



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 06:22 PM BST

PDB ID : 1Y8B
Title : Solution NMR-Derived Global Fold of Malate Synthase G from E.coli
Authors : Tugarinov, V.; Choy, W.-Y.; Orekhov, V.Y.; Kay, L.E.
Deposited on : 2004-12-10

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

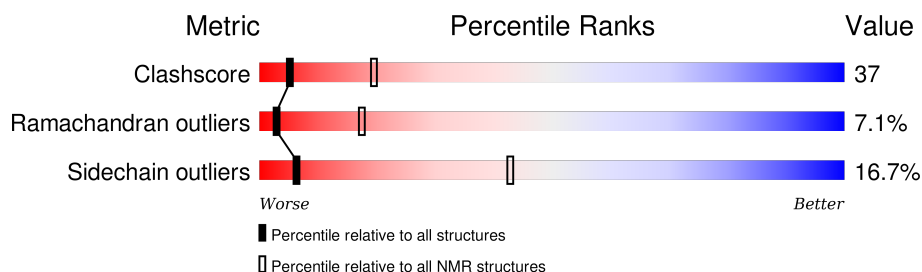
1 Overall quality at a glance

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	731	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 10 models. Model 5 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:3-A:153, A:157-A:299, A:312-A:467, A:481-A:671, A:687-A:723 (678)	1.65	5

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

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

The models can be grouped into 4 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	5, 6, 10
2	4, 8, 9
3	1, 7
4	2, 3

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 11282 atoms, of which 5627 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Malate synthase G.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	723	Total	C	H	N	O	S	0
			11282	3543	5627	1015	1068	29	

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

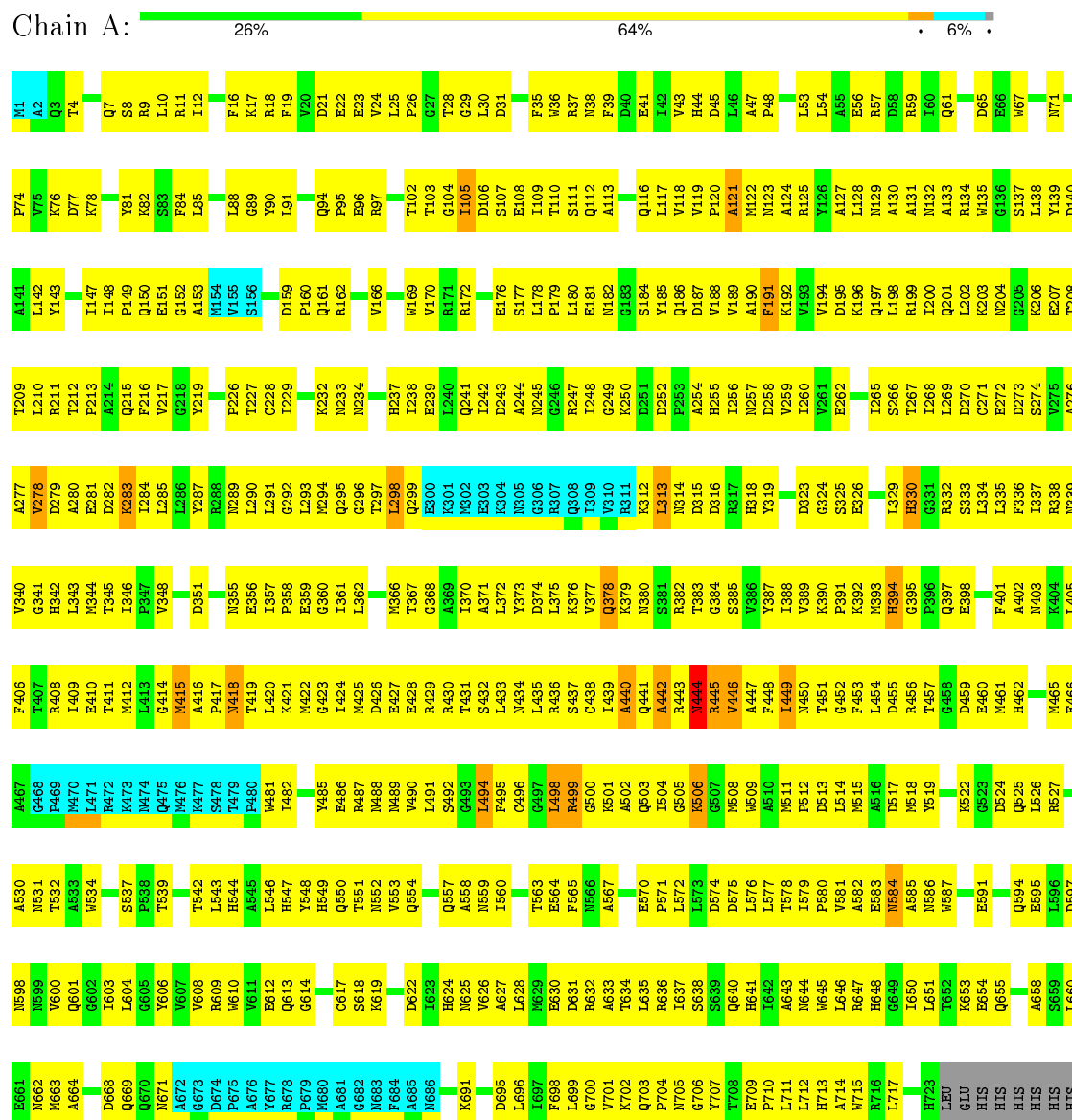
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	INITIATING METHIONINE	UNP P37330
A	2	ALA	SER	ENGINEERED	UNP P37330
A	724	LEU	-	CLONING ARTIFACT	UNP P37330
A	725	GLU	-	CLONING ARTIFACT	UNP P37330
A	726	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330
A	727	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330
A	728	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330
A	729	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330
A	730	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330
A	731	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P37330

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: Malate synthase G

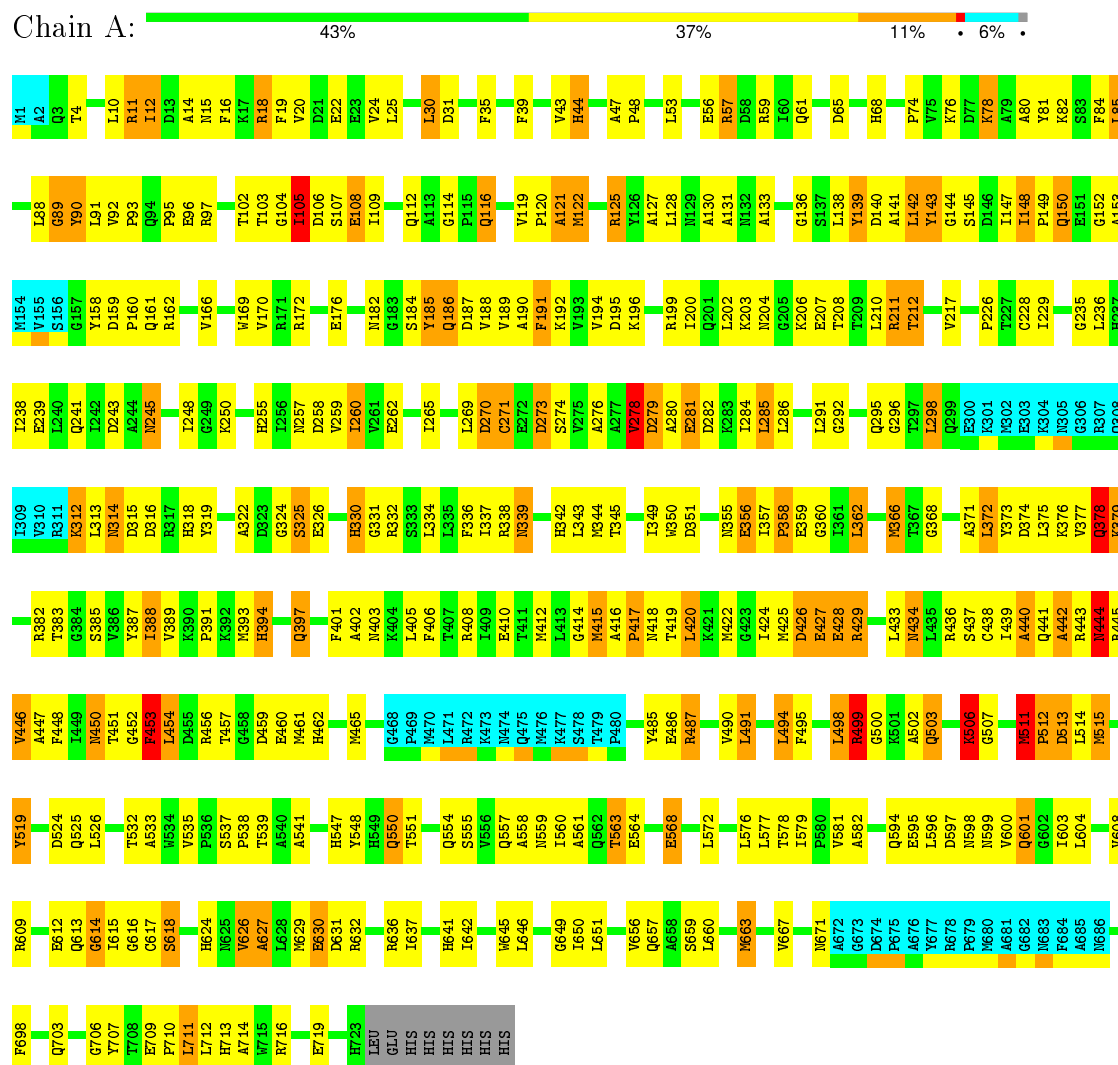


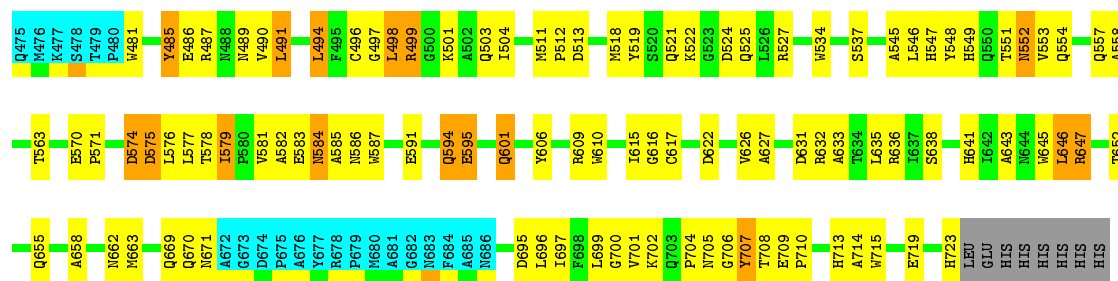
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

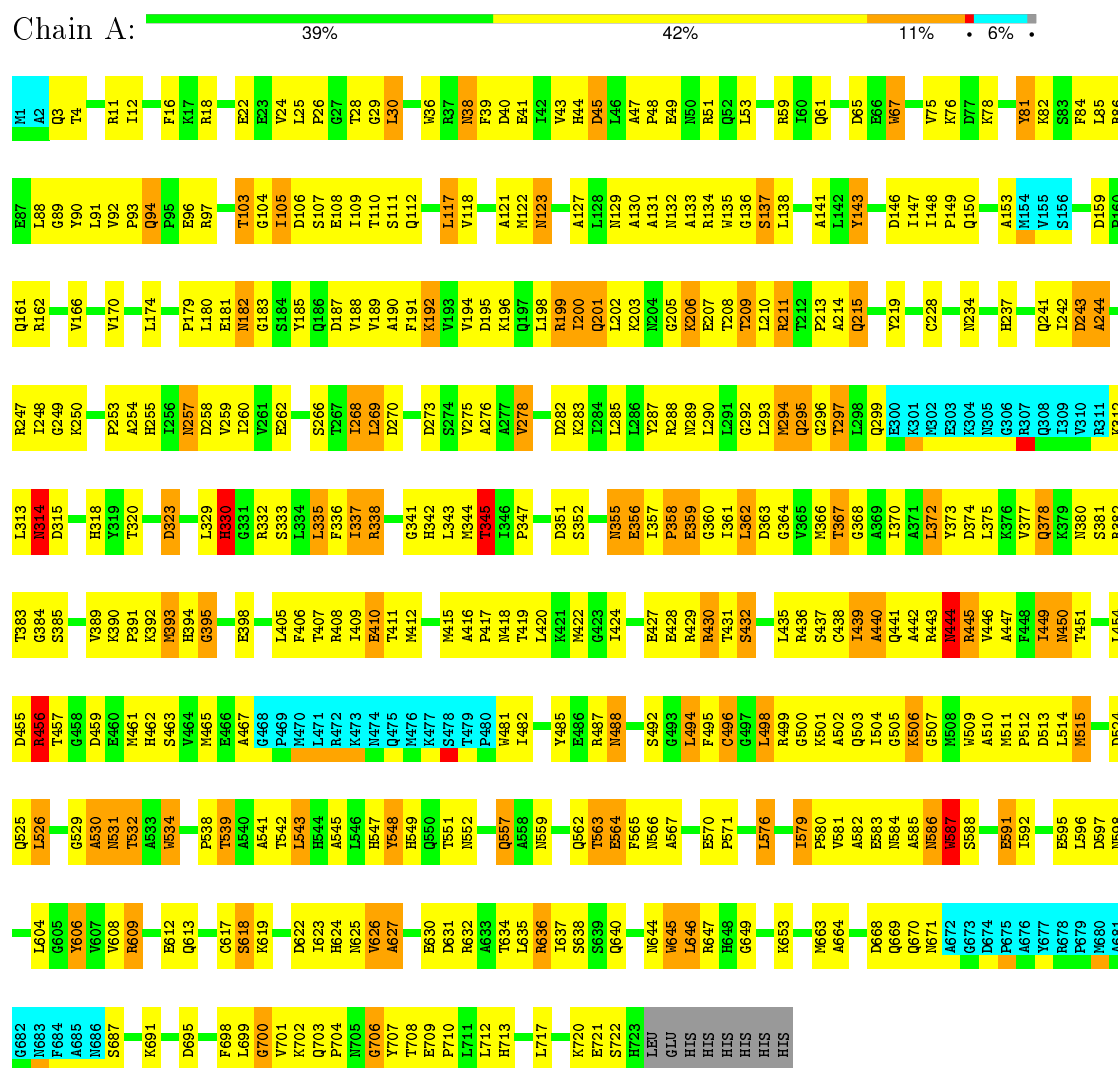
- Molecule 1: Malate synthase G





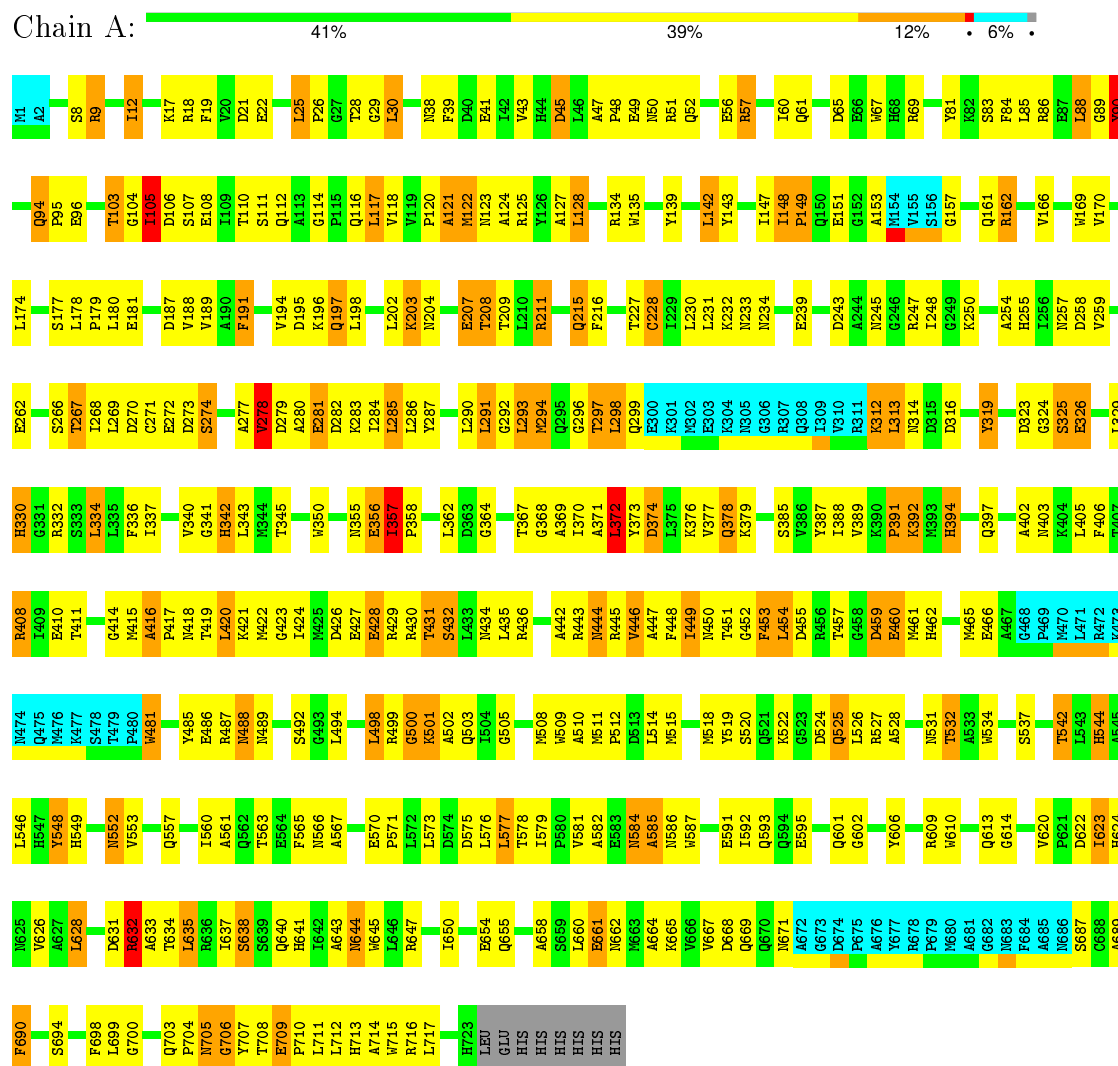
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Malate synthase G



4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: Malate synthase G

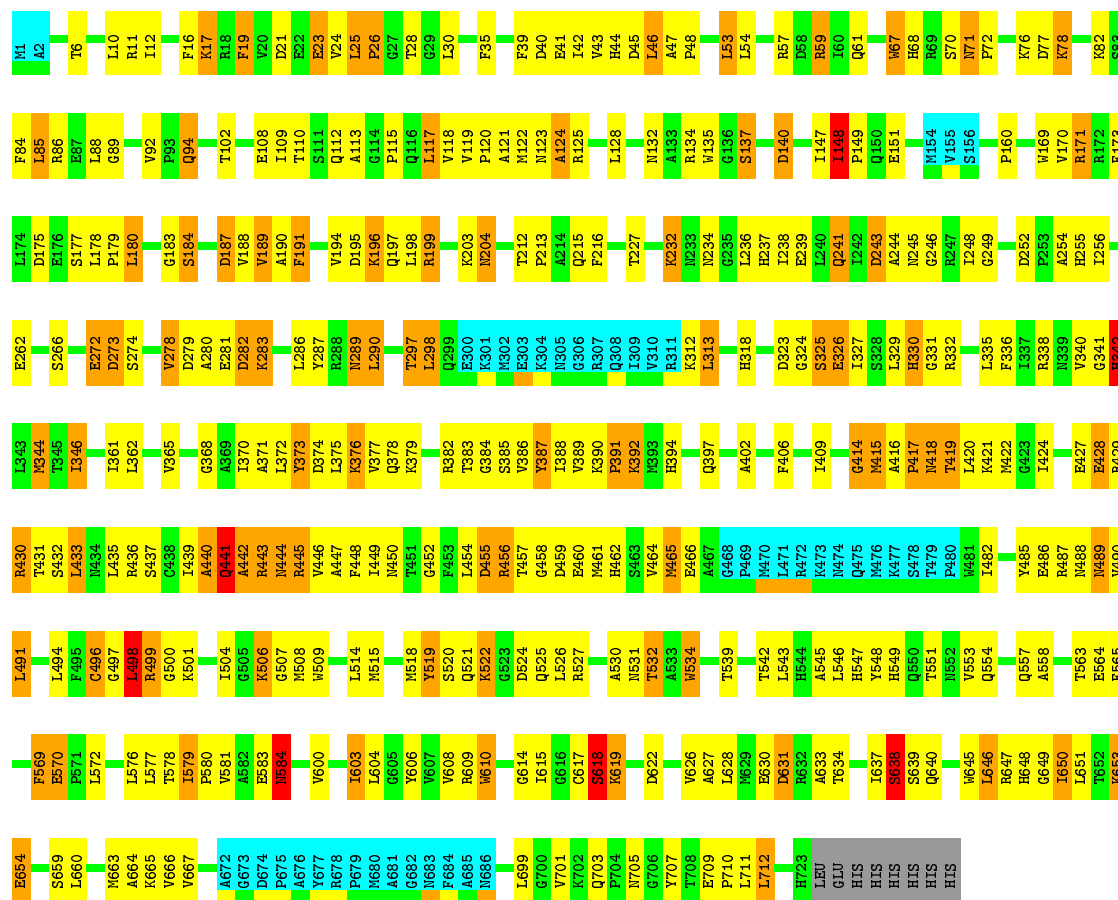




4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Malate synthase G

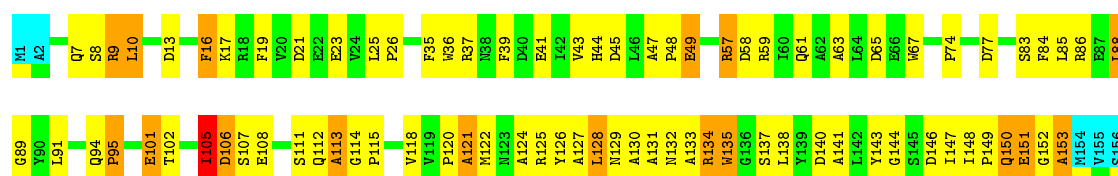
Chain A:  46% 34% 12% • 6% •



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Malate synthase G

Chain A: 41% 39% 12% 6%





N662	N663	A664	R665	V666	V667	D668	Q669	Q670	N671	A672	G673	D674	F675	A676	V677	R678	P679	N680	A681	G682	N683	F684	A685	N686	K691	D695	L696	T697	F698	K702	Y707	T708	E709	F710	L711	A714	N715	R716	L717	R718	E719	K720	E721	S722	H723	LEU	GLU	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	N518	E595	L596	D597	N598	N599	V600	Q601	G602	I603	L604	G605	V606	V607	N608	R609	N610	V611	E612	S618	R619	V620	P621	D622	I623	H624	N625	V626	A627	L628	D631	R632	A633	T634	L635	R636	I637	S638	S639	Q640	H641	I642	A643	N644	N645	I646	R647	H648	L651	T652	K653	E654	Q655	V656	Q657	A658	E661	E570	P571	L572	D575	L576	L577	T578	I579	P580	V581	A582	E583	N584	A585	N586	N587	E591	L592	Q593	Q594
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 60 calculated structures, 10 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
X-PLOR-NIH	refinement	2.9.3

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 ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	5310	5271	5254	388±21
All	All	53100	52710	52540	3883

