | 20 | 1 |
| 1:A:666:CYS:HB3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 0.58 | 1.74 | 1 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:H | 0.58 | 1.59 | 17 | 5 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.58 | 2.29 | 10 | 1 |
| 1:A:765:VAL:CG1 | 1:A:792:PHE:CE1 | 0.58 | 2.85 | 16 | 3 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.58 | 2.34 | 13 | 4 |
| 1:A:748:GLN:O | 1:A:749:GLU:HB2 | 0.58 | 1.99 | 14 | 8 |
| 1:A:751:LEU:HG | 1:A:752:SER:H | 0.58 | 1.58 | 4 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:C | 0.58 | 2.19 | 17 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HD23 | 0.58 | 1.76 | 5 | 3 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:660:PRO:HG2 | 0.58 | 2.26 | 16 | 2 |
| 1:A:743:ILE:CG2 | 1:A:761:PHE:HB2 | 0.57 | 2.29 | 11 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.57 | 1.76 | 16 | 4 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:HA | 0.57 | 2.28 | 15 | 7 |
| 1:A:645:PHE:HB3 | 1:A:666:CYS:HB3 | 0.57 | 1.73 | 3 | 5 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:789:GLN:HG3 | 0.57 | 1.98 | 16 | 5 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:HD13 | 0.57 | 1.73 | 15 | 2 |
| 1:A:638:VAL:CG2 | 1:A:647:PHE:HB2 | 0.57 | 2.25 | 20 | 3 |
| 1:A:772:PHE:CG | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.57 | 2.34 | 13 | 6 |
| 1:A:761:PHE:HD1 | 1:A:761:PHE:C | 0.57 | 2.00 | 5 | 3 |
| 1:A:717:CYS:HA | 1:A:720:LEU:HB2 | 0.57 | 1.76 | 5 | 6 |
| 1:A:760:GLU:HG3 | 1:A:761:PHE:H | 0.57 | 1.58 | 6 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:757:SER:HB2 | 0.57 | 1.76 | 13 | 2 |
| 1:A:712:PHE:CD1 | 1:A:740:LEU:HG | 0.57 | 2.34 | 19 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.57 | 1.73 | 11 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HG | 1:A:709:LEU:N | 0.57 | 2.14 | 14 | 3 |
| 1:A:712:PHE:CE1 | 1:A:744:ARG:HG3 | 0.57 | 2.34 | 15 | 1 |
| 1:A:652:HIS:ND1 | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.57 | 2.15 | 16 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.57 | 1.74 | 16 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:CD2 | 0.57 | 2.33 | 8 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CD1 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.57 | 2.28 | 16 | 7 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.57 | 1.76 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:CD2 | 0.57 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HB2 | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.57 | 1.75 | 17 | 5 |
| 1:A:746:ARG:HB2 | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.57 | 1.75 | 3 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.57 | 2.49 | 16 | 1 |
| 1:A:643:CYS:O | 1:A:645:PHE:N | 0.57 | 2.37 | 8 | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:639:MET:O | 1:A:640:CYS:C | 0.57 | 2.43 | 6 | 10 |
| 1:A:751:LEU:HG | 1:A:752:SER:N | 0.57 | 2.14 | 12 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CD2 | 1:A:652:HIS:HA | 0.57 | 2.34 | 19 | 6 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.57 | 2.35 | 3 | 1 |
| 1:A:627:ILE:CA | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.57 | 2.30 | 8 | 3 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:712:PHE:N | 0.57 | 2.37 | 18 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:SD | 0.57 | 2.40 | 19 | 1 |
| 1:A:752:SER:CB | 1:A:753:PRO:CD | 0.57 | 2.82 | 7 | 8 |
| 1:A:626:THR:CB | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.57 | 2.28 | 18 | 11 |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:646:CYS:SG | 0.57 | 2.40 | 17 | 8 |
| 1:A:704:CYS:CB | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.57 | 2.87 | 19 | 2 |
| 1:A:707:VAL:HG12 | 1:A:708:LEU:N | 0.57 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HG2 | 0.57 | 1.77 | 14 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:649:LEU:CD1 | 0.57 | 2.28 | 15 | 3 |
| 1:A:652:HIS:CE1 | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.57 | 2.35 | 6 | 5 |
| 1:A:707:VAL:HG22 | 1:A:761:PHE:HZ | 0.57 | 1.59 | 20 | 2 |
| 1:A:655:ALA:O | 1:A:656:LEU:C | 0.57 | 2.42 | 7 | 2 |
| 1:A:738:LEU:C | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.57 | 2.18 | 2 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:696:LEU:O | 0.57 | 1.98 | 7 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:737:THR:HG22 | 0.57 | 2.00 | 10 | 1 |
| 1:A:697:SER:HB3 | 1:A:700:ASN:HB2 | 0.57 | 1.77 | 4 | 10 |
| 1:A:754:PRO:O | 1:A:755:TYR:O | 0.57 | 2.23 | 4 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.57 | 2.35 | 4 | 4 |
| 1:A:639:MET:O | 1:A:639:MET:HG3 | 0.57 | 1.99 | 6 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HA | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.57 | 1.77 | 4 | 5 |
| 1:A:773:ASN:CG | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.57 | 2.20 | 13 | 9 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:CD2 | 0.57 | 2.11 | 15 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:HG2 | 0.57 | 2.30 | 15 | 1 |
| 1:A:773:ASN:CB | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.57 | 2.30 | 3 | 8 |
| 1:A:634:PRO:CA | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.57 | 2.27 | 1 | 5 |
| 1:A:649:LEU:HB3 | 1:A:656:LEU:CB | 0.57 | 2.30 | 14 | 7 |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:645:PHE:HB2 | 0.57 | 2.40 | 7 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:761:PHE:HE2 | 0.57 | 1.58 | 7 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HB2 | 1:A:772:PHE:CE2 | 0.57 | 2.34 | 19 | 2 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:670:HIS:HB3 | 0.57 | 1.99 | 15 | 2 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.57 | 2.34 | 3 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.57 | 1.59 | 18 | 1 |
| 1:A:788:LEU:H | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.57 | 1.58 | 8 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:HG | 0.57 | 1.75 | 8 | 4 |
| 1:A:772:PHE:CZ | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.57 | 2.35 | 4 | 4 |
| 1:A:753:PRO:CD | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.57 | 2.28 | 5 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:723:LEU:HD23 | 1:A:737:THR:CG2 | 0.56 | 2.29 | 10 | 2 |
| 1:A:630:VAL:CG2 | 1:A:631:CYS:N | 0.56 | 2.68 | 14 | 5 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:NE1 | 0.56 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:767:ARG:O | 1:A:770:LYS:N | 0.56 | 2.37 | 15 | 13 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.56 | 2.68 | 17 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:768:MET:SD | 0.56 | 2.63 | 9 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:758:PRO:CG | 0.56 | 2.29 | 13 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:HA | 0.56 | 1.77 | 11 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CG | 1:A:755:TYR:HD2 | 0.56 | 2.13 | 11 | 4 |
| 1:A:645:PHE:HB3 | 1:A:666:CYS:CB | 0.56 | 2.30 | 3 | 3 |
| 1:A:792:PHE:HD2 | 1:A:793:GLU:HG2 | 0.56 | 1.61 | 20 | 5 |
| 1:A:639:MET:HA | 1:A:644:GLU:O | 0.56 | 1.99 | 5 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.56 | 2.30 | 20 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:CD2 | 0.56 | 2.29 | 13 | 2 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:658:ASP:C | 0.56 | 2.74 | 11 | 3 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:HD2 | 0.56 | 1.60 | 10 | 4 |
| 1:A:627:ILE:HD13 | 1:A:632:GLN:HB3 | 0.56 | 1.75 | 6 | 5 |
| 1:A:627:ILE:O | 1:A:627:ILE:HD12 | 0.56 | 2.00 | 19 | 5 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.56 | 2.30 | 14 | 6 |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:791:PHE:HE2 | 0.56 | 1.59 | 4 | 1 |
| 1:A:775:LEU:C | 1:A:775:LEU:HD23 | 0.56 | 2.19 | 17 | 3 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:747:LEU:HB3 | 0.56 | 2.15 | 15 | 3 |
| 1:A:665:SER:OG | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.56 | 2.01 | 14 | 6 |
| 1:A:744:ARG:HA | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.56 | 2.15 | 17 | 1 |
| 1:A:759:GLN:HG2 | 1:A:763:GLN:HG3 | 0.56 | 1.76 | 5 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.56 | 1.77 | 18 | 1 |
| 1:A:747:LEU:CA | 1:A:755:TYR:OH | 0.56 | 2.52 | 20 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:CD2 | 0.56 | 2.30 | 16 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:661:GLY:N | 0.56 | 2.15 | 16 | 1 |
| 1:A:660:PRO:HG3 | 1:A:664:TRP:CG | 0.56 | 2.35 | 16 | 5 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.56 | 1.76 | 10 | 4 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:758:PRO:HG3 | 0.56 | 1.77 | 13 | 1 |
| 1:A:788:LEU:HA | 1:A:791:PHE:HB2 | 0.56 | 1.76 | 11 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:649:LEU:HD21 | 0.56 | 1.77 | 14 | 2 |
| 1:A:703:LYS:O | 1:A:706:ARG:HB2 | 0.56 | 2.00 | 20 | 11 |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:721:HIS:HE1 | 0.56 | 1.61 | 6 | 3 |
| 1:A:705:GLU:HG2 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.56 | 2.14 | 2 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HA | 0.56 | 1.78 | 6 | 1 |
| 1:A:703:LYS:NZ | 1:A:799:ALA:HB3 | 0.56 | 2.16 | 18 | 2 |
| 1:A:755:TYR:N | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.56 | 2.15 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CG | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.56 | 2.31 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:790:ARG:HG2 | 0.56 | 2.00 | 1 | 6 |
| 1:A:705:GLU:O | 1:A:709:LEU:HB2 | 0.56 | 2.00 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.56 | 1.77 | 20 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CA | 1:A:751:LEU:HG | 0.56 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HB | 1:A:768:MET:HE2 | 0.56 | 1.77 | 15 | 1 |
| 1:A:709:LEU:O | 1:A:710:ALA:C | 0.56 | 2.44 | 7 | 13 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:HA | 0.56 | 1.78 | 12 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:738:LEU:HD13 | 0.56 | 2.01 | 17 | 1 |
| 1:A:740:LEU:H | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.56 | 1.61 | 18 | 2 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:660:PRO:CD | 0.56 | 2.84 | 8 | 5 |
| 1:A:703:LYS:NZ | 1:A:795:ARG:O | 0.56 | 2.34 | 14 | 2 |
| 1:A:659:VAL:O | 1:A:660:PRO:O | 0.56 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CB | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.56 | 2.31 | 2 | 2 |
| 1:A:718:ARG:HB2 | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.56 | 1.78 | 13 | 12 |
| 1:A:716:PRO:HB3 | 1:A:784:SER:O | 0.56 | 2.00 | 2 | 8 |
| 1:A:627:ILE:HB | 1:A:632:GLN:O | 0.56 | 2.00 | 8 | 8 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.56 | 2.35 | 7 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.56 | 1.78 | 2 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:701:GLN:HG2 | 0.56 | 1.77 | 7 | 1 |
| 1:A:711:LEU:O | 1:A:717:CYS:CB | 0.56 | 2.54 | 11 | 1 |
| 1:A:766:GLY:O | 1:A:770:LYS:HD3 | 0.56 | 2.00 | 11 | 16 |
| 1:A:667:SER:C | 1:A:669:CYS:N | 0.56 | 2.58 | 5 | 10 |
| 1:A:783:GLN:HA | 1:A:786:ILE:HB | 0.56 | 1.76 | 13 | 11 |
| 1:A:627:ILE:HA | 1:A:633:LYS:O | 0.56 | 2.01 | 20 | 13 |
| 1:A:762:ALA:O | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.56 | 2.01 | 20 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:767:ARG:HD3 | 0.56 | 2.30 | 9 | 4 |
| 1:A:638:VAL:CG2 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.56 | 2.30 | 2 | 5 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:669:CYS:SG | 0.56 | 2.64 | 4 | 3 |
| 1:A:752:SER:HB3 | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.56 | 1.78 | 15 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:767:ARG:CB | 0.56 | 2.54 | 19 | 6 |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:721:HIS:CE1 | 0.56 | 2.36 | 20 | 3 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.56 | 2.36 | 19 | 2 |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:761:PHE:CG | 0.56 | 2.35 | 5 | 1 |
| 1:A:744:ARG:NE | 1:A:750:LYS:HE2 | 0.56 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:700:ASN:HB2 | 1:A:757:SER:OG | 0.56 | 2.01 | 20 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:742:LEU:HB3 | 0.56 | 1.78 | 14 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB3 | 1:A:696:LEU:HD23 | 0.56 | 1.78 | 8 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HB3 | 1:A:789:GLN:OE1 | 0.56 | 2.01 | 1 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:758:PRO:O | 0.55 | 2.63 | 10 | 3 |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HB3 | 0.55 | 1.61 | 15 | 3 |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:712:PHE:HB3 | 0.55 | 1.77 | 17 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HD3 | 0.55 | 1.79 | 1 | 6 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:660:PRO:CD | 0.55 | 2.31 | 5 | 7 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.55 | 2.16 | 17 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.55 | 1.78 | 3 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB3 | 1:A:755:TYR:O | 0.55 | 2.01 | 14 | 3 |
| 1:A:651:CYS:O | 1:A:653:LEU:N | 0.55 | 2.39 | 18 | 3 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:761:PHE:N | 0.55 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:768:MET:HG3 | 0.55 | 2.02 | 4 | 3 |
| 1:A:647:PHE:O | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.55 | 2.01 | 16 | 4 |
| 1:A:769:PHE:CZ | 1:A:792:PHE:HB2 | 0.55 | 2.36 | 10 | 7 |
| 1:A:755:TYR:CD2 | 1:A:760:GLU:HB3 | 0.55 | 2.36 | 13 | 2 |
| 1:A:721:HIS:HA | 1:A:740:LEU:CB | 0.55 | 2.31 | 19 | 1 |
| 1:A:744:ARG:O | 1:A:748:GLN:N | 0.55 | 2.39 | 4 | 3 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:750:LYS:HB2 | 0.55 | 1.79 | 13 | 6 |
| 1:A:738:LEU:CB | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.55 | 2.31 | 15 | 2 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:768:MET:CG | 0.55 | 2.54 | 6 | 3 |
| 1:A:631:CYS:HB3 | 1:A:633:LYS:HE3 | 0.55 | 1.78 | 5 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CG2 | 1:A:761:PHE:CG | 0.55 | 2.89 | 5 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HG | 0.55 | 1.78 | 20 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.55 | 2.88 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:658:ASP:HA | 0.55 | 1.77 | 12 | 1 |
| 1:A:783:GLN:HE21 | 1:A:783:GLN:C | 0.55 | 2.04 | 12 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:709:LEU:HG | 0.55 | 1.78 | 6 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.55 | 1.79 | 5 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HA | 1:A:772:PHE:HD2 | 0.55 | 1.62 | 9 | 1 |
| 1:A:765:VAL:CG2 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.55 | 2.89 | 20 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HA | 1:A:796:MET:HE1 | 0.55 | 1.78 | 1 | 2 |
| 1:A:633:LYS:HB2 | 1:A:648:HIS:CE1 | 0.55 | 2.37 | 11 | 1 |
| 1:A:664:TRP:CH2 | 1:A:666:CYS:HA | 0.55 | 2.37 | 15 | 4 |
| 1:A:717:CYS:CA | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.55 | 2.30 | 13 | 5 |
| 1:A:699:ALA:HB1 | 1:A:703:LYS:NZ | 0.55 | 2.16 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:764:ASP:O | 0.55 | 2.54 | 19 | 5 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.55 | 2.01 | 15 | 1 |
| 1:A:653:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.55 | 1.61 | 3 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.55 | 1.76 | 5 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:758:PRO:HD3 | 0.55 | 1.79 | 20 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.55 | 2.31 | 16 | 1 |
| 1:A:640:CYS:C | 1:A:642:GLN:H | 0.55 | 2.05 | 3 | 17 |
| 1:A:649:LEU:HD23 | 1:A:649:LEU:N | 0.55 | 2.15 | 9 | 5 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:697:SER:HB3 | 0.55 | 2.02 | 12 | 2 |
| 1:A:755:TYR:CE1 | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.55 | 2.36 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:718:ARG:O | 1:A:721:HIS:HB2 | 0.55 | 2.01 | 17 | 4 |
| 1:A:711:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.55 | 2.31 | 17 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.55 | 1.61 | 3 | 2 |
| 1:A:711:LEU:HB2 | 1:A:792:PHE:CD2 | 0.55 | 2.36 | 16 | 1 |
| 1:A:783:GLN:HA | 1:A:783:GLN:HE21 | 0.55 | 1.61 | 11 | 2 |
| 1:A:751:LEU:H | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.55 | 2.15 | 9 | 2 |
| 1:A:742:LEU:HA | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.55 | 1.76 | 17 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HG2 | 0.55 | 1.78 | 6 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HB | 0.55 | 1.79 | 6 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:700:ASN:CB | 0.55 | 2.32 | 8 | 1 |
| 1:A:711:LEU:O | 1:A:717:CYS:HB2 | 0.55 | 2.02 | 11 | 1 |
| 1:A:710:ALA:HB2 | 1:A:795:ARG:HG3 | 0.55 | 1.79 | 3 | 4 |
| 1:A:755:TYR:OH | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.55 | 2.60 | 17 | 5 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:649:LEU:C | 0.55 | 2.45 | 9 | 2 |
| 1:A:697:SER:HB3 | 1:A:700:ASN:H | 0.55 | 1.62 | 4 | 4 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:O | 0.55 | 2.01 | 16 | 3 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:CD1 | 0.55 | 2.31 | 2 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:767:ARG:HD3 | 0.55 | 1.79 | 14 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HZ | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.55 | 1.60 | 11 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:CD2 | 0.55 | 2.37 | 16 | 5 |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:632:GLN:HG2 | 0.55 | 1.79 | 3 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:NH2 | 0.55 | 2.17 | 20 | 1 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:708:LEU:C | 0.54 | 2.45 | 1 | 5 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:721:HIS:NE2 | 0.54 | 2.81 | 3 | 10 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.54 | 2.32 | 20 | 1 |
| 1:A:752:SER:N | 1:A:753:PRO:CD | 0.54 | 2.70 | 1 | 2 |
| 1:A:659:VAL:HG13 | 1:A:660:PRO:N | 0.54 | 2.17 | 16 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HD21 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.54 | 1.80 | 11 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HA | 1:A:751:LEU:HG | 0.54 | 1.78 | 11 | 1 |
| 1:A:701:GLN:O | 1:A:705:GLU:HG3 | 0.54 | 2.03 | 6 | 5 |
| 1:A:770:LYS:O | 1:A:774:LYS:HG2 | 0.54 | 2.01 | 19 | 9 |
| 1:A:708:LEU:HA | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.54 | 1.78 | 19 | 6 |
| 1:A:705:GLU:CG | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.54 | 2.32 | 16 | 3 |
| 1:A:721:HIS:N | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.54 | 2.17 | 12 | 7 |
| 1:A:753:PRO:HD2 | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.54 | 1.79 | 5 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.54 | 1.79 | 8 | 5 |
| 1:A:630:VAL:HG13 | 1:A:712:PHE:HD1 | 0.54 | 1.62 | 3 | 3 |
| 1:A:695:LYS:HG2 | 1:A:756:SER:HB3 | 0.54 | 1.78 | 3 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CG | 1:A:652:HIS:O | 0.54 | 2.61 | 5 | 2 |
| 1:A:762:ALA:HB1 | 1:A:792:PHE:HZ | 0.54 | 1.61 | 5 | 2 |
| 1:A:765:VAL:HG23 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.54 | 1.79 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:750:LYS:CB | 0.54 | 2.31 | 13 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:723:LEU:HD22 | 0.54 | 1.79 | 11 | 3 |
| 1:A:751:LEU:CD1 | 1:A:752:SER:H | 0.54 | 2.14 | 11 | 2 |
| 1:A:717:CYS:HG | 1:A:721:HIS:CD2 | 0.54 | 2.19 | 12 | 2 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.54 | 2.69 | 17 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:C | 0.54 | 2.23 | 7 | 2 |
| 1:A:645:PHE:HB2 | 1:A:666:CYS:HB3 | 0.54 | 1.79 | 2 | 2 |
| 1:A:645:PHE:CD2 | 1:A:666:CYS:SG | 0.54 | 3.00 | 20 | 5 |
| 1:A:753:PRO:CG | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.54 | 2.33 | 4 | 2 |
| 1:A:665:SER:HB2 | 1:A:670:HIS:CB | 0.54 | 2.33 | 12 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CA | 1:A:742:LEU:HD11 | 0.54 | 2.32 | 15 | 1 |
| 1:A:749:GLU:HA | 1:A:752:SER:O | 0.54 | 2.02 | 15 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.54 | 1.78 | 15 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HG | 1:A:705:GLU:O | 0.54 | 2.03 | 12 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:761:PHE:CZ | 0.54 | 2.37 | 16 | 3 |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.54 | 2.32 | 7 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:669:CYS:HB2 | 0.54 | 2.02 | 20 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.54 | 1.80 | 11 | 1 |
| 1:A:706:ARG:HE | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.54 | 1.62 | 6 | 1 |
| 1:A:651:CYS:HA | 1:A:744:ARG:HH12 | 0.54 | 1.63 | 5 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CD1 | 1:A:756:SER:N | 0.54 | 2.75 | 20 | 1 |
| 1:A:631:CYS:SG | 1:A:633:LYS:HB2 | 0.54 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:631:CYS:N | 0.54 | 2.17 | 9 | 5 |
| 1:A:753:PRO:HB2 | 1:A:754:PRO:HD3 | 0.54 | 1.80 | 6 | 7 |
| 1:A:716:PRO:C | 1:A:719:PRO:HD2 | 0.54 | 2.23 | 9 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.54 | 1.78 | 8 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:639:MET:H | 0.54 | 1.62 | 14 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HG | 1:A:768:MET:HG3 | 0.54 | 1.77 | 19 | 1 |
| 1:A:789:GLN:O | 1:A:792:PHE:HB3 | 0.54 | 2.03 | 19 | 6 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:719:PRO:CD | 0.54 | 2.56 | 17 | 3 |
| 1:A:655:ALA:O | 1:A:656:LEU:O | 0.54 | 2.26 | 17 | 6 |
| 1:A:768:MET:O | 1:A:772:PHE:N | 0.54 | 2.40 | 1 | 9 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HG22 | 0.54 | 1.79 | 16 | 2 |
| 1:A:643:CYS:O | 1:A:644:GLU:HB3 | 0.54 | 2.03 | 10 | 2 |
| 1:A:773:ASN:ND2 | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.54 | 2.18 | 10 | 5 |
| 1:A:740:LEU:CD2 | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.54 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB2 | 1:A:756:SER:HB3 | 0.54 | 1.79 | 20 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HA | 1:A:768:MET:CG | 0.54 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD22 | 1:A:768:MET:CE | 0.54 | 2.32 | 8 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HG3 | 1:A:754:PRO:HA | 0.54 | 1.79 | 1 | 1 |
| 1:A:765:VAL:C | 1:A:768:MET:HB2 | 0.54 | 2.23 | 14 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.54 | 2.18 | 17 | 1 |
| 1:A:712:PHE:CZ | 1:A:740:LEU:HB3 | 0.54 | 2.37 | 17 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:696:LEU:C | 0.54 | 2.22 | 7 | 1 |
| 1:A:741:THR:CA | 1:A:744:ARG:HB3 | 0.54 | 2.33 | 7 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HZ3 | 1:A:799:ALA:CB | 0.54 | 2.16 | 18 | 2 |
| 1:A:738:LEU:CG | 1:A:768:MET:HG3 | 0.54 | 2.33 | 19 | 1 |
| 1:A:659:VAL:C | 1:A:661:GLY:H | 0.54 | 2.06 | 9 | 8 |
| 1:A:703:LYS:CA | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.54 | 2.33 | 4 | 3 |
| 1:A:747:LEU:HB2 | 1:A:755:TYR:OH | 0.54 | 2.02 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.54 | 2.22 | 12 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HA | 1:A:750:LYS:HE2 | 0.54 | 1.79 | 5 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:CB | 0.54 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HD3 | 1:A:630:VAL:N | 0.54 | 2.19 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.54 | 1.80 | 16 | 1 |
| 1:A:653:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.54 | 1.63 | 8 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HG3 | 1:A:784:SER:HB2 | 0.53 | 1.78 | 11 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:HE2 | 0.53 | 1.78 | 11 | 1 |
| 1:A:796:MET:O | 1:A:800:PHE:HB2 | 0.53 | 2.03 | 9 | 12 |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HB | 0.53 | 1.63 | 15 | 2 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.53 | 2.34 | 12 | 3 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:762:ALA:CB | 0.53 | 2.56 | 16 | 4 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.53 | 1.79 | 5 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.53 | 2.38 | 16 | 2 |
| 1:A:714:HIS:CE1 | 1:A:791:PHE:HB3 | 0.53 | 2.38 | 13 | 3 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.53 | 2.33 | 17 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HA | 1:A:634:PRO:HA | 0.53 | 1.80 | 8 | 2 |
| 1:A:630:VAL:O | 1:A:718:ARG:HD3 | 0.53 | 2.03 | 1 | 2 |
| 1:A:743:ILE:O | 1:A:747:LEU:HG | 0.53 | 2.03 | 13 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HG | 1:A:646:CYS:HB2 | 0.53 | 1.79 | 19 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:659:VAL:HA | 0.53 | 2.33 | 12 | 4 |
| 1:A:715:GLU:HA | 1:A:718:ARG:HB3 | 0.53 | 1.80 | 4 | 2 |
| 1:A:626:THR:CG2 | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.53 | 2.34 | 16 | 4 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.53 | 1.81 | 12 | 1 |
| 1:A:652:HIS:HB3 | 1:A:656:LEU:H | 0.53 | 1.62 | 17 | 1 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:796:MET:HB2 | 0.53 | 2.34 | 17 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:796:MET:HB2 | 0.53 | 1.79 | 14 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:709:LEU:HB3 | 0.53 | 1.80 | 10 | 2 |
| 1:A:652:HIS:HD1 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.53 | 1.60 | 16 | 2 |
| 1:A:745:ALA:O | 1:A:751:LEU:HD12 | 0.53 | 2.04 | 11 | 2 |
| 1:A:629:ARG:HD2 | 1:A:713:CYS:SG | 0.53 | 2.44 | 4 | 1 |
| 1:A:647:PHE:C | 1:A:649:LEU:N | 0.53 | 2.60 | 5 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:723:LEU:HD11 | 0.53 | 2.33 | 14 | 3 |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.53 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:635:GLY:C | 1:A:637:LEU:N | 0.53 | 2.60 | 10 | 2 |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:792:PHE:CE1 | 0.53 | 2.39 | 4 | 5 |
| 1:A:656:LEU:C | 1:A:658:ASP:N | 0.53 | 2.61 | 15 | 6 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.53 | 2.37 | 15 | 1 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:718:ARG:N | 0.53 | 2.81 | 5 | 10 |
| 1:A:629:ARG:HE | 1:A:713:CYS:HB2 | 0.53 | 1.64 | 9 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.53 | 2.39 | 11 | 1 |
| 1:A:640:CYS:C | 1:A:642:GLN:N | 0.53 | 2.62 | 6 | 17 |
| 1:A:649:LEU:N | 1:A:649:LEU:CD2 | 0.53 | 2.71 | 2 | 2 |
| 1:A:660:PRO:CG | 1:A:664:TRP:HB2 | 0.53 | 2.33 | 19 | 8 |
| 1:A:721:HIS:CD2 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.53 | 2.92 | 2 | 6 |
| 1:A:715:GLU:N | 1:A:716:PRO:HD2 | 0.53 | 2.19 | 6 | 4 |
| 1:A:721:HIS:CA | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.53 | 2.33 | 12 | 1 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:708:LEU:N | 0.53 | 2.72 | 18 | 3 |
| 1:A:652:HIS:ND1 | 1:A:656:LEU:CD1 | 0.53 | 2.71 | 16 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:HA | 0.53 | 1.80 | 13 | 2 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:740:LEU:N | 0.53 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:745:ALA:CB | 1:A:751:LEU:HB3 | 0.53 | 2.31 | 9 | 2 |
| 1:A:705:GLU:HG2 | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.53 | 1.81 | 5 | 1 |
| 1:A:641:ASN:ND2 | 1:A:663:GLU:HA | 0.53 | 2.19 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:757:SER:N | 0.53 | 2.19 | 3 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.53 | 2.39 | 10 | 2 |
| 1:A:701:GLN:CA | 1:A:757:SER:HA | 0.53 | 2.34 | 20 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:758:PRO:CD | 0.53 | 2.34 | 13 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.53 | 2.38 | 3 | 7 |
| 1:A:745:ALA:CB | 1:A:750:LYS:HB2 | 0.53 | 2.33 | 7 | 8 |
| 1:A:710:ALA:HB1 | 1:A:795:ARG:CD | 0.53 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HB2 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.53 | 2.38 | 16 | 3 |
| 1:A:668:LEU:HG | 1:A:710:ALA:HA | 0.53 | 1.81 | 20 | 1 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:758:PRO:HD3 | 0.53 | 2.04 | 20 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HG23 | 1:A:761:PHE:CB | 0.53 | 2.32 | 9 | 3 |
| 1:A:721:HIS:HA | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.53 | 1.78 | 12 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HG | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.53 | 2.19 | 17 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:N | 0.53 | 2.19 | 2 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CE2 | 0.53 | 2.39 | 16 | 1 |
| 1:A:756:SER:N | 1:A:760:GLU:OE1 | 0.52 | 2.42 | 6 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:758:PRO:HA | 0.52 | 1.80 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:705:GLU:HA | 0.52 | 1.80 | 4 | 3 |
| 1:A:765:VAL:CG1 | 1:A:768:MET:HE2 | 0.52 | 2.34 | 7 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:741:THR:HA | 1:A:744:ARG:HB3 | 0.52 | 1.78 | 17 | 5 |
| 1:A:793:GLU:O | 1:A:797:ASN:CB | 0.52 | 2.57 | 18 | 5 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:HB2 | 0.52 | 1.79 | 2 | 1 |
| 1:A:645:PHE:HB2 | 1:A:666:CYS:SG | 0.52 | 2.44 | 10 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:762:ALA:HB2 | 0.52 | 2.04 | 19 | 1 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:711:LEU:HB2 | 0.52 | 2.04 | 20 | 3 |
| 1:A:716:PRO:O | 1:A:772:PHE:CZ | 0.52 | 2.62 | 6 | 8 |
| 1:A:703:LYS:CD | 1:A:703:LYS:C | 0.52 | 2.71 | 15 | 1 |
| 1:A:768:MET:O | 1:A:772:PHE:HB3 | 0.52 | 2.05 | 3 | 2 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.52 | 2.05 | 6 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.52 | 1.79 | 10 | 1 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:HG | 0.52 | 2.34 | 5 | 2 |
| 1:A:761:PHE:HD1 | 1:A:762:ALA:N | 0.52 | 2.02 | 18 | 4 |
| 1:A:709:LEU:O | 1:A:712:PHE:HB2 | 0.52 | 2.04 | 6 | 4 |
| 1:A:707:VAL:HG21 | 1:A:796:MET:HE2 | 0.52 | 1.81 | 4 | 3 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:712:PHE:HD1 | 0.52 | 1.88 | 1 | 4 |
| 1:A:792:PHE:CD2 | 1:A:793:GLU:HG3 | 0.52 | 2.39 | 3 | 6 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:755:TYR:CE2 | 0.52 | 3.02 | 18 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HG | 0.52 | 1.80 | 14 | 1 |
| 1:A:702:ARG:NH1 | 1:A:706:ARG:HE | 0.52 | 2.03 | 19 | 1 |
| 1:A:721:HIS:NE2 | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.52 | 2.18 | 19 | 1 |
| 1:A:660:PRO:HG2 | 1:A:664:TRP:CB | 0.52 | 2.34 | 8 | 8 |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:NH1 | 0.52 | 2.19 | 15 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HG2 | 1:A:755:TYR:CZ | 0.52 | 2.38 | 13 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:649:LEU:HD21 | 0.52 | 1.81 | 5 | 2 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.52 | 2.39 | 8 | 3 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.52 | 2.04 | 19 | 1 |
| 1:A:639:MET:HA | 1:A:646:CYS:HA | 0.52 | 1.80 | 11 | 1 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:719:PRO:HD2 | 0.52 | 2.04 | 11 | 10 |
| 1:A:628:CYS:HB2 | 1:A:648:HIS:H | 0.52 | 1.65 | 16 | 3 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:721:HIS:HE1 | 0.52 | 1.63 | 4 | 3 |
| 1:A:718:ARG:HG3 | 1:A:719:PRO:CD | 0.52 | 2.33 | 4 | 2 |
| 1:A:631:CYS:HA | 1:A:718:ARG:HD3 | 0.52 | 1.81 | 12 | 1 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:789:GLN:N | 0.52 | 2.43 | 1 | 6 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:701:GLN:N | 0.52 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:703:LYS:C | 1:A:703:LYS:HD3 | 0.52 | 2.25 | 18 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:HH21 | 0.52 | 1.64 | 20 | 1 |
| 1:A:755:TYR:N | 1:A:755:TYR:CD1 | 0.52 | 2.71 | 20 | 1 |
| 1:A:724:ALA:HB2 | 1:A:738:LEU:N | 0.52 | 2.18 | 19 | 1 |
| 1:A:741:THR:O | 1:A:744:ARG:HG3 | 0.52 | 2.05 | 19 | 1 |
| 1:A:772:PHE:HA | 1:A:775:LEU:HB2 | 0.52 | 1.82 | 7 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:697:SER:HB2 | 1:A:700:ASN:HB2 | 0.52 | 1.82 | 20 | 2 |
| 1:A:710:ALA:O | 1:A:714:HIS:ND1 | 0.52 | 2.43 | 12 | 2 |
| 1:A:703:LYS:HD2 | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.52 | 1.82 | 1 | 3 |
| 1:A:752:SER:H | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.52 | 1.64 | 1 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HB2 | 0.52 | 1.81 | 5 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HA | 1:A:746:ARG:HD3 | 0.52 | 1.82 | 5 | 2 |
| 1:A:761:PHE:HA | 1:A:764:ASP:HB2 | 0.52 | 1.81 | 20 | 3 |
| 1:A:642:GLN:HE21 | 1:A:642:GLN:HA | 0.52 | 1.64 | 9 | 1 |
| 1:A:642:GLN:HG3 | 1:A:665:SER:HB3 | 0.52 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:700:ASN:C | 0.52 | 2.25 | 16 | 1 |
| 1:A:653:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.52 | 1.65 | 16 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:761:PHE:CG | 0.52 | 2.39 | 14 | 1 |
| 1:A:767:ARG:CA | 1:A:770:LYS:HB2 | 0.52 | 2.35 | 11 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:CB | 0.52 | 2.34 | 12 | 2 |
| 1:A:654:PRO:HA | 1:A:748:GLN:CD | 0.52 | 2.25 | 15 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:HB3 | 0.52 | 2.04 | 15 | 2 |
| 1:A:639:MET:HG2 | 1:A:644:GLU:HA | 0.52 | 1.82 | 3 | 3 |
| 1:A:756:SER:O | 1:A:757:SER:HB3 | 0.52 | 2.05 | 18 | 2 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:744:ARG:CA | 0.52 | 2.87 | 7 | 5 |
| 1:A:790:ARG:N | 1:A:790:ARG:HD3 | 0.52 | 2.19 | 5 | 1 |
| 1:A:631:CYS:HB3 | 1:A:633:LYS:HD3 | 0.52 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD22 | 1:A:792:PHE:CE2 | 0.52 | 2.40 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:700:ASN:C | 0.52 | 2.25 | 11 | 2 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:697:SER:CB | 0.52 | 2.58 | 18 | 15 |