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:449:ILE:HD13	1:A:449:ILE:H	0.95	1.21	5	3
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:HA	0.92	1.63	2	2
1:A:498:LEU:H	1:A:498:LEU:HD12	0.92	1.25	9	1
1:A:377:VAL:HG23	1:A:378:GLN:H	0.89	1.27	4	10
1:A:373:TYR:O	1:A:377:VAL:HG22	0.89	1.65	4	4
1:A:446:VAL:HG22	1:A:447:ALA:H	0.88	1.27	5	3
1:A:200:ILE:HD13	1:A:200:ILE:N	0.87	1.83	4	1
1:A:448:PHE:O	1:A:449:ILE:HD13	0.85	1.70	9	3
1:A:498:LEU:HD23	1:A:498:LEU:N	0.83	1.88	4	2
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:H	0.83	1.34	3	1
1:A:503:GLN:O	1:A:504:ILE:HD13	0.82	1.74	4	1
1:A:298:LEU:H	1:A:298:LEU:HD12	0.82	1.31	9	1
1:A:121:ALA:O	1:A:123:ASN:N	0.82	2.12	8	1
1:A:217:VAL:O	1:A:322:ALA:HB2	0.82	1.75	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:420:LEU:HD12	1:A:420:LEU:H	0.81	1.34	8	1
1:A:313:LEU:HD22	1:A:313:LEU:N	0.81	1.91	2	1
1:A:105:ILE:HD12	1:A:105:ILE:N	0.81	1.90	6	1
1:A:85:LEU:O	1:A:89:GLY:N	0.80	2.13	4	8
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:HB3	0.79	1.76	5	5
1:A:449:ILE:H	1:A:449:ILE:HD12	0.79	1.36	4	1
1:A:336:PHE:O	1:A:337:ILE:HD13	0.79	1.76	10	1
1:A:335:LEU:HD22	1:A:335:LEU:N	0.79	1.93	6	2
1:A:109:ILE:HD11	1:A:448:PHE:CD2	0.78	2.13	1	1
1:A:120:PRO:O	1:A:122:MET:N	0.78	2.16	9	6
1:A:444:ASN:O	1:A:446:VAL:N	0.78	2.15	5	6
1:A:424:ILE:H	1:A:448:PHE:HB2	0.78	1.37	8	2
1:A:449:ILE:HD12	1:A:496:CYS:O	0.78	1.78	8	1
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:GLN:H	0.78	1.38	2	1
1:A:441:GLN:O	1:A:443:ARG:N	0.78	2.16	8	5
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:HG13	0.78	1.79	8	3
1:A:444:ASN:C	1:A:446:VAL:H	0.78	1.82	5	8
1:A:194:VAL:O	1:A:196:LYS:N	0.78	2.16	6	10
1:A:198:LEU:HD22	1:A:198:LEU:N	0.77	1.95	4	1
1:A:285:LEU:HD12	1:A:286:LEU:N	0.77	1.94	5	1
1:A:615:ILE:O	1:A:615:ILE:HD12	0.77	1.79	8	1
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:HD23	0.77	1.93	4	1
1:A:377:VAL:HG23	1:A:378:GLN:N	0.76	1.94	4	10
1:A:449:ILE:H	1:A:449:ILE:CD1	0.76	1.94	10	2
1:A:230:LEU:O	1:A:231:LEU:HD23	0.76	1.80	5	2
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:GLY:H	0.76	1.41	2	1
1:A:441:GLN:C	1:A:443:ARG:H	0.75	1.82	8	7
1:A:119:VAL:HG23	1:A:119:VAL:O	0.75	1.81	8	2
1:A:219:TYR:CG	1:A:220:ARG:N	0.75	2.54	3	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:105:ILE:N	0.74	1.96	2	1
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:HD13	0.74	1.96	1	1
1:A:148:ILE:N	1:A:149:PRO:CD	0.74	2.49	5	2
1:A:697:ILE:HD13	1:A:697:ILE:N	0.73	1.98	9	1
1:A:481:TRP:O	1:A:485:TYR:N	0.73	2.21	10	2
1:A:259:VAL:C	1:A:260:ILE:HD13	0.73	2.04	1	1
1:A:109:ILE:CD1	1:A:447:ALA:HB1	0.73	2.14	8	2
1:A:504:ILE:O	1:A:505:GLY:O	0.73	2.06	6	2
1:A:12:ILE:N	1:A:12:ILE:HD13	0.73	1.98	1	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:346:ILE:H	0.73	1.42	10	1
1:A:198:LEU:H	1:A:198:LEU:HD22	0.73	1.40	4	1
1:A:439:ILE:O	1:A:441:GLN:N	0.73	2.21	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:615:ILE:HG22	1:A:616:GLY:H	0.72	1.44	3	1
1:A:357:ILE:N	1:A:358:PRO:CD	0.72	2.52	1	2
1:A:449:ILE:H	1:A:449:ILE:HD13	0.72	1.42	7	1
1:A:361:ILE:H	1:A:361:ILE:HD13	0.72	1.45	9	1
1:A:454:LEU:HD22	1:A:457:THR:OG1	0.72	1.85	1	1
1:A:449:ILE:CD1	1:A:449:ILE:H	0.72	1.98	5	2
1:A:183:GLY:O	1:A:184:SER:CB	0.72	2.38	10	2
1:A:268:ILE:HD11	1:A:338:ARG:CZ	0.72	2.15	7	1
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:GLN:N	0.72	1.99	2	1
1:A:579:ILE:O	1:A:581:VAL:N	0.72	2.22	8	4
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:CG1	0.71	2.37	9	3
1:A:526:LEU:HD12	1:A:551:THR:OG1	0.71	1.84	2	1
1:A:449:ILE:HD12	1:A:449:ILE:H	0.71	1.43	6	1
1:A:449:ILE:N	1:A:449:ILE:HD13	0.71	2.00	2	2
1:A:628:LEU:HD22	1:A:628:LEU:N	0.71	2.00	10	1
1:A:446:VAL:HG22	1:A:447:ALA:N	0.71	1.99	5	2
1:A:194:VAL:C	1:A:196:LYS:H	0.71	1.89	9	10
1:A:422:MET:C	1:A:447:ALA:HB3	0.71	2.06	6	4
1:A:98:VAL:HG11	1:A:439:ILE:HG22	0.70	1.61	7	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:HG23	0.70	1.87	4	2
1:A:494:LEU:HD13	1:A:494:LEU:C	0.70	2.07	2	1
1:A:615:ILE:HG22	1:A:616:GLY:N	0.70	2.01	3	1
1:A:334:LEU:HD12	1:A:382:ARG:NH2	0.70	2.01	10	1
1:A:604:LEU:O	1:A:608:VAL:HG12	0.70	1.86	7	6
1:A:617:CYS:O	1:A:618:SER:CB	0.70	2.40	4	5
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LEU:HD12	0.70	2.06	7	1
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:N	0.70	2.01	3	2
1:A:293:LEU:HD12	1:A:293:LEU:C	0.70	2.06	3	2
1:A:269:LEU:HD12	1:A:336:PHE:O	0.70	1.87	2	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:CA	0.69	2.40	2	1
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:HD13	0.69	2.08	9	1
1:A:201:GLN:NE2	1:A:201:GLN:H	0.69	1.85	4	1
1:A:191:PHE:CD1	1:A:191:PHE:N	0.69	2.59	8	3
1:A:579:ILE:H	1:A:579:ILE:HD13	0.69	1.47	10	1
1:A:533:ALA:HB2	1:A:548:TYR:OH	0.69	1.87	7	1
1:A:375:LEU:HD13	1:A:414:GLY:O	0.69	1.87	1	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:421:LYS:NZ	0.69	2.02	6	1
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:HG13	0.69	1.88	1	2
1:A:389:VAL:O	1:A:389:VAL:HG23	0.69	1.87	1	1
1:A:265:ILE:N	1:A:265:ILE:HD12	0.69	2.03	7	1
1:A:449:ILE:HD13	1:A:449:ILE:N	0.69	1.99	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:C	0.69	2.08	10	1
1:A:584:ASN:N	1:A:584:ASN:HD22	0.69	1.85	8	2
1:A:134:ARG:CD	1:A:134:ARG:H	0.68	2.01	10	1
1:A:451:THR:HG23	1:A:485:TYR:OH	0.68	1.88	7	1
1:A:576:LEU:C	1:A:576:LEU:HD13	0.68	2.09	1	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:HB2	0.68	1.88	10	1
1:A:278:VAL:HG13	1:A:278:VAL:O	0.68	1.88	8	2
1:A:361:ILE:CD1	1:A:361:ILE:H	0.68	2.00	9	1
1:A:346:ILE:H	1:A:346:ILE:HD13	0.68	1.49	7	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:C	0.68	2.09	7	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:O	0.68	1.87	8	1
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:HD12	0.68	1.89	3	1
1:A:448:PHE:C	1:A:449:ILE:HD13	0.68	2.09	9	2
1:A:635:LEU:C	1:A:635:LEU:HD13	0.68	2.09	3	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:220:ARG:O	0.68	2.47	3	1
1:A:375:LEU:HD23	1:A:375:LEU:N	0.68	2.04	2	1
1:A:377:VAL:CG2	1:A:378:GLN:H	0.67	2.02	4	10
1:A:440:ALA:C	1:A:442:ALA:H	0.67	1.91	3	7
1:A:335:LEU:N	1:A:335:LEU:HD22	0.67	2.04	7	1
1:A:546:LEU:HD23	1:A:546:LEU:N	0.67	2.02	10	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:584:ASN:H	0.67	1.87	6	1
1:A:339:ASN:HB3	1:A:389:VAL:O	0.67	1.90	1	1
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG22	0.67	1.89	10	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:CB	0.67	2.42	3	4
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:CD	0.67	2.58	7	6
1:A:108:GLU:O	1:A:112:GLN:O	0.67	2.12	2	2
1:A:200:ILE:N	1:A:200:ILE:CD1	0.67	2.56	4	1
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:GLY:N	0.67	2.04	2	2
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:CB	0.67	2.42	2	1
1:A:420:LEU:HD12	1:A:420:LEU:N	0.67	2.04	8	1
1:A:134:ARG:N	1:A:134:ARG:NE	0.67	2.43	10	1
1:A:637:ILE:HD13	1:A:637:ILE:H	0.67	1.48	2	1
1:A:290:LEU:C	1:A:290:LEU:HD13	0.67	2.09	5	1
1:A:526:LEU:C	1:A:526:LEU:HD13	0.67	2.09	8	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:228:CYS:O	0.66	2.48	3	1
1:A:191:PHE:N	1:A:191:PHE:CD1	0.66	2.63	2	4
1:A:542:THR:O	1:A:544:HIS:N	0.66	2.28	10	1
1:A:361:ILE:HD13	1:A:361:ILE:N	0.66	2.04	9	1
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:CB	0.66	2.43	5	3
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:HD23	0.66	2.05	5	2
1:A:439:ILE:O	1:A:442:ALA:N	0.66	2.29	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:HD12	0.66	2.05	6	3
1:A:362:LEU:H	1:A:362:LEU:HD23	0.66	1.49	7	3
1:A:298:LEU:HD12	1:A:298:LEU:H	0.66	1.50	7	1
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:HG23	0.66	1.90	6	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:O	0.66	2.49	2	1
1:A:242:ILE:N	1:A:242:ILE:HD12	0.66	2.05	6	1
1:A:650:ILE:N	1:A:650:ILE:HD12	0.66	2.06	2	2
1:A:709:GLU:N	1:A:710:PRO:CD	0.66	2.58	10	9
1:A:346:ILE:N	1:A:346:ILE:HD13	0.66	2.06	7	1
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:HB2	0.66	1.89	5	1
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:HB3	0.66	1.91	2	2
1:A:68:HIS:CE1	1:A:81:TYR:HH	0.65	2.08	1	1
1:A:579:ILE:N	1:A:579:ILE:HD13	0.65	2.06	10	1
1:A:339:ASN:ND2	1:A:339:ASN:H	0.65	1.90	7	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:57:ARG:N	0.65	2.43	1	1
1:A:448:PHE:CZ	1:A:498:LEU:HD21	0.65	2.25	1	1
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:HB3	0.65	1.90	4	1
1:A:709:GLU:N	1:A:710:PRO:HD2	0.65	2.06	8	5
1:A:576:LEU:HD13	1:A:576:LEU:O	0.65	1.92	9	1
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD23	0.65	1.92	7	1
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:HB3	0.65	1.92	6	1
1:A:357:ILE:H	1:A:358:PRO:HD3	0.65	1.52	1	1
1:A:132:ASN:OD1	1:A:298:LEU:HD23	0.65	1.91	10	1
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CZ	0.65	2.49	9	2
1:A:436:ARG:NE	1:A:499:ARG:NH2	0.65	2.44	5	1
1:A:269:LEU:O	1:A:270:ASP:CB	0.65	2.44	9	6
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:NE1	0.65	2.07	10	2
1:A:610:TRP:O	1:A:614:GLY:N	0.65	2.30	2	4
1:A:635:LEU:HD13	1:A:635:LEU:C	0.65	2.12	4	1
1:A:442:ALA:O	1:A:444:ASN:N	0.64	2.31	9	2
1:A:169:TRP:NE1	1:A:173:PHE:CZ	0.64	2.66	10	1
1:A:441:GLN:C	1:A:443:ARG:N	0.64	2.50	8	5
1:A:584:ASN:ND2	1:A:645:TRP:HE1	0.64	1.90	6	1
1:A:388:ILE:HD12	1:A:388:ILE:N	0.64	2.08	6	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:HD12	0.64	1.92	7	1
1:A:134:ARG:H	1:A:134:ARG:NE	0.64	1.89	10	1
1:A:387:TYR:CD1	1:A:387:TYR:N	0.64	2.65	3	3
1:A:339:ASN:HD21	1:A:364:GLY:N	0.64	1.90	6	1
1:A:162:ARG:O	1:A:166:VAL:HG23	0.64	1.93	5	4
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:HD12	0.64	2.05	9	1
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:HD2	0.64	1.53	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:488:ASN:ND2	1:A:489:ASN:N	0.64	2.44	5	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:209:THR:N	0.64	2.07	3	2
1:A:47:ALA:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.64	2.23	1	4
1:A:201:GLN:HE21	1:A:201:GLN:H	0.64	1.33	4	1
1:A:587:TRP:N	1:A:587:TRP:CD1	0.64	2.62	4	2
1:A:237:HIS:CD2	1:A:237:HIS:H	0.64	2.07	7	1
1:A:600:VAL:HG23	1:A:601:GLN:N	0.64	2.06	9	1
1:A:337:ILE:HD13	1:A:337:ILE:N	0.64	2.08	4	1
1:A:481:TRP:CD1	1:A:578:THR:HG21	0.64	2.27	3	1
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:HB2	0.64	1.93	7	2
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:CB	0.64	2.46	6	1
1:A:488:ASN:HD21	1:A:572:LEU:HD22	0.64	1.53	10	1
1:A:548:TYR:CD1	1:A:549:HIS:N	0.64	2.66	9	1
1:A:637:ILE:HG22	1:A:637:ILE:O	0.63	1.92	8	1
1:A:647:ARG:N	1:A:647:ARG:HE	0.63	1.92	3	1
1:A:122:MET:N	1:A:122:MET:SD	0.63	2.71	1	2
1:A:436:ARG:HE	1:A:499:ARG:NH2	0.63	1.91	5	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:30:LEU:O	0.63	1.92	10	1
1:A:237:HIS:N	1:A:237:HIS:CD2	0.63	2.67	3	1
1:A:416:ALA:HB1	1:A:417:PRO:CD	0.63	2.24	3	2
1:A:372:LEU:C	1:A:372:LEU:HD12	0.63	2.14	2	1
1:A:424:ILE:HD12	1:A:424:ILE:H	0.63	1.53	5	2
1:A:453:PHE:N	1:A:453:PHE:CD1	0.63	2.64	1	1
1:A:134:ARG:N	1:A:134:ARG:HE	0.63	1.91	10	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:N	0.63	2.31	10	3
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:HB2	0.63	1.92	10	1
1:A:204:ASN:ND2	1:A:204:ASN:N	0.63	2.47	7	1
1:A:149:PRO:O	1:A:151:GLU:N	0.63	2.31	5	1
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:HD12	0.63	2.14	10	1
1:A:525:GLN:NE2	1:A:525:GLN:N	0.63	2.46	9	1
1:A:436:ARG:O	1:A:440:ALA:HB2	0.63	1.93	8	1
1:A:584:ASN:HD22	1:A:645:TRP:HE1	0.63	1.37	6	1
1:A:456:ARG:NH1	1:A:485:TYR:CD1	0.63	2.66	1	1
1:A:632:ARG:HH21	1:A:633:ALA:HB2	0.63	1.54	5	1
1:A:394:HIS:NE2	1:A:438:CYS:SG	0.63	2.71	4	1
1:A:342:HIS:CD2	1:A:342:HIS:N	0.63	2.67	8	1
1:A:444:ASN:C	1:A:446:VAL:N	0.62	2.51	5	5
1:A:355:ASN:ND2	1:A:355:ASN:N	0.62	2.46	4	2
1:A:279:ASP:O	1:A:281:GLU:N	0.62	2.31	2	3
1:A:563:THR:HG22	1:A:564:GLU:N	0.62	2.09	8	2
1:A:210:LEU:O	1:A:212:THR:N	0.62	2.32	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CE2	0.62	2.87	9	2
1:A:278:VAL:HG12	1:A:278:VAL:O	0.62	1.94	1	1
1:A:504:ILE:O	1:A:505:GLY:C	0.62	2.38	2	2
1:A:342:HIS:ND1	1:A:342:HIS:N	0.62	2.47	5	1
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:CD2	0.62	2.57	10	1
1:A:236:LEU:HD23	1:A:237:HIS:N	0.62	2.09	2	1
1:A:271:CYS:SG	1:A:632:ARG:NH2	0.62	2.73	1	1
1:A:319:TYR:N	1:A:319:TYR:CD1	0.62	2.67	2	1
1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:H	0.62	2.05	5	1
1:A:336:PHE:C	1:A:337:ILE:HD13	0.62	2.14	4	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:119:VAL:O	0.62	2.47	8	1
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:CB	0.62	2.48	8	8
1:A:557:GLN:NE2	1:A:557:GLN:N	0.61	2.47	6	1
1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:ND2	0.61	2.47	4	1
1:A:449:ILE:HD11	1:A:499:ARG:HH11	0.61	1.55	8	1
1:A:209:THR:HG22	1:A:210:LEU:N	0.61	2.08	6	2
1:A:414:GLY:O	1:A:416:ALA:N	0.61	2.33	7	3
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:HB3	0.61	1.95	5	2
1:A:442:ALA:HB1	1:A:446:VAL:HG23	0.61	1.71	5	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:39:PHE:CZ	0.61	2.88	9	1
1:A:177:SER:O	1:A:178:LEU:HD12	0.61	1.95	8	1
1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:N	0.61	2.30	3	2
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:NE2	0.61	2.48	5	1
1:A:436:ARG:NH2	1:A:569:PHE:CZ	0.61	2.67	8	1
1:A:451:THR:HG22	1:A:452:GLY:N	0.61	2.09	7	1
1:A:90:TYR:CE1	1:A:394:HIS:NE2	0.61	2.68	5	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:217:VAL:N	0.61	2.69	3	1
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:HB3	0.61	1.93	2	3
1:A:257:ASN:HD22	1:A:258:ASP:N	0.61	1.93	4	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:O	0.61	2.19	9	3
1:A:362:LEU:HD23	1:A:362:LEU:N	0.61	2.10	10	2
1:A:565:PHE:CD2	1:A:566:ASN:N	0.61	2.68	5	1
1:A:187:ASP:N	1:A:187:ASP:OD1	0.61	2.33	8	2
1:A:456:ARG:HE	1:A:456:ARG:N	0.61	1.93	7	1
1:A:531:ASN:HD22	1:A:532:THR:N	0.61	1.94	4	1
1:A:382:ARG:N	1:A:382:ARG:NE	0.61	2.48	4	1
1:A:216:PHE:CG	1:A:216:PHE:O	0.61	2.53	8	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:HE1	0.61	1.56	3	2
1:A:110:THR:O	1:A:111:SER:CB	0.61	2.48	7	1
1:A:565:PHE:CG	1:A:566:ASN:N	0.61	2.68	5	1
1:A:377:VAL:CG2	1:A:378:GLN:N	0.61	2.63	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:CB	0.61	2.49	3	3
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:CB	0.61	2.47	8	2
1:A:90:TYR:CZ	1:A:394:HIS:NE2	0.61	2.69	5	1
1:A:314:ASN:N	1:A:314:ASN:HD22	0.61	1.94	4	1
1:A:219:TYR:N	1:A:219:TYR:CD1	0.61	2.68	10	1
1:A:194:VAL:C	1:A:196:LYS:N	0.61	2.53	9	10
1:A:116:GLN:NE2	1:A:534:TRP:HE1	0.61	1.93	7	1
1:A:271:CYS:SG	1:A:636:ARG:NE	0.61	2.74	1	1
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:C	0.61	2.39	10	1
1:A:498:LEU:HD13	1:A:498:LEU:H	0.61	1.54	8	1
1:A:297:THR:O	1:A:299:GLN:N	0.60	2.34	6	2
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD2	0.60	2.64	2	1
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:HB3	0.60	1.96	5	1
1:A:394:HIS:O	1:A:395:GLY:C	0.60	2.40	4	1
1:A:382:ARG:N	1:A:382:ARG:HE	0.60	1.94	4	1
1:A:620:VAL:HG22	1:A:628:LEU:O	0.60	1.96	10	1
1:A:298:LEU:N	1:A:298:LEU:HD12	0.60	2.11	1	3
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:CB	0.60	2.48	4	2
1:A:645:TRP:O	1:A:649:GLY:N	0.60	2.34	8	4
1:A:116:GLN:N	1:A:116:GLN:NE2	0.60	2.49	5	1
1:A:334:LEU:HD21	1:A:387:TYR:CE2	0.60	2.31	3	1
1:A:489:ASN:OD1	1:A:489:ASN:N	0.60	2.34	3	2
1:A:242:ILE:H	1:A:242:ILE:HD12	0.60	1.57	6	1
1:A:626:VAL:O	1:A:627:ALA:HB2	0.60	1.96	1	2
1:A:552:ASN:ND2	1:A:554:GLN:H	0.60	1.95	2	2
1:A:57:ARG:NH2	1:A:429:ARG:NH2	0.60	2.50	2	1
1:A:609:ARG:NH2	1:A:610:TRP:NE1	0.60	2.50	7	1
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:HB2	0.60	1.95	9	3
1:A:421:LYS:NZ	1:A:421:LYS:CB	0.60	2.64	7	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:712:LEU:N	0.60	2.11	7	1
1:A:93:PRO:O	1:A:94:GLN:NE2	0.60	2.35	4	2
1:A:394:HIS:CD2	1:A:438:CYS:SG	0.60	2.95	4	1
1:A:334:LEU:HD12	1:A:334:LEU:C	0.60	2.17	9	1
1:A:518:MET:SD	1:A:518:MET:N	0.60	2.74	2	1
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:HB2	0.60	1.96	8	3
1:A:228:CYS:SG	1:A:229:ILE:N	0.60	2.74	3	2
1:A:57:ARG:NH2	1:A:429:ARG:HH21	0.60	1.94	2	1
1:A:393:MET:SD	1:A:429:ARG:NH2	0.60	2.75	10	2
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:HH22	0.60	1.94	9	1
1:A:11:ARG:O	1:A:12:ILE:HG23	0.60	1.96	4	4
1:A:671:ASN:H	1:A:671:ASN:HD22	0.60	1.37	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:650:ILE:HG22	1:A:650:ILE:O	0.60	1.96	7	1
1:A:456:ARG:NE	1:A:456:ARG:N	0.60	2.50	7	1
1:A:344:MET:SD	1:A:713:HIS:CE1	0.60	2.94	7	1
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:N	0.60	2.12	1	1
1:A:134:ARG:NH1	1:A:382:ARG:NH2	0.60	2.48	8	1
1:A:298:LEU:H	1:A:298:LEU:CD1	0.60	2.08	7	2
1:A:105:ILE:HD12	1:A:105:ILE:H	0.60	1.52	6	1
1:A:134:ARG:NH2	1:A:237:HIS:NE2	0.60	2.49	7	1
1:A:418:ASN:ND2	1:A:418:ASN:N	0.60	2.49	7	1
1:A:334:LEU:HD23	1:A:336:PHE:CE1	0.60	2.32	1	1
1:A:422:MET:H	1:A:447:ALA:HB2	0.60	1.57	5	1
1:A:124:ALA:O	1:A:298:LEU:HD23	0.60	1.97	9	1
1:A:389:VAL:HG12	1:A:425:MET:SD	0.60	2.36	9	1
1:A:518:MET:SD	1:A:522:LYS:NZ	0.60	2.75	7	2
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:VAL:N	0.60	2.12	7	10
1:A:105:ILE:CD1	1:A:105:ILE:N	0.60	2.64	2	2
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CD2	0.60	2.54	10	2
1:A:135:TRP:CG	1:A:135:TRP:O	0.60	2.54	9	2
1:A:374:ASP:O	1:A:377:VAL:CG2	0.59	2.49	3	3
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CD1	0.59	2.56	3	1
1:A:119:VAL:HG21	1:A:269:LEU:HD23	0.59	1.74	2	1
1:A:484:ALA:O	1:A:488:ASN:N	0.59	2.29	6	1
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:CD2	0.59	2.65	4	1
1:A:94:GLN:NE2	1:A:437:SER:OG	0.59	2.35	4	1
1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:HD22	0.59	1.94	10	1
1:A:135:TRP:O	1:A:261:VAL:O	0.59	2.19	6	2
1:A:119:VAL:HG23	1:A:269:LEU:HA	0.59	1.74	2	1
1:A:450:ASN:OD1	1:A:451:THR:N	0.59	2.35	6	2
1:A:192:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HH21	0.59	1.95	4	1
1:A:635:LEU:HD12	1:A:636:ARG:NH1	0.59	2.12	4	1
1:A:57:ARG:NH1	1:A:429:ARG:HE	0.59	1.95	2	1
1:A:159:ASP:N	1:A:159:ASP:OD1	0.59	2.35	7	2
1:A:339:ASN:ND2	1:A:364:GLY:N	0.59	2.50	6	1
1:A:577:LEU:N	1:A:577:LEU:HD22	0.59	2.11	10	2
1:A:47:ALA:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.59	1.74	10	6
1:A:57:ARG:NH1	1:A:429:ARG:NE	0.59	2.51	2	1
1:A:330:HIS:ND1	1:A:330:HIS:N	0.59	2.47	9	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:C	0.59	2.18	8	1
1:A:653:LYS:H	1:A:653:LYS:CD	0.59	2.10	8	1
1:A:200:ILE:O	1:A:207:GLU:O	0.59	2.21	4	1
1:A:233:ASN:N	1:A:233:ASN:HD22	0.59	1.96	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CD2	0.59	2.91	3	1
1:A:345:THR:N	1:A:359:GLU:OE1	0.59	2.35	7	1
1:A:343:LEU:H	1:A:343:LEU:HD23	0.59	1.57	9	2
1:A:586:ASN:N	1:A:586:ASN:HD22	0.59	1.95	10	1
1:A:390:LYS:O	1:A:392:LYS:N	0.59	2.35	4	1
1:A:600:VAL:HG23	1:A:601:GLN:H	0.59	1.57	9	1
1:A:546:LEU:O	1:A:549:HIS:ND1	0.59	2.35	8	1
1:A:67:TRP:CH2	1:A:84:PHE:CD2	0.59	2.90	8	1
1:A:411:THR:O	1:A:415:MET:N	0.59	2.36	10	3
1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:NE	0.59	1.94	7	1
1:A:422:MET:SD	1:A:447:ALA:HB2	0.59	2.38	1	1
1:A:663:MET:N	1:A:663:MET:SD	0.59	2.75	1	1
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:CG	0.59	2.27	3	2
1:A:180:LEU:O	1:A:181:GLU:C	0.59	2.41	3	5
1:A:557:GLN:HE21	1:A:557:GLN:H	0.59	1.40	6	1
1:A:515:MET:SD	1:A:515:MET:N	0.59	2.75	6	1
1:A:339:ASN:ND2	1:A:339:ASN:N	0.59	2.51	7	1
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:ARG:N	0.59	2.13	1	1
1:A:204:ASN:OD1	1:A:204:ASN:N	0.59	2.36	10	1
1:A:506:LYS:H	1:A:506:LYS:CD	0.59	2.11	9	1
1:A:15:ASN:HD22	1:A:16:PHE:H	0.59	1.40	3	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:CB	0.59	2.51	7	5
1:A:335:LEU:N	1:A:335:LEU:CD2	0.59	2.66	6	2
1:A:482:ILE:CG2	1:A:483:LYS:N	0.59	2.66	10	2
1:A:332:ARG:O	1:A:382:ARG:NH2	0.59	2.36	10	1
1:A:123:ASN:ND2	1:A:124:ALA:H	0.58	1.96	3	1
1:A:187:ASP:O	1:A:203:LYS:N	0.58	2.36	8	8
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:CB	0.58	2.51	5	1
1:A:340:VAL:HG22	1:A:341:GLY:N	0.58	2.13	5	2
1:A:699:LEU:O	1:A:703:GLN:N	0.58	2.36	4	1
1:A:135:TRP:CD2	1:A:135:TRP:O	0.58	2.56	9	2
1:A:129:ASN:ND2	1:A:134:ARG:HE	0.58	1.96	9	1
1:A:350:TRP:CD1	1:A:350:TRP:N	0.58	2.71	3	1
1:A:635:LEU:O	1:A:635:LEU:HD23	0.58	1.97	2	2
1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HE	0.58	1.40	7	1
1:A:249:GLY:N	1:A:257:ASN:HD21	0.58	1.96	10	1
1:A:660:LEU:O	1:A:664:ALA:N	0.58	2.37	7	1
1:A:431:THR:OG1	1:A:432:SER:N	0.58	2.37	7	2
1:A:122:MET:SD	1:A:290:LEU:N	0.58	2.75	10	1
1:A:180:LEU:C	1:A:182:ASN:H	0.58	2.01	10	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CD2	0.58	2.57	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:ASN:ND2	1:A:204:ASN:H	0.58	1.97	7	1
1:A:342:HIS:N	1:A:359:GLU:CD	0.58	2.56	7	1
1:A:377:VAL:O	1:A:379:LYS:N	0.58	2.36	9	3
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:HG22	0.58	1.98	8	1
1:A:132:ASN:ND2	1:A:132:ASN:N	0.58	2.51	3	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:VAL:N	0.58	2.14	5	1
1:A:579:ILE:CD1	1:A:579:ILE:N	0.58	2.66	10	1
1:A:709:GLU:N	1:A:709:GLU:OE1	0.58	2.34	2	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:29:GLY:HA3	0.58	1.76	7	1
1:A:508:MET:N	1:A:508:MET:SD	0.58	2.76	7	1
1:A:292:GLY:O	1:A:296:GLY:N	0.58	2.36	7	2
1:A:634:THR:O	1:A:638:SER:N	0.58	2.37	10	2
1:A:606:TYR:CD1	1:A:606:TYR:N	0.58	2.68	10	1
1:A:129:ASN:O	1:A:134:ARG:N	0.58	2.37	9	1
1:A:138:LEU:HD11	1:A:546:LEU:HD21	0.58	1.75	3	1
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:ALA:N	0.58	2.13	1	7
1:A:603:ILE:CG1	1:A:604:LEU:N	0.58	2.66	2	2
1:A:581:VAL:HG13	1:A:581:VAL:O	0.58	1.99	4	2
1:A:442:ALA:CA	1:A:446:VAL:HG11	0.58	2.29	4	3
1:A:645:TRP:O	1:A:647:ARG:N	0.58	2.37	6	1
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:HB2	0.58	1.97	10	4
1:A:608:VAL:HG13	1:A:609:ARG:N	0.58	2.13	8	4
1:A:668:ASP:OD1	1:A:669:GLN:N	0.58	2.37	7	1
1:A:234:ASN:ND2	1:A:549:HIS:CE1	0.58	2.72	5	1
1:A:498:LEU:CD2	1:A:499:ARG:N	0.58	2.67	8	1
1:A:424:ILE:H	1:A:448:PHE:CB	0.58	2.11	8	2
1:A:338:ARG:NH2	1:A:456:ARG:CZ	0.58	2.67	3	1
1:A:216:PHE:O	1:A:216:PHE:CG	0.58	2.57	2	1
1:A:416:ALA:HB1	1:A:417:PRO:HD2	0.58	1.75	3	4
1:A:282:ASP:O	1:A:284:ILE:N	0.58	2.37	7	5
1:A:350:TRP:N	1:A:350:TRP:CD1	0.58	2.72	6	1
1:A:289:ASN:O	1:A:293:LEU:N	0.58	2.36	7	2
1:A:210:LEU:C	1:A:212:THR:H	0.58	2.02	1	1
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:C	0.58	2.42	5	3
1:A:197:GLN:NE2	1:A:198:LEU:H	0.58	1.96	5	1
1:A:202:LEU:N	1:A:206:LYS:HA	0.58	2.13	4	1
1:A:440:ALA:O	1:A:442:ALA:N	0.58	2.36	3	3
1:A:534:TRP:CH2	1:A:633:ALA:HB2	0.58	2.34	3	1
1:A:403:ASN:HD21	1:A:443:ARG:CB	0.58	2.12	2	1
1:A:577:LEU:N	1:A:577:LEU:CD2	0.58	2.67	10	2
1:A:324:GLY:O	1:A:325:SER:C	0.58	2.42	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:330:HIS:CD2	1:A:330:HIS:H	0.58	2.17	6	1
1:A:362:LEU:O	1:A:366:MET:N	0.58	2.37	7	1
1:A:393:MET:N	1:A:393:MET:SD	0.58	2.76	4	2
1:A:498:LEU:H	1:A:498:LEU:CD2	0.58	2.12	10	1
1:A:361:ILE:CD1	1:A:361:ILE:N	0.58	2.67	9	1
1:A:439:ILE:C	1:A:441:GLN:N	0.57	2.57	8	8
1:A:119:VAL:HG12	1:A:130:ALA:HB1	0.57	1.73	3	1
1:A:57:ARG:HH22	1:A:429:ARG:HH21	0.57	1.40	2	1
1:A:705:ASN:O	1:A:707:TYR:N	0.57	2.35	2	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:412:MET:SD	0.57	2.77	7	1
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:HB3	0.57	1.99	5	1
1:A:394:HIS:ND1	1:A:394:HIS:N	0.57	2.48	2	1
1:A:383:THR:O	1:A:385:SER:N	0.57	2.36	8	8
1:A:552:ASN:ND2	1:A:552:ASN:N	0.57	2.51	5	1
1:A:416:ALA:HB3	1:A:417:PRO:HD3	0.57	1.74	5	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:209:THR:N	0.57	2.67	2	2
1:A:57:ARG:HH12	1:A:429:ARG:HE	0.57	1.40	2	1
1:A:461:MET:O	1:A:465:MET:N	0.57	2.37	1	5
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:HD22	0.57	2.13	6	1
1:A:436:ARG:NH1	1:A:499:ARG:NH1	0.57	2.52	10	1
1:A:219:TYR:CZ	1:A:220:ARG:O	0.57	2.56	3	1
1:A:338:ARG:CZ	1:A:456:ARG:NH2	0.57	2.67	3	1
1:A:671:ASN:N	1:A:671:ASN:HD22	0.57	1.97	6	1
1:A:433:LEU:HD13	1:A:433:LEU:O	0.57	1.98	6	1
1:A:635:LEU:HD13	1:A:635:LEU:O	0.57	1.99	4	2
1:A:123:ASN:HD22	1:A:123:ASN:N	0.57	1.97	4	1
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CE2	0.57	2.58	9	2
1:A:495:PHE:CZ	1:A:561:ALA:CB	0.57	2.88	1	1
1:A:342:HIS:CG	1:A:343:LEU:N	0.57	2.71	10	1
1:A:449:ILE:HG21	1:A:502:ALA:HB1	0.57	1.74	9	1
1:A:16:PHE:CD2	1:A:284:ILE:CD1	0.57	2.87	9	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.57	2.38	10	4
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:HG23	0.57	1.99	2	2
1:A:612:GLU:OE1	1:A:612:GLU:N	0.57	2.37	7	1
1:A:162:ARG:O	1:A:166:VAL:N	0.57	2.33	1	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:22:GLU:N	0.57	2.38	5	1
1:A:198:LEU:CD2	1:A:198:LEU:N	0.57	2.68	4	1
1:A:436:ARG:NH1	1:A:496:CYS:O	0.57	2.37	10	1
1:A:420:LEU:CD1	1:A:420:LEU:H	0.57	2.09	8	1
1:A:626:VAL:HG12	1:A:627:ALA:N	0.57	2.14	3	4
1:A:449:ILE:N	1:A:449:ILE:HD12	0.57	2.14	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:CB	0.57	2.53	6	4
1:A:644:ASN:HD22	1:A:644:ASN:N	0.57	1.97	9	2
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:TYR:N	0.57	2.13	5	1
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:CB	0.57	2.53	4	2
1:A:357:ILE:O	1:A:358:PRO:O	0.57	2.23	4	2
1:A:139:TYR:CD1	1:A:140:ASP:N	0.57	2.72	10	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CZ	0.57	2.92	8	1
1:A:453:PHE:CD1	1:A:453:PHE:N	0.57	2.73	6	1
1:A:125:ARG:HE	1:A:125:ARG:H	0.57	1.40	1	1
1:A:436:ARG:NH1	1:A:499:ARG:HH12	0.57	1.98	10	1
1:A:549:HIS:C	1:A:551:THR:H	0.57	2.03	10	1
1:A:710:PRO:O	1:A:713:HIS:ND1	0.57	2.38	9	1
1:A:403:ASN:OD1	1:A:445:ARG:NH2	0.57	2.37	3	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CB	0.57	2.53	10	2
1:A:413:LEU:N	1:A:413:LEU:HD22	0.57	2.15	7	1
1:A:366:MET:N	1:A:366:MET:SD	0.57	2.78	1	1
1:A:337:ILE:HB	1:A:388:ILE:HG22	0.57	1.77	5	1
1:A:577:LEU:C	1:A:578:THR:HG23	0.57	2.20	5	1
1:A:314:ASN:N	1:A:314:ASN:ND2	0.57	2.51	4	1
1:A:577:LEU:HD22	1:A:577:LEU:N	0.57	2.15	2	1
1:A:247:ARG:H	1:A:247:ARG:HH11	0.57	1.43	7	1
1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:HE	0.57	1.97	1	1
1:A:94:GLN:H	1:A:94:GLN:NE2	0.57	1.97	5	1
1:A:198:LEU:H	1:A:198:LEU:CD2	0.57	2.12	4	1
1:A:713:HIS:CG	1:A:714:ALA:N	0.57	2.72	9	1
1:A:624:HIS:O	1:A:625:ASN:CB	0.56	2.53	6	5
1:A:449:ILE:N	1:A:449:ILE:CD1	0.56	2.68	7	4
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:CB	0.56	2.53	7	2
1:A:138:LEU:O	1:A:141:ALA:N	0.56	2.38	1	1
1:A:568:GLU:OE1	1:A:568:GLU:N	0.56	2.38	1	1
1:A:109:ILE:O	1:A:501:LYS:NZ	0.56	2.33	2	1
1:A:357:ILE:H	1:A:358:PRO:CD	0.56	2.10	1	1
1:A:342:HIS:ND1	1:A:343:LEU:N	0.56	2.53	10	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CZ	0.56	2.58	8	1
1:A:260:ILE:CD1	1:A:260:ILE:N	0.56	2.63	1	3
1:A:209:THR:HG22	1:A:210:LEU:H	0.56	1.59	6	1
1:A:120:PRO:C	1:A:122:MET:H	0.56	2.03	9	6
1:A:543:LEU:O	1:A:547:HIS:CE1	0.56	2.58	7	1
1:A:388:ILE:N	1:A:388:ILE:HD12	0.56	2.14	7	1
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:NH1	0.56	2.39	1	1
1:A:12:ILE:N	1:A:12:ILE:CD1	0.56	2.65	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:NE1	0.56	2.54	1	1
1:A:91:LEU:O	1:A:92:VAL:HG13	0.56	2.00	1	1
1:A:204:ASN:N	1:A:204:ASN:OD1	0.56	2.38	8	2
1:A:632:ARG:H	1:A:632:ARG:CD	0.56	2.12	9	2
1:A:394:HIS:CD2	1:A:397:GLN:NE2	0.56	2.73	5	1
1:A:560:ILE:O	1:A:563:THR:HG22	0.56	1.99	5	1
1:A:427:GLU:OE2	1:A:456:ARG:NH1	0.56	2.38	4	1
1:A:498:LEU:H	1:A:498:LEU:HD23	0.56	1.58	10	1
1:A:375:LEU:O	1:A:378:GLN:CG	0.56	2.53	10	1
1:A:494:LEU:HD13	1:A:495:PHE:N	0.56	2.15	2	1
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:CB	0.56	2.52	6	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:109:ILE:N	0.56	2.39	6	1
1:A:346:ILE:N	1:A:346:ILE:CD1	0.56	2.68	7	1
1:A:107:SER:O	1:A:111:SER:N	0.56	2.39	9	2
1:A:624:HIS:ND1	1:A:624:HIS:O	0.56	2.38	2	1
1:A:402:ALA:O	1:A:406:PHE:N	0.56	2.38	7	5
1:A:584:ASN:N	1:A:584:ASN:ND2	0.56	2.54	5	2
1:A:313:LEU:HD12	1:A:313:LEU:H	0.56	1.61	6	1
1:A:88:LEU:O	1:A:90:TYR:N	0.56	2.38	1	2
1:A:577:LEU:O	1:A:578:THR:OG1	0.56	2.22	5	1
1:A:241:GLN:O	1:A:257:ASN:ND2	0.56	2.39	4	1
1:A:542:THR:C	1:A:544:HIS:H	0.56	2.03	10	1
1:A:444:ASN:ND2	1:A:444:ASN:N	0.56	2.52	10	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CE1	0.56	2.99	8	1
1:A:552:ASN:HD22	1:A:553:VAL:N	0.56	1.98	2	2
1:A:77:ASP:O	1:A:81:TYR:CD2	0.56	2.58	3	1
1:A:313:LEU:O	1:A:314:ASN:O	0.56	2.24	4	3
1:A:506:LYS:CG	1:A:507:GLY:N	0.56	2.69	6	1
1:A:282:ASP:O	1:A:285:LEU:N	0.56	2.39	10	3
1:A:597:ASP:N	1:A:597:ASP:OD1	0.56	2.38	1	1
1:A:125:ARG:HE	1:A:299:GLN:NE2	0.56	1.98	9	1
1:A:339:ASN:OD1	1:A:339:ASN:N	0.56	2.39	9	1
1:A:134:ARG:NH2	1:A:237:HIS:CE1	0.56	2.74	7	1
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:H	0.56	1.61	1	1
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:NH2	0.56	2.53	9	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:HB3	0.56	2.01	1	3
1:A:413:LEU:N	1:A:413:LEU:CD2	0.56	2.68	7	1
1:A:215:GLN:NE2	1:A:232:LYS:O	0.56	2.39	10	1
1:A:334:LEU:HD12	1:A:335:LEU:N	0.56	2.15	9	1
1:A:248:ILE:O	1:A:250:LYS:N	0.56	2.39	7	6
1:A:637:ILE:HD13	1:A:637:ILE:N	0.56	2.14	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:410:GLU:O	1:A:414:GLY:N	0.56	2.39	5	3
1:A:58:ASP:OD1	1:A:59:ARG:N	0.56	2.39	7	1
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:CG	0.56	2.53	5	1
1:A:371:ALA:O	1:A:373:TYR:N	0.55	2.38	5	4
1:A:339:ASN:ND2	1:A:339:ASN:C	0.55	2.58	1	1
1:A:290:LEU:O	1:A:292:GLY:N	0.55	2.39	10	2
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:ND2	0.55	2.39	9	1
1:A:485:TYR:CZ	1:A:489:ASN:OD1	0.55	2.59	9	1
1:A:543:LEU:O	1:A:547:HIS:ND1	0.55	2.39	8	1
1:A:406:PHE:CZ	1:A:422:MET:SD	0.55	2.99	2	1
1:A:637:ILE:N	1:A:637:ILE:CD1	0.55	2.69	2	1
1:A:125:ARG:CD	1:A:125:ARG:H	0.55	2.14	6	1
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:HB2	0.55	2.01	9	2
1:A:549:HIS:ND1	1:A:550:GLN:N	0.55	2.55	10	1
1:A:27:GLY:O	1:A:376:LYS:NZ	0.55	2.39	10	1
1:A:440:ALA:C	1:A:442:ALA:N	0.55	2.59	3	7
1:A:446:VAL:HG22	1:A:447:ALA:O	0.55	2.01	10	3
1:A:390:LYS:O	1:A:391:PRO:O	0.55	2.25	6	3
1:A:424:ILE:N	1:A:449:ILE:HG21	0.55	2.17	7	1
1:A:267:THR:N	1:A:334:LEU:O	0.55	2.39	5	1
1:A:192:LYS:HZ2	1:A:199:ARG:HH21	0.55	1.44	4	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ILE:N	0.55	2.40	4	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:N	0.55	2.54	10	1
1:A:411:THR:HG23	1:A:412:MET:N	0.55	2.16	10	1
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:CD1	0.55	2.60	9	1
1:A:492:SER:O	1:A:496:CYS:SG	0.55	2.64	9	1
1:A:59:ARG:NE	1:A:59:ARG:O	0.55	2.39	8	1
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:HD3	0.55	2.16	1	2
1:A:644:ASN:OD1	1:A:645:TRP:N	0.55	2.40	6	1
1:A:116:GLN:NE2	1:A:534:TRP:NE1	0.55	2.54	7	1
1:A:563:THR:HG22	1:A:564:GLU:H	0.55	1.60	8	2
1:A:92:VAL:O	1:A:94:GLN:NE2	0.55	2.39	4	1
1:A:234:ASN:HD21	1:A:552:ASN:ND2	0.55	1.99	4	1
1:A:285:LEU:HD12	1:A:285:LEU:N	0.55	2.17	10	1
1:A:340:VAL:HG12	1:A:341:GLY:N	0.55	2.16	8	2
1:A:108:GLU:OE2	1:A:387:TYR:CZ	0.55	2.59	2	1
1:A:552:ASN:HD22	1:A:552:ASN:N	0.55	1.99	5	2
1:A:67:TRP:NE1	1:A:81:TYR:CZ	0.55	2.75	5	1
1:A:495:PHE:CD2	1:A:495:PHE:O	0.55	2.60	10	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:HB3	0.55	2.01	9	1
1:A:124:ALA:HB1	1:A:614:GLY:O	0.55	2.02	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:373:TYR:O	1:A:377:VAL:HG13	0.55	2.01	8	1
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CD1	0.55	2.60	8	1
1:A:699:LEU:O	1:A:701:VAL:N	0.55	2.39	3	2
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:HD12	0.55	2.16	2	1
1:A:452:GLY:O	1:A:454:LEU:N	0.55	2.40	1	1
1:A:508:MET:SD	1:A:525:GLN:NE2	0.55	2.79	5	1
1:A:436:ARG:HH21	1:A:437:SER:CB	0.55	2.15	9	1
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CE1	0.55	2.60	3	3
1:A:357:ILE:O	1:A:359:GLU:N	0.55	2.40	2	1
1:A:267:THR:HG23	1:A:333:SER:OG	0.55	2.02	6	1
1:A:430:ARG:C	1:A:432:SER:H	0.55	2.05	5	1
1:A:216:PHE:CD2	1:A:216:PHE:O	0.55	2.60	8	1
1:A:519:TYR:CE2	1:A:547:HIS:NE2	0.55	2.75	8	1
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:HB3	0.55	2.02	8	1
1:A:582:ALA:O	1:A:584:ASN:ND2	0.55	2.39	7	1
1:A:454:LEU:H	1:A:454:LEU:HD23	0.55	1.60	4	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:113:ALA:N	0.55	2.60	10	1
1:A:489:ASN:ND2	1:A:490:VAL:H	0.55	1.99	8	1
1:A:109:ILE:HD12	1:A:447:ALA:HB1	0.55	1.77	8	2
1:A:498:LEU:HD12	1:A:498:LEU:N	0.55	2.17	6	1
1:A:709:GLU:O	1:A:713:HIS:CD2	0.55	2.60	1	1
1:A:342:HIS:NE2	1:A:393:MET:SD	0.55	2.80	4	1
1:A:121:ALA:O	1:A:289:ASN:ND2	0.55	2.40	4	1
1:A:343:LEU:H	1:A:343:LEU:CD2	0.55	2.14	9	1
1:A:95:PRO:O	1:A:96:GLU:HB2	0.55	2.03	3	1
1:A:268:ILE:HD13	1:A:268:ILE:N	0.55	2.16	6	2
1:A:254:ALA:O	1:A:255:HIS:CB	0.55	2.54	9	3
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:ND2	0.55	2.40	7	1
1:A:545:ALA:O	1:A:549:HIS:ND1	0.55	2.40	7	1
1:A:458:GLY:O	1:A:462:HIS:CD2	0.55	2.60	7	1
1:A:108:GLU:H	1:A:108:GLU:CD	0.55	2.05	10	2
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:NH2	0.55	2.40	1	1
1:A:236:LEU:HD23	1:A:262:GLU:OE2	0.55	2.02	1	1
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:C	0.55	2.46	4	1
1:A:133:ALA:N	1:A:333:SER:OG	0.55	2.40	9	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CD1	0.55	3.00	8	1
1:A:439:ILE:C	1:A:441:GLN:H	0.54	2.06	1	8
1:A:180:LEU:O	1:A:182:ASN:N	0.54	2.40	10	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:66:GLU:N	0.54	2.40	3	1
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:ND2	0.54	2.40	3	1
1:A:329:LEU:O	1:A:331:GLY:N	0.54	2.40	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:OG1	0.54	2.40	2	2
1:A:372:LEU:O	1:A:372:LEU:HD12	0.54	2.01	2	1
1:A:454:LEU:O	1:A:456:ARG:N	0.54	2.40	8	4
1:A:248:ILE:HG23	1:A:249:GLY:N	0.54	2.17	8	2
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:OE1	0.54	2.40	1	1
1:A:539:THR:O	1:A:543:LEU:HD12	0.54	2.02	8	1
1:A:531:ASN:O	1:A:532:THR:HG23	0.54	2.02	2	1
1:A:632:ARG:O	1:A:635:LEU:N	0.54	2.40	6	1
1:A:247:ARG:HH11	1:A:247:ARG:N	0.54	2.00	7	1
1:A:579:ILE:O	1:A:579:ILE:HD12	0.54	2.02	4	2
1:A:355:ASN:O	1:A:357:ILE:N	0.54	2.40	9	2
1:A:262:GLU:O	1:A:544:HIS:CE1	0.54	2.60	10	1
1:A:133:ALA:O	1:A:134:ARG:CB	0.54	2.55	9	1
1:A:522:LYS:O	1:A:547:HIS:CE1	0.54	2.60	3	1
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:N	0.54	2.40	2	2
1:A:290:LEU:O	1:A:294:MET:SD	0.54	2.65	2	1
1:A:491:LEU:N	1:A:491:LEU:CD2	0.54	2.70	1	2
1:A:265:ILE:N	1:A:265:ILE:CD1	0.54	2.70	7	1
1:A:577:LEU:CD2	1:A:577:LEU:N	0.54	2.71	7	1
1:A:269:LEU:CD1	1:A:336:PHE:O	0.54	2.56	1	1
1:A:405:LEU:N	1:A:405:LEU:CD1	0.54	2.71	5	1
1:A:430:ARG:CG	1:A:431:THR:H	0.54	2.15	4	1
1:A:550:GLN:NE2	1:A:550:GLN:O	0.54	2.38	10	1
1:A:439:ILE:O	1:A:446:VAL:HG21	0.54	2.03	9	1
1:A:105:ILE:C	1:A:107:SER:H	0.54	2.06	9	1
1:A:575:ASP:O	1:A:578:THR:HG22	0.54	2.03	9	1
1:A:265:ILE:H	1:A:265:ILE:HD13	0.54	1.62	3	1
1:A:421:LYS:O	1:A:422:MET:SD	0.54	2.65	6	1
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG23	0.54	2.02	4	2
1:A:553:VAL:O	1:A:557:GLN:N	0.54	2.38	10	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:531:ASN:OD1	0.54	2.02	10	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:CB	0.54	2.51	10	2
1:A:424:ILE:N	1:A:448:PHE:HB2	0.54	2.15	8	1
1:A:65:ASP:CG	1:A:66:GLU:N	0.54	2.61	3	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.54	2.40	3	1
1:A:705:ASN:C	1:A:707:TYR:H	0.54	2.06	2	2
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CE1	0.54	2.60	8	2
1:A:341:GLY:O	1:A:342:HIS:CD2	0.54	2.61	6	2
1:A:403:ASN:CA	1:A:445:ARG:HH12	0.54	2.16	7	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:N	0.54	2.40	1	2
1:A:548:TYR:CD1	1:A:548:TYR:C	0.54	2.80	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:530:ALA:O	1:A:557:GLN:NE2	0.54	2.41	4	1
1:A:128:LEU:HD23	1:A:132:ASN:OD1	0.54	2.02	3	1
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:N	0.54	2.41	3	3
1:A:444:ASN:ND2	1:A:445:ARG:H	0.54	2.00	6	2
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:CG	0.54	2.61	9	3
1:A:257:ASN:ND2	1:A:258:ASP:N	0.54	2.55	4	1
1:A:427:GLU:O	1:A:429:ARG:N	0.54	2.41	4	1
1:A:77:ASP:O	1:A:79:ALA:N	0.54	2.41	10	1
1:A:517:ASP:OD1	1:A:518:MET:N	0.54	2.41	10	1
1:A:351:ASP:OD1	1:A:355:ASN:N	0.54	2.41	1	1
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CE2	0.54	2.61	1	1
1:A:359:GLU:OE1	1:A:359:GLU:N	0.54	2.41	3	1
1:A:138:LEU:N	1:A:259:VAL:O	0.54	2.35	2	2
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:CD2	0.54	2.61	6	1
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:OE2	0.54	2.40	6	1
1:A:464:VAL:O	1:A:466:GLU:N	0.54	2.41	6	2
1:A:513:ASP:O	1:A:515:MET:SD	0.54	2.66	7	2
1:A:648:HIS:CG	1:A:648:HIS:O	0.54	2.59	10	3
1:A:389:VAL:CG2	1:A:389:VAL:O	0.54	2.55	1	1
1:A:270:ASP:O	1:A:338:ARG:NH2	0.54	2.41	9	1
1:A:509:TRP:CZ3	1:A:534:TRP:O	0.54	2.60	8	1
1:A:151:GLU:CD	1:A:619:LYS:HZ1	0.54	2.06	8	1
1:A:4:THR:OG1	1:A:11:ARG:NE	0.54	2.41	3	1
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:HG13	0.54	2.03	10	4
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLN:NE2	0.54	2.40	6	1
1:A:637:ILE:O	1:A:638:SER:CB	0.54	2.56	9	2
1:A:605:GLY:O	1:A:609:ARG:NE	0.54	2.40	10	1
1:A:143:TYR:O	1:A:162:ARG:NH1	0.54	2.40	10	1
1:A:140:ASP:N	1:A:140:ASP:OD1	0.54	2.41	9	1
1:A:341:GLY:C	1:A:342:HIS:CG	0.54	2.81	8	2
1:A:615:ILE:CG2	1:A:616:GLY:N	0.54	2.71	3	1
1:A:403:ASN:HD21	1:A:443:ARG:CD	0.54	2.15	2	1
1:A:431:THR:O	1:A:433:LEU:N	0.54	2.41	8	2
1:A:361:ILE:HG23	1:A:362:LEU:N	0.54	2.18	8	2
1:A:136:GLY:O	1:A:138:LEU:N	0.54	2.41	6	1
1:A:344:MET:O	1:A:345:THR:CB	0.54	2.56	9	3
1:A:68:HIS:CE1	1:A:81:TYR:OH	0.54	2.61	1	1
1:A:704:PRO:O	1:A:706:GLY:N	0.54	2.40	5	1
1:A:720:LYS:O	1:A:722:SER:N	0.54	2.41	4	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:106:ASP:H	0.54	2.16	9	1
1:A:233:ASN:O	1:A:235:GLY:N	0.54	2.41	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:565:PHE:O	1:A:569:PHE:N	0.54	2.33	8	1
1:A:173:PHE:O	1:A:549:HIS:CD2	0.54	2.61	8	1
1:A:606:TYR:CE2	1:A:610:TRP:CG	0.54	2.96	8	1
1:A:419:THR:O	1:A:420:LEU:O	0.53	2.26	2	2
1:A:436:ARG:HH21	1:A:492:SER:CB	0.53	2.16	2	1