| 1:A:653:LEU:C | 1:A:653:LEU:HD12 | 0.52 | 2.25 | 4 | 2 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:709:LEU:H | 0.52 | 2.17 | 18 | 2 |
| 1:A:773:ASN:HD21 | 1:A:782:VAL:HA | 0.52 | 1.64 | 16 | 9 |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:HB3 | 0.52 | 1.82 | 1 | 5 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:722:GLN:N | 0.52 | 2.43 | 6 | 2 |
| 1:A:769:PHE:CD1 | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.52 | 2.39 | 20 | 1 |
| 1:A:694:ALA:HA | 1:A:697:SER:HA | 0.52 | 1.81 | 14 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:656:LEU:HD23 | 0.52 | 2.30 | 8 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.52 | 2.04 | 8 | 1 |
| 1:A:744:ARG:HE | 1:A:750:LYS:HE3 | 0.52 | 1.65 | 11 | 2 |
| 1:A:700:ASN:HA | 1:A:703:LYS:HB3 | 0.52 | 1.81 | 15 | 1 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.52 | 2.05 | 20 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:701:GLN:HA | 0.52 | 1.81 | 1 | 2 |
| 1:A:647:PHE:CD2 | 1:A:664:TRP:HH2 | 0.52 | 2.23 | 2 | 2 |
| 1:A:762:ALA:HA | 1:A:765:VAL:CG2 | 0.52 | 2.35 | 18 | 1 |
| 1:A:721:HIS:HA | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.52 | 1.82 | 20 | 2 |
| 1:A:696:LEU:H | 1:A:756:SER:HB3 | 0.52 | 1.64 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:774:LYS:HB2 | 0.52 | 2.05 | 3 | 2 |
| 1:A:628:CYS:O | 1:A:629:ARG:C | 0.52 | 2.47 | 3 | 20 |
| 1:A:660:PRO:CG | 1:A:664:TRP:CB | 0.52 | 2.87 | 15 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:CA | 0.52 | 2.34 | 12 | 2 |
| 1:A:760:GLU:O | 1:A:764:ASP:OD2 | 0.52 | 2.28 | 3 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CD2 | 1:A:760:GLU:CD | 0.52 | 2.83 | 6 | 1 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:764:ASP:HB2 | 0.51 | 2.05 | 4 | 5 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:649:LEU:CD2 | 0.51 | 2.34 | 4 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:627:ILE:O | 0.51 | 2.04 | 2 | 4 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.51 | 2.35 | 17 | 1 |
| 1:A:667:SER:H | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.51 | 2.17 | 7 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CG | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.51 | 2.40 | 10 | 1 |
| 1:A:773:ASN:HA | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.51 | 1.82 | 11 | 1 |
| 1:A:773:ASN:ND2 | 1:A:782:VAL:HB | 0.51 | 2.20 | 15 | 2 |
| 1:A:643:CYS:SG | 1:A:645:PHE:CD1 | 0.51 | 3.03 | 10 | 6 |
| 1:A:759:GLN:O | 1:A:760:GLU:C | 0.51 | 2.49 | 6 | 3 |
| 1:A:742:LEU:CD1 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.51 | 2.32 | 5 | 2 |
| 1:A:629:ARG:CZ | 1:A:647:PHE:HD1 | 0.51 | 2.19 | 9 | 1 |
| 1:A:740:LEU:N | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.51 | 2.21 | 16 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CD1 | 0.51 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:721:HIS:CD2 | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.51 | 2.93 | 11 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:CA | 0.51 | 2.34 | 15 | 2 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:721:HIS:CD2 | 0.51 | 3.03 | 12 | 4 |
| 1:A:697:SER:O | 1:A:701:GLN:HB3 | 0.51 | 2.04 | 3 | 1 |
| 1:A:643:CYS:O | 1:A:644:GLU:CB | 0.51 | 2.58 | 10 | 2 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:790:ARG:N | 0.51 | 2.43 | 18 | 5 |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HB | 0.51 | 1.82 | 5 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:709:LEU:HG | 0.51 | 2.34 | 19 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:CB | 0.51 | 2.31 | 5 | 4 |
| 1:A:720:LEU:C | 1:A:740:LEU:HD23 | 0.51 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:759:GLN:HA | 1:A:762:ALA:HB3 | 0.51 | 1.81 | 2 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:765:VAL:HB | 0.51 | 1.81 | 5 | 2 |
| 1:A:783:GLN:HE21 | 1:A:783:GLN:HA | 0.51 | 1.66 | 5 | 2 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:HA | 0.51 | 2.19 | 13 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:659:VAL:N | 0.51 | 2.73 | 11 | 5 |
| 1:A:640:CYS:O | 1:A:642:GLN:N | 0.51 | 2.43 | 6 | 8 |
| 1:A:628:CYS:HB2 | 1:A:648:HIS:N | 0.51 | 2.20 | 16 | 3 |
| 1:A:747:LEU:HA | 1:A:755:TYR:HE2 | 0.51 | 1.64 | 4 | 1 |
| 1:A:716:PRO:CB | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.51 | 2.36 | 16 | 3 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.51 | 2.35 | 15 | 3 |
| 1:A:706:ARG:HG2 | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.51 | 1.83 | 19 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:696:LEU:N | 0.51 | 2.20 | 8 | 1 |
| 1:A:649:LEU:H | 1:A:649:LEU:CD2 | 0.51 | 2.19 | 11 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:C | 0.51 | 2.26 | 11 | 1 |
| 1:A:751:LEU:HD13 | 1:A:752:SER:N | 0.51 | 2.18 | 11 | 2 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.51 | 3.03 | 11 | 4 |
| 1:A:701:GLN:CA | 1:A:704:CYS:SG | 0.51 | 2.97 | 15 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.51 | 2.35 | 2 | 1 |
| 1:A:630:VAL:CG1 | 1:A:631:CYS:N | 0.51 | 2.72 | 20 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD13 | 1:A:668:LEU:N | 0.51 | 2.21 | 13 | 3 |
| 1:A:721:HIS:HD2 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.51 | 1.66 | 5 | 3 |
| 1:A:705:GLU:HG2 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.51 | 1.83 | 9 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HG | 1:A:740:LEU:HG | 0.51 | 1.83 | 20 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HA | 1:A:707:VAL:HB | 0.51 | 1.83 | 16 | 1 |
| 1:A:772:PHE:O | 1:A:775:LEU:CD2 | 0.51 | 2.58 | 19 | 3 |
| 1:A:783:GLN:NE2 | 1:A:783:GLN:C | 0.51 | 2.64 | 12 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:741:THR:N | 0.51 | 2.44 | 18 | 2 |
| 1:A:790:ARG:N | 1:A:790:ARG:HD2 | 0.51 | 2.20 | 3 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HD22 | 1:A:656:LEU:CD2 | 0.51 | 2.27 | 5 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:771:GLN:HE22 | 0.51 | 1.66 | 5 | 2 |
| 1:A:710:ALA:O | 1:A:711:LEU:C | 0.51 | 2.48 | 4 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HA | 1:A:772:PHE:HB3 | 0.51 | 1.81 | 18 | 10 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:649:LEU:CB | 0.51 | 2.59 | 5 | 11 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:653:LEU:N | 0.51 | 2.78 | 12 | 2 |
| 1:A:639:MET:HG2 | 1:A:644:GLU:O | 0.51 | 2.04 | 17 | 2 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.51 | 2.93 | 2 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HB2 | 1:A:737:THR:HG21 | 0.51 | 1.81 | 6 | 1 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:CB | 0.51 | 2.19 | 10 | 1 |
| 1:A:714:HIS:CE1 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.51 | 2.41 | 13 | 1 |
| 1:A:715:GLU:HB2 | 1:A:716:PRO:HD3 | 0.51 | 1.83 | 11 | 2 |
| 1:A:790:ARG:O | 1:A:794:THR:HB | 0.51 | 2.05 | 16 | 2 |
| 1:A:627:ILE:HA | 1:A:633:LYS:C | 0.51 | 2.27 | 19 | 6 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:627:ILE:O | 0.51 | 2.28 | 14 | 16 |
| 1:A:745:ALA:O | 1:A:746:ARG:C | 0.51 | 2.49 | 9 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.51 | 2.41 | 4 | 5 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:785:ILE:N | 0.51 | 2.44 | 4 | 7 |
| 1:A:739:ASP:N | 1:A:742:LEU:HD21 | 0.51 | 2.21 | 15 | 3 |
| 1:A:766:GLY:O | 1:A:769:PHE:HB2 | 0.51 | 2.05 | 12 | 5 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:CZ2 | 0.51 | 2.41 | 6 | 3 |
| 1:A:646:CYS:C | 1:A:647:PHE:CD1 | 0.51 | 2.84 | 17 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.51 | 1.81 | 18 | 3 |
| 1:A:746:ARG:C | 1:A:748:GLN:N | 0.51 | 2.62 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:746:ARG:NH2 | 1:A:753:PRO:O | 0.51 | 2.43 | 3 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD2 | 1:A:789:GLN:CG | 0.51 | 2.94 | 2 | 5 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.51 | 2.35 | 1 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CG | 0.51 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:796:MET:HE1 | 0.51 | 2.45 | 14 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HG3 | 1:A:756:SER:O | 0.51 | 2.06 | 13 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.51 | 2.21 | 13 | 5 |
| 1:A:773:ASN:HA | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.51 | 1.82 | 3 | 5 |
| 1:A:740:LEU:O | 1:A:744:ARG:N | 0.51 | 2.44 | 3 | 3 |
| 1:A:758:PRO:HG2 | 1:A:800:PHE:CZ | 0.51 | 2.41 | 7 | 2 |
| 1:A:720:LEU:HD13 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.51 | 1.83 | 14 | 3 |
| 1:A:703:LYS:HE3 | 1:A:796:MET:O | 0.51 | 2.05 | 18 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:HD13 | 0.51 | 1.82 | 16 | 1 |
| 1:A:737:THR:HA | 1:A:771:GLN:CD | 0.51 | 2.27 | 1 | 2 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:768:MET:HA | 0.50 | 2.06 | 15 | 1 |
| 1:A:752:SER:HB3 | 1:A:753:PRO:CD | 0.50 | 2.36 | 7 | 3 |
| 1:A:717:CYS:HA | 1:A:720:LEU:HB3 | 0.50 | 1.82 | 18 | 3 |
| 1:A:700:ASN:HB3 | 1:A:758:PRO:HD3 | 0.50 | 1.83 | 5 | 4 |
| 1:A:626:THR:HB | 1:A:637:LEU:CD2 | 0.50 | 2.36 | 2 | 6 |
| 1:A:746:ARG:HB3 | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.50 | 2.41 | 14 | 3 |
| 1:A:706:ARG:HD2 | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.50 | 1.83 | 7 | 1 |
| 1:A:765:VAL:CA | 1:A:768:MET:HE2 | 0.50 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:708:LEU:N | 1:A:761:PHE:CZ | 0.50 | 2.78 | 13 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.50 | 2.36 | 11 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HA | 0.50 | 1.81 | 11 | 1 |
| 1:A:657:GLN:O | 1:A:658:ASP:HB2 | 0.50 | 2.06 | 10 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:740:LEU:HA | 0.50 | 1.81 | 4 | 2 |
| 1:A:741:THR:HG23 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.50 | 2.22 | 15 | 1 |
| 1:A:711:LEU:O | 1:A:714:HIS:CD2 | 0.50 | 2.64 | 9 | 8 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:764:ASP:C | 0.50 | 2.79 | 17 | 1 |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:703:LYS:HG2 | 0.50 | 2.06 | 10 | 3 |
| 1:A:716:PRO:HB2 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.50 | 1.83 | 8 | 1 |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:666:CYS:N | 0.50 | 2.84 | 3 | 10 |
| 1:A:700:ASN:HB3 | 1:A:758:PRO:HG3 | 0.50 | 1.82 | 8 | 3 |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CD1 | 0.50 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.50 | 2.36 | 14 | 2 |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:HG21 | 0.50 | 1.82 | 19 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CE2 | 1:A:761:PHE:HA | 0.50 | 2.42 | 1 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.50 | 2.91 | 11 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.50 | 2.41 | 12 | 4 |
| 1:A:628:CYS:SG | 1:A:630:VAL:HG22 | 0.50 | 2.47 | 4 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:744:ARG:N | 0.50 | 2.21 | 4 | 4 |
| 1:A:773:ASN:ND2 | 1:A:785:ILE:HB | 0.50 | 2.22 | 5 | 6 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.50 | 2.06 | 10 | 3 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:656:LEU:HG | 0.50 | 2.41 | 15 | 1 |
| 1:A:765:VAL:O | 1:A:768:MET:CB | 0.50 | 2.58 | 15 | 3 |
| 1:A:769:PHE:O | 1:A:772:PHE:HB3 | 0.50 | 2.06 | 14 | 6 |
| 1:A:656:LEU:CG | 1:A:660:PRO:HG3 | 0.50 | 2.36 | 3 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:743:ILE:HB | 0.50 | 2.07 | 8 | 2 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:742:LEU:CB | 0.50 | 2.59 | 10 | 5 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.50 | 1.83 | 7 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HA | 1:A:712:PHE:O | 0.50 | 2.06 | 18 | 1 |
| 1:A:769:PHE:O | 1:A:773:ASN:CB | 0.50 | 2.60 | 11 | 5 |
| 1:A:703:LYS:O | 1:A:706:ARG:N | 0.50 | 2.44 | 4 | 4 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:771:GLN:HG3 | 0.50 | 2.07 | 2 | 6 |
| 1:A:704:CYS:CB | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.50 | 2.94 | 13 | 5 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.50 | 1.83 | 12 | 1 |
| 1:A:701:GLN:N | 1:A:757:SER:OG | 0.50 | 2.45 | 20 | 1 |
| 1:A:700:ASN:HB3 | 1:A:758:PRO:HG2 | 0.50 | 1.83 | 13 | 1 |
| 1:A:702:ARG:HH12 | 1:A:706:ARG:HE | 0.50 | 1.50 | 19 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:757:SER:CA | 0.50 | 2.36 | 8 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:CB | 0.50 | 2.35 | 2 | 2 |
| 1:A:771:GLN:HA | 1:A:774:LYS:HB2 | 0.50 | 1.83 | 19 | 2 |
| 1:A:769:PHE:HA | 1:A:772:PHE:CD2 | 0.50 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:744:ARG:N | 0.50 | 2.21 | 16 | 1 |
| 1:A:700:ASN:C | 1:A:758:PRO:CD | 0.50 | 2.80 | 13 | 1 |
| 1:A:790:ARG:CD | 1:A:790:ARG:N | 0.50 | 2.75 | 13 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.50 | 2.94 | 4 | 2 |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:CB | 0.50 | 2.20 | 18 | 3 |
| 1:A:795:ARG:HA | 1:A:798:GLU:CB | 0.50 | 2.36 | 12 | 2 |
| 1:A:749:GLU:HA | 1:A:753:PRO:O | 0.50 | 2.06 | 10 | 2 |
| 1:A:792:PHE:CD2 | 1:A:793:GLU:HG2 | 0.50 | 2.41 | 1 | 6 |
| 1:A:657:GLN:O | 1:A:658:ASP:CB | 0.50 | 2.59 | 16 | 5 |
| 1:A:746:ARG:HH21 | 1:A:760:GLU:HG3 | 0.50 | 1.67 | 10 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD1 | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.50 | 2.41 | 10 | 1 |
| 1:A:635:GLY:O | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.50 | 2.06 | 8 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD1 | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.50 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:697:SER:HB2 | 0.50 | 2.07 | 5 | 4 |
| 1:A:705:GLU:HA | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.50 | 1.83 | 4 | 2 |
| 1:A:699:ALA:HA | 1:A:702:ARG:HB2 | 0.50 | 1.84 | 8 | 10 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.50 | 1.84 | 12 | 1 |
| 1:A:748:GLN:NE2 | 1:A:750:LYS:NZ | 0.50 | 2.60 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:695:LYS:HG3 | 1:A:755:TYR:O | 0.50 | 2.07 | 18 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CD1 | 0.50 | 2.36 | 15 | 1 |
| 1:A:748:GLN:O | 1:A:749:GLU:CB | 0.50 | 2.60 | 12 | 2 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:791:PHE:N | 0.50 | 2.45 | 13 | 4 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:772:PHE:CD2 | 0.50 | 2.95 | 5 | 2 |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.50 | 1.67 | 9 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:HD2 | 0.50 | 1.66 | 14 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HA | 1:A:746:ARG:CG | 0.50 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:653:LEU:C | 0.50 | 2.27 | 8 | 1 |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:665:SER:CA | 0.49 | 3.00 | 11 | 3 |
| 1:A:667:SER:O | 1:A:669:CYS:N | 0.49 | 2.45 | 18 | 7 |
| 1:A:755:TYR:O | 1:A:756:SER:HB3 | 0.49 | 2.07 | 8 | 2 |
| 1:A:762:ALA:CA | 1:A:765:VAL:HG13 | 0.49 | 2.37 | 20 | 3 |
| 1:A:723:LEU:HD22 | 1:A:772:PHE:CB | 0.49 | 2.36 | 12 | 2 |
| 1:A:746:ARG:NH2 | 1:A:751:LEU:HD22 | 0.49 | 2.22 | 2 | 1 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:747:LEU:O | 0.49 | 2.44 | 7 | 2 |
| 1:A:720:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.49 | 2.37 | 5 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:CA | 0.49 | 2.89 | 18 | 2 |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:HE | 0.49 | 1.65 | 9 | 1 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:646:CYS:HB2 | 0.49 | 2.07 | 4 | 5 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:784:SER:N | 0.49 | 2.45 | 9 | 4 |
| 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:GLU:HG3 | 0.49 | 2.26 | 20 | 5 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HG3 | 0.49 | 1.84 | 2 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:707:VAL:CB | 0.49 | 2.59 | 6 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:738:LEU:N | 0.49 | 2.22 | 18 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB3 | 1:A:756:SER:CB | 0.49 | 2.36 | 13 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HB2 | 1:A:755:TYR:CZ | 0.49 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:647:PHE:HE2 | 1:A:709:LEU:HD22 | 0.49 | 1.65 | 11 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CA | 1:A:656:LEU:HD12 | 0.49 | 2.27 | 4 | 1 |
| 1:A:740:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:CE | 0.49 | 2.90 | 5 | 5 |
| 1:A:769:PHE:CA | 1:A:772:PHE:HB3 | 0.49 | 2.37 | 9 | 8 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.49 | 3.00 | 18 | 4 |
| 1:A:744:ARG:HE | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.49 | 1.51 | 12 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HD23 | 1:A:751:LEU:HD11 | 0.49 | 1.83 | 3 | 1 |
| 1:A:667:SER:OG | 1:A:709:LEU:HB3 | 0.49 | 2.07 | 7 | 1 |
| 1:A:667:SER:OG | 1:A:706:ARG:HA | 0.49 | 2.06 | 7 | 1 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:654:PRO:CD | 0.49 | 2.60 | 19 | 1 |
| 1:A:751:LEU:HB3 | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.49 | 1.84 | 1 | 1 |
| 1:A:790:ARG:HD2 | 1:A:790:ARG:N | 0.49 | 2.21 | 6 | 3 |
| 1:A:744:ARG:HE | 1:A:750:LYS:NZ | 0.49 | 2.06 | 8 | 2 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:709:LEU:N | 0.49 | 2.70 | 15 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:721:HIS:N | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.49 | 2.22 | 15 | 2 |
| 1:A:723:LEU:H | 1:A:739:ASP:HB3 | 0.49 | 1.67 | 8 | 2 |
| 1:A:752:SER:HB2 | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.49 | 1.84 | 13 | 2 |
| 1:A:635:GLY:O | 1:A:637:LEU:HD22 | 0.49 | 2.07 | 3 | 2 |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:H | 0.49 | 1.68 | 8 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:705:GLU:CA | 0.49 | 2.38 | 11 | 1 |
| 1:A:658:ASP:O | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.49 | 2.07 | 11 | 2 |
| 1:A:755:TYR:CE1 | 1:A:761:PHE:N | 0.49 | 2.80 | 10 | 7 |
| 1:A:627:ILE:N | 1:A:637:LEU:CD1 | 0.49 | 2.76 | 14 | 6 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:721:HIS:N | 0.49 | 2.46 | 17 | 4 |
| 1:A:649:LEU:HG | 1:A:656:LEU:CB | 0.49 | 2.38 | 20 | 2 |
| 1:A:712:PHE:HA | 1:A:717:CYS:SG | 0.49 | 2.48 | 17 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HA | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.49 | 1.84 | 5 | 3 |
| 1:A:723:LEU:CD1 | 1:A:739:ASP:HA | 0.49 | 2.36 | 7 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:768:MET:CG | 0.49 | 2.38 | 5 | 1 |
| 1:A:764:ASP:HA | 1:A:767:ARG:HD3 | 0.49 | 1.82 | 20 | 2 |
| 1:A:717:CYS:HG | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.49 | 1.67 | 20 | 1 |
| 1:A:766:GLY:HA2 | 1:A:769:PHE:HD2 | 0.49 | 1.64 | 19 | 1 |
| 1:A:626:THR:O | 1:A:627:ILE:C | 0.49 | 2.49 | 11 | 4 |
| 1:A:633:LYS:HB2 | 1:A:648:HIS:HE1 | 0.49 | 1.65 | 11 | 5 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:656:LEU:HB3 | 0.49 | 2.38 | 17 | 3 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:717:CYS:SG | 0.49 | 2.71 | 17 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HG2 | 1:A:747:LEU:HD11 | 0.49 | 1.85 | 6 | 3 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:HG3 | 0.49 | 2.08 | 6 | 1 |
| 1:A:703:LYS:CG | 1:A:799:ALA:HB1 | 0.49 | 2.36 | 6 | 2 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.49 | 2.37 | 5 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE1 | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.49 | 2.96 | 9 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.49 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:757:SER:CB | 1:A:758:PRO:CD | 0.49 | 2.90 | 20 | 2 |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:713:CYS:N | 0.49 | 2.23 | 19 | 2 |
| 1:A:640:CYS:HB3 | 1:A:644:GLU:N | 0.49 | 2.23 | 19 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:664:TRP:CE3 | 0.49 | 2.41 | 2 | 3 |
| 1:A:643:CYS:C | 1:A:645:PHE:H | 0.49 | 2.10 | 18 | 6 |
| 1:A:747:LEU:HA | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.49 | 1.85 | 9 | 2 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:HB3 | 0.49 | 1.84 | 17 | 1 |
| 1:A:756:SER:O | 1:A:757:SER:CB | 0.49 | 2.60 | 18 | 2 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:755:TYR:OH | 0.49 | 2.66 | 16 | 3 |
| 1:A:707:VAL:CG2 | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.49 | 2.95 | 14 | 3 |
| 1:A:647:PHE:CD2 | 1:A:664:TRP:CZ2 | 0.49 | 3.01 | 8 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HA | 1:A:746:ARG:HG3 | 0.49 | 1.85 | 19 | 2 |
| 1:A:791:PHE:O | 1:A:795:ARG:HD3 | 0.49 | 2.08 | 6 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:CG | 0.49 | 2.38 | 13 | 2 |
| 1:A:629:ARG:CZ | 1:A:645:PHE:CD2 | 0.49 | 2.95 | 9 | 1 |
| 1:A:656:LEU:CD2 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.49 | 2.38 | 9 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.49 | 2.37 | 9 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.49 | 2.65 | 19 | 1 |
| 1:A:753:PRO:CB | 1:A:754:PRO:CD | 0.49 | 2.90 | 6 | 16 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:CD1 | 0.49 | 2.28 | 15 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HA | 1:A:629:ARG:HE | 0.49 | 1.67 | 12 | 2 |
| 1:A:697:SER:O | 1:A:701:GLN:CB | 0.49 | 2.60 | 3 | 2 |
| 1:A:647:PHE:HE2 | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.49 | 1.66 | 16 | 3 |
| 1:A:656:LEU:CG | 1:A:659:VAL:HG21 | 0.49 | 2.33 | 16 | 1 |
| 1:A:668:LEU:N | 1:A:668:LEU:HD12 | 0.49 | 2.22 | 14 | 1 |
| 1:A:769:PHE:O | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.49 | 2.08 | 4 | 3 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:703:LYS:HE3 | 0.49 | 2.07 | 15 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:N | 0.49 | 2.46 | 7 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.49 | 1.84 | 10 | 1 |
| 1:A:763:GLN:O | 1:A:767:ARG:HG3 | 0.49 | 2.08 | 14 | 2 |
| 1:A:630:VAL:HG23 | 1:A:647:PHE:CE1 | 0.49 | 2.43 | 19 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:767:ARG:CB | 0.49 | 2.37 | 1 | 2 |
| 1:A:706:ARG:NE | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.49 | 2.23 | 11 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HA | 1:A:755:TYR:CE2 | 0.49 | 2.43 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HA | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.49 | 1.84 | 9 | 2 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:CB | 0.49 | 2.61 | 2 | 4 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:795:ARG:NH2 | 0.49 | 2.67 | 6 | 1 |
| 1:A:641:ASN:HB3 | 1:A:664:TRP:O | 0.49 | 2.07 | 16 | 5 |
| 1:A:710:ALA:O | 1:A:713:CYS:HB3 | 0.48 | 2.08 | 4 | 1 |
| 1:A:794:THR:O | 1:A:798:GLU:N | 0.48 | 2.45 | 6 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.48 | 2.35 | 2 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:710:ALA:N | 0.48 | 2.23 | 10 | 3 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:CG | 0.48 | 2.37 | 9 | 2 |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:642:GLN:HB2 | 0.48 | 2.48 | 16 | 2 |
| 1:A:649:LEU:O | 1:A:652:HIS:CB | 0.48 | 2.61 | 1 | 5 |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.48 | 1.84 | 5 | 1 |
| 1:A:706:ARG:HG3 | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.48 | 1.84 | 5 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:767:ARG:HB3 | 0.48 | 1.84 | 18 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.48 | 1.84 | 14 | 1 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.48 | 2.70 | 13 | 1 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.48 | 2.08 | 19 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HE | 1:A:751:LEU:HG | 0.48 | 1.67 | 8 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:N | 0.48 | 2.23 | 14 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.48 | 1.83 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:718:ARG:HB3 | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.48 | 1.83 | 2 | 1 |
| 1:A:705:GLU:HG3 | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.48 | 1.84 | 18 | 2 |
| 1:A:700:ASN:HB3 | 1:A:758:PRO:HD2 | 0.48 | 1.84 | 20 | 1 |
| 1:A:659:VAL:CB | 1:A:660:PRO:CD | 0.48 | 2.89 | 16 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CB | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.48 | 2.96 | 14 | 1 |
| 1:A:627:ILE:N | 1:A:637:LEU:CD2 | 0.48 | 2.76 | 19 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:664:TRP:NE1 | 0.48 | 2.22 | 19 | 1 |
| 1:A:771:GLN:C | 1:A:775:LEU:HG | 0.48 | 2.29 | 12 | 1 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.48 | 2.08 | 3 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CG | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.48 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD12 | 1:A:714:HIS:CE1 | 0.48 | 2.43 | 7 | 1 |
| 1:A:711:LEU:CD1 | 1:A:765:VAL:HG21 | 0.48 | 2.38 | 5 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:792:PHE:CD1 | 0.48 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:747:LEU:CD2 | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.48 | 2.97 | 18 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:709:LEU:HB3 | 0.48 | 1.85 | 20 | 1 |
| 1:A:755:TYR:HD2 | 1:A:760:GLU:CG | 0.48 | 2.22 | 20 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:790:ARG:CD | 0.48 | 2.37 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:757:SER:CB | 0.48 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:626:THR:C | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.48 | 2.28 | 11 | 1 |
| 1:A:636:ASP:O | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.48 | 2.09 | 11 | 1 |
| 1:A:638:VAL:O | 1:A:638:VAL:HG13 | 0.48 | 2.09 | 18 | 2 |
| 1:A:755:TYR:CD1 | 1:A:760:GLU:HB3 | 0.48 | 2.44 | 18 | 5 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:HD21 | 0.48 | 1.83 | 17 | 3 |
| 1:A:743:ILE:HG12 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.48 | 1.85 | 17 | 1 |
| 1:A:705:GLU:HG2 | 1:A:747:LEU:CD2 | 0.48 | 2.38 | 3 | 2 |
| 1:A:745:ALA:C | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.48 | 2.28 | 10 | 6 |
| 1:A:649:LEU:HD23 | 1:A:649:LEU:H | 0.48 | 1.67 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:711:LEU:HD23 | 0.48 | 1.84 | 16 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HA | 1:A:789:GLN:CB | 0.48 | 2.38 | 16 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CD | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.48 | 2.38 | 14 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HG13 | 1:A:790:ARG:NE | 0.48 | 2.23 | 13 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:740:LEU:CA | 0.48 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:717:CYS:HB3 | 0.48 | 2.42 | 8 | 4 |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:CG | 0.48 | 2.39 | 12 | 1 |
| 1:A:669:CYS:SG | 1:A:670:HIS:N | 0.48 | 2.86 | 17 | 2 |
| 1:A:660:PRO:C | 1:A:662:GLU:N | 0.48 | 2.66 | 5 | 7 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:743:ILE:HG22 | 0.48 | 2.38 | 16 | 2 |
| 1:A:762:ALA:HA | 1:A:765:VAL:HG23 | 0.48 | 1.84 | 18 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CD2 | 1:A:652:HIS:N | 0.48 | 2.82 | 9 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HG3 | 1:A:800:PHE:HD1 | 0.48 | 1.69 | 14 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:HA | 0.48 | 1.86 | 13 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:626:THR:CB | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.48 | 2.39 | 10 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HG | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.48 | 1.85 | 14 | 3 |
| 1:A:747:LEU:CB | 1:A:755:TYR:OH | 0.48 | 2.62 | 4 | 2 |
| 1:A:759:GLN:O | 1:A:763:GLN:CB | 0.48 | 2.61 | 4 | 3 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:790:ARG:HG3 | 0.48 | 2.08 | 2 | 4 |
| 1:A:794:THR:O | 1:A:798:GLU:HB2 | 0.48 | 2.09 | 15 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HG22 | 1:A:744:ARG:N | 0.48 | 2.23 | 12 | 1 |
| 1:A:628:CYS:HA | 1:A:646:CYS:C | 0.48 | 2.28 | 17 | 1 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:CG | 0.48 | 2.39 | 5 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HG | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.48 | 1.84 | 18 | 1 |
| 1:A:629:ARG:NH1 | 1:A:645:PHE:HB3 | 0.48 | 2.24 | 9 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HA | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.48 | 2.44 | 20 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD23 | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.48 | 2.43 | 20 | 1 |
| 1:A:765:VAL:C | 1:A:767:ARG:N | 0.48 | 2.66 | 20 | 1 |
| 1:A:753:PRO:N | 1:A:754:PRO:CD | 0.48 | 2.77 | 1 | 2 |
| 1:A:659:VAL:HG12 | 1:A:660:PRO:HD2 | 0.48 | 1.85 | 15 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:CD1 | 0.48 | 2.97 | 5 | 3 |
| 1:A:645:PHE:HB3 | 1:A:647:PHE:HE1 | 0.48 | 1.69 | 7 | 6 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:656:LEU:CG | 0.48 | 2.38 | 2 | 1 |
| 1:A:629:ARG:NH2 | 1:A:645:PHE:HD2 | 0.48 | 2.07 | 9 | 1 |
| 1:A:659:VAL:HG22 | 1:A:660:PRO:CD | 0.48 | 2.34 | 16 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.48 | 1.69 | 14 | 1 |
| 1:A:753:PRO:CG | 1:A:754:PRO:HD3 | 0.48 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:711:LEU:CB | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.48 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:647:PHE:HB2 | 1:A:664:TRP:CH2 | 0.48 | 2.44 | 11 | 2 |
| 1:A:723:LEU:HD11 | 1:A:772:PHE:HA | 0.48 | 1.86 | 4 | 2 |
| 1:A:654:PRO:HA | 1:A:744:ARG:HH21 | 0.48 | 1.68 | 12 | 1 |
| 1:A:702:ARG:O | 1:A:706:ARG:HG2 | 0.48 | 2.09 | 17 | 3 |
| 1:A:637:LEU:N | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.48 | 2.23 | 2 | 1 |
| 1:A:796:MET:SD | 1:A:800:PHE:CZ | 0.48 | 3.07 | 14 | 1 |
| 1:A:633:LYS:O | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.48 | 2.08 | 8 | 1 |
| 1:A:653:LEU:C | 1:A:655:ALA:H | 0.48 | 2.12 | 15 | 2 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:789:GLN:N | 0.48 | 2.77 | 15 | 1 |
| 1:A:648:HIS:HB2 | 1:A:651:CYS:HB2 | 0.48 | 1.84 | 7 | 3 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:792:PHE:HB2 | 0.48 | 2.08 | 2 | 2 |
| 1:A:723:LEU:HD12 | 1:A:739:ASP:CA | 0.48 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CG | 1:A:789:GLN:HG2 | 0.48 | 2.44 | 18 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.48 | 2.94 | 13 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:755:TYR:HD2 | 0.48 | 2.21 | 11 | 4 |
| 1:A:714:HIS:HD2 | 1:A:717:CYS:SG | 0.48 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:751:LEU:N | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.48 | 2.77 | 11 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HB3 | 0.48 | 1.86 | 11 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.48 | 2.44 | 18 | 3 |
| 1:A:715:GLU:HB3 | 1:A:716:PRO:CD | 0.48 | 2.39 | 15 | 3 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:750:LYS:HZ2 | 0.48 | 2.21 | 15 | 1 |
| 1:A:661:GLY:C | 1:A:663:GLU:H | 0.48 | 2.12 | 10 | 3 |
| 1:A:721:HIS:O | 1:A:722:GLN:HG2 | 0.48 | 2.09 | 17 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HA | 1:A:750:LYS:HE3 | 0.48 | 1.85 | 7 | 4 |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:NE2 | 0.48 | 2.24 | 10 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HG | 1:A:764:ASP:O | 0.48 | 2.09 | 18 | 1 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:788:LEU:HD23 | 0.48 | 2.48 | 20 | 1 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:653:LEU:C | 0.47 | 2.53 | 2 | 11 |
| 1:A:765:VAL:CA | 1:A:768:MET:HB2 | 0.47 | 2.38 | 16 | 7 |
| 1:A:647:PHE:CD1 | 1:A:664:TRP:CH2 | 0.47 | 3.02 | 17 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CA | 0.47 | 2.38 | 18 | 2 |
| 1:A:703:LYS:O | 1:A:706:ARG:HB3 | 0.47 | 2.08 | 6 | 2 |
| 1:A:711:LEU:CD2 | 1:A:740:LEU:HD21 | 0.47 | 2.29 | 9 | 1 |
| 1:A:717:CYS:SG | 1:A:720:LEU:HD23 | 0.47 | 2.49 | 20 | 1 |
| 1:A:668:LEU:CD1 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47 | 2.39 | 14 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:706:ARG:HA | 0.47 | 1.84 | 19 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.47 | 2.39 | 19 | 1 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.47 | 2.39 | 17 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:659:VAL:HG13 | 0.47 | 2.38 | 3 | 1 |
| 1:A:700:ASN:HD22 | 1:A:703:LYS:HD2 | 0.47 | 1.69 | 3 | 1 |
| 1:A:656:LEU:O | 1:A:657:GLN:HB2 | 0.47 | 2.09 | 18 | 2 |
| 1:A:743:ILE:CD1 | 1:A:761:PHE:O | 0.47 | 2.60 | 2 | 1 |
| 1:A:629:ARG:CZ | 1:A:647:PHE:CE1 | 0.47 | 2.98 | 9 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HG23 | 1:A:790:ARG:NE | 0.47 | 2.24 | 19 | 1 |
| 1:A:656:LEU:O | 1:A:658:ASP:N | 0.47 | 2.47 | 15 | 2 |
| 1:A:785:ILE:C | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.47 | 2.12 | 17 | 5 |
| 1:A:723:LEU:CD2 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.47 | 2.38 | 12 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.47 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:768:MET:N | 0.47 | 2.75 | 2 | 1 |
| 1:A:770:LYS:O | 1:A:773:ASN:ND2 | 0.47 | 2.47 | 20 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:708:LEU:HB2 | 0.47 | 2.39 | 13 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:788:LEU:HG | 0.47 | 2.39 | 8 | 1 |
| 1:A:794:THR:HG22 | 1:A:795:ARG:N | 0.47 | 2.24 | 8 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HG3 | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.47 | 2.40 | 4 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CE2 | 1:A:785:ILE:HA | 0.47 | 2.43 | 4 | 2 |
| 1:A:737:THR:CG2 | 1:A:738:LEU:N | 0.47 | 2.67 | 6 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.47 | 2.44 | 7 | 2 |