1:A:47:ALA:N	1:A:48:PRO:HD2	0.53	2.18	7	6
1:A:116:GLN:HE22	1:A:450:ASN:HD21	0.53	1.45	7	1
1:A:597:ASP:O	1:A:601:GLN:N	0.53	2.39	10	2
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CD1	0.53	2.62	5	1
1:A:408:ARG:O	1:A:408:ARG:NE	0.53	2.42	5	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:587:TRP:CZ3	0.53	2.76	4	1
1:A:362:LEU:H	1:A:362:LEU:CD2	0.53	2.16	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:39:PHE:CE2	0.53	2.96	9	1
1:A:121:ALA:C	1:A:123:ASN:H	0.53	2.05	8	1
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:N	0.53	2.18	2	4
1:A:94:GLN:O	1:A:96:GLU:N	0.53	2.41	3	1
1:A:126:TYR:OH	1:A:632:ARG:N	0.53	2.41	2	1
1:A:39:PHE:O	1:A:43:VAL:HG23	0.53	2.02	1	6
1:A:143:TYR:O	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.41	2	1
1:A:123:ASN:O	1:A:125:ARG:N	0.53	2.41	2	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:636:ARG:NE	0.53	2.41	2	1
1:A:486:GLU:O	1:A:489:ASN:ND2	0.53	2.41	8	2
1:A:553:VAL:O	1:A:557:GLN:NE2	0.53	2.41	5	2
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CD2	0.53	2.71	6	1
1:A:136:GLY:O	1:A:260:ILE:HG23	0.53	2.03	1	1
1:A:44:HIS:NE2	1:A:351:ASP:OD2	0.53	2.41	1	1
1:A:318:HIS:O	1:A:319:TYR:CD1	0.53	2.62	1	1
1:A:150:GLN:O	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.40	1	1
1:A:427:GLU:OE1	1:A:427:GLU:N	0.53	2.41	1	1
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:HD12	0.53	2.18	1	1
1:A:90:TYR:OH	1:A:394:HIS:NE2	0.53	2.40	5	1
1:A:51:ARG:HH11	1:A:355:ASN:ND2	0.53	2.01	5	1
1:A:18:ARG:NH2	1:A:19:PHE:CE1	0.53	2.76	5	1
1:A:430:ARG:O	1:A:432:SER:N	0.53	2.41	5	1
1:A:586:ASN:ND2	1:A:649:GLY:O	0.53	2.41	4	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:132:ASN:HD21	0.53	2.17	8	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CZ	0.53	2.96	8	1
1:A:330:HIS:N	1:A:330:HIS:ND1	0.53	2.55	3	1
1:A:337:ILE:N	1:A:337:ILE:HD12	0.53	2.18	3	1
1:A:434:ASN:O	1:A:438:CYS:SG	0.53	2.66	3	1
1:A:145:SER:N	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.57	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:ASP:OD1	1:A:225:ALA:N	0.53	2.41	2	1
1:A:253:PRO:O	1:A:255:HIS:CE1	0.53	2.61	2	1
1:A:120:PRO:C	1:A:122:MET:N	0.53	2.62	10	6
1:A:355:ASN:OD1	1:A:356:GLU:N	0.53	2.41	1	1
1:A:139:TYR:CE2	1:A:140:ASP:OD1	0.53	2.61	1	1
1:A:296:GLY:O	1:A:313:LEU:HD21	0.53	2.04	1	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:VAL:H	0.53	1.63	5	2
1:A:297:THR:HG22	1:A:332:ARG:NH2	0.53	2.19	5	1
1:A:491:LEU:O	1:A:493:GLY:N	0.53	2.41	10	1
1:A:586:ASN:ND2	1:A:586:ASN:N	0.53	2.52	10	1
1:A:406:PHE:CD2	1:A:410:GLU:OE1	0.53	2.62	3	1
1:A:12:ILE:O	1:A:12:ILE:HD12	0.53	2.03	2	1
1:A:164:GLU:OE1	1:A:164:GLU:N	0.53	2.41	6	1
1:A:450:ASN:OD1	1:A:503:GLN:NE2	0.53	2.41	1	1
1:A:297:THR:HG22	1:A:332:ARG:HH22	0.53	1.63	5	1
1:A:385:SER:OG	1:A:420:LEU:N	0.53	2.42	9	2
1:A:424:ILE:HD13	1:A:446:VAL:HG23	0.53	1.79	4	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:335:LEU:HD22	0.53	1.80	4	1
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:GLU:OE1	0.53	2.42	4	1
1:A:134:ARG:CD	1:A:134:ARG:N	0.53	2.71	10	1
1:A:237:HIS:ND1	1:A:262:GLU:OE2	0.53	2.41	10	1
1:A:68:HIS:CD2	1:A:464:VAL:HG12	0.53	2.38	10	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:O	0.53	2.27	3	3
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CD2	0.53	2.62	2	1
1:A:234:ASN:OD1	1:A:552:ASN:ND2	0.53	2.41	2	1
1:A:359:GLU:O	1:A:361:ILE:N	0.53	2.36	6	2
1:A:148:ILE:HD11	1:A:166:VAL:HG22	0.53	1.81	2	1
1:A:330:HIS:ND1	1:A:330:HIS:O	0.53	2.42	2	1
1:A:450:ASN:ND2	1:A:534:TRP:HE1	0.53	2.01	2	1
1:A:68:HIS:NE2	1:A:81:TYR:OH	0.53	2.42	6	1
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:N	0.53	2.42	6	2
1:A:262:GLU:N	1:A:262:GLU:CD	0.53	2.62	7	1
1:A:147:ILE:HA	1:A:516:ALA:HB2	0.53	1.80	7	1
1:A:279:ASP:OD1	1:A:280:ALA:N	0.53	2.41	5	2
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CG	0.53	2.62	10	1
1:A:653:LYS:O	1:A:657:GLN:NE2	0.53	2.41	10	1
1:A:564:GLU:CD	1:A:564:GLU:H	0.53	2.07	9	1
1:A:622:ASP:OD1	1:A:626:VAL:N	0.53	2.41	8	1
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:CG	0.53	2.47	7	3
1:A:350:TRP:CZ3	1:A:356:GLU:OE2	0.53	2.62	3	1
1:A:112:GLN:O	1:A:113:ALA:HB2	0.53	2.04	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:PRO:O	1:A:215:GLN:N	0.53	2.42	4	4
1:A:450:ASN:ND2	1:A:532:THR:OG1	0.53	2.41	6	1
1:A:121:ALA:CB	1:A:270:ASP:O	0.53	2.57	6	1
1:A:123:ASN:OD1	1:A:610:TRP:CH2	0.53	2.61	5	1
1:A:591:GLU:OE1	1:A:591:GLU:N	0.53	2.42	4	1
1:A:118:VAL:O	1:A:632:ARG:NH2	0.53	2.42	9	1
1:A:105:ILE:O	1:A:107:SER:N	0.53	2.41	9	1
1:A:638:SER:OG	1:A:639:SER:N	0.53	2.41	8	1
1:A:410:GLU:OE2	1:A:445:ARG:NH2	0.53	2.41	2	1
1:A:324:GLY:O	1:A:327:ILE:HG23	0.53	2.04	8	2
1:A:158:TYR:CD1	1:A:158:TYR:N	0.53	2.76	1	1
1:A:687:SER:OG	1:A:690:PHE:CE2	0.53	2.62	5	1
1:A:717:LEU:O	1:A:721:GLU:N	0.53	2.41	10	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:41:GLU:N	0.53	2.41	9	1
1:A:321:ALA:O	1:A:323:ASP:N	0.53	2.42	3	1
1:A:575:ASP:O	1:A:577:LEU:N	0.53	2.41	3	2
1:A:427:GLU:CD	1:A:427:GLU:H	0.53	2.07	1	1
1:A:584:ASN:CB	1:A:587:TRP:CE3	0.53	2.92	4	1
1:A:242:ILE:HG23	1:A:255:HIS:O	0.53	2.04	4	1
1:A:316:ASP:OD1	1:A:332:ARG:NH1	0.53	2.42	10	1
1:A:544:HIS:O	1:A:547:HIS:N	0.53	2.36	10	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CZ	0.53	3.02	8	1
1:A:12:ILE:CD1	1:A:12:ILE:N	0.53	2.66	3	1
1:A:410:GLU:O	1:A:415:MET:N	0.53	2.37	3	1
1:A:715:TRP:O	1:A:719:GLU:N	0.53	2.41	3	1
1:A:650:ILE:CD1	1:A:650:ILE:N	0.53	2.71	7	1
1:A:455:ASP:OD2	1:A:636:ARG:NH2	0.53	2.41	7	1
1:A:251:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.53	2.42	7	1
1:A:637:ILE:CG1	1:A:638:SER:H	0.53	2.17	5	1
1:A:361:ILE:O	1:A:364:GLY:N	0.53	2.42	4	1
1:A:626:VAL:HG12	1:A:627:ALA:H	0.53	1.63	10	1
1:A:393:MET:SD	1:A:394:HIS:N	0.53	2.82	9	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:586:ASN:OD1	0.53	2.42	9	1
1:A:498:LEU:HD22	1:A:499:ARG:N	0.53	2.19	8	1
1:A:575:ASP:OD1	1:A:575:ASP:N	0.53	2.40	3	1
1:A:695:ASP:OD2	1:A:715:TRP:CZ2	0.53	2.62	3	1
1:A:234:ASN:N	1:A:234:ASN:OD1	0.53	2.41	3	1
1:A:317:ARG:O	1:A:319:TYR:CE1	0.53	2.62	2	1
1:A:139:TYR:CG	1:A:140:ASP:N	0.53	2.77	2	2
1:A:116:GLN:OE1	1:A:534:TRP:CZ2	0.53	2.62	7	1
1:A:262:GLU:N	1:A:262:GLU:OE1	0.53	2.39	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:514:LEU:HD22	1:A:514:LEU:N	0.53	2.19	7	1
1:A:405:LEU:O	1:A:408:ARG:N	0.53	2.42	4	3
1:A:363:ASP:N	1:A:363:ASP:OD1	0.53	2.42	9	1
1:A:649:GLY:O	1:A:651:LEU:N	0.53	2.41	8	1
1:A:346:ILE:HD12	1:A:346:ILE:N	0.53	2.18	8	1
1:A:416:ALA:O	1:A:418:ASN:N	0.52	2.42	3	2
1:A:175:ASP:O	1:A:179:PRO:N	0.52	2.42	3	1
1:A:121:ALA:CB	1:A:270:ASP:OD1	0.52	2.57	2	2
1:A:343:LEU:C	1:A:345:THR:H	0.52	2.07	6	1
1:A:25:LEU:N	1:A:26:PRO:CD	0.52	2.72	9	6
1:A:119:VAL:HG22	1:A:269:LEU:HD23	0.52	1.81	1	2
1:A:237:HIS:CD2	1:A:237:HIS:N	0.52	2.77	7	1
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:N	0.52	2.42	9	2
1:A:537:SER:OG	1:A:629:MET:SD	0.52	2.68	9	2
1:A:498:LEU:CD2	1:A:498:LEU:H	0.52	2.16	4	1
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:VAL:N	0.52	2.18	4	1
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:ND2	0.52	2.42	10	1
1:A:632:ARG:N	1:A:632:ARG:CD	0.52	2.72	9	1
1:A:278:VAL:CG1	1:A:278:VAL:O	0.52	2.56	8	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:HD23	0.52	2.04	8	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:696:LEU:N	0.52	2.73	3	1
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:CB	0.52	2.58	2	2
1:A:7:GLN:OE1	1:A:8:SER:N	0.52	2.42	2	1
1:A:35:PHE:O	1:A:37:ARG:N	0.52	2.42	7	1
1:A:123:ASN:OD1	1:A:124:ALA:N	0.52	2.42	10	2
1:A:200:ILE:CD1	1:A:210:LEU:HD21	0.52	2.35	1	1
1:A:298:LEU:CD1	1:A:298:LEU:N	0.52	2.73	1	2
1:A:600:VAL:HG11	1:A:660:LEU:CD2	0.52	2.34	1	1
1:A:422:MET:N	1:A:447:ALA:HB2	0.52	2.20	5	1
1:A:51:ARG:HH11	1:A:355:ASN:HD21	0.52	1.47	5	1
1:A:128:LEU:HD23	1:A:128:LEU:O	0.52	2.04	5	2
1:A:531:ASN:O	1:A:550:GLN:NE2	0.52	2.42	10	1
1:A:549:HIS:O	1:A:551:THR:N	0.52	2.42	10	1
1:A:393:MET:O	1:A:429:ARG:NH2	0.52	2.40	10	1
1:A:643:ALA:O	1:A:646:LEU:N	0.52	2.41	3	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:387:TYR:CE1	0.52	2.62	2	1
1:A:37:ARG:NH2	1:A:41:GLU:OE1	0.52	2.41	6	1
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:O	0.52	2.03	1	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:576:LEU:HD21	0.52	2.19	5	1
1:A:243:ASP:OD1	1:A:244:ALA:N	0.52	2.42	10	2
1:A:38:ASN:ND2	1:A:39:PHE:N	0.52	2.57	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:ALA:HB1	1:A:541:ALA:CB	0.52	2.35	10	1
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:CD1	0.52	2.73	10	1
1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:CD	0.52	2.16	9	1
1:A:494:LEU:O	1:A:497:GLY:N	0.52	2.40	8	1
1:A:373:TYR:CD2	1:A:377:VAL:HG11	0.52	2.40	8	1
1:A:522:LYS:CB	1:A:522:LYS:NZ	0.52	2.72	8	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:534:TRP:NE1	0.52	2.42	2	1
1:A:456:ARG:O	1:A:460:GLU:N	0.52	2.41	6	2
1:A:182:ASN:OD1	1:A:182:ASN:N	0.52	2.41	7	1
1:A:44:HIS:CE1	1:A:351:ASP:OD2	0.52	2.63	1	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CE1	0.52	2.62	5	1
1:A:177:SER:O	1:A:549:HIS:CE1	0.52	2.61	5	1
1:A:278:VAL:HG23	1:A:717:LEU:CD2	0.52	2.35	10	1
1:A:436:ARG:NH2	1:A:437:SER:OG	0.52	2.42	9	1
1:A:534:TRP:N	1:A:534:TRP:CD1	0.52	2.77	2	1
1:A:691:LYS:NZ	1:A:691:LYS:CB	0.52	2.73	2	1
1:A:583:GLU:OE2	1:A:644:ASN:ND2	0.52	2.43	6	1
1:A:70:SER:O	1:A:71:ASN:ND2	0.52	2.42	6	1
1:A:271:CYS:O	1:A:273:ASP:N	0.52	2.43	9	3
1:A:635:LEU:O	1:A:637:ILE:N	0.52	2.43	7	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:57:ARG:H	0.52	2.01	1	1
1:A:704:PRO:C	1:A:706:GLY:H	0.52	2.07	5	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:107:SER:N	0.52	2.42	10	2
1:A:265:ILE:HD13	1:A:265:ILE:H	0.52	1.64	10	1
1:A:239:GLU:N	1:A:239:GLU:OE1	0.52	2.43	9	1
1:A:433:LEU:N	1:A:433:LEU:CD1	0.52	2.72	9	1
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:NZ	0.52	2.73	9	1
1:A:254:ALA:C	1:A:256:ILE:H	0.52	2.07	2	5
1:A:410:GLU:CD	1:A:445:ARG:NH2	0.52	2.63	2	1
1:A:505:GLY:O	1:A:532:THR:N	0.52	2.42	2	1
1:A:427:GLU:H	1:A:427:GLU:CD	0.52	2.07	10	2
1:A:450:ASN:O	1:A:452:GLY:N	0.52	2.42	7	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:GLN:OE1	0.52	2.27	1	1
1:A:449:ILE:O	1:A:503:GLN:O	0.52	2.28	5	1
1:A:640:GLN:O	1:A:644:ASN:ND2	0.52	2.43	5	2
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:CD2	0.52	2.62	5	1
1:A:606:TYR:CE2	1:A:631:ASP:O	0.52	2.63	4	1
1:A:706:GLY:O	1:A:708:THR:N	0.52	2.41	4	1
1:A:276:ALA:O	1:A:713:HIS:NE2	0.52	2.43	4	1
1:A:541:ALA:O	1:A:543:LEU:N	0.52	2.43	10	1
1:A:227:THR:O	1:A:228:CYS:SG	0.52	2.67	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:594:GLN:N	1:A:594:GLN:OE1	0.52	2.42	9	1
1:A:570:GLU:OE1	1:A:570:GLU:N	0.52	2.42	8	1
1:A:188:VAL:CG1	1:A:189:VAL:N	0.52	2.72	7	7
1:A:204:ASN:O	1:A:204:ASN:ND2	0.52	2.39	3	1
1:A:150:GLN:NE2	1:A:162:ARG:CZ	0.52	2.72	3	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:534:TRP:CE2	0.52	2.54	2	1
1:A:632:ARG:NH2	1:A:709:GLU:OE2	0.52	2.43	6	1
1:A:601:GLN:NE2	1:A:622:ASP:OD2	0.52	2.42	7	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:OG	0.52	2.42	7	1
1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:CE2	0.52	2.77	1	1
1:A:279:ASP:N	1:A:279:ASP:OD1	0.52	2.42	1	1
1:A:547:HIS:ND1	1:A:547:HIS:N	0.52	2.57	1	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:TYR:H	0.52	1.64	5	1
1:A:583:GLU:CD	1:A:583:GLU:H	0.52	2.08	9	1
1:A:496:CYS:C	1:A:498:LEU:HD13	0.52	2.25	8	1
1:A:95:PRO:O	1:A:96:GLU:CB	0.52	2.56	3	2
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:CG1	0.52	2.57	1	2
1:A:253:PRO:O	1:A:255:HIS:CD2	0.52	2.61	2	1
1:A:254:ALA:O	1:A:256:ILE:N	0.52	2.42	7	3
1:A:44:HIS:O	1:A:44:HIS:CD2	0.52	2.62	2	1
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ALA:N	0.52	2.20	2	1
1:A:557:GLN:NE2	1:A:557:GLN:H	0.52	2.01	6	1
1:A:650:ILE:O	1:A:650:ILE:CG2	0.52	2.58	7	2
1:A:511:MET:SD	1:A:511:MET:O	0.52	2.67	1	1
1:A:426:ASP:O	1:A:427:GLU:O	0.52	2.28	1	1
1:A:161:GLN:H	1:A:161:GLN:CD	0.52	2.08	4	1
1:A:355:ASN:ND2	1:A:355:ASN:O	0.52	2.43	10	1
1:A:115:PRO:CG	1:A:545:ALA:HB2	0.52	2.35	8	1
1:A:486:GLU:O	1:A:489:ASN:OD1	0.52	2.28	3	1
1:A:233:ASN:H	1:A:233:ASN:HD22	0.52	1.48	3	1
1:A:450:ASN:HD22	1:A:534:TRP:HE1	0.52	1.46	2	1
1:A:96:GLU:CD	1:A:96:GLU:H	0.52	2.09	5	1
1:A:609:ARG:NE	1:A:613:GLN:HE21	0.52	2.02	5	1
1:A:273:ASP:N	1:A:273:ASP:OD1	0.52	2.42	4	1
1:A:564:GLU:CD	1:A:565:PHE:N	0.52	2.63	4	1
1:A:485:TYR:CE2	1:A:489:ASN:OD1	0.52	2.63	9	1
1:A:518:MET:O	1:A:521:GLN:N	0.52	2.42	8	3
1:A:85:LEU:O	1:A:89:GLY:CA	0.52	2.58	9	4
1:A:465:MET:O	1:A:465:MET:SD	0.52	2.68	6	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:N	0.52	2.42	6	1
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:HD12	0.52	2.25	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:296:GLY:O	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.58	1	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:O	0.52	2.04	5	2
1:A:93:PRO:C	1:A:94:GLN:NE2	0.52	2.63	4	1
1:A:436:ARG:CZ	1:A:499:ARG:HH12	0.52	2.17	10	1
1:A:628:LEU:CD2	1:A:628:LEU:N	0.52	2.73	10	1
1:A:485:TYR:CE2	1:A:489:ASN:ND2	0.52	2.78	9	1
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:O	0.51	2.28	9	2
1:A:181:GLU:N	1:A:210:LEU:O	0.51	2.41	3	2
1:A:697:ILE:HD12	1:A:697:ILE:N	0.51	2.20	3	1
1:A:259:VAL:C	1:A:260:ILE:HD12	0.51	2.25	9	4
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:C	0.51	2.83	2	2
1:A:294:MET:SD	1:A:370:ILE:O	0.51	2.68	6	1
1:A:485:TYR:CD1	1:A:485:TYR:C	0.51	2.83	7	1
1:A:104:GLY:O	1:A:106:ASP:N	0.51	2.42	7	1
1:A:11:ARG:C	1:A:12:ILE:HD13	0.51	2.26	1	1
1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:HE	0.51	2.03	1	1
1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:CD	0.51	2.08	1	1
1:A:512:PRO:O	1:A:514:LEU:N	0.51	2.43	9	2
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:VAL:N	0.51	2.41	4	1
1:A:257:ASN:C	1:A:257:ASN:ND2	0.51	2.64	9	2
1:A:88:LEU:O	1:A:88:LEU:HD23	0.51	2.05	3	2
1:A:445:ARG:O	1:A:446:VAL:O	0.51	2.28	2	2
1:A:191:PHE:CD1	1:A:229:ILE:CD1	0.51	2.93	2	1
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:N	0.51	2.74	2	2
1:A:565:PHE:O	1:A:567:ALA:N	0.51	2.43	6	4
1:A:132:ASN:O	1:A:132:ASN:ND2	0.51	2.42	6	2
1:A:534:TRP:CD1	1:A:535:VAL:N	0.51	2.77	6	1
1:A:56:GLU:OE1	1:A:56:GLU:N	0.51	2.43	6	1
1:A:244:ALA:O	1:A:246:GLY:N	0.51	2.43	8	2
1:A:267:THR:O	1:A:336:PHE:N	0.51	2.39	5	1
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:GLY:N	0.51	2.02	4	1
1:A:218:GLY:C	1:A:219:TYR:CG	0.51	2.83	10	1
1:A:434:ASN:CG	1:A:436:ARG:NH2	0.51	2.64	9	1
1:A:626:VAL:CG1	1:A:627:ALA:N	0.51	2.73	3	2
1:A:337:ILE:N	1:A:337:ILE:CD1	0.51	2.73	3	1
1:A:281:GLU:N	1:A:281:GLU:OE1	0.51	2.43	2	1
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:HD22	0.51	2.20	6	2
1:A:418:ASN:HD22	1:A:418:ASN:N	0.51	2.04	7	1
1:A:456:ARG:NH1	1:A:485:TYR:CE1	0.51	2.77	1	1
1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:OE1	0.51	2.43	1	1
1:A:339:ASN:CB	1:A:389:VAL:O	0.51	2.58	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:276:ALA:HB1	1:A:713:HIS:CD2	0.51	2.40	1	1
1:A:600:VAL:O	1:A:603:ILE:N	0.51	2.43	10	2
1:A:609:ARG:CZ	1:A:613:GLN:OE1	0.51	2.59	4	1
1:A:68:HIS:CD2	1:A:464:VAL:CG1	0.51	2.94	10	1
1:A:225:ALA:N	1:A:226:PRO:CD	0.51	2.73	9	2
1:A:108:GLU:O	1:A:112:GLN:N	0.51	2.40	9	1
1:A:351:ASP:OD1	1:A:352:SER:N	0.51	2.44	3	2
1:A:119:VAL:HG21	1:A:269:LEU:CD2	0.51	2.35	2	1
1:A:489:ASN:O	1:A:493:GLY:N	0.51	2.42	6	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CG	0.51	2.63	7	1
1:A:669:GLN:O	1:A:669:GLN:NE2	0.51	2.43	7	2
1:A:427:GLU:N	1:A:427:GLU:OE1	0.51	2.43	10	2
1:A:538:PRO:O	1:A:541:ALA:N	0.51	2.42	4	2
1:A:488:ASN:O	1:A:492:SER:N	0.51	2.44	10	2
1:A:690:PHE:O	1:A:694:SER:N	0.51	2.42	5	1
1:A:294:MET:O	1:A:294:MET:SD	0.51	2.68	5	1
1:A:525:GLN:NE2	1:A:530:ALA:CB	0.51	2.74	4	1
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:OG1	0.51	2.24	4	2
1:A:112:GLN:CG	1:A:113:ALA:N	0.51	2.74	10	1
1:A:321:ALA:N	1:A:325:SER:O	0.51	2.41	10	1
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:HH12	0.51	2.03	9	1
1:A:671:ASN:O	1:A:671:ASN:ND2	0.51	2.43	9	1
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:HG3	0.51	1.82	9	1
1:A:121:ALA:C	1:A:123:ASN:N	0.51	2.63	8	1
1:A:654:GLU:OE1	1:A:654:GLU:N	0.51	2.44	8	1
1:A:57:ARG:NH2	1:A:427:GLU:O	0.51	2.43	8	1
1:A:439:ILE:HD12	1:A:498:LEU:HD21	0.51	1.83	3	1
1:A:215:GLN:O	1:A:232:LYS:N	0.51	2.38	3	1
1:A:126:TYR:O	1:A:130:ALA:HB3	0.51	2.05	2	1
1:A:557:GLN:NE2	1:A:557:GLN:O	0.51	2.43	1	1
1:A:406:PHE:CE2	1:A:410:GLU:OE1	0.51	2.64	5	1
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:HD2	0.51	2.21	5	1
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:544:HIS:CG	0.51	2.24	5	1
1:A:237:HIS:ND1	1:A:262:GLU:OE1	0.51	2.44	4	1
1:A:291:LEU:O	1:A:294:MET:N	0.51	2.42	10	1
1:A:416:ALA:O	1:A:417:PRO:O	0.51	2.28	8	1
1:A:604:LEU:HD13	1:A:667:VAL:CG2	0.51	2.36	8	1
1:A:15:ASN:ND2	1:A:284:ILE:HD13	0.51	2.21	3	1
1:A:338:ARG:HH22	1:A:454:LEU:HD13	0.51	1.65	6	1
1:A:290:LEU:CD2	1:A:290:LEU:N	0.51	2.73	6	2
1:A:410:GLU:CG	1:A:420:LEU:HD13	0.51	2.35	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:715:TRP:CZ3	1:A:719:GLU:OE2	0.51	2.63	6	1
1:A:239:GLU:OE2	1:A:239:GLU:N	0.51	2.43	1	1
1:A:123:ASN:OD1	1:A:610:TRP:CZ2	0.51	2.64	5	1
1:A:481:TRP:N	1:A:481:TRP:CD1	0.51	2.76	5	1
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:CD2	0.51	2.64	4	1
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:HD12	0.51	2.21	4	1
1:A:263:ALA:HB1	1:A:541:ALA:HB3	0.51	1.83	10	1
1:A:340:VAL:CG1	1:A:341:GLY:N	0.51	2.73	8	1
1:A:581:VAL:HG23	1:A:581:VAL:O	0.51	2.03	3	1
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:O	0.51	2.28	9	2
1:A:399:VAL:CG1	1:A:403:ASN:ND2	0.51	2.74	3	1
1:A:410:GLU:CG	1:A:411:THR:N	0.51	2.74	3	2
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:CG2	0.51	2.58	2	2
1:A:271:CYS:SG	1:A:636:ARG:CD	0.51	2.99	1	1
1:A:192:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HE	0.51	2.04	4	1
1:A:509:TRP:N	1:A:509:TRP:CD1	0.51	2.72	4	1
1:A:603:ILE:CG2	1:A:604:LEU:N	0.51	2.73	9	1
1:A:387:TYR:N	1:A:387:TYR:CD1	0.51	2.76	8	1
1:A:415:MET:O	1:A:415:MET:SD	0.51	2.68	2	1
1:A:436:ARG:NE	1:A:492:SER:OG	0.51	2.43	2	1
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:NH1	0.51	2.43	6	1
1:A:343:LEU:O	1:A:345:THR:N	0.51	2.43	6	1
1:A:356:GLU:O	1:A:357:ILE:C	0.51	2.48	6	2
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:C	0.51	2.49	7	2
1:A:403:ASN:HD22	1:A:441:GLN:HE22	0.51	1.49	1	1
1:A:312:LYS:NZ	1:A:312:LYS:CB	0.51	2.74	1	2
1:A:498:LEU:HD13	1:A:502:ALA:HB2	0.51	1.83	5	1
1:A:593:GLN:NE2	1:A:655:GLN:OE1	0.51	2.43	5	1
1:A:176:GLU:O	1:A:548:TYR:CD1	0.51	2.63	10	1
1:A:592:ILE:HG23	1:A:593:GLN:N	0.51	2.20	10	1
1:A:600:VAL:CG2	1:A:601:GLN:N	0.51	2.74	9	1
1:A:356:GLU:H	1:A:356:GLU:CD	0.51	2.09	9	1
1:A:504:ILE:O	1:A:504:ILE:HG22	0.51	2.05	8	1
1:A:429:ARG:NH2	1:A:460:GLU:OE2	0.51	2.44	8	1
1:A:132:ASN:O	1:A:134:ARG:N	0.51	2.44	3	1
1:A:540:ALA:O	1:A:544:HIS:CD2	0.51	2.64	2	1
1:A:498:LEU:HD12	1:A:498:LEU:H	0.51	1.65	5	2
1:A:148:ILE:HG22	1:A:162:ARG:HH22	0.51	1.66	6	1
1:A:487:ARG:O	1:A:490:VAL:N	0.51	2.44	1	1
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:OE1	0.51	2.39	5	1
1:A:394:HIS:NE2	1:A:438:CYS:CB	0.51	2.73	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:ILE:O	1:A:243:ASP:C	0.51	2.47	4	2
1:A:183:GLY:O	1:A:184:SER:HB2	0.51	2.05	10	1
1:A:637:ILE:CG2	1:A:641:HIS:NE2	0.51	2.73	10	1
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:HB2	0.51	2.06	8	1
1:A:233:ASN:ND2	1:A:233:ASN:O	0.51	2.44	3	1
1:A:189:VAL:CG2	1:A:190:ALA:N	0.51	2.74	9	8
1:A:524:ASP:N	1:A:524:ASP:OD1	0.51	2.44	3	2
1:A:28:THR:O	1:A:30:LEU:N	0.51	2.43	3	2
1:A:581:VAL:CG2	1:A:581:VAL:O	0.51	2.59	6	1
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:SD	0.51	2.69	7	1
1:A:144:GLY:O	1:A:619:LYS:NZ	0.51	2.42	7	2
1:A:488:ASN:CG	1:A:489:ASN:N	0.51	2.65	5	1
1:A:459:ASP:OD1	1:A:459:ASP:N	0.51	2.43	5	1
1:A:134:ARG:N	1:A:333:SER:OG	0.51	2.44	4	1
1:A:494:LEU:HD12	1:A:495:PHE:N	0.51	2.21	4	1
1:A:147:ILE:HG22	1:A:147:ILE:O	0.51	2.06	10	2
1:A:564:GLU:O	1:A:566:ASN:N	0.51	2.44	10	1
1:A:118:VAL:C	1:A:632:ARG:NH2	0.51	2.63	9	1
1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:N	0.50	2.40	4	3
1:A:574:ASP:OD1	1:A:574:ASP:N	0.50	2.43	3	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:GLY:N	0.50	2.74	2	2
1:A:137:SER:OG	1:A:139:TYR:CD2	0.50	2.60	2	1
1:A:379:LYS:O	1:A:380:ASN:ND2	0.50	2.45	2	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:65:ASP:N	0.50	2.44	7	2
1:A:134:ARG:NE	1:A:332:ARG:O	0.50	2.42	6	1
1:A:336:PHE:CE1	1:A:389:VAL:HG13	0.50	2.41	6	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:269:LEU:HD23	0.50	2.35	1	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:355:ASN:HD21	0.50	1.67	1	1
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CG	0.50	2.64	5	1
1:A:200:ILE:HD13	1:A:200:ILE:H	0.50	1.65	4	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:C	0.50	2.49	10	2
1:A:32:ALA:O	1:A:35:PHE:N	0.50	2.44	10	1
1:A:131:ALA:O	1:A:333:SER:OG	0.50	2.29	9	1
1:A:487:ARG:O	1:A:489:ASN:ND2	0.50	2.44	8	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:176:GLU:N	0.50	2.43	3	1
1:A:316:ASP:OD1	1:A:317:ARG:N	0.50	2.41	3	1
1:A:601:GLN:NE2	1:A:622:ASP:OD1	0.50	2.44	3	1
1:A:202:LEU:O	1:A:204:ASN:N	0.50	2.43	6	6
1:A:514:LEU:N	1:A:514:LEU:CD2	0.50	2.74	7	2
1:A:257:ASN:OD1	1:A:258:ASP:N	0.50	2.44	7	1
1:A:121:ALA:O	1:A:286:LEU:HD21	0.50	2.06	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:323:ASP:OD1	1:A:324:GLY:N	0.50	2.44	5	1
1:A:378:GLN:O	1:A:378:GLN:CG	0.50	2.58	4	1
1:A:530:ALA:O	1:A:553:VAL:HG11	0.50	2.06	8	1
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HG3	0.50	1.84	8	2
1:A:242:ILE:H	1:A:242:ILE:CD1	0.50	2.20	6	1
1:A:21:ASP:O	1:A:26:PRO:CG	0.50	2.59	7	1
1:A:242:ILE:HD13	1:A:242:ILE:N	0.50	2.21	7	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:235:GLY:O	0.50	2.44	1	1
1:A:716:ARG:O	1:A:719:GLU:N	0.50	2.43	1	1
1:A:123:ASN:HD21	1:A:716:ARG:HH22	0.50	1.49	5	1
1:A:457:THR:O	1:A:459:ASP:N	0.50	2.44	4	2
1:A:389:VAL:HG12	1:A:423:GLY:H	0.50	1.67	5	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:GLY:N	0.50	2.43	4	1
1:A:465:MET:SD	1:A:640:GLN:OE1	0.50	2.69	4	1
1:A:455:ASP:OD1	1:A:455:ASP:N	0.50	2.45	10	1
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:CD2	0.50	2.74	10	1
1:A:549:HIS:CG	1:A:550:GLN:N	0.50	2.78	9	1
1:A:345:THR:O	1:A:346:ILE:HG23	0.50	2.07	9	1
1:A:503:GLN:C	1:A:504:ILE:HD12	0.50	2.27	3	2
1:A:696:LEU:O	1:A:696:LEU:HD23	0.50	2.06	6	1
1:A:234:ASN:ND2	1:A:548:TYR:CE2	0.50	2.79	6	1
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:ARG:H	0.50	1.65	1	1
1:A:207:GLU:CD	1:A:207:GLU:H	0.50	2.09	5	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:346:ILE:N	0.50	2.19	10	1
1:A:668:ASP:O	1:A:671:ASN:N	0.50	2.36	10	1
1:A:61:GLN:NE2	1:A:430:ARG:NH2	0.50	2.58	10	1
1:A:9:ARG:NH1	1:A:44:HIS:CG	0.50	2.79	9	1
1:A:646:LEU:HD13	1:A:646:LEU:O	0.50	2.07	3	1
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:O	0.50	2.06	3	2
1:A:494:LEU:CD1	1:A:494:LEU:C	0.50	2.80	2	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:GLN:N	0.50	2.44	2	1
1:A:512:PRO:O	1:A:515:MET:SD	0.50	2.69	4	2
1:A:444:ASN:N	1:A:444:ASN:ND2	0.50	2.56	6	1
1:A:339:ASN:HD22	1:A:339:ASN:N	0.50	2.04	7	1
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:OG	0.50	2.29	4	2
1:A:441:GLN:O	1:A:441:GLN:NE2	0.50	2.45	1	1
1:A:336:PHE:CE2	1:A:387:TYR:CD2	0.50	2.99	10	1
1:A:526:LEU:HD11	1:A:551:THR:O	0.50	2.06	10	1
1:A:713:HIS:C	1:A:713:HIS:CD2	0.50	2.85	9	1
1:A:448:PHE:CD1	1:A:448:PHE:C	0.50	2.83	3	1
1:A:349:ILE:HD11	1:A:359:GLU:OE1	0.50	2.06	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:630:GLU:OE1	1:A:630:GLU:N	0.50	2.45	2	1
1:A:377:VAL:C	1:A:379:LYS:N	0.50	2.65	9	4
1:A:489:ASN:OD1	1:A:490:VAL:N	0.50	2.43	6	1
1:A:500:GLY:O	1:A:501:LYS:CG	0.50	2.60	6	1
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:544:HIS:CB	0.50	2.19	5	1
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:CB	0.50	2.60	9	2
1:A:557:GLN:OE1	1:A:557:GLN:N	0.50	2.45	4	1
1:A:361:ILE:O	1:A:363:ASP:N	0.50	2.45	9	2
1:A:237:HIS:ND1	1:A:237:HIS:N	0.50	2.58	4	2
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:NH1	0.50	2.60	9	1
1:A:553:VAL:HG23	1:A:554:GLN:N	0.50	2.22	8	1
1:A:21:ASP:HA	1:A:25:LEU:HD12	0.50	1.83	2	1
1:A:504:ILE:HG22	1:A:504:ILE:O	0.50	2.05	7	2
1:A:503:GLN:N	1:A:503:GLN:CD	0.50	2.65	6	2
1:A:198:LEU:CD1	1:A:198:LEU:N	0.50	2.75	9	3
1:A:388:ILE:HD13	1:A:388:ILE:N	0.50	2.22	1	1
1:A:340:VAL:CG2	1:A:341:GLY:N	0.50	2.75	5	1
1:A:581:VAL:HG22	1:A:582:ALA:N	0.50	2.22	5	1
1:A:442:ALA:HA	1:A:446:VAL:HG11	0.50	1.82	10	3
1:A:704:PRO:O	1:A:708:THR:OG1	0.50	2.29	4	1
1:A:513:ASP:N	1:A:513:ASP:OD1	0.50	2.44	4	1
1:A:9:ARG:HH11	1:A:44:HIS:CG	0.50	2.25	9	1
1:A:450:ASN:O	1:A:451:THR:CB	0.50	2.60	10	2
1:A:663:MET:O	1:A:666:VAL:N	0.50	2.42	6	2
1:A:405:LEU:N	1:A:405:LEU:HD12	0.50	2.22	5	1
1:A:455:ASP:O	1:A:457:THR:N	0.50	2.45	8	3
1:A:38:ASN:O	1:A:42:ILE:HG22	0.50	2.07	10	1
1:A:134:ARG:CZ	1:A:330:HIS:O	0.50	2.60	8	1
1:A:67:TRP:CH2	1:A:84:PHE:CE2	0.50	3.00	8	1
1:A:159:ASP:O	1:A:161:GLN:N	0.50	2.45	9	4
1:A:420:LEU:O	1:A:445:ARG:CB	0.50	2.60	2	1
1:A:574:ASP:N	1:A:574:ASP:OD1	0.50	2.43	7	2
1:A:119:VAL:HG13	1:A:267:THR:OG1	0.50	2.06	7	1
1:A:452:GLY:C	1:A:453:PHE:CG	0.50	2.84	1	1
1:A:88:LEU:C	1:A:90:TYR:H	0.50	2.10	1	2
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:N	0.50	2.45	5	1
1:A:343:LEU:CD2	1:A:343:LEU:N	0.50	2.75	5	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:45:ASP:N	0.50	2.45	5	1
1:A:518:MET:O	1:A:520:SER:N	0.50	2.44	8	2
1:A:547:HIS:N	1:A:547:HIS:CD2	0.50	2.77	4	1
1:A:444:ASN:CG	1:A:445:ARG:N	0.50	2.65	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:439:ILE:HD11	1:A:449:ILE:HD11	0.49	1.84	2	1
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:HB2	0.49	2.05	2	2
1:A:116:GLN:NE2	1:A:266:SER:OG	0.49	2.45	2	1
1:A:365:VAL:O	1:A:367:THR:N	0.49	2.45	6	1
1:A:197:GLN:NE2	1:A:198:LEU:O	0.49	2.45	6	1
1:A:429:ARG:O	1:A:430:ARG:CB	0.49	2.60	7	1
1:A:595:GLU:O	1:A:599:ASN:ND2	0.49	2.45	1	1
1:A:498:LEU:HD23	1:A:498:LEU:H	0.49	1.63	4	1
1:A:498:LEU:CD2	1:A:498:LEU:N	0.49	2.57	4	1
1:A:637:ILE:HG23	1:A:638:SER:N	0.49	2.22	4	1
1:A:542:THR:C	1:A:544:HIS:N	0.49	2.65	10	1
1:A:661:GLU:CD	1:A:662:ASN:N	0.49	2.65	10	1
1:A:299:GLN:O	1:A:299:GLN:NE2	0.49	2.44	9	1
1:A:316:ASP:OD2	1:A:382:ARG:NH1	0.49	2.45	2	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:645:TRP:NE1	0.49	2.60	6	1
1:A:108:GLU:CD	1:A:109:ILE:N	0.49	2.66	6	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD23	0.49	2.07	7	1
1:A:444:ASN:OD1	1:A:444:ASN:N	0.49	2.43	1	2
1:A:142:LEU:HD12	1:A:142:LEU:H	0.49	1.68	1	1
1:A:336:PHE:CZ	1:A:387:TYR:CD2	0.49	3.00	10	1
1:A:486:GLU:CD	1:A:487:ARG:NH1	0.49	2.66	10	1
1:A:169:TRP:CE2	1:A:173:PHE:CE1	0.49	3.00	10	1
1:A:695:ASP:N	1:A:695:ASP:OD1	0.49	2.42	10	1
1:A:719:GLU:CD	1:A:720:LYS:N	0.49	2.66	10	1
1:A:35:PHE:O	1:A:39:PHE:CD1	0.49	2.65	8	2
1:A:359:GLU:CD	1:A:360:GLY:N	0.49	2.65	9	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CE2	0.49	2.64	8	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CG	0.49	3.05	8	1
1:A:506:LYS:NZ	1:A:534:TRP:CZ3	0.49	2.80	8	1
1:A:47:ALA:N	1:A:48:PRO:CD	0.49	2.75	2	2
1:A:635:LEU:HD22	1:A:636:ARG:NH2	0.49	2.23	6	1
1:A:397:GLN:H	1:A:397:GLN:CD	0.49	2.11	6	2
1:A:565:PHE:CD1	1:A:565:PHE:N	0.49	2.80	7	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:176:GLU:N	0.49	2.45	1	2
1:A:367:THR:CG2	1:A:368:GLY:N	0.49	2.76	5	1
1:A:376:LYS:CG	1:A:377:VAL:N	0.49	2.75	5	1
1:A:290:LEU:C	1:A:290:LEU:CD1	0.49	2.81	10	2
1:A:416:ALA:H	1:A:417:PRO:HD2	0.49	1.66	5	1
1:A:637:ILE:CG1	1:A:638:SER:N	0.49	2.76	5	1
1:A:202:LEU:H	1:A:207:GLU:H	0.49	1.49	4	1
1:A:646:LEU:O	1:A:646:LEU:HD13	0.49	2.07	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:C	0.49	2.66	10	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CG	0.49	2.64	9	1
1:A:233:ASN:ND2	1:A:234:ASN:H	0.49	2.06	9	1
1:A:509:TRP:O	1:A:509:TRP:CD1	0.49	2.65	8	1
1:A:640:GLN:NE2	1:A:705:ASN:O	0.49	2.45	8	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:298:LEU:O	0.49	2.07	3	1
1:A:94:GLN:C	1:A:96:GLU:H	0.49	2.09	3	1
1:A:372:LEU:HA	1:A:375:LEU:HD12	0.49	1.84	3	2
1:A:600:VAL:HG11	1:A:663:MET:SD	0.49	2.47	2	2
1:A:383:THR:C	1:A:385:SER:N	0.49	2.66	10	6
1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:N	0.49	2.39	6	2
1:A:244:ALA:C	1:A:246:GLY:H	0.49	2.11	6	3
1:A:292:GLY:O	1:A:295:GLN:N	0.49	2.41	9	3
1:A:498:LEU:HD22	1:A:502:ALA:CB	0.49	2.37	7	1
1:A:446:VAL:HG23	1:A:447:ALA:N	0.49	2.22	7	1
1:A:290:LEU:HD22	1:A:370:ILE:HD13	0.49	1.83	7	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:31:ASP:H	0.49	1.67	1	1
1:A:428:GLU:O	1:A:429:ARG:CB	0.49	2.58	1	1
1:A:177:SER:OG	1:A:178:LEU:N	0.49	2.46	10	1
1:A:276:ALA:HB2	1:A:610:TRP:CZ2	0.49	2.43	10	1
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:HD22	0.49	2.21	10	1
1:A:377:VAL:C	1:A:379:LYS:H	0.49	2.11	9	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:427:GLU:OE1	0.49	2.45	8	1
1:A:449:ILE:CD1	1:A:449:ILE:N	0.49	2.68	2	2
1:A:105:ILE:H	1:A:105:ILE:HD13	0.49	1.68	2	1
1:A:637:ILE:H	1:A:637:ILE:CD1	0.49	2.16	2	1
1:A:237:HIS:O	1:A:262:GLU:OE1	0.49	2.29	7	3
1:A:43:VAL:CG1	1:A:359:GLU:OE2	0.49	2.61	2	1
1:A:242:ILE:N	1:A:242:ILE:CD1	0.49	2.75	6	2
1:A:56:GLU:CA	1:A:56:GLU:OE1	0.49	2.61	6	1
1:A:664:ALA:O	1:A:668:ASP:OD1	0.49	2.30	7	1
1:A:267:THR:HG22	1:A:334:LEU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:482:ILE:HG23	1:A:483:LYS:N	0.49	2.21	10	2
1:A:448:PHE:CE2	1:A:498:LEU:HD21	0.49	2.42	1	1
1:A:121:ALA:O	1:A:286:LEU:CD2	0.49	2.59	1	2
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:CD	0.49	2.18	5	2
1:A:148:ILE:N	1:A:149:PRO:HD2	0.49	2.19	5	2
1:A:288:ARG:O	1:A:292:GLY:N	0.49	2.46	4	1
1:A:134:ARG:HD3	1:A:134:ARG:H	0.49	1.68	10	1
1:A:132:ASN:C	1:A:134:ARG:N	0.49	2.65	3	1
1:A:143:TYR:OH	1:A:159:ASP:N	0.49	2.40	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:604:LEU:O	1:A:608:VAL:CG1	0.49	2.61	4	5
1:A:339:ASN:O	1:A:391:PRO:CD	0.49	2.61	7	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:299:GLN:CB	0.49	2.38	7	1
1:A:207:GLU:CD	1:A:207:GLU:N	0.49	2.66	5	2
1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:SD	0.49	2.85	1	1
1:A:342:HIS:O	1:A:345:THR:HG23	0.49	2.07	1	1
1:A:198:LEU:HD13	1:A:216:PHE:CE1	0.49	2.42	5	1
1:A:356:GLU:O	1:A:357:ILE:O	0.49	2.30	10	2
1:A:329:LEU:HD12	1:A:329:LEU:N	0.49	2.23	5	1
1:A:299:GLN:NE2	1:A:312:LYS:NZ	0.49	2.61	4	1
1:A:628:LEU:H	1:A:628:LEU:HD22	0.49	1.65	10	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:GLY:H	0.49	2.17	2	1
1:A:604:LEU:O	1:A:604:LEU:HD23	0.49	2.07	7	1
1:A:533:ALA:HB3	1:A:544:HIS:CE1	0.49	2.43	7	1
1:A:241:GLN:HB2	1:A:260:ILE:HD11	0.49	1.83	1	1
1:A:632:ARG:NE	1:A:632:ARG:N	0.49	2.61	5	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:76:LYS:CB	0.49	2.76	4	1
1:A:345:THR:HG21	1:A:360:GLY:CA	0.49	2.38	10	1
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:HD23	0.49	2.28	10	1
1:A:231:LEU:N	1:A:238:ILE:O	0.49	2.44	10	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.49	2.28	9	1
1:A:239:GLU:CD	1:A:317:ARG:NH1	0.49	2.66	3	1
1:A:271:CYS:O	1:A:271:CYS:SG	0.49	2.71	3	1
1:A:17:LYS:NZ	1:A:17:LYS:CB	0.49	2.75	2	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:CB	0.49	2.61	2	2
1:A:7:GLN:O	1:A:9:ARG:N	0.49	2.46	6	1
1:A:454:LEU:CD2	1:A:455:ASP:H	0.49	2.21	6	1
1:A:68:HIS:CD2	1:A:81:TYR:OH	0.49	2.65	6	1
1:A:535:VAL:HG21	1:A:541:ALA:HB2	0.49	1.84	1	1
1:A:342:HIS:CE1	1:A:343:LEU:CD1	0.49	2.96	4	1
1:A:666:VAL:O	1:A:669:GLN:N	0.49	2.42	10	1
1:A:625:ASN:N	1:A:625:ASN:ND2	0.49	2.60	9	1
1:A:640:GLN:NE2	1:A:707:TYR:CE1	0.49	2.81	2	1
1:A:282:ASP:N	1:A:282:ASP:OD1	0.49	2.45	6	1
1:A:318:HIS:CD2	1:A:318:HIS:N	0.49	2.81	8	2
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG21	0.49	2.07	7	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD13	0.49	2.20	7	1
1:A:450:ASN:N	1:A:450:ASN:HD22	0.49	2.05	1	1
1:A:382:ARG:CA	1:A:382:ARG:NE	0.49	2.76	4	1
1:A:529:GLY:O	1:A:530:ALA:O	0.49	2.31	4	1
1:A:592:ILE:O	1:A:596:LEU:N	0.49	2.41	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:709:GLU:CD	1:A:709:GLU:H	0.49	2.11	8	1
1:A:190:ALA:C	1:A:191:PHE:CD1	0.49	2.87	1	3
1:A:564:GLU:N	1:A:564:GLU:CD	0.49	2.66	2	2
1:A:687:SER:O	1:A:688:CYS:C	0.49	2.51	6	1
1:A:631:ASP:C	1:A:633:ALA:N	0.49	2.67	8	3
1:A:114:GLY:N	1:A:265:ILE:HD11	0.49	2.22	1	1
1:A:612:GLU:CG	1:A:613:GLN:N	0.49	2.75	1	1
1:A:57:ARG:O	1:A:60:ILE:HG22	0.49	2.07	5	1
1:A:275:VAL:HG22	1:A:276:ALA:N	0.49	2.22	4	1
1:A:362:LEU:N	1:A:362:LEU:CD2	0.49	2.76	10	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:TRP:CD1	0.49	2.65	9	1
1:A:527:ARG:CZ	1:A:551:THR:OG1	0.49	2.60	8	1
1:A:449:ILE:CG2	1:A:503:GLN:O	0.48	2.61	3	1
1:A:208:THR:HG22	1:A:209:THR:H	0.48	1.68	3	1
1:A:298:LEU:CD1	1:A:299:GLN:N	0.48	2.75	2	1
1:A:315:ASP:O	1:A:316:ASP:CB	0.48	2.61	9	2
1:A:124:ALA:O	1:A:127:ALA:N	0.48	2.41	2	1
1:A:313:LEU:H	1:A:313:LEU:CD1	0.48	2.19	6	1
1:A:454:LEU:O	1:A:458:GLY:N	0.48	2.41	7	1
1:A:626:VAL:O	1:A:627:ALA:CB	0.48	2.61	1	2
1:A:366:MET:O	1:A:368:GLY:N	0.48	2.46	1	2
1:A:717:LEU:N	1:A:717:LEU:HD12	0.48	2.23	5	1
1:A:421:LYS:HZ3	1:A:421:LYS:HB2	0.48	1.69	9	1
1:A:114:GLY:O	1:A:532:THR:CG2	0.48	2.61	9	1
1:A:147:ILE:HG23	1:A:148:ILE:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:226:PRO:C	1:A:228:CYS:N	0.48	2.66	2	3
1:A:199:ARG:NH2	1:A:201:GLN:CD	0.48	2.66	2	1
1:A:422:MET:C	1:A:447:ALA:CB	0.48	2.81	5	4
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:CB	0.48	2.61	6	3
1:A:252:ASP:OD2	1:A:255:HIS:N	0.48	2.46	6	1
1:A:577:LEU:O	1:A:578:THR:CB	0.48	2.61	7	2
1:A:108:GLU:HG2	1:A:334:LEU:HD22	0.48	1.84	1	1
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:CG2	0.48	2.60	1	1
1:A:150:GLN:C	1:A:150:GLN:NE2	0.48	2.67	1	1
1:A:370:ILE:CD1	1:A:370:ILE:N	0.48	2.76	5	1
1:A:237:HIS:CG	1:A:262:GLU:OE2	0.48	2.66	10	1
1:A:344:MET:SD	1:A:709:GLU:OE2	0.48	2.71	10	1
1:A:585:ALA:HB2	1:A:645:TRP:CZ3	0.48	2.43	10	1
1:A:615:ILE:CG2	1:A:616:GLY:H	0.48	2.15	3	1
1:A:132:ASN:C	1:A:134:ARG:H	0.48	2.12	3	1
1:A:338:ARG:NH1	1:A:456:ARG:NH2	0.48	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:575:ASP:C	1:A:577:LEU:N	0.48	2.66	10	2
1:A:262:GLU:OE1	1:A:262:GLU:N	0.48	2.44	2	1
1:A:315:ASP:CG	1:A:332:ARG:HH12	0.48	2.11	2	1
1:A:444:ASN:HD22	1:A:445:ARG:N	0.48	2.05	6	2
1:A:500:GLY:O	1:A:501:LYS:CB	0.48	2.61	6	1
1:A:298:LEU:HD12	1:A:298:LEU:N	0.48	2.21	7	1
1:A:281:GLU:O	1:A:284:ILE:HG22	0.48	2.07	7	1
1:A:56:GLU:OE2	1:A:59:ARG:NH1	0.48	2.46	7	1
1:A:629:MET:SD	1:A:629:MET:C	0.48	2.92	7	1
1:A:139:TYR:CD2	1:A:140:ASP:OD1	0.48	2.66	1	1
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:CB	0.48	2.61	5	1
1:A:720:LYS:C	1:A:722:SER:N	0.48	2.66	4	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:38:ASN:C	0.48	2.66	4	1
1:A:637:ILE:O	1:A:640:GLN:N	0.48	2.45	10	2
1:A:323:ASP:OD1	1:A:323:ASP:N	0.48	2.44	4	1
1:A:433:LEU:HD12	1:A:434:ASN:H	0.48	1.68	10	1
1:A:526:LEU:C	1:A:526:LEU:CD1	0.48	2.82	8	1
1:A:435:LEU:O	1:A:439:ILE:N	0.48	2.35	6	1
1:A:560:ILE:HG22	1:A:565:PHE:CE2	0.48	2.44	6	1
1:A:234:ASN:OD1	1:A:551:THR:O	0.48	2.31	7	1
1:A:53:LEU:O	1:A:56:GLU:N	0.48	2.42	1	1
1:A:107:SER:O	1:A:110:THR:OG1	0.48	2.32	4	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:53:LEU:H	0.48	1.68	4	1
1:A:449:ILE:CG2	1:A:502:ALA:HB1	0.48	2.38	9	1
1:A:508:MET:O	1:A:509:TRP:CG	0.48	2.66	9	1
1:A:570:GLU:CB	1:A:571:PRO:CD	0.48	2.90	3	5
1:A:459:ASP:OD2	1:A:707:TYR:CZ	0.48	2.67	3	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:N	0.48	2.40	2	3
1:A:66:GLU:O	1:A:69:ARG:N	0.48	2.47	7	1
1:A:659:SER:O	1:A:663:MET:SD	0.48	2.71	1	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE1	0.48	2.31	1	1
1:A:518:MET:C	1:A:520:SER:N	0.48	2.66	8	2
1:A:278:VAL:CG2	1:A:347:PRO:O	0.48	2.62	4	1
1:A:258:ASP:N	1:A:258:ASP:OD1	0.48	2.46	10	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CE2	0.48	3.07	8	1
1:A:509:TRP:CG	1:A:509:TRP:O	0.48	2.66	8	1
1:A:299:GLN:HE21	1:A:299:GLN:C	0.48	2.12	2	1
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:C	0.48	2.51	2	4
1:A:351:ASP:OD2	1:A:357:ILE:HG21	0.48	2.08	2	1
1:A:366:MET:O	1:A:366:MET:SD	0.48	2.71	2	1
1:A:383:THR:C	1:A:385:SER:H	0.48	2.11	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:565:PHE:C	1:A:567:ALA:N	0.48	2.66	6	5
1:A:209:THR:CG2	1:A:210:LEU:N	0.48	2.77	6	2
1:A:282:ASP:OD1	1:A:282:ASP:N	0.48	2.43	1	2
1:A:343:LEU:O	1:A:357:ILE:O	0.48	2.32	1	1
1:A:717:LEU:N	1:A:717:LEU:CD1	0.48	2.76	5	1
1:A:380:ASN:ND2	1:A:382:ARG:NH2	0.48	2.61	4	1
1:A:542:THR:O	1:A:545:ALA:N	0.48	2.46	4	1
1:A:439:ILE:HG12	1:A:498:LEU:HD11	0.48	1.86	8	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:132:ASN:ND2	0.48	2.77	8	1
1:A:151:GLU:CD	1:A:619:LYS:NZ	0.48	2.67	8	1
1:A:258:ASP:OD1	1:A:258:ASP:N	0.48	2.44	3	1
1:A:248:ILE:C	1:A:250:LYS:N	0.48	2.66	7	6
1:A:423:GLY:C	1:A:425:MET:SD	0.48	2.92	2	1
1:A:202:LEU:C	1:A:204:ASN:N	0.48	2.67	6	6
1:A:544:HIS:CD2	1:A:544:HIS:C	0.48	2.87	6	1
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:HD13	0.48	2.09	9	2
1:A:361:ILE:HD13	1:A:361:ILE:O	0.48	2.08	7	1
1:A:632:ARG:HH22	1:A:712:LEU:HD13	0.48	1.67	7	1
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG23	0.48	2.07	1	1
1:A:538:PRO:O	1:A:541:ALA:HB3	0.48	2.09	1	1
1:A:539:THR:O	1:A:541:ALA:N	0.48	2.47	1	1
1:A:519:TYR:C	1:A:519:TYR:CD1	0.48	2.86	1	1
1:A:632:ARG:HE	1:A:633:ALA:N	0.48	2.07	5	1
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ASN:N	0.48	2.76	5	1
1:A:181:GLU:C	1:A:182:ASN:ND2	0.48	2.67	10	1
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:HD22	0.48	2.23	8	1
1:A:273:ASP:OD2	1:A:338:ARG:O	0.48	2.32	8	1
1:A:376:LYS:O	1:A:377:VAL:C	0.48	2.51	3	5
1:A:321:ALA:C	1:A:323:ASP:N	0.48	2.67	3	1
1:A:389:VAL:HG13	1:A:389:VAL:O	0.48	2.09	3	1
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:CG	0.48	2.62	3	1
1:A:385:SER:OG	1:A:386:VAL:N	0.48	2.46	2	1
1:A:448:PHE:CE2	1:A:503:GLN:OE1	0.48	2.67	6	1