| 1:A:656:LEU:CD2 | 1:A:660:PRO:HD3 | 0.47 | 2.39 | 8 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:752:SER:CB | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.47 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:785:ILE:HA | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.47 | 2.40 | 5 | 2 |
| 1:A:703:LYS:HE2 | 1:A:799:ALA:CB | 0.47 | 2.39 | 14 | 2 |
| 1:A:707:VAL:CG2 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.47 | 2.97 | 20 | 2 |
| 1:A:658:ASP:O | 1:A:659:VAL:O | 0.47 | 2.32 | 1 | 2 |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:792:PHE:CB | 0.47 | 2.39 | 16 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD13 | 1:A:792:PHE:HB2 | 0.47 | 1.86 | 16 | 1 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:709:LEU:C | 0.47 | 2.49 | 18 | 2 |
| 1:A:723:LEU:CB | 1:A:739:ASP:HB3 | 0.47 | 2.39 | 2 | 2 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.47 | 2.40 | 17 | 3 |
| 1:A:696:LEU:O | 1:A:700:ASN:CB | 0.47 | 2.62 | 3 | 3 |
| 1:A:712:PHE:CE2 | 1:A:744:ARG:HD3 | 0.47 | 2.45 | 3 | 2 |
| 1:A:757:SER:OG | 1:A:760:GLU:HB2 | 0.47 | 2.10 | 3 | 1 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:748:GLN:CG | 0.47 | 2.92 | 2 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:H | 0.47 | 2.21 | 6 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:670:HIS:N | 0.47 | 2.42 | 7 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG2 | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.47 | 2.98 | 5 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HG23 | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.47 | 2.44 | 5 | 2 |
| 1:A:707:VAL:HG23 | 1:A:711:LEU:CD1 | 0.47 | 2.40 | 5 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:755:TYR:HE2 | 0.47 | 2.33 | 18 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:O | 0.47 | 2.10 | 9 | 2 |
| 1:A:637:LEU:HA | 1:A:647:PHE:O | 0.47 | 2.10 | 20 | 2 |
| 1:A:630:VAL:CG2 | 1:A:647:PHE:CE2 | 0.47 | 2.98 | 20 | 2 |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:668:LEU:H | 0.47 | 1.69 | 16 | 1 |
| 1:A:695:LYS:O | 1:A:756:SER:O | 0.47 | 2.32 | 17 | 7 |
| 1:A:653:LEU:C | 1:A:655:ALA:N | 0.47 | 2.68 | 19 | 3 |
| 1:A:700:ASN:ND2 | 1:A:703:LYS:NZ | 0.47 | 2.63 | 7 | 1 |
| 1:A:639:MET:HG3 | 1:A:639:MET:O | 0.47 | 2.10 | 5 | 1 |
| 1:A:648:HIS:O | 1:A:651:CYS:HB2 | 0.47 | 2.10 | 9 | 1 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.47 | 2.93 | 9 | 1 |
| 1:A:668:LEU:N | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47 | 2.22 | 20 | 1 |
| 1:A:796:MET:HE2 | 1:A:800:PHE:CE1 | 0.47 | 2.44 | 19 | 2 |
| 1:A:713:CYS:SG | 1:A:714:HIS:N | 0.47 | 2.88 | 11 | 2 |
| 1:A:664:TRP:CZ2 | 1:A:666:CYS:HA | 0.47 | 2.45 | 19 | 3 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.47 | 2.37 | 4 | 1 |
| 1:A:796:MET:O | 1:A:800:PHE:CD1 | 0.47 | 2.68 | 4 | 1 |
| 1:A:652:HIS:ND1 | 1:A:664:TRP:HZ2 | 0.47 | 2.08 | 6 | 4 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:789:GLN:N | 0.47 | 2.43 | 16 | 4 |
| 1:A:706:ARG:O | 1:A:710:ALA:HB2 | 0.47 | 2.10 | 13 | 4 |
| 1:A:703:LYS:HG2 | 1:A:799:ALA:HB3 | 0.47 | 1.87 | 15 | 3 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:HA | 0.47 | 1.85 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.47 | 2.93 | 19 | 2 |
| 1:A:640:CYS:HA | 1:A:664:TRP:O | 0.47 | 2.08 | 3 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:768:MET:CE | 0.47 | 2.39 | 3 | 1 |
| 1:A:628:CYS:HB2 | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.47 | 1.87 | 3 | 2 |
| 1:A:653:LEU:C | 1:A:744:ARG:HE | 0.47 | 2.12 | 2 | 1 |
| 1:A:705:GLU:O | 1:A:706:ARG:C | 0.47 | 2.52 | 6 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:662:GLU:HA | 0.47 | 1.86 | 6 | 1 |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:CD | 0.47 | 2.53 | 6 | 1 |
| 1:A:667:SER:H | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.47 | 1.70 | 7 | 1 |
| 1:A:794:THR:O | 1:A:797:ASN:HB3 | 0.47 | 2.09 | 1 | 3 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:742:LEU:HB3 | 0.47 | 2.10 | 20 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:746:ARG:NH2 | 0.47 | 2.25 | 18 | 1 |
| 1:A:629:ARG:NE | 1:A:647:PHE:CE1 | 0.47 | 2.83 | 9 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HD12 | 1:A:746:ARG:HE | 0.47 | 1.70 | 19 | 1 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.47 | 2.25 | 8 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:OH | 0.47 | 2.10 | 4 | 1 |
| 1:A:764:ASP:O | 1:A:765:VAL:C | 0.47 | 2.51 | 6 | 2 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:716:PRO:C | 0.47 | 2.52 | 5 | 3 |
| 1:A:660:PRO:CG | 1:A:664:TRP:CG | 0.47 | 2.98 | 7 | 5 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:772:PHE:HD2 | 0.47 | 2.22 | 5 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HA | 1:A:784:SER:HB3 | 0.47 | 1.87 | 5 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HA | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.47 | 1.69 | 19 | 3 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.47 | 2.25 | 14 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HB2 | 1:A:742:LEU:CD1 | 0.47 | 2.38 | 8 | 1 |
| 1:A:767:ARG:HG2 | 1:A:771:GLN:NE2 | 0.47 | 2.24 | 15 | 2 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.47 | 2.98 | 15 | 2 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:792:PHE:CB | 0.47 | 2.63 | 2 | 1 |
| 1:A:720:LEU:C | 1:A:740:LEU:HG | 0.47 | 2.30 | 7 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:761:PHE:HD1 | 0.47 | 1.93 | 7 | 2 |
| 1:A:786:ILE:CG2 | 1:A:790:ARG:HD3 | 0.47 | 2.35 | 10 | 1 |
| 1:A:719:PRO:HB2 | 1:A:772:PHE:CE1 | 0.47 | 2.45 | 13 | 2 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:787:GLY:C | 0.47 | 2.53 | 16 | 1 |
| 1:A:665:SER:OG | 1:A:669:CYS:HB3 | 0.47 | 2.10 | 11 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:667:SER:C | 0.47 | 2.53 | 18 | 9 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:768:MET:HB3 | 0.47 | 2.34 | 3 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:CG | 0.47 | 2.40 | 9 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.47 | 2.45 | 16 | 1 |
| 1:A:697:SER:HB3 | 1:A:700:ASN:CB | 0.46 | 2.39 | 4 | 1 |
| 1:A:626:THR:C | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.46 | 2.30 | 3 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:CD2 | 0.46 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:758:PRO:HB2 | 1:A:800:PHE:CZ | 0.46 | 2.45 | 9 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:633:LYS:HD2 | 1:A:633:LYS:N | 0.46 | 2.23 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:HB2 | 0.46 | 1.86 | 20 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:HZ | 0.46 | 1.65 | 16 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.46 | 1.87 | 16 | 1 |
| 1:A:752:SER:N | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.46 | 2.25 | 1 | 1 |
| 1:A:744:ARG:HH12 | 1:A:747:LEU:HD13 | 0.46 | 1.67 | 12 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HG11 | 1:A:796:MET:HE3 | 0.46 | 1.87 | 17 | 1 |
| 1:A:706:ARG:CD | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.46 | 2.41 | 7 | 2 |
| 1:A:637:LEU:HG | 1:A:646:CYS:CB | 0.46 | 2.38 | 10 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.46 | 2.98 | 13 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:CG | 0.46 | 2.34 | 4 | 2 |
| 1:A:712:PHE:CE2 | 1:A:744:ARG:NE | 0.46 | 2.83 | 17 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HG | 1:A:795:ARG:HH22 | 0.46 | 1.70 | 6 | 1 |
| 1:A:761:PHE:CZ | 1:A:765:VAL:HG21 | 0.46 | 2.45 | 7 | 1 |
| 1:A:745:ALA:CB | 1:A:750:LYS:HB3 | 0.46 | 2.40 | 16 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HB3 | 1:A:768:MET:CG | 0.46 | 2.40 | 18 | 1 |
| 1:A:627:ILE:CG2 | 1:A:634:PRO:HD3 | 0.46 | 2.39 | 1 | 2 |
| 1:A:668:LEU:CD1 | 1:A:709:LEU:HB3 | 0.46 | 2.39 | 14 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB2 | 1:A:757:SER:OG | 0.46 | 2.09 | 13 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:761:PHE:HD2 | 0.46 | 1.93 | 1 | 1 |
| 1:A:746:ARG:N | 1:A:751:LEU:HG | 0.46 | 2.24 | 9 | 2 |
| 1:A:758:PRO:CB | 1:A:800:PHE:HZ | 0.46 | 2.24 | 4 | 1 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:711:LEU:N | 0.46 | 2.48 | 5 | 2 |
| 1:A:765:VAL:HG21 | 1:A:792:PHE:CD1 | 0.46 | 2.46 | 15 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:708:LEU:CB | 0.46 | 2.92 | 7 | 3 |
| 1:A:712:PHE:CE2 | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.46 | 2.81 | 17 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.46 | 2.68 | 6 | 2 |
| 1:A:640:CYS:HB2 | 1:A:645:PHE:HB2 | 0.46 | 1.88 | 18 | 3 |
| 1:A:645:PHE:HB3 | 1:A:647:PHE:CE1 | 0.46 | 2.45 | 10 | 2 |
| 1:A:760:GLU:O | 1:A:763:GLN:HB2 | 0.46 | 2.11 | 1 | 2 |
| 1:A:765:VAL:HG22 | 1:A:769:PHE:CZ | 0.46 | 2.46 | 5 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD11 | 1:A:710:ALA:CA | 0.46 | 2.41 | 16 | 2 |
| 1:A:704:CYS:CB | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.46 | 2.99 | 1 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HA | 1:A:706:ARG:HD3 | 0.46 | 1.86 | 1 | 1 |
| 1:A:707:VAL:C | 1:A:709:LEU:N | 0.46 | 2.64 | 1 | 1 |
| 1:A:715:GLU:HB2 | 1:A:716:PRO:CD | 0.46 | 2.41 | 11 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:CE2 | 0.46 | 2.45 | 4 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.46 | 2.46 | 8 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:CG | 0.46 | 2.41 | 3 | 2 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:786:ILE:CD1 | 0.46 | 2.63 | 2 | 4 |
| 1:A:645:PHE:CB | 1:A:666:CYS:HB3 | 0.46 | 2.40 | 18 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:702:ARG:CB | 0.46 | 2.63 | 7 | 2 |
| 1:A:753:PRO:CB | 1:A:754:PRO:HD2 | 0.46 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:LEU:CD1 | 0.46 | 2.34 | 18 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:768:MET:HA | 0.46 | 2.11 | 18 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HE | 1:A:629:ARG:HA | 0.46 | 1.70 | 16 | 1 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:786:ILE:HB | 0.46 | 2.11 | 14 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CB | 1:A:757:SER:OG | 0.46 | 2.64 | 13 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HA | 1:A:707:VAL:CG2 | 0.46 | 2.40 | 13 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HG2 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.46 | 2.45 | 3 | 1 |
| 1:A:745:ALA:O | 1:A:750:LYS:N | 0.46 | 2.49 | 6 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HE | 0.46 | 1.68 | 2 | 1 |
| 1:A:663:GLU:O | 1:A:664:TRP:O | 0.46 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HA | 1:A:768:MET:CB | 0.46 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HB3 | 1:A:789:GLN:CG | 0.46 | 2.41 | 20 | 2 |
| 1:A:638:VAL:HG22 | 1:A:639:MET:N | 0.46 | 2.25 | 14 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD22 | 1:A:701:GLN:N | 0.46 | 2.24 | 11 | 4 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.46 | 2.98 | 11 | 1 |
| 1:A:765:VAL:O | 1:A:769:PHE:CG | 0.46 | 2.69 | 14 | 6 |
| 1:A:784:SER:O | 1:A:788:LEU:CB | 0.46 | 2.63 | 15 | 1 |
| 1:A:786:ILE:HG13 | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.46 | 1.69 | 12 | 1 |
| 1:A:767:ARG:O | 1:A:768:MET:C | 0.46 | 2.53 | 17 | 8 |
| 1:A:714:HIS:ND1 | 1:A:791:PHE:CD1 | 0.46 | 2.83 | 6 | 2 |
| 1:A:627:ILE:O | 1:A:646:CYS:SG | 0.46 | 2.73 | 3 | 2 |
| 1:A:793:GLU:O | 1:A:797:ASN:HB3 | 0.46 | 2.11 | 18 | 2 |
| 1:A:652:HIS:CD2 | 1:A:656:LEU:HD22 | 0.46 | 2.46 | 6 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.46 | 2.46 | 5 | 1 |
| 1:A:642:GLN:CG | 1:A:665:SER:HB3 | 0.46 | 2.40 | 9 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:709:LEU:HD13 | 0.46 | 2.44 | 9 | 1 |
| 1:A:753:PRO:CB | 1:A:754:PRO:HD3 | 0.46 | 2.41 | 13 | 1 |
| 1:A:703:LYS:NZ | 1:A:758:PRO:HA | 0.46 | 2.26 | 15 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:664:TRP:CE2 | 0.46 | 2.46 | 6 | 2 |
| 1:A:773:ASN:CA | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.46 | 2.41 | 3 | 3 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.46 | 2.64 | 19 | 3 |
| 1:A:716:PRO:C | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.46 | 2.31 | 3 | 2 |
| 1:A:790:ARG:N | 1:A:790:ARG:CD | 0.46 | 2.78 | 7 | 4 |
| 1:A:641:ASN:OD1 | 1:A:642:GLN:HG2 | 0.46 | 2.10 | 2 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:768:MET:CG | 0.46 | 2.94 | 7 | 3 |
| 1:A:710:ALA:CB | 1:A:795:ARG:HG3 | 0.46 | 2.41 | 5 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:667:SER:HB2 | 0.46 | 2.26 | 16 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HG12 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.46 | 2.45 | 16 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD13 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.46 | 1.88 | 14 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:747:LEU:HD11 | 1:A:761:PHE:HD2 | 0.46 | 1.70 | 14 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CG1 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.46 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:634:PRO:HA | 1:A:637:LEU:CD1 | 0.46 | 2.36 | 1 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:723:LEU:HD22 | 0.46 | 2.41 | 11 | 2 |
| 1:A:788:LEU:C | 1:A:790:ARG:N | 0.46 | 2.68 | 11 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:709:LEU:H | 0.46 | 1.69 | 4 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CG | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.46 | 2.45 | 10 | 4 |
| 1:A:665:SER:O | 1:A:670:HIS:CB | 0.46 | 2.64 | 5 | 4 |
| 1:A:638:VAL:O | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.46 | 2.69 | 2 | 2 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:747:LEU:CD1 | 0.46 | 2.94 | 2 | 1 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:747:LEU:HB3 | 0.46 | 2.26 | 2 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CB | 1:A:755:TYR:CZ | 0.46 | 2.99 | 19 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:CD2 | 0.46 | 2.34 | 6 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.46 | 2.36 | 6 | 1 |
| 1:A:665:SER:CB | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.46 | 2.41 | 9 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CB | 0.46 | 2.41 | 20 | 2 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:CZ | 0.46 | 2.94 | 17 | 1 |
| 1:A:649:LEU:N | 1:A:649:LEU:HD23 | 0.46 | 2.26 | 3 | 1 |
| 1:A:737:THR:HG22 | 1:A:738:LEU:O | 0.46 | 2.11 | 16 | 7 |
| 1:A:738:LEU:CD1 | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.46 | 2.41 | 13 | 2 |
| 1:A:742:LEU:CD1 | 1:A:743:ILE:N | 0.46 | 2.72 | 18 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:758:PRO:CD | 0.46 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:785:ILE:HA | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.46 | 1.87 | 20 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:758:PRO:HD3 | 0.46 | 1.87 | 13 | 1 |
| 1:A:626:THR:CG2 | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.45 | 2.41 | 10 | 2 |
| 1:A:721:HIS:HB3 | 1:A:722:GLN:NE2 | 0.45 | 2.26 | 4 | 2 |
| 1:A:633:LYS:O | 1:A:648:HIS:CE1 | 0.45 | 2.69 | 20 | 3 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:723:LEU:CD1 | 0.45 | 2.39 | 14 | 3 |
| 1:A:758:PRO:HB3 | 1:A:800:PHE:CE1 | 0.45 | 2.46 | 3 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD23 | 1:A:795:ARG:NH1 | 0.45 | 2.24 | 6 | 1 |
| 1:A:716:PRO:CG | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.45 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:667:SER:CB | 0.45 | 2.79 | 10 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:HB2 | 0.45 | 2.11 | 1 | 2 |
| 1:A:755:TYR:HE1 | 1:A:761:PHE:N | 0.45 | 2.10 | 9 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD11 | 1:A:701:GLN:HA | 0.45 | 1.88 | 16 | 2 |
| 1:A:720:LEU:HA | 1:A:723:LEU:CG | 0.45 | 2.41 | 14 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:705:GLU:CA | 0.45 | 2.41 | 13 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CB | 1:A:709:LEU:HG | 0.45 | 2.41 | 8 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CB | 1:A:654:PRO:CD | 0.45 | 2.95 | 13 | 3 |
| 1:A:704:CYS:C | 1:A:706:ARG:N | 0.45 | 2.67 | 15 | 1 |
| 1:A:628:CYS:N | 1:A:637:LEU:HD13 | 0.45 | 2.25 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:757:SER:O | 1:A:760:GLU:N | 0.45 | 2.49 | 5 | 3 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:744:ARG:CB | 0.45 | 2.92 | 17 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HG12 | 1:A:761:PHE:HB2 | 0.45 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:705:GLU:CG | 0.45 | 2.79 | 7 | 2 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:654:PRO:HD2 | 0.45 | 2.10 | 5 | 2 |
| 1:A:629:ARG:HE | 1:A:713:CYS:CB | 0.45 | 2.24 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:761:PHE:CZ | 0.45 | 2.46 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CG | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.45 | 2.98 | 11 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HA | 1:A:751:LEU:CG | 0.45 | 2.40 | 11 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HB2 | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.45 | 1.87 | 12 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HD3 | 1:A:754:PRO:HG2 | 0.45 | 1.89 | 4 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CA | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.45 | 2.41 | 4 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:701:GLN:HA | 0.45 | 1.88 | 15 | 1 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:750:LYS:HE3 | 0.45 | 2.26 | 15 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.45 | 2.24 | 17 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HH22 | 0.45 | 1.70 | 17 | 1 |
| 1:A:723:LEU:CD1 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.45 | 2.41 | 2 | 1 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:720:LEU:HB2 | 0.45 | 2.10 | 1 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:768:MET:CG | 0.45 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HG3 | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.45 | 1.87 | 5 | 1 |
| 1:A:714:HIS:CE1 | 1:A:791:PHE:CD1 | 0.45 | 3.04 | 16 | 2 |
| 1:A:721:HIS:CA | 1:A:740:LEU:HD12 | 0.45 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:743:ILE:CD1 | 0.45 | 2.38 | 1 | 2 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.45 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HG | 0.45 | 2.46 | 4 | 1 |
| 1:A:757:SER:N | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.45 | 2.27 | 15 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:658:ASP:CA | 0.45 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CG | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.45 | 2.42 | 17 | 2 |
| 1:A:665:SER:C | 1:A:669:CYS:HB2 | 0.45 | 2.32 | 5 | 2 |
| 1:A:783:GLN:HE22 | 1:A:786:ILE:HG21 | 0.45 | 1.72 | 18 | 1 |
| 1:A:628:CYS:HB2 | 1:A:647:PHE:HA | 0.45 | 1.89 | 20 | 1 |
| 1:A:755:TYR:O | 1:A:756:SER:CB | 0.45 | 2.64 | 13 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:CE | 0.45 | 2.93 | 11 | 2 |
| 1:A:655:ALA:CB | 1:A:657:GLN:HG3 | 0.45 | 2.41 | 15 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD13 | 1:A:659:VAL:CG1 | 0.45 | 2.41 | 12 | 1 |
| 1:A:666:CYS:C | 1:A:668:LEU:H | 0.45 | 2.14 | 17 | 1 |
| 1:A:744:ARG:CA | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.45 | 2.80 | 17 | 1 |
| 1:A:628:CYS:C | 1:A:630:VAL:N | 0.45 | 2.70 | 3 | 7 |
| 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CG | 0.45 | 2.39 | 2 | 1 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:721:HIS:C | 0.45 | 2.55 | 14 | 4 |
| 1:A:656:LEU:O | 1:A:657:GLN:CB | 0.45 | 2.65 | 7 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:763:GLN:O | 1:A:767:ARG:HB2 | 0.45 | 2.12 | 5 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:CG2 | 0.45 | 2.93 | 8 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:N | 0.45 | 2.80 | 6 | 1 |
| 1:A:704:CYS:CA | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.45 | 2.42 | 5 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:789:GLN:CG | 0.45 | 2.65 | 16 | 1 |
| 1:A:701:GLN:CB | 1:A:756:SER:O | 0.45 | 2.63 | 13 | 1 |
| 1:A:783:GLN:NE2 | 1:A:783:GLN:O | 0.45 | 2.50 | 13 | 1 |
| 1:A:709:LEU:CD1 | 1:A:713:CYS:SG | 0.45 | 3.05 | 1 | 1 |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.45 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HG3 | 1:A:645:PHE:HA | 0.45 | 1.87 | 15 | 2 |
| 1:A:772:PHE:HA | 1:A:775:LEU:HD12 | 0.45 | 1.89 | 12 | 1 |
| 1:A:653:LEU:C | 1:A:653:LEU:HD23 | 0.45 | 2.32 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:O | 1:A:739:ASP:HB3 | 0.45 | 2.12 | 18 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HB2 | 1:A:750:LYS:NZ | 0.45 | 2.27 | 14 | 1 |
| 1:A:655:ALA:HB3 | 1:A:657:GLN:HE21 | 0.45 | 1.71 | 13 | 1 |
| 1:A:700:ASN:C | 1:A:758:PRO:HD2 | 0.45 | 2.32 | 13 | 1 |
| 1:A:665:SER:C | 1:A:670:HIS:HB2 | 0.45 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HZ | 1:A:792:PHE:HB2 | 0.45 | 1.71 | 18 | 4 |
| 1:A:626:THR:HB | 1:A:637:LEU:CD1 | 0.45 | 2.40 | 14 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.45 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD11 | 1:A:764:ASP:CB | 0.45 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CG | 1:A:761:PHE:CZ | 0.45 | 2.99 | 16 | 2 |
| 1:A:711:LEU:O | 1:A:712:PHE:C | 0.45 | 2.54 | 9 | 3 |
| 1:A:744:ARG:NE | 1:A:750:LYS:CE | 0.45 | 2.79 | 18 | 1 |
| 1:A:700:ASN:C | 1:A:758:PRO:HD3 | 0.45 | 2.32 | 20 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE2 | 1:A:799:ALA:CA | 0.45 | 2.41 | 14 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HA | 1:A:706:ARG:HB2 | 0.45 | 1.88 | 8 | 1 |
| 1:A:791:PHE:O | 1:A:794:THR:HB | 0.45 | 2.12 | 4 | 1 |
| 1:A:706:ARG:HB2 | 1:A:799:ALA:HB2 | 0.45 | 1.89 | 4 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD22 | 1:A:660:PRO:HB3 | 0.45 | 1.87 | 15 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:785:ILE:O | 0.45 | 2.70 | 15 | 1 |
| 1:A:657:GLN:O | 1:A:658:ASP:HB3 | 0.45 | 2.12 | 12 | 1 |
| 1:A:699:ALA:C | 1:A:703:LYS:HE2 | 0.45 | 2.32 | 13 | 4 |
| 1:A:648:HIS:C | 1:A:649:LEU:HG | 0.45 | 2.32 | 7 | 2 |
| 1:A:656:LEU:O | 1:A:657:GLN:CG | 0.45 | 2.65 | 7 | 1 |
| 1:A:744:ARG:O | 1:A:748:GLN:HB2 | 0.45 | 2.10 | 7 | 3 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:788:LEU:HB3 | 0.45 | 2.26 | 8 | 2 |
| 1:A:720:LEU:C | 1:A:722:GLN:N | 0.45 | 2.66 | 14 | 4 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:792:PHE:CZ | 0.45 | 2.99 | 16 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE1 | 1:A:788:LEU:HD13 | 0.45 | 2.47 | 13 | 1 |
| 1:A:739:ASP:H | 1:A:742:LEU:CD1 | 0.45 | 2.19 | 8 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:743:ILE:HG12 | 0.45 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:790:ARG:HA | 1:A:790:ARG:NE | 0.45 | 2.27 | 11 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:SD | 0.45 | 2.51 | 13 | 2 |
| 1:A:755:TYR:HB3 | 1:A:760:GLU:CB | 0.45 | 2.42 | 15 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HB2 | 1:A:788:LEU:HG | 0.45 | 1.89 | 18 | 3 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:658:ASP:HA | 0.45 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CZ | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.45 | 3.05 | 9 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HA | 1:A:746:ARG:NH1 | 0.45 | 2.25 | 3 | 1 |
| 1:A:711:LEU:CD2 | 1:A:795:ARG:HH12 | 0.45 | 2.24 | 6 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.45 | 2.42 | 13 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD1 | 1:A:705:GLU:HA | 0.44 | 2.40 | 15 | 6 |
| 1:A:759:GLN:HB3 | 1:A:763:GLN:HE21 | 0.44 | 1.72 | 11 | 1 |
| 1:A:739:ASP:HA | 1:A:768:MET:HG2 | 0.44 | 1.88 | 15 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:HG3 | 0.44 | 1.87 | 12 | 1 |
| 1:A:718:ARG:CG | 1:A:719:PRO:HD3 | 0.44 | 2.40 | 9 | 2 |
| 1:A:786:ILE:HG22 | 1:A:787:GLY:N | 0.44 | 2.27 | 6 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:761:PHE:CG | 0.44 | 2.47 | 1 | 2 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:711:LEU:HD12 | 0.44 | 2.36 | 18 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD21 | 1:A:659:VAL:H | 0.44 | 1.71 | 20 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HB2 | 1:A:756:SER:CB | 0.44 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:CG | 0.44 | 2.39 | 19 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CZ | 1:A:713:CYS:HB2 | 0.44 | 2.47 | 11 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CE1 | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.44 | 2.48 | 11 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.44 | 1.89 | 4 | 1 |
| 1:A:716:PRO:HB3 | 1:A:784:SER:HB2 | 0.44 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:701:GLN:NE2 | 0.44 | 2.80 | 12 | 1 |
| 1:A:756:SER:H | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.44 | 1.73 | 12 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HA | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.44 | 1.87 | 3 | 1 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:790:ARG:N | 0.44 | 2.50 | 6 | 2 |
| 1:A:637:LEU:HD13 | 1:A:637:LEU:N | 0.44 | 2.28 | 13 | 3 |
| 1:A:792:PHE:HD2 | 1:A:793:GLU:HG3 | 0.44 | 1.72 | 18 | 3 |
| 1:A:698:PRO:O | 1:A:702:ARG:CG | 0.44 | 2.65 | 14 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HA | 1:A:748:GLN:HB2 | 0.44 | 1.89 | 19 | 1 |
| 1:A:649:LEU:N | 1:A:649:LEU:CD1 | 0.44 | 2.80 | 8 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CZ | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.44 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HD12 | 1:A:768:MET:CE | 0.44 | 2.42 | 11 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:788:LEU:HD21 | 0.44 | 2.47 | 11 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HD2 | 1:A:785:ILE:HG22 | 0.44 | 1.71 | 15 | 1 |
| 1:A:721:HIS:O | 1:A:741:THR:CG2 | 0.44 | 2.66 | 17 | 1 |
| 1:A:720:LEU:HD12 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.44 | 1.88 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD22 | 1:A:764:ASP:HB2 | 0.44 | 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:639:MET:CG | 1:A:644:GLU:HA | 0.44 | 2.43 | 3 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:649:LEU:N | 0.44 | 2.80 | 10 | 2 |
| 1:A:704:CYS:HB2 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.44 | 1.88 | 18 | 1 |
| 1:A:709:LEU:O | 1:A:713:CYS:HB3 | 0.44 | 2.13 | 18 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CG | 0.44 | 2.42 | 14 | 1 |
| 1:A:788:LEU:HD12 | 1:A:791:PHE:CD2 | 0.44 | 2.48 | 4 | 1 |
| 1:A:699:ALA:HA | 1:A:702:ARG:HB3 | 0.44 | 1.89 | 19 | 2 |
| 1:A:668:LEU:N | 1:A:668:LEU:HD13 | 0.44 | 2.28 | 18 | 1 |
| 1:A:642:GLN:HG2 | 1:A:665:SER:OG | 0.44 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:CD1 | 0.44 | 2.42 | 16 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HA | 1:A:792:PHE:HE2 | 0.44 | 1.72 | 16 | 1 |
| 1:A:643:CYS:HB2 | 1:A:645:PHE:CD1 | 0.44 | 2.47 | 12 | 1 |
| 1:A:744:ARG:NE | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.44 | 2.10 | 12 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:HD11 | 0.44 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:737:THR:CG2 | 1:A:737:THR:O | 0.44 | 2.64 | 3 | 1 |
| 1:A:773:ASN:HD22 | 1:A:785:ILE:HG13 | 0.44 | 1.72 | 10 | 1 |
| 1:A:641:ASN:CB | 1:A:664:TRP:O | 0.44 | 2.66 | 18 | 3 |
| 1:A:660:PRO:HB2 | 1:A:664:TRP:CB | 0.44 | 2.42 | 9 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE2 | 1:A:800:PHE:N | 0.44 | 2.27 | 14 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HG | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.44 | 2.47 | 19 | 1 |
| 1:A:639:MET:HG3 | 1:A:646:CYS:SG | 0.44 | 2.53 | 11 | 1 |
| 1:A:655:ALA:O | 1:A:657:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 4 | 1 |
| 1:A:740:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:HE1 | 0.44 | 2.43 | 15 | 1 |
| 1:A:758:PRO:HG2 | 1:A:800:PHE:HZ | 0.44 | 1.73 | 12 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:795:ARG:HD2 | 0.44 | 1.90 | 17 | 1 |
| 1:A:700:ASN:N | 1:A:700:ASN:HD22 | 0.44 | 2.10 | 7 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.44 | 1.89 | 5 | 2 |
| 1:A:782:VAL:HA | 1:A:785:ILE:CG1 | 0.44 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:718:ARG:N | 1:A:719:PRO:CD | 0.44 | 2.81 | 9 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HG | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.44 | 1.72 | 14 | 1 |
| 1:A:783:GLN:NE2 | 1:A:786:ILE:HG21 | 0.44 | 2.27 | 8 | 1 |
| 1:A:790:ARG:HE | 1:A:790:ARG:HA | 0.44 | 1.72 | 11 | 2 |
| 1:A:745:ALA:CB | 1:A:751:LEU:CB | 0.44 | 2.95 | 12 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HA | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.44 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:660:PRO:CB | 1:A:664:TRP:HB2 | 0.44 | 2.42 | 16 | 3 |
| 1:A:653:LEU:HD23 | 1:A:744:ARG:CD | 0.44 | 2.42 | 3 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD1 | 1:A:772:PHE:O | 0.44 | 2.71 | 3 | 1 |
| 1:A:785:ILE:HG22 | 1:A:789:GLN:HE21 | 0.44 | 1.73 | 10 | 2 |
| 1:A:628:CYS:HA | 1:A:637:LEU:HD11 | 0.44 | 1.89 | 10 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:738:LEU:C | 0.44 | 2.53 | 10 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HE21 | 1:A:747:LEU:CD2 | 0.44 | 2.26 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:773:ASN:CB | 1:A:785:ILE:HG21 | 0.44 | 2.34 | 20 | 1 |
| 1:A:791:PHE:O | 1:A:795:ARG:HG2 | 0.44 | 2.12 | 20 | 1 |
| 1:A:700:ASN:HA | 1:A:703:LYS:HB2 | 0.44 | 1.90 | 14 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE3 | 1:A:796:MET:HA | 0.44 | 1.90 | 14 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:700:ASN:HB3 | 0.44 | 1.88 | 19 | 1 |
| 1:A:762:ALA:O | 1:A:765:VAL:N | 0.44 | 2.51 | 19 | 2 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.44 | 2.43 | 1 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD1 | 1:A:785:ILE:HD11 | 0.44 | 2.47 | 11 | 2 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:761:PHE:CZ | 0.44 | 2.71 | 5 | 6 |
| 1:A:702:ARG:O | 1:A:705:GLU:HB2 | 0.44 | 2.13 | 3 | 1 |
| 1:A:788:LEU:HA | 1:A:791:PHE:HB3 | 0.44 | 1.88 | 20 | 2 |
| 1:A:664:TRP:CE2 | 1:A:665:SER:O | 0.44 | 2.71 | 8 | 1 |
| 1:A:667:SER:CA | 1:A:670:HIS:HB3 | 0.44 | 2.43 | 8 | 1 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:723:LEU:HB2 | 0.44 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:HG12 | 0.44 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:769:PHE:HB3 | 1:A:785:ILE:HG23 | 0.44 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:757:SER:OG | 1:A:758:PRO:HD2 | 0.44 | 2.13 | 4 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD1 | 1:A:772:PHE:C | 0.44 | 2.91 | 12 | 3 |
| 1:A:635:GLY:O | 1:A:636:ASP:C | 0.44 | 2.55 | 12 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HB2 | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.44 | 2.43 | 3 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:738:LEU:HB2 | 0.44 | 2.12 | 3 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CA | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.44 | 2.43 | 3 | 1 |
| 1:A:647:PHE:HZ | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.44 | 1.73 | 2 | 1 |
| 1:A:660:PRO:C | 1:A:662:GLU:H | 0.44 | 2.16 | 7 | 2 |
| 1:A:762:ALA:C | 1:A:765:VAL:HG12 | 0.44 | 2.32 | 5 | 1 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.44 | 2.47 | 9 | 1 |
| 1:A:739:ASP:OD1 | 1:A:742:LEU:N | 0.44 | 2.51 | 14 | 1 |
| 1:A:701:GLN:HG3 | 1:A:756:SER:C | 0.44 | 2.33 | 13 | 1 |
| 1:A:640:CYS:SG | 1:A:643:CYS:N | 0.43 | 2.86 | 4 | 3 |
| 1:A:652:HIS:HE2 | 1:A:667:SER:CB | 0.43 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB3 | 1:A:701:GLN:HB2 | 0.43 | 1.90 | 3 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.43 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:717:CYS:C | 1:A:721:HIS:CD2 | 0.43 | 2.91 | 20 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HA | 1:A:755:TYR:HE1 | 0.43 | 1.71 | 20 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CG | 1:A:757:SER:HB2 | 0.43 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD11 | 1:A:664:TRP:CD1 | 0.43 | 2.48 | 19 | 1 |
| 1:A:643:CYS:SG | 1:A:643:CYS:O | 0.43 | 2.76 | 11 | 1 |
| 1:A:667:SER:HA | 1:A:670:HIS:C | 0.43 | 2.33 | 4 | 3 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.43 | 1.89 | 4 | 2 |
| 1:A:703:LYS:C | 1:A:706:ARG:HB2 | 0.43 | 2.34 | 15 | 1 |
| 1:A:668:LEU:H | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.43 | 1.72 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:652:HIS:HB3 | 1:A:655:ALA:HA | 0.43 | 1.89 | 17 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HH11 | 1:A:751:LEU:HB3 | 0.43 | 1.73 | 3 | 1 |
| 1:A:748:GLN:NE2 | 1:A:750:LYS:HZ1 | 0.43 | 2.11 | 3 | 1 |
| 1:A:627:ILE:N | 1:A:637:LEU:HD23 | 0.43 | 2.28 | 2 | 2 |
| 1:A:628:CYS:CA | 1:A:637:LEU:HG | 0.43 | 2.42 | 2 | 3 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.43 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:786:ILE:O | 1:A:789:GLN:HB2 | 0.43 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:629:ARG:CZ | 1:A:645:PHE:HD2 | 0.43 | 2.25 | 9 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CG | 1:A:756:SER:N | 0.43 | 2.82 | 20 | 1 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:746:ARG:HB2 | 0.43 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:766:GLY:O | 1:A:770:LYS:HB2 | 0.43 | 2.12 | 8 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.43 | 3.01 | 11 | 1 |
| 1:A:716:PRO:CB | 1:A:788:LEU:HG | 0.43 | 2.43 | 12 | 3 |