1:A:531:ASN:O	1:A:548:TYR:CZ	0.48	2.67	7	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:CG	0.48	2.61	7	1
1:A:227:THR:O	1:A:227:THR:HG22	0.48	2.08	7	1
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:CB	0.48	2.62	1	2
1:A:184:SER:OG	1:A:185:TYR:N	0.48	2.46	1	1
1:A:512:PRO:C	1:A:514:LEU:H	0.48	2.11	5	2
1:A:578:THR:HG23	1:A:578:THR:O	0.48	2.08	9	1
1:A:244:ALA:C	1:A:246:GLY:N	0.48	2.66	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:226:PRO:O	1:A:228:CYS:N	0.48	2.46	2	1
1:A:584:ASN:OD1	1:A:585:ALA:N	0.48	2.46	2	1
1:A:97:ARG:CG	1:A:98:VAL:N	0.48	2.77	2	1
1:A:586:ASN:CG	1:A:586:ASN:O	0.48	2.53	6	1
1:A:164:GLU:OE1	1:A:164:GLU:CA	0.48	2.62	6	1
1:A:418:ASN:O	1:A:419:THR:OG1	0.48	2.31	6	2
1:A:656:VAL:O	1:A:660:LEU:HD12	0.48	2.08	6	1
1:A:512:PRO:O	1:A:513:ASP:CB	0.48	2.62	10	2
1:A:414:GLY:C	1:A:416:ALA:N	0.48	2.66	7	2
1:A:579:ILE:CD1	1:A:581:VAL:HG12	0.48	2.38	1	1
1:A:442:ALA:CB	1:A:446:VAL:HG23	0.48	2.38	5	1
1:A:234:ASN:CG	1:A:549:HIS:CE1	0.48	2.87	5	1
1:A:608:VAL:O	1:A:612:GLU:CG	0.48	2.62	4	2
1:A:77:ASP:C	1:A:79:ALA:N	0.48	2.67	10	1
1:A:554:GLN:OE1	1:A:554:GLN:O	0.48	2.32	10	1
1:A:640:GLN:CD	1:A:640:GLN:N	0.48	2.67	9	1
1:A:418:ASN:O	1:A:419:THR:CB	0.48	2.59	8	1
1:A:531:ASN:CG	1:A:548:TYR:HH	0.48	2.12	8	1
1:A:62:ALA:O	1:A:65:ASP:OD2	0.48	2.32	3	1
1:A:213:PRO:C	1:A:215:GLN:N	0.48	2.67	6	5
1:A:386:VAL:HG12	1:A:388:ILE:HD11	0.48	1.85	6	2
1:A:498:LEU:CD1	1:A:498:LEU:N	0.48	2.71	9	2
1:A:414:GLY:C	1:A:415:MET:SD	0.48	2.93	6	1
1:A:715:TRP:CE3	1:A:719:GLU:OE1	0.48	2.66	6	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:HB3	0.48	2.09	1	1
1:A:215:GLN:OE1	1:A:233:ASN:ND2	0.48	2.47	5	1
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:O	0.48	2.31	10	1
1:A:180:LEU:C	1:A:182:ASN:N	0.48	2.67	10	1
1:A:506:LYS:CD	1:A:506:LYS:N	0.48	2.76	9	1
1:A:570:GLU:N	1:A:570:GLU:CD	0.48	2.67	8	1
1:A:430:ARG:N	1:A:460:GLU:OE1	0.47	2.47	3	1
1:A:557:GLN:CG	1:A:558:ALA:N	0.47	2.77	3	2
1:A:425:MET:CG	1:A:450:ASN:OD1	0.47	2.61	2	1
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:HD3	0.47	1.69	5	1
1:A:584:ASN:CG	1:A:587:TRP:CZ3	0.47	2.87	4	1
1:A:228:CYS:SG	1:A:241:GLN:OE1	0.47	2.72	4	1
1:A:430:ARG:CG	1:A:431:THR:N	0.47	2.76	4	1
1:A:546:LEU:O	1:A:548:TYR:N	0.47	2.46	10	1
1:A:458:GLY:O	1:A:460:GLU:N	0.47	2.47	9	1
1:A:578:THR:HG22	1:A:579:ILE:N	0.47	2.24	10	3
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:522:LYS:CB	0.47	2.22	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:608:VAL:CG1	1:A:609:ARG:N	0.47	2.78	4	5
1:A:67:TRP:NE1	1:A:84:PHE:CD2	0.47	2.82	7	1
1:A:643:ALA:O	1:A:647:ARG:CG	0.47	2.62	7	1
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CD2	0.47	2.67	1	1
1:A:324:GLY:O	1:A:325:SER:O	0.47	2.32	1	1
1:A:601:GLN:HE21	1:A:667:VAL:CG2	0.47	2.22	5	1
1:A:531:ASN:ND2	1:A:552:ASN:CG	0.47	2.68	10	1
1:A:609:ARG:CZ	1:A:670:GLN:OE1	0.47	2.61	9	1
1:A:248:ILE:CG2	1:A:249:GLY:N	0.47	2.76	8	1
1:A:361:ILE:CG2	1:A:362:LEU:N	0.47	2.77	8	1
1:A:704:PRO:C	1:A:706:GLY:N	0.47	2.67	5	2
1:A:606:TYR:O	1:A:610:TRP:CB	0.47	2.62	10	4
1:A:465:MET:C	1:A:467:ALA:H	0.47	2.12	7	4
1:A:645:TRP:O	1:A:648:HIS:N	0.47	2.42	6	1
1:A:671:ASN:N	1:A:671:ASN:ND2	0.47	2.62	6	1
1:A:341:GLY:O	1:A:342:HIS:CG	0.47	2.68	6	1
1:A:600:VAL:O	1:A:602:GLY:N	0.47	2.47	7	1
1:A:576:LEU:C	1:A:576:LEU:CD1	0.47	2.81	1	1
1:A:290:LEU:C	1:A:292:GLY:N	0.47	2.66	10	2
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:CB	0.47	2.61	5	1
1:A:713:HIS:O	1:A:716:ARG:N	0.47	2.41	5	1
1:A:293:LEU:HD23	1:A:293:LEU:N	0.47	2.25	5	1
1:A:378:GLN:CD	1:A:378:GLN:O	0.47	2.52	4	1
1:A:40:ASP:OD1	1:A:44:HIS:CE1	0.47	2.67	4	1
1:A:640:GLN:N	1:A:640:GLN:OE1	0.47	2.44	9	1
1:A:433:LEU:HD12	1:A:433:LEU:N	0.47	2.21	9	1
1:A:271:CYS:C	1:A:273:ASP:N	0.47	2.66	9	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:44:HIS:O	0.47	2.67	9	1
1:A:454:LEU:O	1:A:457:THR:N	0.47	2.43	9	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:584:ASN:N	0.47	2.56	8	1
1:A:430:ARG:NH2	1:A:459:ASP:CB	0.47	2.77	8	1
1:A:635:LEU:CD1	1:A:635:LEU:C	0.47	2.81	3	1
1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:CB	0.47	2.63	3	3
1:A:433:LEU:C	1:A:433:LEU:HD13	0.47	2.29	3	1
1:A:609:ARG:HH12	1:A:671:ASN:HD21	0.47	1.52	3	1
1:A:335:LEU:HD22	1:A:335:LEU:H	0.47	1.68	2	1
1:A:634:THR:O	1:A:637:ILE:CD1	0.47	2.62	2	1
1:A:653:LYS:NZ	1:A:653:LYS:CB	0.47	2.77	2	1
1:A:78:LYS:CE	1:A:574:ASP:OD2	0.47	2.62	2	1
1:A:557:GLN:HE21	1:A:557:GLN:N	0.47	2.04	6	1
1:A:450:ASN:OD1	1:A:532:THR:OG1	0.47	2.31	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:ASP:O	1:A:110:THR:OG1	0.47	2.33	7	2
1:A:635:LEU:C	1:A:637:ILE:N	0.47	2.68	7	1
1:A:631:ASP:O	1:A:633:ALA:N	0.47	2.47	8	4
1:A:121:ALA:N	1:A:122:MET:SD	0.47	2.87	1	1
1:A:596:LEU:O	1:A:600:VAL:HG23	0.47	2.09	1	1
1:A:429:ARG:CZ	1:A:460:GLU:OE2	0.47	2.63	1	1
1:A:282:ASP:C	1:A:284:ILE:H	0.47	2.13	5	1
1:A:92:VAL:HG23	1:A:94:GLN:HE22	0.47	1.69	4	1
1:A:132:ASN:OD1	1:A:298:LEU:CD2	0.47	2.61	10	1
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:CD1	0.47	2.80	9	1
1:A:197:GLN:HE22	1:A:213:PRO:CB	0.47	2.22	9	1
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:CG	0.47	2.62	8	1
1:A:455:ASP:CG	1:A:637:ILE:HG23	0.47	2.30	8	1
1:A:509:TRP:CD1	1:A:510:ALA:N	0.47	2.81	2	1
1:A:39:PHE:CZ	1:A:43:VAL:HG21	0.47	2.45	1	2
1:A:631:ASP:C	1:A:633:ALA:H	0.47	2.12	9	3
1:A:592:ILE:CG2	1:A:593:GLN:N	0.47	2.77	10	1
1:A:485:TYR:CD1	1:A:486:GLU:N	0.47	2.82	9	1
1:A:147:ILE:CG2	1:A:147:ILE:O	0.47	2.63	9	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CD2	0.47	3.08	8	1
1:A:489:ASN:CG	1:A:490:VAL:N	0.47	2.68	8	1
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:522:LYS:HB2	0.47	1.68	3	1
1:A:699:LEU:C	1:A:701:VAL:N	0.47	2.68	3	2
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:O	0.47	2.10	8	2
1:A:421:LYS:CG	1:A:446:VAL:O	0.47	2.62	2	1
1:A:373:TYR:C	1:A:373:TYR:CD1	0.47	2.88	2	1
1:A:269:LEU:O	1:A:270:ASP:OD2	0.47	2.32	2	2
1:A:587:TRP:CZ3	1:A:645:TRP:CH2	0.47	3.02	2	1
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:HB2	0.47	2.09	6	1
1:A:715:TRP:CE3	1:A:719:GLU:CD	0.47	2.88	6	1
1:A:643:ALA:O	1:A:701:VAL:CG1	0.47	2.62	6	1
1:A:334:LEU:N	1:A:334:LEU:HD12	0.47	2.25	7	1
1:A:233:ASN:C	1:A:235:GLY:N	0.47	2.66	9	2
1:A:210:LEU:C	1:A:212:THR:N	0.47	2.67	1	1
1:A:355:ASN:C	1:A:357:ILE:N	0.47	2.66	4	1
1:A:383:THR:HG22	1:A:383:THR:O	0.47	2.09	4	1
1:A:529:GLY:O	1:A:557:GLN:NE2	0.47	2.47	4	1
1:A:510:ALA:H	1:A:631:ASP:CG	0.47	2.11	4	1
1:A:161:GLN:N	1:A:161:GLN:CD	0.47	2.68	4	1
1:A:595:GLU:CD	1:A:595:GLU:N	0.47	2.68	10	1
1:A:137:SER:CB	1:A:140:ASP:OD1	0.47	2.62	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:ALA:C	1:A:256:ILE:N	0.47	2.68	8	4
1:A:269:LEU:HD11	1:A:335:LEU:HB3	0.47	1.86	2	1
1:A:226:PRO:C	1:A:228:CYS:H	0.47	2.12	1	2
1:A:62:ALA:O	1:A:65:ASP:OD1	0.47	2.32	2	1
1:A:645:TRP:C	1:A:647:ARG:N	0.47	2.68	6	1
1:A:11:ARG:O	1:A:12:ILE:CG2	0.47	2.61	4	3
1:A:371:ALA:C	1:A:373:TYR:N	0.47	2.67	5	4
1:A:654:GLU:CG	1:A:655:GLN:N	0.47	2.77	6	1
1:A:287:TYR:OH	1:A:370:ILE:HD11	0.47	2.10	7	1
1:A:591:GLU:O	1:A:594:GLN:N	0.47	2.47	7	2
1:A:422:MET:HB3	1:A:447:ALA:HB2	0.47	1.85	1	1
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:HE22	0.47	2.07	1	1
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HB2	0.47	1.87	1	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:48:PRO:CD	0.47	2.91	1	2
1:A:419:THR:O	1:A:419:THR:OG1	0.47	2.32	1	1
1:A:364:GLY:O	1:A:367:THR:HG22	0.47	2.08	5	1
1:A:371:ALA:O	1:A:374:ASP:OD2	0.47	2.32	8	2
1:A:117:LEU:HD21	1:A:537:SER:O	0.47	2.10	5	1
1:A:439:ILE:CG2	1:A:440:ALA:N	0.47	2.78	10	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:534:TRP:NE1	0.47	2.76	10	1
1:A:482:ILE:HD13	1:A:482:ILE:O	0.47	2.09	10	1
1:A:231:LEU:O	1:A:238:ILE:N	0.47	2.37	10	1
1:A:697:ILE:CD1	1:A:697:ILE:N	0.47	2.64	9	1
1:A:436:ARG:NE	1:A:436:ARG:N	0.47	2.62	9	1
1:A:490:VAL:HG21	1:A:529:GLY:O	0.47	2.09	9	1
1:A:657:GLN:CD	1:A:658:ALA:N	0.47	2.68	9	1
1:A:436:ARG:NH2	1:A:569:PHE:CE1	0.47	2.83	8	1
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:HB2	0.47	2.10	8	1
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:CG2	0.47	2.63	8	1
1:A:487:ARG:O	1:A:491:LEU:HD12	0.47	2.10	3	1
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:N	0.47	2.62	2	1
1:A:652:THR:O	1:A:655:GLN:N	0.47	2.42	2	1
1:A:454:LEU:C	1:A:456:ARG:N	0.47	2.68	8	3
1:A:278:VAL:O	1:A:278:VAL:HG23	0.47	2.09	6	2
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:CG1	0.47	2.63	9	2
1:A:326:GLU:N	1:A:326:GLU:CD	0.47	2.69	6	1
1:A:132:ASN:O	1:A:132:ASN:CG	0.47	2.53	7	1
1:A:526:LEU:HD12	1:A:530:ALA:O	0.47	2.09	10	2
1:A:450:ASN:N	1:A:450:ASN:ND2	0.47	2.63	1	1
1:A:485:TYR:O	1:A:488:ASN:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:90:TYR:CZ	1:A:394:HIS:CD2	0.47	3.03	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:586:ASN:O	1:A:587:TRP:O	0.47	2.32	4	1
1:A:547:HIS:O	1:A:551:THR:N	0.47	2.48	10	1
1:A:193:VAL:HG13	1:A:219:TYR:CZ	0.47	2.43	10	1
1:A:526:LEU:CD2	1:A:530:ALA:O	0.47	2.63	8	1
1:A:515:MET:C	1:A:515:MET:SD	0.47	2.93	8	1
1:A:524:ASP:O	1:A:527:ARG:N	0.47	2.46	7	3
1:A:433:LEU:O	1:A:433:LEU:HD13	0.47	2.09	3	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:636:ARG:CZ	0.47	2.63	2	1
1:A:642:ILE:CG2	1:A:643:ALA:N	0.47	2.78	2	1
1:A:117:LEU:O	1:A:267:THR:HA	0.47	2.10	2	1
1:A:694:SER:OG	1:A:695:ASP:N	0.47	2.48	6	1
1:A:184:SER:O	1:A:187:ASP:OD1	0.47	2.33	7	3
1:A:91:LEU:O	1:A:92:VAL:CG1	0.47	2.62	1	1
1:A:406:PHE:CE2	1:A:410:GLU:CD	0.47	2.88	5	1
1:A:335:LEU:O	1:A:335:LEU:HD12	0.47	2.10	4	1
1:A:578:THR:HG22	1:A:579:ILE:H	0.47	1.70	10	1
1:A:419:THR:CG2	1:A:444:ASN:OD1	0.47	2.63	8	1
1:A:395:GLY:O	1:A:398:GLU:N	0.47	2.48	2	2
1:A:100:VAL:HG22	1:A:442:ALA:HB1	0.47	1.85	6	1
1:A:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.47	2.48	7	1
1:A:286:LEU:O	1:A:286:LEU:HD23	0.47	2.10	1	1
1:A:622:ASP:C	1:A:624:HIS:H	0.47	2.12	4	1
1:A:436:ARG:CB	1:A:496:CYS:O	0.47	2.63	4	1
1:A:95:PRO:O	1:A:436:ARG:NE	0.47	2.43	10	1
1:A:363:ASP:O	1:A:367:THR:OG1	0.47	2.30	10	1
1:A:435:LEU:O	1:A:437:SER:N	0.47	2.48	9	1
1:A:134:ARG:C	1:A:135:TRP:CD1	0.47	2.88	9	1
1:A:604:LEU:HD11	1:A:660:LEU:CD1	0.47	2.40	8	1
1:A:123:ASN:ND2	1:A:124:ALA:N	0.46	2.63	3	1
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD13	0.46	2.09	3	1
1:A:282:ASP:C	1:A:284:ILE:N	0.46	2.68	5	4
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:OD2	0.46	2.33	2	1
1:A:703:GLN:O	1:A:704:PRO:O	0.46	2.33	6	2
1:A:455:ASP:C	1:A:456:ARG:HE	0.46	2.14	7	1
1:A:406:PHE:C	1:A:406:PHE:CD1	0.46	2.87	7	1
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CD1	0.46	2.68	7	1
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:ND1	0.46	2.48	1	1
1:A:342:HIS:O	1:A:345:THR:N	0.46	2.41	10	2
1:A:587:TRP:CE3	1:A:591:GLU:CD	0.46	2.89	5	1
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:HG3	0.46	2.10	4	1
1:A:636:ARG:HH12	1:A:712:LEU:CD1	0.46	2.23	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:595:GLU:N	1:A:595:GLU:OE1	0.46	2.48	4	1
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:ND1	0.46	2.47	4	1
1:A:669:GLN:C	1:A:671:ASN:N	0.46	2.69	10	2
1:A:563:THR:O	1:A:564:GLU:CB	0.46	2.63	10	1
1:A:340:VAL:O	1:A:341:GLY:O	0.46	2.33	9	1
1:A:599:ASN:HD22	1:A:599:ASN:N	0.46	2.07	9	1
1:A:213:PRO:C	1:A:215:GLN:H	0.46	2.14	3	3
1:A:252:ASP:N	1:A:252:ASP:OD1	0.46	2.48	3	1
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:CG2	0.46	2.64	2	1
1:A:359:GLU:C	1:A:361:ILE:H	0.46	2.14	2	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:294:MET:SD	0.46	3.03	2	1
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:O	0.46	2.33	5	3
1:A:169:TRP:CZ3	1:A:172:ARG:NH2	0.46	2.83	6	1
1:A:169:TRP:CE3	1:A:172:ARG:NH2	0.46	2.84	6	1
1:A:343:LEU:CD1	1:A:343:LEU:H	0.46	2.23	1	1
1:A:67:TRP:CD1	1:A:81:TYR:CZ	0.46	3.02	5	1
1:A:512:PRO:C	1:A:514:LEU:N	0.46	2.66	9	2
1:A:370:ILE:HD12	1:A:370:ILE:N	0.46	2.25	5	1
1:A:583:GLU:OE1	1:A:645:TRP:CZ3	0.46	2.68	4	1
1:A:375:LEU:CD1	1:A:415:MET:SD	0.46	3.03	4	1
1:A:120:PRO:O	1:A:121:ALA:C	0.46	2.53	10	1
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:C	0.46	2.53	9	1
1:A:609:ARG:NE	1:A:670:GLN:OE1	0.46	2.48	9	1
1:A:622:ASP:O	1:A:670:GLN:NE2	0.46	2.48	3	1
1:A:318:HIS:N	1:A:318:HIS:CD2	0.46	2.83	3	1
1:A:132:ASN:ND2	1:A:315:ASP:OD1	0.46	2.49	2	1
1:A:265:ILE:HG22	1:A:265:ILE:O	0.46	2.10	2	1
1:A:202:LEU:C	1:A:204:ASN:H	0.46	2.14	6	5
1:A:249:GLY:C	1:A:251:ASP:N	0.46	2.68	7	1
1:A:406:PHE:CZ	1:A:410:GLU:CD	0.46	2.89	5	1
1:A:690:PHE:CD1	1:A:690:PHE:N	0.46	2.79	5	1
1:A:634:THR:O	1:A:637:ILE:O	0.46	2.34	5	1
1:A:431:THR:O	1:A:432:SER:CB	0.46	2.62	4	2
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:O	0.46	2.33	8	1
1:A:243:ASP:OD1	1:A:243:ASP:O	0.46	2.33	8	1
1:A:294:MET:C	1:A:296:GLY:H	0.46	2.14	3	1
1:A:233:ASN:OD1	1:A:234:ASN:ND2	0.46	2.49	2	1
1:A:339:ASN:N	1:A:339:ASN:OD1	0.46	2.48	2	1
1:A:406:PHE:O	1:A:408:ARG:N	0.46	2.48	10	2
1:A:116:GLN:OE1	1:A:116:GLN:C	0.46	2.53	1	1
1:A:284:ILE:CG2	1:A:285:LEU:N	0.46	2.78	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:434:ASN:O	1:A:436:ARG:N	0.46	2.49	5	1
1:A:587:TRP:CZ3	1:A:591:GLU:OE2	0.46	2.69	5	1
1:A:650:ILE:O	1:A:650:ILE:HG22	0.46	2.11	5	1
1:A:465:MET:C	1:A:465:MET:SD	0.46	2.94	5	1
1:A:78:LYS:NZ	1:A:82:LYS:CB	0.46	2.78	4	1
1:A:82:LYS:NZ	1:A:577:LEU:HD21	0.46	2.25	10	1
1:A:123:ASN:HB3	1:A:127:ALA:HB2	0.46	1.88	10	1
1:A:512:PRO:O	1:A:513:ASP:OD1	0.46	2.32	10	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:O	0.46	2.33	10	1
1:A:487:ARG:C	1:A:489:ASN:HD22	0.46	2.14	8	1
1:A:515:MET:O	1:A:518:MET:N	0.46	2.46	8	1
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CG	0.46	2.68	3	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:249:GLY:N	0.46	2.26	6	2
1:A:548:TYR:O	1:A:551:THR:O	0.46	2.34	7	2
1:A:484:ALA:HB1	1:A:572:LEU:HD23	0.46	1.87	2	1
1:A:493:GLY:O	1:A:495:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:8:SER:OG	1:A:9:ARG:N	0.46	2.47	5	2
1:A:618:SER:OG	1:A:630:GLU:N	0.46	2.42	6	1
1:A:425:MET:O	1:A:426:ASP:O	0.46	2.33	1	2
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:N	0.46	2.44	7	1
1:A:16:PHE:O	1:A:20:VAL:HG23	0.46	2.10	1	1
1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:N	0.46	2.68	5	1
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CB	0.46	2.64	5	1
1:A:451:THR:H	1:A:505:GLY:N	0.46	2.09	4	1
1:A:526:LEU:HA	1:A:530:ALA:HB3	0.46	1.86	4	1
1:A:372:LEU:O	1:A:372:LEU:HD23	0.46	2.10	4	1
1:A:201:GLN:OE1	1:A:202:LEU:O	0.46	2.33	10	1
1:A:123:ASN:CG	1:A:124:ALA:N	0.46	2.69	10	1
1:A:444:ASN:N	1:A:444:ASN:OD1	0.46	2.39	9	1
1:A:375:LEU:CD2	1:A:418:ASN:OD1	0.46	2.63	9	1
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HG2	0.46	1.88	3	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:293:LEU:C	0.46	2.74	3	2
1:A:490:VAL:HG13	1:A:494:LEU:HD12	0.46	1.85	3	2
1:A:105:ILE:CG2	1:A:110:THR:OG1	0.46	2.64	3	1
1:A:313:LEU:O	1:A:314:ASN:C	0.46	2.53	7	2
1:A:418:ASN:CG	1:A:419:THR:N	0.46	2.68	2	2
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:242:ILE:H	1:A:242:ILE:HD13	0.46	1.71	2	1
1:A:276:ALA:CB	1:A:611:VAL:O	0.46	2.63	7	1
1:A:644:ASN:HD22	1:A:644:ASN:H	0.46	1.54	5	1
1:A:25:LEU:N	1:A:26:PRO:HD2	0.46	2.25	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:TRP:CE3	1:A:314:ASN:OD1	0.46	2.69	5	1
1:A:153:ALA:HB3	1:A:161:GLN:HE22	0.46	1.70	5	1
1:A:125:ARG:O	1:A:127:ALA:N	0.46	2.49	5	1
1:A:635:LEU:C	1:A:635:LEU:CD1	0.46	2.84	4	1
1:A:44:HIS:O	1:A:48:PRO:CD	0.46	2.63	4	2
1:A:564:GLU:C	1:A:566:ASN:N	0.46	2.67	10	2
1:A:549:HIS:C	1:A:551:THR:N	0.46	2.69	10	1
1:A:347:PRO:O	1:A:348:VAL:HG23	0.46	2.10	10	2
1:A:582:ALA:C	1:A:584:ASN:H	0.46	2.14	9	1
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:NZ	0.46	2.26	9	1
1:A:65:ASP:N	1:A:65:ASP:OD1	0.46	2.46	9	1
1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:OD1	0.46	2.46	8	1
1:A:449:ILE:HG21	1:A:503:GLN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:416:ALA:CB	1:A:417:PRO:CD	0.46	2.92	3	1
1:A:375:LEU:CD2	1:A:375:LEU:N	0.46	2.68	2	1
1:A:526:LEU:O	1:A:529:GLY:N	0.46	2.37	6	2
1:A:649:GLY:C	1:A:651:LEU:N	0.46	2.68	8	2
1:A:550:GLN:NE2	1:A:550:GLN:C	0.46	2.69	1	1
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:CG	0.46	2.64	5	1
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:N	0.46	2.49	5	1
1:A:205:GLY:O	1:A:206:LYS:C	0.46	2.54	4	1
1:A:355:ASN:HD22	1:A:355:ASN:N	0.46	2.07	4	1
1:A:356:GLU:OE2	1:A:356:GLU:O	0.46	2.34	4	1
1:A:669:GLN:O	1:A:671:ASN:N	0.46	2.48	4	2
1:A:653:LYS:CD	1:A:653:LYS:N	0.46	2.79	4	1
1:A:498:LEU:HD22	1:A:499:ARG:H	0.46	1.70	8	1
1:A:330:HIS:C	1:A:332:ARG:N	0.46	2.69	8	1
1:A:119:VAL:O	1:A:120:PRO:O	0.46	2.32	3	1
1:A:552:ASN:HD22	1:A:554:GLN:H	0.46	1.53	3	1
1:A:435:LEU:O	1:A:438:CYS:SG	0.46	2.70	3	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:696:LEU:N	0.46	2.26	3	1
1:A:279:ASP:C	1:A:281:GLU:N	0.46	2.69	2	2
1:A:132:ASN:HD22	1:A:132:ASN:N	0.46	2.08	2	2
1:A:506:LYS:NZ	1:A:533:ALA:HB1	0.46	2.25	6	1
1:A:357:ILE:N	1:A:358:PRO:HD3	0.46	2.18	1	2
1:A:234:ASN:CG	1:A:548:TYR:CE2	0.46	2.89	6	1
1:A:365:VAL:C	1:A:367:THR:N	0.46	2.66	6	1
1:A:695:ASP:O	1:A:698:PHE:N	0.46	2.49	10	2
1:A:711:LEU:CD1	1:A:712:LEU:N	0.46	2.79	7	1
1:A:249:GLY:C	1:A:251:ASP:H	0.46	2.14	7	1
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:317:ARG:NH2	0.46	2.84	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:THR:OG1	1:A:372:LEU:HD23	0.46	2.10	5	1
1:A:363:ASP:O	1:A:367:THR:N	0.46	2.39	10	2
1:A:278:VAL:O	1:A:717:LEU:HD21	0.46	2.11	4	2
1:A:274:SER:O	1:A:610:TRP:CZ2	0.46	2.69	10	1
1:A:148:ILE:CD1	1:A:166:VAL:HG22	0.46	2.40	10	1
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:C	0.46	2.53	9	1
1:A:416:ALA:O	1:A:418:ASN:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:7:GLN:HB2	1:A:12:ILE:HD11	0.46	1.88	3	1
1:A:119:VAL:O	1:A:120:PRO:C	0.46	2.54	3	1
1:A:265:ILE:N	1:A:265:ILE:HD13	0.46	2.25	3	1
1:A:239:GLU:OE2	1:A:317:ARG:NH1	0.46	2.49	3	1
1:A:425:MET:O	1:A:427:GLU:N	0.46	2.49	2	1
1:A:7:GLN:O	1:A:8:SER:C	0.46	2.52	6	2
1:A:426:ASP:OD2	1:A:428:GLU:O	0.46	2.34	7	1
1:A:96:GLU:O	1:A:436:ARG:NH2	0.46	2.42	5	1
1:A:402:ALA:O	1:A:406:PHE:CB	0.46	2.64	5	1
1:A:262:GLU:CD	1:A:262:GLU:N	0.46	2.66	5	1
1:A:451:THR:HG22	1:A:451:THR:O	0.46	2.10	4	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:CB	0.46	2.79	4	1
1:A:337:ILE:O	1:A:389:VAL:HG23	0.46	2.11	9	1
1:A:94:GLN:OE1	1:A:95:PRO:O	0.46	2.34	9	1
1:A:365:VAL:O	1:A:368:GLY:N	0.46	2.45	8	1
1:A:439:ILE:HD12	1:A:498:LEU:CD2	0.46	2.40	3	1
1:A:272:GLU:CD	1:A:272:GLU:N	0.46	2.69	3	1
1:A:116:GLN:O	1:A:535:VAL:HG22	0.46	2.11	2	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:184:SER:HG	0.46	2.13	2	1
1:A:383:THR:OG1	1:A:387:TYR:CE2	0.46	2.61	6	1
1:A:464:VAL:C	1:A:466:GLU:N	0.46	2.69	6	1
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:NE2	0.46	2.64	1	1
1:A:367:THR:HG23	1:A:368:GLY:N	0.46	2.25	5	1
1:A:430:ARG:C	1:A:432:SER:N	0.46	2.68	5	1
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:OD1	0.46	2.35	4	3
1:A:275:VAL:CG2	1:A:276:ALA:N	0.46	2.78	4	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:ILE:CD1	0.46	2.64	10	1
1:A:462:HIS:CD2	1:A:705:ASN:ND2	0.46	2.84	9	1
1:A:394:HIS:NE2	1:A:441:GLN:NE2	0.45	2.64	3	1
1:A:423:GLY:HA2	1:A:448:PHE:HB2	0.45	1.87	3	1
1:A:445:ARG:HD3	1:A:445:ARG:H	0.45	1.71	3	1
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:CD1	0.45	2.79	3	1
1:A:688:CYS:O	1:A:690:PHE:N	0.45	2.49	6	1
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:ND2	0.45	2.46	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:691:LYS:O	1:A:693:ALA:N	0.45	2.49	7	1
1:A:198:LEU:HD12	1:A:198:LEU:N	0.45	2.26	9	3
1:A:366:MET:C	1:A:368:GLY:N	0.45	2.68	1	2
1:A:131:ALA:C	1:A:133:ALA:H	0.45	2.15	1	1
1:A:714:ALA:O	1:A:716:ARG:N	0.45	2.49	10	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CD1	0.45	2.69	8	1
1:A:570:GLU:OE1	1:A:570:GLU:CA	0.45	2.63	8	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:112:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:SER:C	0.45	2.54	5	3
1:A:269:LEU:N	1:A:269:LEU:HD23	0.45	2.26	3	1
1:A:412:MET:C	1:A:412:MET:SD	0.45	2.94	3	1
1:A:503:GLN:CD	1:A:503:GLN:N	0.45	2.70	5	2
1:A:77:ASP:O	1:A:77:ASP:OD1	0.45	2.34	2	1
1:A:698:PHE:C	1:A:700:GLY:H	0.45	2.14	2	2
1:A:338:ARG:HH22	1:A:454:LEU:CD1	0.45	2.24	6	1
1:A:655:GLN:NE2	1:A:656:VAL:N	0.45	2.64	6	1
1:A:99:THR:O	1:A:101:GLU:OE1	0.45	2.34	6	1
1:A:630:GLU:CG	1:A:634:THR:OG1	0.45	2.64	4	1
1:A:637:ILE:CG2	1:A:638:SER:N	0.45	2.79	4	1
1:A:583:GLU:C	1:A:585:ALA:N	0.45	2.70	10	1
1:A:397:GLN:NE2	1:A:401:PHE:CZ	0.45	2.84	10	1
1:A:16:PHE:CG	1:A:284:ILE:CD1	0.45	2.99	9	1
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:HZ2	0.45	1.72	9	1
1:A:220:ARG:NH2	1:A:318:HIS:O	0.45	2.49	9	1
1:A:191:PHE:CE2	1:A:256:ILE:HD11	0.45	2.46	9	1
1:A:228:CYS:SG	1:A:240:LEU:O	0.45	2.70	3	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:215:GLN:NE2	0.45	2.26	2	1
1:A:604:LEU:HD23	1:A:604:LEU:O	0.45	2.10	2	1
1:A:425:MET:SD	1:A:450:ASN:OD1	0.45	2.74	2	1
1:A:493:GLY:C	1:A:495:PHE:N	0.45	2.69	6	1
1:A:343:LEU:C	1:A:345:THR:N	0.45	2.69	6	1
1:A:270:ASP:HB3	1:A:274:SER:H	0.45	1.71	6	1
1:A:234:ASN:CB	1:A:549:HIS:CD2	0.45	2.99	6	1
1:A:134:ARG:NE	1:A:330:HIS:O	0.45	2.47	7	1
1:A:35:PHE:C	1:A:37:ARG:N	0.45	2.69	7	1
1:A:341:GLY:C	1:A:343:LEU:N	0.45	2.70	7	1
1:A:341:GLY:O	1:A:343:LEU:N	0.45	2.49	7	1
1:A:576:LEU:O	1:A:576:LEU:HD13	0.45	2.11	10	2
1:A:459:ASP:O	1:A:460:GLU:C	0.45	2.55	10	2
1:A:457:THR:C	1:A:459:ASP:N	0.45	2.70	4	2
1:A:550:GLN:O	1:A:550:GLN:CG	0.45	2.65	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:427:GLU:OE2	1:A:493:GLY:CA	0.45	2.64	10	1
1:A:411:THR:CG2	1:A:412:MET:N	0.45	2.80	10	1
1:A:583:GLU:O	1:A:585:ALA:N	0.45	2.49	10	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:C	0.45	2.54	10	1
1:A:67:TRP:O	1:A:68:HIS:C	0.45	2.53	8	1
1:A:53:LEU:O	1:A:53:LEU:HD23	0.45	2.11	6	1
1:A:612:GLU:CA	1:A:612:GLU:OE1	0.45	2.64	7	1
1:A:563:THR:CG2	1:A:564:GLU:N	0.45	2.77	8	2
1:A:279:ASP:CG	1:A:280:ALA:N	0.45	2.70	5	1
1:A:455:ASP:C	1:A:457:THR:N	0.45	2.68	8	3
1:A:448:PHE:O	1:A:448:PHE:CD1	0.45	2.70	5	1
1:A:582:ALA:O	1:A:584:ASN:N	0.45	2.49	9	1
1:A:149:PRO:O	1:A:150:GLN:O	0.45	2.35	9	1
1:A:151:GLU:OE1	1:A:619:LYS:NZ	0.45	2.48	8	1
1:A:428:GLU:OE1	1:A:428:GLU:O	0.45	2.35	8	1
1:A:504:ILE:HD12	1:A:504:ILE:N	0.45	2.25	3	1
1:A:421:LYS:HB3	1:A:447:ALA:HB3	0.45	1.89	3	1
1:A:636:ARG:NE	1:A:708:THR:OG1	0.45	2.50	3	1
1:A:496:CYS:O	1:A:497:GLY:C	0.45	2.55	2	2
1:A:498:LEU:CB	1:A:502:ALA:HB2	0.45	2.41	2	1
1:A:150:GLN:OE1	1:A:627:ALA:CB	0.45	2.65	2	1
1:A:179:PRO:O	1:A:180:LEU:O	0.45	2.34	8	2
1:A:687:SER:O	1:A:689:ALA:N	0.45	2.50	6	1
1:A:517:ASP:O	1:A:520:SER:N	0.45	2.48	6	1
1:A:166:VAL:O	1:A:170:VAL:HG23	0.45	2.12	6	1
1:A:456:ARG:CD	1:A:456:ARG:N	0.45	2.79	7	1
1:A:57:ARG:HH11	1:A:392:LYS:NZ	0.45	2.10	7	1
1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:NE	0.45	2.08	1	1
1:A:393:MET:CB	1:A:438:CYS:SG	0.45	3.05	1	1
1:A:485:TYR:CE1	1:A:489:ASN:ND2	0.45	2.85	5	1
1:A:431:THR:O	1:A:432:SER:O	0.45	2.35	5	1
1:A:270:ASP:O	1:A:338:ARG:O	0.45	2.34	4	1
1:A:449:ILE:HG21	1:A:502:ALA:CB	0.45	2.40	9	1
1:A:594:GLN:CA	1:A:594:GLN:OE1	0.45	2.65	9	1
1:A:527:ARG:N	1:A:527:ARG:CD	0.45	2.79	9	1
1:A:496:CYS:O	1:A:498:LEU:HD13	0.45	2.12	8	1
1:A:637:ILE:CG2	1:A:637:ILE:O	0.45	2.63	8	1
1:A:539:THR:O	1:A:543:LEU:CD1	0.45	2.65	8	1
1:A:659:SER:O	1:A:663:MET:CE	0.45	2.64	8	1
1:A:397:GLN:N	1:A:397:GLN:CD	0.45	2.69	8	1
1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:CB	0.45	2.65	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:601:GLN:OE1	1:A:601:GLN:O	0.45	2.34	3	1
1:A:177:SER:OG	1:A:549:HIS:ND1	0.45	2.41	3	1
1:A:282:ASP:O	1:A:283:LYS:C	0.45	2.54	4	7
1:A:425:MET:O	1:A:427:GLU:OE2	0.45	2.33	2	1
1:A:297:THR:O	1:A:297:THR:HG22	0.45	2.12	6	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:452:GLY:N	0.45	2.50	6	1
1:A:498:LEU:CD1	1:A:498:LEU:H	0.45	2.21	6	2
1:A:632:ARG:HH11	1:A:632:ARG:CG	0.45	2.23	7	1
1:A:147:ILE:HD12	1:A:543:LEU:HD11	0.45	1.88	4	1
1:A:491:LEU:C	1:A:493:GLY:N	0.45	2.68	10	1
1:A:249:GLY:O	1:A:252:ASP:O	0.45	2.35	10	2
1:A:283:LYS:NZ	1:A:348:VAL:HG22	0.45	2.27	10	1
1:A:393:MET:SD	1:A:393:MET:C	0.45	2.95	9	1
1:A:37:ARG:O	1:A:41:GLU:OE1	0.45	2.35	9	1
1:A:330:HIS:C	1:A:332:ARG:H	0.45	2.14	8	1
1:A:520:SER:O	1:A:524:ASP:OD2	0.45	2.35	8	1
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:CB	0.45	2.64	3	3
1:A:143:TYR:CD1	1:A:144:GLY:N	0.45	2.85	2	2
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:OD1	0.45	2.34	2	2
1:A:721:GLU:O	1:A:723:HIS:N	0.45	2.49	2	1
1:A:719:GLU:O	1:A:723:HIS:N	0.45	2.50	6	1
1:A:344:MET:SD	1:A:713:HIS:ND1	0.45	2.89	7	1
1:A:518:MET:SD	1:A:522:LYS:CE	0.45	3.05	7	1
1:A:38:ASN:HD21	1:A:412:MET:CB	0.45	2.24	7	1
1:A:539:THR:C	1:A:541:ALA:N	0.45	2.70	1	1
1:A:421:LYS:O	1:A:422:MET:CG	0.45	2.64	5	2
1:A:500:GLY:O	1:A:557:GLN:OE1	0.45	2.34	5	1
1:A:441:GLN:NE2	1:A:441:GLN:C	0.45	2.70	4	1
1:A:622:ASP:O	1:A:624:HIS:N	0.45	2.44	4	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:CA	0.45	2.79	10	1
1:A:276:ALA:HB2	1:A:709:GLU:OE2	0.45	2.10	9	1
1:A:600:VAL:CG2	1:A:601:GLN:H	0.45	2.24	9	1
1:A:695:ASP:O	1:A:699:LEU:N	0.45	2.36	9	1
1:A:219:TYR:CD2	1:A:220:ARG:N	0.45	2.85	3	1
1:A:379:LYS:O	1:A:380:ASN:OD1	0.45	2.35	3	1
1:A:465:MET:O	1:A:467:ALA:N	0.45	2.50	7	2
1:A:297:THR:CG2	1:A:332:ARG:NH2	0.45	2.80	5	1
1:A:699:LEU:N	1:A:699:LEU:CD2	0.45	2.79	5	1
1:A:133:ALA:O	1:A:135:TRP:N	0.45	2.50	4	1
1:A:393:MET:C	1:A:393:MET:SD	0.45	2.95	10	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:69:ARG:NE	0.45	2.49	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:456:ARG:O	1:A:458:GLY:N	0.45	2.50	8	1
1:A:385:SER:O	1:A:387:TYR:CE1	0.45	2.70	3	1
1:A:298:LEU:N	1:A:298:LEU:CD1	0.45	2.78	3	2
1:A:650:ILE:N	1:A:650:ILE:CD1	0.45	2.78	2	1
1:A:524:ASP:OD2	1:A:527:ARG:NH1	0.45	2.42	2	1
1:A:357:ILE:O	1:A:357:ILE:CG1	0.45	2.64	6	1
1:A:110:THR:O	1:A:111:SER:OG	0.45	2.35	7	1
1:A:270:ASP:OD1	1:A:271:CYS:N	0.45	2.50	7	1
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:NE	0.45	2.49	7	1
1:A:130:ALA:O	1:A:133:ALA:N	0.45	2.42	9	3
1:A:44:HIS:O	1:A:48:PRO:CG	0.45	2.65	1	1
1:A:624:HIS:C	1:A:626:VAL:N	0.45	2.70	1	2
1:A:624:HIS:O	1:A:626:VAL:N	0.45	2.50	1	2
1:A:176:GLU:CD	1:A:176:GLU:N	0.45	2.71	1	2
1:A:273:ASP:O	1:A:274:SER:OG	0.45	2.34	1	1
1:A:234:ASN:OD1	1:A:549:HIS:O	0.45	2.35	5	1
1:A:340:VAL:HG21	1:A:345:THR:OG1	0.45	2.11	10	1
1:A:230:LEU:CD1	1:A:230:LEU:C	0.45	2.81	10	1
1:A:595:GLU:OE1	1:A:595:GLU:N	0.45	2.50	10	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:HB2	0.45	2.10	3	1
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:VAL:O	0.45	2.12	3	1
1:A:591:GLU:O	1:A:595:GLU:OE1	0.45	2.34	4	3
1:A:587:TRP:CH2	1:A:645:TRP:CH2	0.45	3.05	2	1
1:A:508:MET:SD	1:A:534:TRP:CE3	0.45	3.10	6	1
1:A:367:THR:O	1:A:369:ALA:N	0.45	2.50	6	1
1:A:19:PHE:HB2	1:A:284:ILE:HD11	0.45	1.88	7	1
1:A:641:HIS:O	1:A:642:ILE:C	0.45	2.55	7	1
1:A:434:ASN:C	1:A:436:ARG:N	0.45	2.70	5	2
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:HD12	0.45	2.32	4	1
1:A:40:ASP:O	1:A:44:HIS:CD2	0.45	2.70	4	1
1:A:129:ASN:HD22	1:A:129:ASN:N	0.45	2.09	10	1
1:A:459:ASP:O	1:A:461:MET:N	0.45	2.50	10	1
1:A:336:PHE:CE1	1:A:389:VAL:HG22	0.45	2.47	9	1
1:A:212:THR:OG1	1:A:212:THR:O	0.45	2.31	8	1
1:A:150:GLN:NE2	1:A:162:ARG:NE	0.44	2.65	3	1
1:A:238:ILE:HG23	1:A:261:VAL:HG12	0.44	1.88	7	2
1:A:439:ILE:O	1:A:440:ALA:C	0.44	2.55	8	5
1:A:134:ARG:HE	1:A:332:ARG:C	0.44	2.15	6	1
1:A:162:ARG:HH21	1:A:165:GLN:NE2	0.44	2.10	6	1
1:A:705:ASN:ND2	1:A:706:GLY:N	0.44	2.65	6	1
1:A:600:VAL:O	1:A:601:GLN:C	0.44	2.55	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:285:LEU:HD23	1:A:285:LEU:O	0.44	2.12	1	1
1:A:532:THR:HG22	1:A:533:ALA:N	0.44	2.27	1	1
1:A:546:LEU:N	1:A:546:LEU:HD12	0.44	2.27	5	1
1:A:451:THR:HG21	1:A:534:TRP:HB3	0.44	1.88	4	1
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:HG23	0.44	2.27	4	1
1:A:334:LEU:HD12	1:A:382:ARG:HH21	0.44	1.70	10	1
1:A:19:PHE:O	1:A:23:GLU:CB	0.44	2.65	8	2
1:A:54:LEU:CD2	1:A:342:HIS:CE1	0.44	3.00	8	1
1:A:346:ILE:CD1	1:A:346:ILE:N	0.44	2.80	8	1
1:A:524:ASP:OD1	1:A:525:GLN:N	0.44	2.50	8	1
1:A:547:HIS:O	1:A:547:HIS:CD2	0.44	2.71	3	1
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:HD12	0.44	2.27	3	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:53:LEU:N	0.44	2.79	2	1
1:A:137:SER:OG	1:A:140:ASP:OD2	0.44	2.35	8	2
1:A:36:TRP:O	1:A:36:TRP:CD1	0.44	2.71	2	1
1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:CB	0.44	2.64	2	1
1:A:121:ALA:HB2	1:A:270:ASP:O	0.44	2.12	6	1
1:A:184:SER:OG	1:A:187:ASP:OD2	0.44	2.35	10	2
1:A:465:MET:C	1:A:467:ALA:N	0.44	2.70	7	2
1:A:202:LEU:HD11	1:A:208:THR:HG21	0.44	1.88	7	1
1:A:625:ASN:O	1:A:626:VAL:O	0.44	2.35	4	2
1:A:511:MET:H	1:A:512:PRO:HD3	0.44	1.72	1	1
1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:OD1	0.44	2.35	5	1
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:OD1	0.44	2.36	4	1
1:A:78:LYS:HZ3	1:A:82:LYS:HB2	0.44	1.72	4	1
1:A:563:THR:O	1:A:564:GLU:HB3	0.44	2.12	10	1
1:A:436:ARG:CD	1:A:436:ARG:N	0.44	2.80	9	1
1:A:452:GLY:N	1:A:505:GLY:O	0.44	2.49	9	1
1:A:695:ASP:OD2	1:A:715:TRP:CE2	0.44	2.71	3	1
1:A:28:THR:C	1:A:30:LEU:N	0.44	2.69	3	2
1:A:32:ALA:O	1:A:36:TRP:N	0.44	2.50	3	1
1:A:31:ASP:N	1:A:31:ASP:OD1	0.44	2.50	2	1
1:A:565:PHE:C	1:A:567:ALA:H	0.44	2.16	6	2
1:A:52:GLN:O	1:A:56:GLU:OE1	0.44	2.35	5	2
1:A:233:ASN:O	1:A:549:HIS:CE1	0.44	2.70	6	1
1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:OG1	0.44	2.36	6	1
1:A:427:GLU:O	1:A:428:GLU:O	0.44	2.35	6	1
1:A:330:HIS:NE2	1:A:334:LEU:HD12	0.44	2.27	1	1
1:A:35:PHE:O	1:A:39:PHE:CB	0.44	2.65	1	1
1:A:314:ASN:ND2	1:A:314:ASN:O	0.44	2.49	1	1
1:A:340:VAL:HG22	1:A:341:GLY:H	0.44	1.72	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:294:MET:CG	1:A:370:ILE:HD12	0.44	2.42	10	1
1:A:333:SER:C	1:A:382:ARG:HH22	0.44	2.16	10	1
1:A:586:ASN:H	1:A:586:ASN:HD22	0.44	1.54	10	1
1:A:658:ALA:O	1:A:661:GLU:OE2	0.44	2.34	10	1
1:A:644:ASN:OD1	1:A:644:ASN:N	0.44	2.49	10	1
1:A:662:ASN:ND2	1:A:662:ASN:H	0.44	2.10	9	1
1:A:190:ALA:C	1:A:191:PHE:CG	0.44	2.89	8	1
1:A:67:TRP:O	1:A:71:ASN:OD1	0.44	2.36	3	1
1:A:584:ASN:CG	1:A:585:ALA:H	0.44	2.16	2	1
1:A:426:ASP:N	1:A:426:ASP:OD1	0.44	2.50	2	1
1:A:533:ALA:CB	1:A:544:HIS:CE1	0.44	2.99	7	1
1:A:250:LYS:NZ	1:A:250:LYS:CB	0.44	2.80	7	1
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CD1	0.44	2.80	1	1
1:A:57:ARG:H	1:A:57:ARG:HE	0.44	1.53	1	1
1:A:337:ILE:CG2	1:A:338:ARG:N	0.44	2.80	1	1
1:A:319:TYR:O	1:A:326:GLU:OE2	0.44	2.35	1	1
1:A:665:LYS:O	1:A:669:GLN:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:623:ILE:HD13	1:A:623:ILE:H	0.44	1.73	5	1
1:A:542:THR:HG23	1:A:543:LEU:N	0.44	2.26	4	2
1:A:297:THR:O	1:A:297:THR:OG1	0.44	2.36	4	2
1:A:663:MET:O	1:A:664:ALA:C	0.44	2.56	9	4
1:A:430:ARG:NH2	1:A:463:SER:OG	0.44	2.50	10	1
1:A:655:GLN:NE2	1:A:655:GLN:O	0.44	2.50	10	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:534:TRP:HE1	0.44	2.25	10	2
1:A:481:TRP:CG	1:A:578:THR:HG21	0.44	2.48	2	1
1:A:108:GLU:CG	1:A:109:ILE:N	0.44	2.81	6	2
1:A:198:LEU:HD21	1:A:229:ILE:HD11	0.44	1.89	6	1
1:A:286:LEU:C	1:A:286:LEU:HD23	0.44	2.33	1	1
1:A:429:ARG:NH1	1:A:460:GLU:OE2	0.44	2.51	1	1
1:A:315:ASP:O	1:A:316:ASP:C	0.44	2.56	1	1
1:A:245:ASN:ND2	1:A:245:ASN:O	0.44	2.50	1	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:C	0.44	2.56	10	1
1:A:713:HIS:CD2	1:A:714:ALA:N	0.44	2.85	9	1
1:A:105:ILE:C	1:A:107:SER:N	0.44	2.71	9	1
1:A:94:GLN:O	1:A:95:PRO:O	0.44	2.35	9	1
1:A:132:ASN:OD1	1:A:332:ARG:NE	0.44	2.50	8	1
1:A:622:ASP:OD1	1:A:622:ASP:N	0.44	2.48	8	1
1:A:115:PRO:HG2	1:A:545:ALA:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:215:GLN:OE1	1:A:232:LYS:O	0.44	2.36	8	1
1:A:71:ASN:OD1	1:A:71:ASN:O	0.44	2.35	3	1
1:A:358:PRO:O	1:A:361:ILE:CG2	0.44	2.66	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:464:VAL:O	1:A:465:MET:C	0.44	2.54	6	2
1:A:197:GLN:OE1	1:A:198:LEU:O	0.44	2.35	6	1
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:O	0.44	2.36	8	2
1:A:366:MET:O	1:A:369:ALA:N	0.44	2.50	7	1
1:A:517:ASP:OD2	1:A:521:GLN:NE2	0.44	2.51	7	1
1:A:424:ILE:HG22	1:A:424:ILE:O	0.44	2.12	1	1
1:A:189:VAL:O	1:A:255:HIS:ND1	0.44	2.50	1	1
1:A:427:GLU:CD	1:A:427:GLU:N	0.44	2.70	1	1
1:A:391:PRO:C	1:A:393:MET:N	0.44	2.70	1	1
1:A:277:ALA:C	1:A:278:VAL:CG2	0.44	2.86	5	1
1:A:103:THR:O	1:A:104:GLY:C	0.44	2.56	5	1
1:A:609:ARG:NH1	1:A:617:CYS:O	0.44	2.51	4	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:532:THR:O	0.44	2.36	4	1
1:A:101:GLU:O	1:A:101:GLU:OE1	0.44	2.35	9	1
1:A:560:ILE:O	1:A:563:THR:OG1	0.44	2.31	9	1
1:A:394:HIS:CE1	1:A:441:GLN:NE2	0.44	2.86	3	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:632:ARG:NH2	0.44	2.86	2	1
1:A:272:GLU:OE2	1:A:277:ALA:O	0.44	2.36	6	1
1:A:367:THR:O	1:A:368:GLY:C	0.44	2.56	6	1
1:A:361:ILE:O	1:A:362:LEU:C	0.44	2.56	7	3
1:A:249:GLY:O	1:A:251:ASP:N	0.44	2.50	7	1
1:A:245:ASN:O	1:A:245:ASN:ND2	0.44	2.51	7	1
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:CB	0.44	2.65	7	2
1:A:276:ALA:HB1	1:A:713:HIS:NE2	0.44	2.27	1	1
1:A:703:GLN:OE1	1:A:707:TYR:O	0.44	2.36	8	2
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:CD1	0.44	2.80	4	1
1:A:375:LEU:HD21	1:A:419:THR:HG21	0.44	1.89	4	1
1:A:439:ILE:HG23	1:A:440:ALA:N	0.44	2.27	10	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:CD1	0.44	2.47	10	1
1:A:291:LEU:HD23	1:A:370:ILE:HG12	0.44	1.90	9	1
1:A:241:GLN:HE22	1:A:243:ASP:CB	0.44	2.25	8	1
1:A:282:ASP:OD1	1:A:283:LYS:N	0.44	2.51	8	1
1:A:695:ASP:CG	1:A:715:TRP:CZ2	0.44	2.91	3	1
1:A:430:ARG:O	1:A:460:GLU:OE1	0.44	2.36	3	1
1:A:433:LEU:C	1:A:433:LEU:CD1	0.44	2.86	3	1
1:A:278:VAL:O	1:A:279:ASP:O	0.44	2.35	2	1
1:A:421:LYS:C	1:A:422:MET:SD	0.44	2.96	6	1
1:A:504:ILE:H	1:A:531:ASN:HD22	0.44	1.56	6	1
1:A:711:LEU:HG	1:A:712:LEU:N	0.44	2.28	6	1
1:A:594:GLN:O	1:A:597:ASP:OD1	0.44	2.36	1	2
1:A:669:GLN:C	1:A:669:GLN:NE2	0.44	2.71	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:461:MET:O	1:A:463:SER:N	0.44	2.50	7	2
1:A:498:LEU:HD22	1:A:502:ALA:HB2	0.44	1.88	1	1
1:A:114:GLY:O	1:A:116:GLN:OE1	0.44	2.35	5	1
1:A:687:SER:C	1:A:689:ALA:N	0.44	2.72	5	1
1:A:585:ALA:C	1:A:586:ASN:HD22	0.44	2.16	4	1
1:A:96:GLU:C	1:A:436:ARG:HH21	0.44	2.17	10	1
1:A:96:GLU:CD	1:A:96:GLU:N	0.44	2.72	10	1
1:A:337:ILE:O	1:A:389:VAL:N	0.44	2.41	9	1
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CE1	0.44	2.71	8	1
1:A:604:LEU:HD22	1:A:667:VAL:HG21	0.44	1.89	8	1
1:A:123:ASN:C	1:A:125:ARG:N	0.44	2.69	2	1
1:A:444:ASN:HD22	1:A:445:ARG:H	0.44	1.55	6	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:575:ASP:OD2	0.44	2.48	6	1
1:A:339:ASN:HD22	1:A:339:ASN:H	0.44	1.53	7	1
1:A:204:ASN:HD22	1:A:204:ASN:N	0.44	2.11	7	1
1:A:709:GLU:O	1:A:711:LEU:N	0.44	2.51	8	2
1:A:38:ASN:OD1	1:A:412:MET:SD	0.44	2.76	7	1
1:A:506:LYS:O	1:A:530:ALA:HB1	0.44	2.13	7	1
1:A:572:LEU:O	1:A:576:LEU:CB	0.44	2.66	1	1
1:A:711:LEU:O	1:A:714:ALA:HB3	0.44	2.13	1	1
1:A:442:ALA:C	1:A:444:ASN:N	0.44	2.71	9	2
1:A:278:VAL:HG13	1:A:717:LEU:HD21	0.44	1.89	5	1
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:CA	0.44	2.66	5	1
1:A:208:THR:OG1	1:A:209:THR:N	0.44	2.50	5	1
1:A:494:LEU:C	1:A:494:LEU:HD12	0.44	2.32	4	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:114:GLY:N	0.44	2.66	10	1
1:A:669:GLN:C	1:A:671:ASN:H	0.44	2.16	10	1
1:A:514:LEU:O	1:A:517:ASP:OD1	0.44	2.36	10	1
1:A:428:GLU:O	1:A:460:GLU:OE1	0.44	2.36	10	1
1:A:289:ASN:ND2	1:A:297:THR:HG21	0.44	2.28	9	1
1:A:184:SER:CA	1:A:187:ASP:OD1	0.44	2.66	8	1
1:A:170:VAL:O	1:A:173:PHE:N	0.44	2.50	8	1
1:A:706:GLY:O	1:A:707:TYR:C	0.43	2.55	3	1
1:A:111:SER:O	1:A:112:GLN:OE1	0.43	2.36	2	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:274:SER:N	0.43	2.51	2	2
1:A:645:TRP:O	1:A:646:LEU:C	0.43	2.56	8	2
1:A:112:GLN:OE1	1:A:237:HIS:CE1	0.43	2.71	6	1
1:A:442:ALA:O	1:A:443:ARG:C	0.43	2.55	7	1
1:A:351:ASP:OD1	1:A:351:ASP:N	0.43	2.50	7	1
1:A:613:GLN:C	1:A:615:ILE:N	0.43	2.70	7	1
1:A:631:ASP:OD1	1:A:631:ASP:N	0.43	2.51	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:296:GLY:O	1:A:297:THR:OG1	0.43	2.35	5	1
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:O	0.43	2.36	5	1
1:A:544:HIS:O	1:A:544:HIS:ND1	0.43	2.51	5	1
1:A:699:LEU:N	1:A:699:LEU:HD22	0.43	2.28	5	1
1:A:460:GLU:OE1	1:A:460:GLU:O	0.43	2.36	5	1
1:A:192:LYS:HZ3	1:A:199:ARG:HE	0.43	1.56	4	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:81:TYR:CG	0.43	2.48	4	1
1:A:698:PHE:O	1:A:701:VAL:HG22	0.43	2.12	9	1
1:A:606:TYR:CD1	1:A:606:TYR:O	0.43	2.70	8	1
1:A:376:LYS:C	1:A:376:LYS:CD	0.43	2.86	8	1
1:A:452:GLY:O	1:A:485:TYR:OH	0.43	2.36	8	1
1:A:28:THR:C	1:A:30:LEU:H	0.43	2.16	10	2
1:A:531:ASN:O	1:A:532:THR:CG2	0.43	2.65	2	1
1:A:705:ASN:C	1:A:707:TYR:N	0.43	2.71	2	1
1:A:721:GLU:C	1:A:723:HIS:N	0.43	2.70	2	1
1:A:358:PRO:O	1:A:361:ILE:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:576:LEU:C	1:A:578:THR:H	0.43	2.14	6	2
1:A:711:LEU:O	1:A:715:TRP:N	0.43	2.42	7	1
1:A:625:ASN:O	1:A:626:VAL:C	0.43	2.55	7	1
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD1	0.43	2.81	1	1
1:A:130:ALA:O	1:A:133:ALA:HB3	0.43	2.13	1	1
1:A:371:ALA:O	1:A:372:LEU:C	0.43	2.55	5	2
1:A:614:GLY:O	1:A:615:ILE:HG23	0.43	2.13	8	2
1:A:606:TYR:CE1	1:A:620:VAL:HG21	0.43	2.47	5	1
1:A:557:GLN:O	1:A:561:ALA:CB	0.43	2.66	5	1
1:A:634:THR:HG23	1:A:635:LEU:N	0.43	2.29	5	1
1:A:698:PHE:C	1:A:700:GLY:N	0.43	2.71	5	2
1:A:174:LEU:HD21	1:A:259:VAL:HG11	0.43	1.89	5	1
1:A:606:TYR:CZ	1:A:631:ASP:O	0.43	2.71	4	1
1:A:53:LEU:O	1:A:394:HIS:CE1	0.43	2.71	10	1
1:A:334:LEU:C	1:A:334:LEU:CD1	0.43	2.84	9	1
1:A:9:ARG:C	1:A:9:ARG:HE	0.43	2.17	9	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:HB2	0.43	2.13	9	1
1:A:519:TYR:CD1	1:A:519:TYR:O	0.43	2.71	8	1
1:A:279:ASP:OD1	1:A:347:PRO:O	0.43	2.36	2	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:550:GLN:OE1	0.43	2.36	2	1
1:A:142:LEU:CD2	1:A:147:ILE:HG21	0.43	2.43	6	1
1:A:450:ASN:O	1:A:451:THR:C	0.43	2.55	7	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:54:LEU:N	0.43	2.27	7	1
1:A:601:GLN:OE1	1:A:663:MET:SD	0.43	2.76	7	1
1:A:624:HIS:N	1:A:624:HIS:ND1	0.43	2.64	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:380:ASN:ND2	1:A:382:ARG:HH21	0.43	2.11	7	1
1:A:453:PHE:O	1:A:507:GLY:O	0.43	2.37	1	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:197:GLN:CD	1:A:198:LEU:H	0.43	2.15	5	1
1:A:641:HIS:O	1:A:645:TRP:CD1	0.43	2.71	5	2
1:A:622:ASP:N	1:A:622:ASP:OD1	0.43	2.51	4	1
1:A:38:ASN:HD22	1:A:38:ASN:C	0.43	2.17	4	1
1:A:143:TYR:OH	1:A:159:ASP:O	0.43	2.36	4	1
1:A:597:ASP:OD2	1:A:663:MET:SD	0.43	2.77	4	1
1:A:622:ASP:OD2	1:A:628:LEU:HD23	0.43	2.12	10	1
1:A:524:ASP:O	1:A:526:LEU:N	0.43	2.51	9	1
1:A:35:PHE:C	1:A:35:PHE:CD1	0.43	2.91	9	1
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:CD1	0.43	2.66	9	1
1:A:653:LYS:N	1:A:653:LYS:CD	0.43	2.81	8	1
1:A:374:ASP:CG	1:A:384:GLY:O	0.43	2.56	3	1
1:A:94:GLN:C	1:A:96:GLU:N	0.43	2.72	3	1
1:A:386:VAL:O	1:A:421:LYS:N	0.43	2.50	3	1
1:A:140:ASP:C	1:A:140:ASP:OD1	0.43	2.56	2	1
1:A:431:THR:C	1:A:433:LEU:H	0.43	2.17	2	1
1:A:129:ASN:ND2	1:A:129:ASN:C	0.43	2.72	2	1
1:A:268:ILE:CD1	1:A:268:ILE:N	0.43	2.78	6	1
1:A:212:THR:OG1	1:A:215:GLN:NE2	0.43	2.51	6	1
1:A:630:GLU:OE1	1:A:634:THR:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:632:ARG:CG	1:A:632:ARG:NH1	0.43	2.77	7	1
1:A:402:ALA:CB	1:A:445:ARG:NH2	0.43	2.81	7	1
1:A:422:MET:N	1:A:446:VAL:O	0.43	2.37	1	1
1:A:211:ARG:C	1:A:212:THR:OG1	0.43	2.55	1	1
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:314:ASN:OD1	0.43	2.72	5	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:CD1	0.43	2.66	5	1
1:A:587:TRP:CD1	1:A:588:SER:N	0.43	2.86	4	1
1:A:534:TRP:CD1	1:A:534:TRP:C	0.43	2.88	4	1
1:A:410:GLU:OE1	1:A:410:GLU:C	0.43	2.57	4	1
1:A:351:ASP:OD2	1:A:355:ASN:OD1	0.43	2.36	10	1
1:A:61:GLN:HE22	1:A:430:ARG:NH2	0.43	2.12	10	1
1:A:199:ARG:NH2	1:A:207:GLU:OE2	0.43	2.43	10	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:C	0.43	2.92	10	1
1:A:436:ARG:CA	1:A:436:ARG:HE	0.43	2.26	9	1
1:A:129:ASN:ND2	1:A:134:ARG:NE	0.43	2.67	9	1
1:A:129:ASN:CG	1:A:134:ARG:HE	0.43	2.17	9	1
1:A:695:ASP:O	1:A:696:LEU:C	0.43	2.56	9	1
1:A:184:SER:OG	1:A:187:ASP:OD1	0.43	2.35	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:TRP:O	1:A:173:PHE:CD1	0.43	2.72	8	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:176:GLU:N	0.43	2.71	3	1
1:A:192:LYS:O	1:A:198:LEU:HA	0.43	2.13	3	3
1:A:269:LEU:C	1:A:270:ASP:OD2	0.43	2.57	2	1
1:A:321:ALA:HB2	1:A:327:ILE:CD1	0.43	2.43	2	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:53:LEU:H	0.43	2.27	2	1
1:A:565:PHE:O	1:A:568:GLU:OE1	0.43	2.37	2	1
1:A:456:ARG:C	1:A:458:GLY:N	0.43	2.72	8	2
1:A:330:HIS:HD1	1:A:331:GLY:N	0.43	2.11	1	1
1:A:336:PHE:CD2	1:A:387:TYR:CB	0.43	3.01	1	1
1:A:557:GLN:O	1:A:561:ALA:N	0.43	2.49	5	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:505:GLY:O	0.43	2.33	5	1
1:A:358:PRO:O	1:A:359:GLU:OE1	0.43	2.36	4	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG23	0.43	2.12	4	1
1:A:294:MET:CE	1:A:374:ASP:OD2	0.43	2.67	4	1
1:A:717:LEU:O	1:A:721:GLU:CB	0.43	2.65	10	1
1:A:609:ARG:O	1:A:613:GLN:CB	0.43	2.66	9	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:112:GLN:OE1	0.43	2.36	9	1
1:A:242:ILE:N	1:A:242:ILE:HD13	0.43	2.28	9	1
1:A:458:GLY:C	1:A:460:GLU:N	0.43	2.71	9	1
1:A:374:ASP:O	1:A:377:VAL:HG22	0.43	2.12	3	1
1:A:632:ARG:O	1:A:634:THR:N	0.43	2.51	2	1
1:A:586:ASN:OD1	1:A:586:ASN:O	0.43	2.37	2	1
1:A:494:LEU:C	1:A:496:CYS:N	0.43	2.69	8	2
1:A:488:ASN:O	1:A:489:ASN:C	0.43	2.55	6	2
1:A:108:GLU:CG	1:A:109:ILE:H	0.43	2.25	6	1
1:A:267:THR:C	1:A:268:ILE:HD13	0.43	2.34	6	1
1:A:641:HIS:O	1:A:644:ASN:N	0.43	2.52	7	1
1:A:330:HIS:CD2	1:A:332:ARG:O	0.43	2.72	1	1
1:A:170:VAL:O	1:A:172:ARG:N	0.43	2.51	1	1
1:A:703:GLN:CD	1:A:703:GLN:O	0.43	2.56	5	1
1:A:513:ASP:OD1	1:A:514:LEU:N	0.43	2.51	4	1
1:A:562:GLN:O	1:A:563:THR:CB	0.43	2.65	4	1
1:A:541:ALA:C	1:A:543:LEU:N	0.43	2.71	10	1
1:A:530:ALA:C	1:A:553:VAL:CG1	0.43	2.87	10	1
1:A:714:ALA:C	1:A:716:ARG:N	0.43	2.72	10	1
1:A:404:LYS:O	1:A:407:THR:OG1	0.43	2.37	9	1
1:A:321:ALA:O	1:A:324:GLY:N	0.43	2.51	9	1
1:A:110:THR:O	1:A:501:LYS:NZ	0.43	2.51	8	1
1:A:172:ARG:O	1:A:175:ASP:OD2	0.43	2.36	3	1
1:A:403:ASN:ND2	1:A:443:ARG:CD	0.43	2.81	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:394:HIS:O	1:A:395:GLY:O	0.43	2.37	6	1
1:A:600:VAL:C	1:A:602:GLY:N	0.43	2.70	7	1
1:A:55:ALA:O	1:A:58:ASP:OD1	0.43	2.36	7	1
1:A:613:GLN:C	1:A:615:ILE:H	0.43	2.17	7	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:355:ASN:ND2	0.43	2.27	1	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:207:GLU:O	0.43	2.51	1	1
1:A:703:GLN:OE1	1:A:708:THR:HG22	0.43	2.14	5	1
1:A:571:PRO:O	1:A:575:ASP:OD2	0.43	2.37	5	1
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:CB	0.43	2.66	4	2
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:H	0.43	2.12	4	1
1:A:501:LYS:O	1:A:502:ALA:HB2	0.43	2.13	10	2
1:A:557:GLN:HE21	1:A:560:ILE:HD11	0.43	1.74	10	1
1:A:691:LYS:O	1:A:695:ASP:OD1	0.43	2.37	10	1
1:A:340:VAL:O	1:A:340:VAL:HG13	0.43	2.12	9	1
1:A:19:PHE:O	1:A:23:GLU:N	0.43	2.52	9	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:O	0.43	2.37	9	1
1:A:622:ASP:CG	1:A:623:ILE:H	0.43	2.16	9	1
1:A:171:ARG:O	1:A:175:ASP:OD1	0.43	2.35	8	1
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:HB2	0.43	2.14	5	2
1:A:315:ASP:CG	1:A:332:ARG:NH1	0.43	2.72	2	1
1:A:568:GLU:CD	1:A:568:GLU:N	0.43	2.72	2	1
1:A:271:CYS:SG	1:A:338:ARG:O	0.43	2.70	6	1
1:A:464:VAL:O	1:A:467:ALA:N	0.43	2.52	6	1
1:A:161:GLN:HE21	1:A:161:GLN:C	0.43	2.17	6	1
1:A:262:GLU:O	1:A:262:GLU:OE2	0.43	2.36	7	1
1:A:641:HIS:O	1:A:643:ALA:N	0.43	2.52	7	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:208:THR:OG1	0.43	2.35	1	1
1:A:513:ASP:C	1:A:514:LEU:HD22	0.43	2.34	1	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CB	0.43	2.67	5	2
1:A:153:ALA:HB3	1:A:161:GLN:NE2	0.43	2.28	5	1
1:A:247:ARG:O	1:A:249:GLY:N	0.43	2.52	4	1
1:A:583:GLU:C	1:A:585:ALA:H	0.43	2.17	10	1
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:CD	0.43	2.66	10	1
1:A:26:PRO:C	1:A:28:THR:N	0.43	2.72	2	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:143:TYR:C	0.43	2.91	10	2
1:A:108:GLU:CD	1:A:109:ILE:H	0.43	2.16	6	1
1:A:294:MET:SD	1:A:373:TYR:CB	0.43	3.06	6	1
1:A:362:LEU:O	1:A:363:ASP:C	0.43	2.56	7	1
1:A:391:PRO:C	1:A:393:MET:H	0.43	2.17	1	1
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:N	0.43	2.72	1	1
1:A:671:ASN:OD1	1:A:671:ASN:O	0.43	2.36	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:VAL:O	1:A:657:GLN:C	0.43	2.56	1	1
1:A:133:ALA:C	1:A:135:TRP:N	0.43	2.71	4	1
1:A:514:LEU:N	1:A:514:LEU:HD22	0.43	2.29	4	1
1:A:511:MET:O	1:A:515:MET:SD	0.43	2.77	4	1
1:A:189:VAL:O	1:A:254:ALA:O	0.43	2.37	9	1
1:A:359:GLU:OE2	1:A:360:GLY:O	0.43	2.37	9	1
1:A:451:THR:O	1:A:452:GLY:O	0.43	2.36	9	1
1:A:606:TYR:C	1:A:606:TYR:CD1	0.43	2.92	9	1
1:A:554:GLN:NE2	1:A:557:GLN:NE2	0.43	2.66	8	1
1:A:330:HIS:O	1:A:332:ARG:N	0.43	2.51	8	1
1:A:635:LEU:O	1:A:635:LEU:HD13	0.43	2.13	3	1
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:C	0.43	2.56	3	1
1:A:709:GLU:OE1	1:A:713:HIS:ND1	0.43	2.52	3	1
1:A:109:ILE:HD11	1:A:448:PHE:CE2	0.43	2.49	1	1
1:A:450:ASN:ND2	1:A:450:ASN:O	0.43	2.52	1	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:103:THR:N	0.43	2.28	1	1
1:A:408:ARG:O	1:A:411:THR:HG22	0.43	2.14	5	1
1:A:522:LYS:NZ	1:A:544:HIS:CG	0.43	2.87	5	1
1:A:313:LEU:H	1:A:313:LEU:HD23	0.43	1.73	5	2
1:A:654:GLU:O	1:A:658:ALA:N	0.43	2.37	5	1
1:A:548:TYR:O	1:A:551:THR:OG1	0.43	2.28	10	1
1:A:129:ASN:O	1:A:133:ALA:O	0.43	2.36	10	1
1:A:407:THR:O	1:A:411:THR:HG22	0.43	2.14	10	1
1:A:314:ASN:N	1:A:314:ASN:OD1	0.43	2.51	9	1
1:A:510:ALA:O	1:A:513:ASP:OD1	0.43	2.37	9	1
1:A:647:ARG:NE	1:A:647:ARG:N	0.42	2.64	3	1
1:A:594:GLN:O	1:A:594:GLN:NE2	0.42	2.51	3	1
1:A:126:TYR:OH	1:A:617:CYS:SG	0.42	2.77	3	1
1:A:39:PHE:O	1:A:43:VAL:CG2	0.42	2.67	1	3
1:A:446:VAL:HG22	1:A:446:VAL:O	0.42	2.13	6	1
1:A:449:ILE:HD13	1:A:496:CYS:SG	0.42	2.54	6	1
1:A:338:ARG:NH2	1:A:454:LEU:HD13	0.42	2.29	6	1
1:A:454:LEU:O	1:A:455:ASP:C	0.42	2.58	6	3
1:A:212:THR:O	1:A:214:ALA:N	0.42	2.52	6	1
1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:OE2	0.42	2.36	6	1
1:A:163:GLY:O	1:A:167:ILE:CD1	0.42	2.67	6	1
1:A:96:GLU:O	1:A:97:ARG:CG	0.42	2.67	4	2
1:A:28:THR:O	1:A:369:ALA:O	0.42	2.37	7	1
1:A:358:PRO:O	1:A:359:GLU:C	0.42	2.56	1	1
1:A:703:GLN:NE2	1:A:706:GLY:C	0.42	2.71	1	1
1:A:526:LEU:C	1:A:528:ALA:N	0.42	2.72	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:CD1	0.42	2.87	4	1
1:A:586:ASN:O	1:A:587:TRP:C	0.42	2.56	4	1
1:A:588:SER:OG	1:A:591:GLU:OE2	0.42	2.36	4	1
1:A:287:TYR:CZ	1:A:370:ILE:HD11	0.42	2.49	4	1
1:A:640:GLN:O	1:A:643:ALA:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:578:THR:CG2	1:A:578:THR:O	0.42	2.67	9	1
1:A:57:ARG:CD	1:A:61:GLN:NE2	0.42	2.82	9	1
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:GLY:N	0.42	2.67	3	1
1:A:658:ALA:O	1:A:662:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:654:GLU:O	1:A:658:ALA:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:492:SER:O	1:A:493:GLY:C	0.42	2.56	6	1
1:A:608:VAL:O	1:A:612:GLU:OE1	0.42	2.35	6	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:29:GLY:O	0.42	2.14	7	1
1:A:39:PHE:CE1	1:A:43:VAL:HG21	0.42	2.49	1	1
1:A:170:VAL:C	1:A:172:ARG:N	0.42	2.72	1	1
1:A:257:ASN:O	1:A:258:ASP:CG	0.42	2.58	5	2
1:A:485:TYR:O	1:A:487:ARG:N	0.42	2.51	5	1
1:A:632:ARG:CD	1:A:632:ARG:N	0.42	2.82	5	1
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CD	0.42	2.72	5	1
1:A:628:LEU:N	1:A:628:LEU:HD23	0.42	2.30	5	1
1:A:199:ARG:C	1:A:200:ILE:HD13	0.42	2.33	4	1
1:A:405:LEU:O	1:A:406:PHE:C	0.42	2.57	4	1
1:A:485:TYR:OH	1:A:576:LEU:O	0.42	2.32	4	1
1:A:435:LEU:HD21	1:A:496:CYS:SG	0.42	2.54	8	1
1:A:272:GLU:OE2	1:A:272:GLU:O	0.42	2.37	8	1
1:A:297:THR:O	1:A:298:LEU:C	0.42	2.57	3	1
1:A:283:LYS:O	1:A:287:TYR:CD1	0.42	2.72	3	1
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:CG	0.42	2.57	2	1
1:A:642:ILE:O	1:A:646:LEU:N	0.42	2.45	2	2
1:A:318:HIS:N	1:A:318:HIS:ND1	0.42	2.67	2	1
1:A:688:CYS:C	1:A:690:PHE:N	0.42	2.72	6	1
1:A:241:GLN:O	1:A:243:ASP:OD2	0.42	2.37	6	1
1:A:427:GLU:N	1:A:427:GLU:CD	0.42	2.72	7	1
1:A:567:ALA:O	1:A:571:PRO:CD	0.42	2.67	7	1
1:A:114:GLY:O	1:A:532:THR:OG1	0.42	2.37	5	1
1:A:242:ILE:O	1:A:243:ASP:O	0.42	2.37	4	1
1:A:67:TRP:CZ3	1:A:84:PHE:CZ	0.42	3.08	4	1
1:A:438:CYS:SG	1:A:439:ILE:N	0.42	2.91	9	1
1:A:710:PRO:O	1:A:711:LEU:C	0.42	2.57	9	1
1:A:401:PHE:C	1:A:401:PHE:CD1	0.42	2.92	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:634:THR:O	1:A:638:SER:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:92:VAL:O	1:A:94:GLN:OE1	0.42	2.37	8	1
1:A:571:PRO:O	1:A:575:ASP:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:312:LYS:C	1:A:313:LEU:HD22	0.42	2.35	2	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:175:ASP:OD2	1:A:184:SER:OG	0.42	2.36	2	1
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ARG:C	0.42	2.58	9	2
1:A:406:PHE:C	1:A:408:ARG:N	0.42	2.73	10	2
1:A:451:THR:CG2	1:A:452:GLY:N	0.42	2.77	7	1
1:A:105:ILE:O	1:A:106:ASP:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:341:GLY:C	1:A:343:LEU:H	0.42	2.17	7	1
1:A:233:ASN:C	1:A:235:GLY:H	0.42	2.17	7	2
1:A:116:GLN:NE2	1:A:451:THR:HG21	0.42	2.30	1	1
1:A:94:GLN:OE1	1:A:94:GLN:O	0.42	2.37	5	1
1:A:448:PHE:C	1:A:448:PHE:CD1	0.42	2.93	5	1
1:A:247:ARG:C	1:A:249:GLY:N	0.42	2.73	4	1
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ALA:C	0.42	2.57	10	1
1:A:150:GLN:C	1:A:152:GLY:N	0.42	2.72	10	1
1:A:461:MET:SD	1:A:462:HIS:ND1	0.42	2.89	9	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:572:LEU:HD13	0.42	2.29	8	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:C	0.42	2.58	3	2
1:A:524:ASP:O	1:A:525:GLN:C	0.42	2.58	7	6
1:A:138:LEU:HD23	1:A:138:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:175:ASP:OD2	1:A:184:SER:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:146:ASP:O	1:A:146:ASP:CG	0.42	2.58	2	1
1:A:243:ASP:C	1:A:245:ASN:H	0.42	2.18	2	1
1:A:715:TRP:CZ3	1:A:719:GLU:CD	0.42	2.93	6	1
1:A:599:ASN:O	1:A:602:GLY:N	0.42	2.53	6	1
1:A:635:LEU:C	1:A:637:ILE:H	0.42	2.18	7	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:299:GLN:HB2	0.42	1.92	7	1
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:CG	0.42	2.67	1	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:293:LEU:H	0.42	2.27	5	1
1:A:89:GLY:C	1:A:91:LEU:HD12	0.42	2.34	4	1
1:A:47:ALA:O	1:A:359:GLU:OE2	0.42	2.38	4	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:PRO:O	0.42	2.36	10	1
1:A:437:SER:O	1:A:441:GLN:OE1	0.42	2.37	8	1
1:A:494:LEU:C	1:A:496:CYS:H	0.42	2.17	6	1
1:A:75:VAL:O	1:A:76:LYS:O	0.42	2.38	6	1
1:A:93:PRO:O	1:A:94:GLN:CD	0.42	2.57	7	1
1:A:405:LEU:CD1	1:A:409:ILE:HG23	0.42	2.45	7	1
1:A:339:ASN:HD22	1:A:339:ASN:C	0.42	2.15	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ASP:O	1:A:257:ASN:OD1	0.42	2.37	1	1
1:A:290:LEU:O	1:A:291:LEU:C	0.42	2.58	10	2
1:A:465:MET:CE	1:A:705:ASN:ND2	0.42	2.82	5	1
1:A:598:ASN:HD22	1:A:598:ASN:N	0.42	2.12	10	1
1:A:385:SER:OG	1:A:420:LEU:CA	0.42	2.68	9	1
1:A:547:HIS:O	1:A:549:HIS:N	0.42	2.53	8	1
1:A:622:ASP:OD1	1:A:626:VAL:O	0.42	2.38	8	1
1:A:630:GLU:O	1:A:631:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
1:A:323:ASP:O	1:A:323:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
1:A:286:LEU:HD23	1:A:286:LEU:C	0.42	2.35	8	1
1:A:399:VAL:HG12	1:A:403:ASN:ND2	0.42	2.28	3	1
1:A:105:ILE:N	1:A:105:ILE:HD13	0.42	2.30	3	1
1:A:332:ARG:NH1	1:A:332:ARG:CB	0.42	2.83	3	1
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:THR:N	0.42	2.29	3	1
1:A:159:ASP:OD1	1:A:159:ASP:O	0.42	2.38	2	1
1:A:116:GLN:OE1	1:A:450:ASN:ND2	0.42	2.52	6	1
1:A:99:THR:OG1	1:A:101:GLU:OE1	0.42	2.33	6	1
1:A:424:ILE:N	1:A:449:ILE:CG2	0.42	2.82	7	1
1:A:265:ILE:H	1:A:265:ILE:CD1	0.42	2.28	7	1
1:A:456:ARG:CA	1:A:456:ARG:NE	0.42	2.83	7	1
1:A:374:ASP:OD2	1:A:383:THR:OG1	0.42	2.38	1	1
1:A:641:HIS:CD2	1:A:645:TRP:CE2	0.42	3.07	1	1
1:A:641:HIS:CD2	1:A:645:TRP:CZ2	0.42	3.08	1	1
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CD2	0.42	2.73	5	1
1:A:228:CYS:SG	1:A:319:TYR:OH	0.42	2.77	5	1
1:A:450:ASN:HD22	1:A:451:THR:N	0.42	2.12	4	1
1:A:699:LEU:O	1:A:700:GLY:C	0.42	2.58	4	1
1:A:557:GLN:OE1	1:A:557:GLN:CA	0.42	2.68	4	1
1:A:389:VAL:O	1:A:389:VAL:HG13	0.42	2.14	4	1
1:A:719:GLU:OE1	1:A:720:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:491:LEU:C	1:A:491:LEU:HD13	0.42	2.34	8	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:385:SER:OG	0.42	2.38	3	1
1:A:552:ASN:HD22	1:A:552:ASN:C	0.42	2.18	3	1
1:A:150:GLN:HE22	1:A:162:ARG:CZ	0.42	2.28	3	1
1:A:425:MET:O	1:A:426:ASP:OD1	0.42	2.38	3	1
1:A:129:ASN:C	1:A:129:ASN:HD22	0.42	2.14	2	1
1:A:92:VAL:O	1:A:434:ASN:OD1	0.42	2.37	2	1
1:A:691:LYS:C	1:A:693:ALA:N	0.42	2.73	7	1
1:A:654:GLU:OE2	1:A:654:GLU:O	0.42	2.37	7	1
1:A:442:ALA:C	1:A:444:ASN:H	0.42	2.18	5	2
1:A:427:GLU:O	1:A:428:GLU:CG	0.42	2.68	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:424:ILE:O	1:A:425:MET:C	0.42	2.57	10	1
1:A:525:GLN:CA	1:A:525:GLN:NE2	0.42	2.82	9	1
1:A:130:ALA:O	1:A:333:SER:OG	0.42	2.37	9	1
1:A:181:GLU:OE1	1:A:209:THR:OG1	0.42	2.38	9	1
1:A:563:THR:CG2	1:A:564:GLU:H	0.42	2.28	8	1
1:A:395:GLY:O	1:A:399:VAL:HG23	0.42	2.15	3	1
1:A:445:ARG:O	1:A:445:ARG:HG2	0.42	2.15	3	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:30:LEU:C	0.42	2.35	3	1
1:A:660:LEU:HD13	1:A:660:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:517:ASP:O	1:A:520:SER:OG	0.42	2.37	2	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:GLN:C	0.42	2.58	2	2
1:A:108:GLU:C	1:A:110:THR:N	0.42	2.73	6	1
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:HB2	0.42	2.13	6	1
1:A:410:GLU:HG2	1:A:420:LEU:HD13	0.42	1.89	6	1
1:A:509:TRP:CD1	1:A:509:TRP:N	0.42	2.88	6	1
1:A:421:LYS:HZ2	1:A:421:LYS:CB	0.42	2.26	7	1
1:A:58:ASP:C	1:A:58:ASP:OD1	0.42	2.55	7	1
1:A:343:LEU:O	1:A:358:PRO:O	0.42	2.37	1	1
1:A:564:GLU:O	1:A:568:GLU:OE2	0.42	2.38	1	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CG	0.42	2.73	5	1
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CD1	0.42	2.73	5	1
1:A:280:ALA:O	1:A:281:GLU:C	0.42	2.57	5	1
1:A:660:LEU:O	1:A:664:ALA:CB	0.42	2.68	5	1
1:A:83:SER:O	1:A:86:ARG:N	0.42	2.52	9	2
1:A:133:ALA:O	1:A:134:ARG:C	0.42	2.57	4	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:463:SER:O	0.42	2.38	4	1
1:A:170:VAL:O	1:A:174:LEU:N	0.42	2.39	4	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:O	0.42	2.38	4	1
1:A:494:LEU:O	1:A:494:LEU:HD23	0.42	2.14	9	1
1:A:340:VAL:O	1:A:341:GLY:C	0.42	2.58	8	1
1:A:712:LEU:C	1:A:712:LEU:CD2	0.42	2.88	8	1
1:A:552:ASN:C	1:A:552:ASN:ND2	0.42	2.73	2	1
1:A:552:ASN:ND2	1:A:554:GLN:N	0.42	2.66	2	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:421:LYS:HZ3	0.42	1.70	6	1
1:A:433:LEU:O	1:A:434:ASN:OD1	0.42	2.37	6	1
1:A:658:ALA:O	1:A:659:SER:C	0.42	2.59	6	1
1:A:486:GLU:OE2	1:A:506:LYS:CG	0.42	2.68	1	1
1:A:609:ARG:HH22	1:A:630:GLU:CB	0.42	2.27	1	1
1:A:349:ILE:CG2	1:A:350:TRP:N	0.42	2.82	1	1
1:A:243:ASP:OD2	1:A:245:ASN:N	0.42	2.42	5	1
1:A:342:HIS:CE1	1:A:343:LEU:HD13	0.42	2.50	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:637:ILE:O	1:A:638:SER:C	0.42	2.57	4	2
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG2	0.42	2.68	4	1
1:A:179:PRO:O	1:A:180:LEU:C	0.42	2.56	10	3
1:A:484:ALA:O	1:A:485:TYR:C	0.42	2.57	10	2
1:A:147:ILE:O	1:A:147:ILE:CG2	0.42	2.68	10	1
1:A:710:PRO:O	1:A:713:HIS:N	0.42	2.52	9	1
1:A:436:ARG:HE	1:A:436:ARG:N	0.42	2.12	9	1
1:A:120:PRO:O	1:A:121:ALA:HB3	0.42	2.15	8	1
1:A:151:GLU:OE2	1:A:619:LYS:NZ	0.42	2.48	8	1
1:A:430:ARG:HH22	1:A:459:ASP:CG	0.42	2.17	8	1
1:A:448:PHE:CD1	1:A:449:ILE:N	0.41	2.88	3	1
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:294:MET:C	1:A:296:GLY:N	0.41	2.74	3	1
1:A:667:VAL:O	1:A:671:ASN:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:62:ALA:C	1:A:65:ASP:OD1	0.41	2.58	2	1
1:A:426:ASP:C	1:A:428:GLU:N	0.41	2.73	2	1
1:A:504:ILE:H	1:A:531:ASN:ND2	0.41	2.13	6	1
1:A:386:VAL:CG1	1:A:388:ILE:HD11	0.41	2.45	6	1
1:A:549:HIS:CD2	1:A:549:HIS:N	0.41	2.88	6	1
1:A:576:LEU:C	1:A:578:THR:N	0.41	2.72	6	1
1:A:243:ASP:O	1:A:243:ASP:OD1	0.41	2.37	6	1
1:A:547:HIS:O	1:A:550:GLN:N	0.41	2.50	6	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:29:GLY:O	0.41	2.68	7	1
1:A:591:GLU:O	1:A:592:ILE:C	0.41	2.58	7	2
1:A:178:LEU:HD11	1:A:233:ASN:ND2	0.41	2.29	7	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:81:TYR:OH	0.41	2.53	7	1
1:A:424:ILE:HD12	1:A:447:ALA:HB3	0.41	1.92	1	1
1:A:85:LEU:HG	1:A:577:LEU:HD21	0.41	1.91	1	1
1:A:531:ASN:OD1	1:A:531:ASN:N	0.41	2.53	5	1
1:A:180:LEU:CD2	1:A:209:THR:O	0.41	2.68	4	1
1:A:53:LEU:O	1:A:394:HIS:NE2	0.41	2.53	10	1
1:A:389:VAL:HG13	1:A:423:GLY:HA3	0.41	1.91	9	1
1:A:488:ASN:O	1:A:491:LEU:N	0.41	2.53	9	1
1:A:292:GLY:O	1:A:293:LEU:C	0.41	2.58	9	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:49:GLU:O	0.41	2.38	9	1
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLN:OE1	0.41	2.37	9	1
1:A:399:VAL:O	1:A:403:ASN:CB	0.41	2.68	2	1
1:A:504:ILE:N	1:A:504:ILE:CD1	0.41	2.83	2	