| 1:A:738:LEU:HG | 1:A:764:ASP:HB3 | 0.43 | 1.90 | 2 | 2 |
| 1:A:659:VAL:HA | 1:A:660:PRO:HD3 | 0.43 | 1.65 | 8 | 3 |
| 1:A:638:VAL:HB | 1:A:659:VAL:CG2 | 0.43 | 2.43 | 14 | 1 |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:703:LYS:HB2 | 0.43 | 2.13 | 14 | 1 |
| 1:A:743:ILE:HG21 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.43 | 2.48 | 11 | 2 |
| 1:A:717:CYS:O | 1:A:721:HIS:CD2 | 0.43 | 2.72 | 4 | 1 |
| 1:A:695:LYS:HD3 | 1:A:754:PRO:HB2 | 0.43 | 1.89 | 15 | 1 |
| 1:A:783:GLN:C | 1:A:783:GLN:HE21 | 0.43 | 2.17 | 3 | 1 |
| 1:A:668:LEU:CD2 | 1:A:706:ARG:O | 0.43 | 2.66 | 2 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:670:HIS:CB | 0.43 | 2.66 | 7 | 1 |
| 1:A:738:LEU:N | 1:A:738:LEU:HD23 | 0.43 | 2.27 | 7 | 1 |
| 1:A:796:MET:CE | 1:A:800:PHE:CE1 | 0.43 | 3.01 | 7 | 1 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:788:LEU:HG | 0.43 | 2.11 | 5 | 1 |
| 1:A:745:ALA:C | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.43 | 2.85 | 9 | 1 |
| 1:A:790:ARG:O | 1:A:794:THR:OG1 | 0.43 | 2.35 | 14 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD2 | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.43 | 2.43 | 8 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:646:CYS:HB2 | 0.43 | 1.90 | 11 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HB | 1:A:632:GLN:CA | 0.43 | 2.43 | 15 | 2 |
| 1:A:637:LEU:CD2 | 1:A:648:HIS:CD2 | 0.43 | 3.02 | 15 | 3 |
| 1:A:744:ARG:CG | 1:A:744:ARG:HH11 | 0.43 | 2.27 | 17 | 1 |
| 1:A:660:PRO:CG | 1:A:664:TRP:CD1 | 0.43 | 3.01 | 2 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.43 | 1.88 | 2 | 1 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:765:VAL:N | 0.43 | 2.51 | 18 | 2 |
| 1:A:720:LEU:HG | 1:A:740:LEU:CD2 | 0.43 | 2.44 | 7 | 2 |
| 1:A:665:SER:HB2 | 1:A:669:CYS:SG | 0.43 | 2.54 | 7 | 1 |
| 1:A:701:GLN:NE2 | 1:A:705:GLU:CD | 0.43 | 2.71 | 10 | 1 |
| 1:A:629:ARG:CD | 1:A:630:VAL:N | 0.43 | 2.82 | 9 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE1 | 1:A:709:LEU:HD11 | 0.43 | 2.48 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:759:GLN:O | 1:A:763:GLN:CG | 0.43 | 2.67 | 20 | 2 |
| 1:A:697:SER:O | 1:A:701:GLN:N | 0.43 | 2.44 | 16 | 1 |
| 1:A:668:LEU:N | 1:A:668:LEU:CD1 | 0.43 | 2.81 | 14 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HD12 | 1:A:632:GLN:HA | 0.43 | 1.90 | 8 | 1 |
| 1:A:788:LEU:H | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.43 | 1.73 | 8 | 1 |
| 1:A:795:ARG:HD3 | 1:A:798:GLU:OE1 | 0.43 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:744:ARG:CZ | 1:A:750:LYS:NZ | 0.43 | 2.81 | 15 | 1 |
| 1:A:795:ARG:O | 1:A:798:GLU:HB3 | 0.43 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:767:ARG:HA | 1:A:770:LYS:CG | 0.43 | 2.44 | 17 | 2 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:744:ARG:O | 0.43 | 2.50 | 2 | 1 |
| 1:A:710:ALA:O | 1:A:713:CYS:SG | 0.43 | 2.77 | 5 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:649:LEU:CD2 | 0.43 | 2.96 | 18 | 1 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:739:ASP:HA | 0.43 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:625:ALA:O | 1:A:627:ILE:N | 0.43 | 2.52 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:743:ILE:HG21 | 0.43 | 1.89 | 9 | 2 |
| 1:A:755:TYR:C | 1:A:755:TYR:CD1 | 0.43 | 2.92 | 20 | 1 |
| 1:A:650:ASP:HA | 1:A:655:ALA:HB1 | 0.43 | 1.89 | 16 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CB | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.43 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:707:VAL:O | 1:A:709:LEU:N | 0.43 | 2.51 | 1 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HG2 | 1:A:713:CYS:SG | 0.43 | 2.54 | 11 | 1 |
| 1:A:755:TYR:OH | 1:A:761:PHE:CB | 0.43 | 2.67 | 11 | 1 |
| 1:A:714:HIS:NE2 | 1:A:791:PHE:CE1 | 0.43 | 2.86 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:CZ | 0.43 | 2.43 | 12 | 1 |
| 1:A:741:THR:O | 1:A:742:LEU:C | 0.43 | 2.57 | 17 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:HH12 | 0.43 | 2.26 | 17 | 1 |
| 1:A:710:ALA:HB3 | 1:A:795:ARG:CZ | 0.43 | 2.44 | 6 | 1 |
| 1:A:715:GLU:HB3 | 1:A:716:PRO:HD3 | 0.43 | 1.90 | 8 | 2 |
| 1:A:652:HIS:O | 1:A:654:PRO:N | 0.43 | 2.51 | 18 | 1 |
| 1:A:647:PHE:HE2 | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.43 | 1.70 | 13 | 1 |
| 1:A:741:THR:HA | 1:A:744:ARG:HH11 | 0.43 | 1.74 | 13 | 1 |
| 1:A:755:TYR:HB3 | 1:A:760:GLU:CG | 0.43 | 2.43 | 1 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:775:LEU:N | 0.43 | 2.51 | 7 | 2 |
| 1:A:754:PRO:O | 1:A:755:TYR:HB2 | 0.43 | 2.11 | 13 | 3 |
| 1:A:715:GLU:O | 1:A:718:ARG:CB | 0.43 | 2.66 | 2 | 3 |
| 1:A:773:ASN:OD1 | 1:A:782:VAL:HG13 | 0.43 | 2.14 | 2 | 1 |
| 1:A:626:THR:HG22 | 1:A:637:LEU:HD12 | 0.43 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:744:ARG:HE | 1:A:750:LYS:HE2 | 0.43 | 1.73 | 14 | 1 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:716:PRO:HB2 | 0.43 | 2.49 | 13 | 1 |
| 1:A:796:MET:O | 1:A:796:MET:HG3 | 0.43 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:701:GLN:OE1 | 1:A:747:LEU:O | 0.43 | 2.37 | 1 | 1 |
| 1:A:755:TYR:HB3 | 1:A:760:GLU:CD | 0.43 | 2.34 | 1 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:668:LEU:N | 1:A:709:LEU:CD2 | 0.43 | 2.82 | 4 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:774:LYS:N | 0.43 | 2.48 | 12 | 1 |
| 1:A:707:VAL:CG2 | 1:A:796:MET:HE3 | 0.43 | 2.38 | 12 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD21 | 1:A:758:PRO:N | 0.43 | 2.29 | 2 | 2 |
| 1:A:700:ASN:HB3 | 1:A:758:PRO:CG | 0.43 | 2.44 | 7 | 2 |
| 1:A:645:PHE:N | 1:A:645:PHE:CD1 | 0.43 | 2.87 | 10 | 1 |
| 1:A:721:HIS:HA | 1:A:740:LEU:HG | 0.43 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD21 | 1:A:792:PHE:HD1 | 0.43 | 1.73 | 13 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HG22 | 1:A:712:PHE:C | 0.43 | 2.35 | 19 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:788:LEU:HD11 | 0.43 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:653:LEU:O | 1:A:748:GLN:NE2 | 0.43 | 2.51 | 19 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE2 | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.43 | 3.01 | 8 | 1 |
| 1:A:651:CYS:O | 1:A:652:HIS:C | 0.43 | 2.56 | 1 | 1 |
| 1:A:751:LEU:CD2 | 1:A:753:PRO:HD2 | 0.43 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:647:PHE:CE1 | 1:A:666:CYS:HB2 | 0.43 | 2.49 | 14 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD12 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.43 | 2.49 | 4 | 1 |
| 1:A:714:HIS:N | 1:A:714:HIS:ND1 | 0.43 | 2.65 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD11 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.43 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:789:GLN:HG3 | 0.43 | 2.48 | 15 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG2 | 1:A:649:LEU:CD1 | 0.43 | 2.96 | 6 | 2 |
| 1:A:698:PRO:O | 1:A:702:ARG:HG3 | 0.43 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG11 | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.43 | 1.89 | 17 | 1 |
| 1:A:714:HIS:HD2 | 1:A:717:CYS:H | 0.43 | 1.57 | 17 | 1 |
| 1:A:660:PRO:HG2 | 1:A:664:TRP:CD1 | 0.43 | 2.49 | 3 | 2 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:748:GLN:HG3 | 0.43 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:711:LEU:N | 1:A:795:ARG:NH1 | 0.43 | 2.67 | 6 | 1 |
| 1:A:739:ASP:OD1 | 1:A:742:LEU:HG | 0.43 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:764:ASP:C | 1:A:767:ARG:HB2 | 0.43 | 2.34 | 20 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HD2 | 1:A:755:TYR:CE1 | 0.43 | 2.48 | 14 | 1 |
| 1:A:639:MET:O | 1:A:641:ASN:N | 0.42 | 2.52 | 11 | 2 |
| 1:A:647:PHE:HB2 | 1:A:664:TRP:CZ3 | 0.42 | 2.49 | 11 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HB | 1:A:712:PHE:C | 0.42 | 2.34 | 11 | 2 |
| 1:A:708:LEU:CD2 | 1:A:747:LEU:HG | 0.42 | 2.44 | 15 | 1 |
| 1:A:746:ARG:O | 1:A:753:PRO:O | 0.42 | 2.36 | 15 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CZ | 1:A:788:LEU:HG | 0.42 | 2.49 | 15 | 1 |
| 1:A:705:GLU:HG2 | 1:A:747:LEU:HD21 | 0.42 | 1.91 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HA | 1:A:742:LEU:HD22 | 0.42 | 1.90 | 2 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:743:ILE:CD1 | 0.42 | 2.96 | 2 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:667:SER:HB3 | 0.42 | 2.28 | 10 | 1 |
| 1:A:716:PRO:CB | 1:A:788:LEU:HB3 | 0.42 | 2.44 | 5 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:744:ARG:CD | 0.42 | 2.44 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:704:CYS:CA | 1:A:707:VAL:HB | 0.42 | 2.43 | 16 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HD22 | 1:A:740:LEU:H | 0.42 | 1.74 | 1 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HB3 | 1:A:660:PRO:HD3 | 0.42 | 1.91 | 4 | 1 |
| 1:A:746:ARG:CB | 1:A:751:LEU:HD23 | 0.42 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD22 | 1:A:705:GLU:HG2 | 0.42 | 1.91 | 15 | 1 |
| 1:A:782:VAL:C | 1:A:784:SER:H | 0.42 | 2.17 | 15 | 1 |
| 1:A:744:ARG:HH12 | 1:A:747:LEU:HB3 | 0.42 | 1.74 | 12 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CG | 1:A:744:ARG:NH2 | 0.42 | 2.81 | 17 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:761:PHE:HZ | 0.42 | 1.97 | 17 | 1 |
| 1:A:635:GLY:C | 1:A:637:LEU:HG | 0.42 | 2.35 | 5 | 4 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:761:PHE:CD2 | 0.42 | 2.49 | 10 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HD2 | 1:A:799:ALA:O | 0.42 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HG2 | 1:A:646:CYS:H | 0.42 | 1.73 | 14 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HD2 | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.42 | 1.90 | 1 | 1 |
| 1:A:772:PHE:O | 1:A:775:LEU:HB2 | 0.42 | 2.12 | 11 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:708:LEU:HB3 | 0.42 | 1.90 | 4 | 1 |
| 1:A:744:ARG:O | 1:A:747:LEU:HB3 | 0.42 | 2.15 | 2 | 1 |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:739:ASP:N | 0.42 | 2.29 | 6 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD1 | 1:A:701:GLN:HG3 | 0.42 | 2.44 | 10 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:738:LEU:C | 0.42 | 2.31 | 10 | 1 |
| 1:A:704:CYS:C | 1:A:707:VAL:HG13 | 0.42 | 2.34 | 5 | 1 |
| 1:A:656:LEU:CD2 | 1:A:660:PRO:CD | 0.42 | 2.97 | 9 | 1 |
| 1:A:740:LEU:C | 1:A:742:LEU:N | 0.42 | 2.71 | 20 | 1 |
| 1:A:759:GLN:HG2 | 1:A:763:GLN:NE2 | 0.42 | 2.29 | 13 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD21 | 1:A:761:PHE:CD1 | 0.42 | 2.49 | 1 | 1 |
| 1:A:701:GLN:C | 1:A:704:CYS:HG | 0.42 | 2.17 | 15 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD23 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.42 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:712:PHE:CD2 | 0.42 | 3.02 | 2 | 1 |
| 1:A:629:ARG:NE | 1:A:629:ARG:HA | 0.42 | 2.30 | 7 | 1 |
| 1:A:643:CYS:O | 1:A:643:CYS:SG | 0.42 | 2.77 | 7 | 1 |
| 1:A:747:LEU:HD23 | 1:A:755:TYR:CD2 | 0.42 | 2.49 | 7 | 2 |
| 1:A:630:VAL:HB | 1:A:712:PHE:O | 0.42 | 2.14 | 5 | 1 |
| 1:A:631:CYS:O | 1:A:632:GLN:HB2 | 0.42 | 2.15 | 9 | 2 |
| 1:A:711:LEU:HG | 1:A:788:LEU:HD22 | 0.42 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HB2 | 1:A:737:THR:HG22 | 0.42 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HB | 1:A:712:PHE:HB3 | 0.42 | 1.92 | 14 | 1 |
| 1:A:768:MET:HB3 | 1:A:768:MET:HE3 | 0.42 | 1.72 | 14 | 1 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:761:PHE:HZ | 0.42 | 2.27 | 19 | 1 |
| 1:A:658:ASP:O | 1:A:659:VAL:C | 0.42 | 2.57 | 14 | 5 |
| 1:A:700:ASN:CA | 1:A:703:LYS:HE2 | 0.42 | 2.44 | 15 | 1 |
| 1:A:785:ILE:O | 1:A:788:LEU:HB2 | 0.42 | 2.14 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:738:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HG13 | 0.42 | 1.90 | 2 | 1 |
| 1:A:656:LEU:HD21 | 1:A:660:PRO:CD | 0.42 | 2.45 | 7 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:701:GLN:HE21 | 0.42 | 1.74 | 5 | 1 |
| 1:A:704:CYS:SG | 1:A:758:PRO:HB3 | 0.42 | 2.54 | 16 | 2 |
| 1:A:656:LEU:CG | 1:A:660:PRO:CD | 0.42 | 2.98 | 9 | 1 |
| 1:A:701:GLN:O | 1:A:702:ARG:C | 0.42 | 2.56 | 20 | 1 |
| 1:A:718:ARG:HB2 | 1:A:719:PRO:CD | 0.42 | 2.44 | 16 | 2 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:767:ARG:HB2 | 0.42 | 1.92 | 16 | 1 |
| 1:A:701:GLN:O | 1:A:705:GLU:HB2 | 0.42 | 2.15 | 13 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HG3 | 1:A:751:LEU:HB3 | 0.42 | 1.90 | 13 | 1 |
| 1:A:636:ASP:O | 1:A:649:LEU:HG | 0.42 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:767:ARG:O | 1:A:770:LYS:HB2 | 0.42 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:638:VAL:O | 1:A:638:VAL:CG1 | 0.42 | 2.67 | 1 | 1 |
| 1:A:744:ARG:HH11 | 1:A:748:GLN:HE21 | 0.42 | 1.56 | 1 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HD22 | 1:A:746:ARG:HH21 | 0.42 | 1.74 | 11 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CE2 | 1:A:789:GLN:CA | 0.42 | 3.03 | 15 | 1 |
| 1:A:742:LEU:CD1 | 1:A:751:LEU:HD13 | 0.42 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:653:LEU:O | 1:A:744:ARG:HD3 | 0.42 | 2.14 | 6 | 1 |
| 1:A:704:CYS:O | 1:A:705:GLU:C | 0.42 | 2.58 | 6 | 1 |
| 1:A:761:PHE:CE1 | 1:A:796:MET:HE3 | 0.42 | 2.50 | 7 | 1 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:704:CYS:SG | 0.42 | 2.75 | 5 | 2 |
| 1:A:705:GLU:HG3 | 1:A:747:LEU:HD22 | 0.42 | 1.90 | 9 | 1 |
| 1:A:717:CYS:HG | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.42 | 2.26 | 20 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD2 | 1:A:755:TYR:HD2 | 0.42 | 2.22 | 16 | 1 |
| 1:A:627:ILE:HG22 | 1:A:634:PRO:HA | 0.42 | 1.89 | 13 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CB | 1:A:757:SER:CB | 0.42 | 2.98 | 13 | 1 |
| 1:A:626:THR:C | 1:A:646:CYS:SG | 0.42 | 2.98 | 19 | 1 |
| 1:A:783:GLN:HE21 | 1:A:786:ILE:HB | 0.42 | 1.75 | 11 | 1 |
| 1:A:772:PHE:C | 1:A:775:LEU:HD22 | 0.42 | 2.34 | 19 | 2 |
| 1:A:635:GLY:O | 1:A:637:LEU:HG | 0.42 | 2.14 | 20 | 2 |
| 1:A:711:LEU:CG | 1:A:740:LEU:HD11 | 0.42 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:739:ASP:O | 1:A:740:LEU:C | 0.42 | 2.58 | 10 | 2 |
| 1:A:625:ALA:O | 1:A:627:ILE:HG12 | 0.42 | 2.14 | 3 | 1 |
| 1:A:667:SER:HG | 1:A:706:ARG:HA | 0.42 | 1.73 | 7 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HG | 1:A:746:ARG:NH2 | 0.42 | 2.30 | 14 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:SD | 0.42 | 3.08 | 13 | 1 |
| 1:A:628:CYS:H | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.42 | 1.75 | 19 | 1 |
| 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:LEU:HG | 0.42 | 2.34 | 19 | 1 |
| 1:A:751:LEU:CD2 | 1:A:752:SER:N | 0.42 | 2.77 | 11 | 2 |
| 1:A:755:TYR:HA | 1:A:760:GLU:OE1 | 0.42 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:717:CYS:N | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.42 | 2.82 | 15 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:645:PHE:CD1 | 1:A:645:PHE:N | 0.42 | 2.88 | 12 | 1 |
| 1:A:707:VAL:CG1 | 1:A:796:MET:HE3 | 0.42 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:705:GLU:CG | 1:A:747:LEU:CD2 | 0.42 | 2.98 | 3 | 1 |
| 1:A:629:ARG:N | 1:A:646:CYS:O | 0.42 | 2.53 | 5 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HA | 1:A:711:LEU:HB2 | 0.42 | 1.91 | 5 | 1 |
| 1:A:746:ARG:HB3 | 1:A:755:TYR:CE2 | 0.42 | 2.50 | 20 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE3 | 1:A:796:MET:C | 0.42 | 2.34 | 14 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HG | 1:A:654:PRO:HD3 | 0.42 | 1.92 | 13 | 1 |
| 1:A:708:LEU:O | 1:A:712:PHE:CD1 | 0.42 | 2.73 | 1 | 1 |
| 1:A:714:HIS:CD2 | 1:A:717:CYS:SG | 0.42 | 3.13 | 11 | 3 |
| 1:A:696:LEU:HA | 1:A:757:SER:N | 0.42 | 2.30 | 4 | 2 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:705:GLU:C | 0.42 | 2.34 | 15 | 1 |
| 1:A:720:LEU:O | 1:A:740:LEU:HG | 0.42 | 2.15 | 7 | 1 |
| 1:A:647:PHE:O | 1:A:649:LEU:N | 0.42 | 2.53 | 5 | 1 |
| 1:A:667:SER:HB3 | 1:A:709:LEU:CG | 0.42 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:767:ARG:CB | 0.42 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HA | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.42 | 1.91 | 16 | 1 |
| 1:A:665:SER:HB2 | 1:A:670:HIS:CG | 0.42 | 2.48 | 16 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:769:PHE:HE1 | 0.42 | 1.75 | 16 | 1 |
| 1:A:756:SER:C | 1:A:757:SER:OG | 0.42 | 2.57 | 13 | 1 |
| 1:A:762:ALA:O | 1:A:763:GLN:C | 0.42 | 2.58 | 19 | 1 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:703:LYS:HE2 | 0.41 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:745:ALA:HB1 | 1:A:751:LEU:CB | 0.41 | 2.44 | 12 | 1 |
| 1:A:744:ARG:CG | 1:A:744:ARG:NH1 | 0.41 | 2.82 | 17 | 1 |
| 1:A:741:THR:C | 1:A:744:ARG:HB3 | 0.41 | 2.35 | 7 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG12 | 1:A:649:LEU:HD22 | 0.41 | 1.92 | 10 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD13 | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.41 | 1.91 | 10 | 2 |
| 1:A:772:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:HD13 | 0.41 | 2.50 | 10 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:740:LEU:CD1 | 0.41 | 2.98 | 18 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD12 | 1:A:709:LEU:HD23 | 0.41 | 1.90 | 20 | 1 |
| 1:A:710:ALA:HB1 | 1:A:791:PHE:CE1 | 0.41 | 2.50 | 19 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:768:MET:CG | 0.41 | 2.96 | 19 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:HG22 | 0.41 | 2.50 | 15 | 1 |
| 1:A:715:GLU:HA | 1:A:718:ARG:HG2 | 0.41 | 1.92 | 13 | 2 |
| 1:A:746:ARG:O | 1:A:748:GLN:N | 0.41 | 2.52 | 3 | 1 |
| 1:A:715:GLU:H | 1:A:716:PRO:HD2 | 0.41 | 1.75 | 6 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:788:LEU:CD2 | 0.41 | 2.99 | 5 | 1 |
| 1:A:743:ILE:O | 1:A:746:ARG:HB2 | 0.41 | 2.14 | 5 | 1 |
| 1:A:695:LYS:O | 1:A:756:SER:HA | 0.41 | 2.15 | 5 | 1 |
| 1:A:629:ARG:NH1 | 1:A:645:PHE:C | 0.41 | 2.74 | 9 | 1 |
| 1:A:771:GLN:O | 1:A:772:PHE:C | 0.41 | 2.58 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:630:VAL:CG1 | 1:A:651:CYS:HB3 | 0.41 | 2.45 | 8 | 1 |
| 1:A:710:ALA:HB1 | 1:A:791:PHE:CD1 | 0.41 | 2.50 | 11 | 2 |
| 1:A:746:ARG:HA | 1:A:751:LEU:CD1 | 0.41 | 2.45 | 11 | 1 |
| 1:A:652:HIS:CE1 | 1:A:664:TRP:HZ2 | 0.41 | 2.34 | 15 | 1 |
| 1:A:737:THR:HG23 | 1:A:771:GLN:HG3 | 0.41 | 1.91 | 15 | 2 |
| 1:A:649:LEU:CD1 | 1:A:656:LEU:HB2 | 0.41 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:700:ASN:ND2 | 1:A:703:LYS:HZ1 | 0.41 | 2.13 | 7 | 1 |
| 1:A:711:LEU:HD11 | 1:A:788:LEU:HB3 | 0.41 | 1.93 | 7 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CG2 | 1:A:761:PHE:O | 0.41 | 2.69 | 10 | 1 |
| 1:A:740:LEU:HD23 | 1:A:743:ILE:HD12 | 0.41 | 1.92 | 5 | 1 |
| 1:A:757:SER:C | 1:A:759:GLN:N | 0.41 | 2.73 | 5 | 1 |
| 1:A:697:SER:OG | 1:A:698:PRO:HD2 | 0.41 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:664:TRP:O | 1:A:665:SER:OG | 0.41 | 2.31 | 16 | 1 |
| 1:A:704:CYS:C | 1:A:761:PHE:CE2 | 0.41 | 2.94 | 13 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD22 | 1:A:761:PHE:HE1 | 0.41 | 1.75 | 1 | 1 |
| 1:A:794:THR:HG23 | 1:A:798:GLU:OE1 | 0.41 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:710:ALA:CB | 1:A:795:ARG:HB2 | 0.41 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:667:SER:CB | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.41 | 2.98 | 3 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:CB | 0.41 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HB3 | 1:A:646:CYS:HB3 | 0.41 | 1.93 | 13 | 2 |
| 1:A:697:SER:O | 1:A:700:ASN:N | 0.41 | 2.53 | 10 | 1 |
| 1:A:705:GLU:CG | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.41 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD12 | 1:A:742:LEU:CD1 | 0.41 | 2.45 | 18 | 1 |
| 1:A:703:LYS:HE3 | 1:A:796:MET:CA | 0.41 | 2.45 | 14 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD21 | 1:A:743:ILE:C | 0.41 | 2.35 | 13 | 1 |
| 1:A:712:PHE:CD2 | 1:A:721:HIS:CE1 | 0.41 | 3.08 | 13 | 1 |
| 1:A:666:CYS:O | 1:A:670:HIS:HB3 | 0.41 | 2.16 | 1 | 1 |
| 1:A:744:ARG:NH1 | 1:A:748:GLN:NE2 | 0.41 | 2.67 | 1 | 1 |
| 1:A:645:PHE:CE2 | 1:A:713:CYS:SG | 0.41 | 3.12 | 12 | 1 |
| 1:A:641:ASN:HD22 | 1:A:642:GLN:NE2 | 0.41 | 2.13 | 17 | 1 |
| 1:A:783:GLN:C | 1:A:783:GLN:NE2 | 0.41 | 2.73 | 3 | 1 |
| 1:A:643:CYS:SG | 1:A:645:PHE:CG | 0.41 | 3.14 | 7 | 2 |
| 1:A:667:SER:O | 1:A:706:ARG:HG2 | 0.41 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:795:ARG:C | 1:A:797:ASN:N | 0.41 | 2.72 | 5 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD1 | 1:A:772:PHE:HB2 | 0.41 | 2.46 | 13 | 1 |
| 1:A:665:SER:OG | 1:A:670:HIS:CB | 0.41 | 2.69 | 19 | 1 |
| 1:A:645:PHE:HB3 | 1:A:666:CYS:SG | 0.41 | 2.55 | 1 | 1 |
| 1:A:667:SER:O | 1:A:670:HIS:N | 0.41 | 2.53 | 11 | 2 |
| 1:A:656:LEU:HG | 1:A:656:LEU:H | 0.41 | 1.47 | 4 | 1 |
| 1:A:642:GLN:NE2 | 1:A:665:SER:HB2 | 0.41 | 2.30 | 3 | 1 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:740:LEU:HD22 | 0.41 | 1.93 | 3 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:772:PHE:C | 1:A:775:LEU:H | 0.41 | 2.18 | 3 | 1 |
| 1:A:742:LEU:HD13 | 1:A:751:LEU:HD21 | 0.41 | 1.91 | 6 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:738:LEU:HG | 0.41 | 2.15 | 5 | 2 |
| 1:A:716:PRO:HG2 | 1:A:788:LEU:CD1 | 0.41 | 2.42 | 9 | 1 |
| 1:A:668:LEU:C | 1:A:668:LEU:HD22 | 0.41 | 2.36 | 20 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CB | 1:A:761:PHE:CZ | 0.41 | 3.04 | 16 | 1 |
| 1:A:630:VAL:HA | 1:A:713:CYS:CA | 0.41 | 2.44 | 14 | 1 |
| 1:A:709:LEU:HD23 | 1:A:709:LEU:HA | 0.41 | 1.80 | 11 | 1 |
| 1:A:700:ASN:O | 1:A:703:LYS:N | 0.41 | 2.54 | 15 | 1 |
| 1:A:769:PHE:CD2 | 1:A:785:ILE:O | 0.41 | 2.74 | 15 | 1 |
| 1:A:709:LEU:O | 1:A:712:PHE:N | 0.41 | 2.54 | 17 | 1 |
| 1:A:737:THR:O | 1:A:737:THR:CG2 | 0.41 | 2.67 | 17 | 1 |
| 1:A:761:PHE:O | 1:A:764:ASP:CB | 0.41 | 2.69 | 17 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:744:ARG:HB2 | 0.41 | 2.45 | 18 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:659:VAL:HG23 | 0.41 | 2.42 | 14 | 1 |
| 1:A:652:HIS:HD2 | 1:A:656:LEU:HD13 | 0.41 | 1.75 | 13 | 1 |
| 1:A:653:LEU:CD2 | 1:A:705:GLU:CA | 0.41 | 2.98 | 8 | 1 |
| 1:A:772:PHE:C | 1:A:774:LYS:N | 0.41 | 2.74 | 8 | 1 |
| 1:A:746:ARG:O | 1:A:755:TYR:N | 0.41 | 2.53 | 11 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:648:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 15 | 1 |
| 1:A:738:LEU:CD2 | 1:A:764:ASP:HB2 | 0.41 | 2.46 | 3 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HB2 | 1:A:755:TYR:HB3 | 0.41 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:768:MET:CA | 0.41 | 2.46 | 5 | 1 |
| 1:A:747:LEU:N | 1:A:755:TYR:CZ | 0.41 | 2.89 | 20 | 1 |
| 1:A:716:PRO:O | 1:A:772:PHE:HZ | 0.41 | 1.98 | 19 | 1 |
| 1:A:768:MET:HE3 | 1:A:768:MET:HB3 | 0.41 | 1.77 | 8 | 1 |
| 1:A:695:LYS:CG | 1:A:696:LEU:H | 0.41 | 2.29 | 11 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD21 | 1:A:746:ARG:NH2 | 0.41 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD12 | 1:A:744:ARG:HD2 | 0.41 | 1.93 | 4 | 1 |
| 1:A:772:PHE:C | 1:A:785:ILE:HD12 | 0.41 | 2.37 | 20 | 2 |
| 1:A:696:LEU:HD13 | 1:A:757:SER:O | 0.41 | 2.16 | 15 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD11 | 1:A:767:ARG:CD | 0.41 | 2.42 | 15 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD21 | 1:A:708:LEU:C | 0.41 | 2.36 | 12 | 1 |
| 1:A:782:VAL:O | 1:A:785:ILE:HB | 0.41 | 2.16 | 12 | 1 |
| 1:A:755:TYR:CD2 | 1:A:760:GLU:HG2 | 0.41 | 2.51 | 2 | 3 |
| 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:747:LEU:HD23 | 0.41 | 1.92 | 2 | 1 |
| 1:A:658:ASP:C | 1:A:659:VAL:HG22 | 0.41 | 2.35 | 10 | 2 |
| 1:A:745:ALA:HB3 | 1:A:751:LEU:HB2 | 0.41 | 1.91 | 7 | 1 |
| 1:A:641:ASN:HD22 | 1:A:642:GLN:HE22 | 0.41 | 1.58 | 7 | 1 |
| 1:A:787:GLY:HA2 | 1:A:790:ARG:HE | 0.41 | 1.76 | 10 | 1 |
| 1:A:770:LYS:HA | 1:A:773:ASN:ND2 | 0.41 | 2.30 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:786:ILE:HA | 1:A:789:GLN:HG3 | 0.41 | 1.92 | 16 | 1 |
| 1:A:629:ARG:O | 1:A:713:CYS:O | 0.41 | 2.38 | 14 | 1 |
| 1:A:699:ALA:O | 1:A:703:LYS:HE2 | 0.41 | 2.16 | 13 | 1 |
| 1:A:791:PHE:O | 1:A:792:PHE:C | 0.41 | 2.59 | 13 | 1 |
| 1:A:643:CYS:SG | 1:A:645:PHE:CD2 | 0.41 | 3.14 | 19 | 1 |
| 1:A:625:ALA:O | 1:A:626:THR:CB | 0.41 | 2.68 | 4 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HD23 | 1:A:758:PRO:N | 0.41 | 2.31 | 4 | 1 |
| 1:A:743:ILE:CD1 | 1:A:768:MET:SD | 0.41 | 3.09 | 4 | 1 |
| 1:A:712:PHE:CE2 | 1:A:740:LEU:CB | 0.41 | 3.04 | 3 | 1 |
| 1:A:746:ARG:NH1 | 1:A:752:SER:OG | 0.41 | 2.54 | 2 | 1 |
| 1:A:796:MET:HE2 | 1:A:800:PHE:CD1 | 0.41 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG2 | 1:A:659:VAL:HG12 | 0.41 | 2.45 | 10 | 1 |
| 1:A:652:HIS:HA | 1:A:709:LEU:HD21 | 0.41 | 1.92 | 5 | 1 |
| 1:A:638:VAL:HG13 | 1:A:659:VAL:HA | 0.41 | 1.92 | 9 | 1 |
| 1:A:708:LEU:CD1 | 1:A:743:ILE:CG2 | 0.41 | 2.99 | 9 | 1 |
| 1:A:631:CYS:SG | 1:A:633:LYS:HG3 | 0.41 | 2.56 | 16 | 1 |
| 1:A:653:LEU:HD11 | 1:A:747:LEU:HD12 | 0.41 | 1.93 | 13 | 1 |
| 1:A:720:LEU:CD2 | 1:A:772:PHE:CG | 0.41 | 3.00 | 1 | 1 |
| 1:A:759:GLN:HB3 | 1:A:763:GLN:NE2 | 0.40 | 2.31 | 8 | 2 |
| 1:A:743:ILE:HD13 | 1:A:761:PHE:O | 0.40 | 2.16 | 4 | 1 |
| 1:A:755:TYR:HD2 | 1:A:760:GLU:CD | 0.40 | 2.19 | 6 | 1 |
| 1:A:649:LEU:CD2 | 1:A:649:LEU:H | 0.40 | 2.23 | 9 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HD13 | 1:A:772:PHE:HA | 0.40 | 1.92 | 20 | 1 |
| 1:A:748:GLN:HB3 | 1:A:750:LYS:HB2 | 0.40 | 1.93 | 20 | 1 |
| 1:A:795:ARG:O | 1:A:798:GLU:HB2 | 0.40 | 2.16 | 14 | 1 |
| 1:A:723:LEU:H | 1:A:739:ASP:CB | 0.40 | 2.29 | 8 | 1 |
| 1:A:741:THR:OG1 | 1:A:750:LYS:NZ | 0.40 | 2.53 | 8 | 1 |
| 1:A:788:LEU:O | 1:A:791:PHE:HD2 | 0.40 | 1.99 | 4 | 1 |
| 1:A:646:CYS:O | 1:A:647:PHE:CD1 | 0.40 | 2.74 | 17 | 1 |
| 1:A:709:LEU:C | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.40 | 2.36 | 6 | 1 |
| 1:A:696:LEU:CD2 | 1:A:701:GLN:HG2 | 0.40 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:CD1 | 0.40 | 2.45 | 5 | 1 |
| 1:A:721:HIS:C | 1:A:739:ASP:HB2 | 0.40 | 2.35 | 18 | 1 |
| 1:A:739:ASP:CA | 1:A:768:MET:SD | 0.40 | 3.09 | 18 | 1 |
| 1:A:742:LEU:O | 1:A:746:ARG:HG2 | 0.40 | 2.15 | 14 | 1 |
| 1:A:704:CYS:HB3 | 1:A:761:PHE:CE1 | 0.40 | 2.52 | 19 | 1 |
| 1:A:787:GLY:O | 1:A:791:PHE:HB2 | 0.40 | 2.16 | 19 | 1 |
| 1:A:629:ARG:O | 1:A:632:GLN:HG3 | 0.40 | 2.17 | 1 | 1 |
| 1:A:753:PRO:O | 1:A:754:PRO:C | 0.40 | 2.59 | 1 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HD13 | 1:A:764:ASP:HA | 0.40 | 1.92 | 4 | 1 |
| 1:A:649:LEU:HD12 | 1:A:656:LEU:CG | 0.40 | 2.46 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:695:LYS:HG2 | 1:A:755:TYR:O | 0.40 | 2.17 | 12 | 1 |
| 1:A:715:GLU:C | 1:A:717:CYS:N | 0.40 | 2.75 | 12 | 1 |
| 1:A:751:LEU:CG | 1:A:752:SER:N | 0.40 | 2.77 | 12 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HG12 | 1:A:769:PHE:CE1 | 0.40 | 2.51 | 12 | 1 |
| 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:795:ARG:HH11 | 0.40 | 1.76 | 17 | 1 |
| 1:A:738:LEU:HB2 | 1:A:742:LEU:HD22 | 0.40 | 1.93 | 2 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HB3 | 1:A:647:PHE:N | 0.40 | 2.30 | 7 | 1 |
| 1:A:645:PHE:HE2 | 1:A:668:LEU:HD23 | 0.40 | 1.68 | 7 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HG3 | 1:A:646:CYS:O | 0.40 | 2.16 | 9 | 1 |
| 1:A:794:THR:HA | 1:A:797:ASN:HB3 | 0.40 | 1.94 | 16 | 1 |
| 1:A:765:VAL:HB | 1:A:768:MET:CE | 0.40 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:661:GLY:C | 1:A:663:GLU:N | 0.40 | 2.74 | 11 | 1 |
| 1:A:652:HIS:NE2 | 1:A:654:PRO:CG | 0.40 | 2.80 | 15 | 1 |
| 1:A:707:VAL:HB | 1:A:761:PHE:HZ | 0.40 | 1.77 | 15 | 1 |
| 1:A:638:VAL:CG1 | 1:A:647:PHE:HB2 | 0.40 | 2.46 | 17 | 1 |
| 1:A:758:PRO:O | 1:A:762:ALA:HB3 | 0.40 | 2.15 | 18 | 1 |
| 1:A:654:PRO:HB3 | 1:A:705:GLU:OE2 | 0.40 | 2.16 | 9 | 1 |
| 1:A:721:HIS:O | 1:A:722:GLN:HG3 | 0.40 | 2.17 | 20 | 1 |
| 1:A:667:SER:HB2 | 1:A:709:LEU:HD12 | 0.40 | 1.93 | 13 | 1 |
| 1:A:696:LEU:HG | 1:A:701:GLN:HB2 | 0.40 | 1.92 | 19 | 1 |
| 1:A:634:PRO:HA | 1:A:637:LEU:HD21 | 0.40 | 1.93 | 8 | 1 |
| 1:A:772:PHE:HA | 1:A:775:LEU:CG | 0.40 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:637:LEU:HD21 | 1:A:646:CYS:CB | 0.40 | 2.45 | 11 | 1 |
| 1:A:723:LEU:CD2 | 1:A:768:MET:O | 0.40 | 2.69 | 11 | 1 |
| 1:A:751:LEU:CG | 1:A:752:SER:H | 0.40 | 2.25 | 4 | 1 |
| 1:A:723:LEU:HB3 | 1:A:775:LEU:CD1 | 0.40 | 2.46 | 12 | 1 |
| 1:A:755:TYR:O | 1:A:756:SER:OG | 0.40 | 2.35 | 3 | 1 |
| 1:A:761:PHE:HA | 1:A:764:ASP:CG | 0.40 | 2.36 | 3 | 1 |
| 1:A:629:ARG:HG2 | 1:A:645:PHE:CE2 | 0.40 | 2.52 | 6 | 1 |
| 1:A:695:LYS:O | 1:A:756:SER:C | 0.40 | 2.60 | 18 | 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 | 136/189 (72%) | 82±4 (60±3%) | 33±3 (24±3%) | 21±3 (16±2%) | 1 | 4 |
| All | All | 2720/3780 (72%) | 1632 (60%) | 666 (24%) | 422 (16%) | 1 | 4 |

All 58 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 | 628 | CYS | 20 |
| 1 | A | 658 | ASP | 20 |
| 1 | A | 629 | ARG | 20 |
| 1 | A | 627 | ILE | 19 |
| 1 | A | 659 | VAL | 18 |
| 1 | A | 753 | PRO | 17 |
| 1 | A | 655 | ALA | 17 |
| 1 | A | 697 | SER | 17 |
| 1 | A | 645 | PHE | 16 |
| 1 | A | 752 | SER | 15 |
| 1 | A | 738 | LEU | 14 |
| 1 | A | 656 | LEU | 12 |
| 1 | A | 667 | SER | 11 |
| 1 | A | 666 | CYS | 11 |
| 1 | A | 755 | TYR | 11 |
| 1 | A | 644 | GLU | 11 |
| 1 | A | 749 | GLU | 11 |
| 1 | A | 664 | TRP | 10 |
| 1 | A | 653 | LEU | 10 |
| 1 | A | 751 | LEU | 9 |
| 1 | A | 648 | HIS | 9 |
| 1 | A | 754 | PRO | 8 |
| 1 | A | 724 | ALA | 8 |
| 1 | A | 668 | LEU | 7 |
| 1 | A | 661 | GLY | 7 |
| 1 | A | 640 | CYS | 7 |
| 1 | A | 695 | LYS | 7 |
| 1 | A | 662 | GLU | 7 |
| 1 | A | 660 | PRO | 6 |
| 1 | A | 783 | GLN | 6 |
| 1 | A | 630 | VAL | 6 |
| 1 | A | 756 | SER | 6 |
| 1 | A | 792 | PHE | 5 |
| 1 | A | 665 | SER | 4 |
| 1 | A | 657 | GLN | 3 |
| 1 | A | 739 | ASP | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 652 | HIS | 3 |
| 1 | A | 740 | LEU | 3 |
| 1 | A | 757 | SER | 2 |
| 1 | A | 636 | ASP | 2 |
| 1 | A | 748 | GLN | 2 |
| 1 | A | 625 | ALA | 2 |
| 1 | A | 711 | LEU | 2 |
| 1 | A | 663 | GLU | 2 |
| 1 | A | 737 | THR | 2 |
| 1 | A | 641 | ASN | 2 |
| 1 | A | 800 | PHE | 1 |
| 1 | A | 626 | THR | 1 |
| 1 | A | 698 | PRO | 1 |
| 1 | A | 721 | HIS | 1 |
| 1 | A | 782 | VAL | 1 |
| 1 | A | 765 | VAL | 1 |
| 1 | A | 775 | LEU | 1 |
| 1 | A | 649 | LEU | 1 |
| 1 | A | 716 | PRO | 1 |
| 1 | A | 703 | LYS | 1 |
| 1 | A | 758 | PRO | 1 |
| 1 | A | 635 | GLY | 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 | 123/167 (74%) | 86±4 (70±3%) | 37±4 (30±3%) | 2 17 |
| All | All | 2460/3340 (74%) | 1717 (70%) | 743 (30%) | 2 17 |

All 101 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 | 659 | VAL | 20 |
| 1 | A | 761 | PHE | 19 |
| 1 | A | 626 | THR | 19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 744 | ARG | 19 |
| 1 | A | 628 | CYS | 19 |
| 1 | A | 656 | LEU | 18 |
| 1 | A | 796 | MET | 18 |
| 1 | A | 667 | SER | 17 |
| 1 | A | 770 | LYS | 17 |
| 1 | A | 746 | ARG | 16 |
| 1 | A | 753 | PRO | 16 |
| 1 | A | 653 | LEU | 15 |
| 1 | A | 771 | GLN | 15 |
| 1 | A | 696 | LEU | 15 |
| 1 | A | 708 | LEU | 14 |
| 1 | A | 751 | LEU | 14 |
| 1 | A | 782 | VAL | 14 |
| 1 | A | 788 | LEU | 14 |
| 1 | A | 742 | LEU | 14 |
| 1 | A | 783 | GLN | 14 |
| 1 | A | 723 | LEU | 14 |
| 1 | A | 702 | ARG | 13 |
| 1 | A | 638 | VAL | 13 |
| 1 | A | 713 | CYS | 12 |
| 1 | A | 755 | TYR | 12 |
| 1 | A | 668 | LEU | 12 |
| 1 | A | 704 | CYS | 11 |
| 1 | A | 768 | MET | 11 |
| 1 | A | 658 | ASP | 11 |
| 1 | A | 738 | LEU | 10 |
| 1 | A | 643 | CYS | 9 |
| 1 | A | 665 | SER | 9 |
| 1 | A | 716 | PRO | 9 |
| 1 | A | 650 | ASP | 9 |
| 1 | A | 637 | LEU | 9 |
| 1 | A | 631 | CYS | 9 |
| 1 | A | 695 | LYS | 8 |
| 1 | A | 706 | ARG | 8 |
| 1 | A | 790 | ARG | 8 |
| 1 | A | 748 | GLN | 7 |
| 1 | A | 798 | GLU | 7 |
| 1 | A | 649 | LEU | 7 |
| 1 | A | 629 | ARG | 7 |
| 1 | A | 759 | GLN | 7 |
| 1 | A | 743 | ILE | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 764 | ASP | 6 |
| 1 | A | 718 | ARG | 6 |
| 1 | A | 700 | ASN | 6 |
| 1 | A | 636 | ASP | 6 |
| 1 | A | 646 | CYS | 6 |
| 1 | A | 715 | GLU | 6 |
| 1 | A | 775 | LEU | 6 |
| 1 | A | 642 | GLN | 6 |
| 1 | A | 767 | ARG | 6 |
| 1 | A | 639 | MET | 6 |
| 1 | A | 794 | THR | 5 |
| 1 | A | 797 | ASN | 5 |
| 1 | A | 772 | PHE | 5 |
| 1 | A | 712 | PHE | 5 |
| 1 | A | 741 | THR | 5 |
| 1 | A | 707 | VAL | 5 |
| 1 | A | 709 | LEU | 5 |
| 1 | A | 697 | SER | 4 |
| 1 | A | 752 | SER | 4 |
| 1 | A | 701 | GLN | 4 |
| 1 | A | 641 | ASN | 4 |
| 1 | A | 760 | GLU | 4 |
| 1 | A | 747 | LEU | 4 |
| 1 | A | 645 | PHE | 4 |
| 1 | A | 765 | VAL | 3 |
| 1 | A | 670 | HIS | 3 |
| 1 | A | 786 | ILE | 3 |
| 1 | A | 756 | SER | 3 |
| 1 | A | 703 | LYS | 3 |
| 1 | A | 663 | GLU | 3 |
| 1 | A | 714 | HIS | 2 |
| 1 | A | 711 | LEU | 2 |
| 1 | A | 634 | PRO | 2 |
| 1 | A | 737 | THR | 2 |
| 1 | A | 722 | GLN | 2 |
| 1 | A | 652 | HIS | 2 |
| 1 | A | 789 | GLN | 2 |
| 1 | A | 784 | SER | 2 |
| 1 | A | 627 | ILE | 2 |
| 1 | A | 630 | VAL | 2 |
| 1 | A | 632 | GLN | 1 |
| 1 | A | 800 | PHE | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 763 | GLN | 1 |
| 1 | A | 785 | ILE | 1 |
| 1 | A | 750 | LYS | 1 |
| 1 | A | 739 | ASP | 1 |
| 1 | A | 758 | PRO | 1 |
| 1 | A | 795 | ARG | 1 |
| 1 | A | 633 | LYS | 1 |
| 1 | A | 647 | PHE | 1 |
| 1 | A | 740 | LEU | 1 |
| 1 | A | 791 | PHE | 1 |
| 1 | A | 773 | ASN | 1 |
| 1 | A | 666 | CYS | 1 |
| 1 | A | 757 | SER | 1 |
| 1 | A | 717 | CYS | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided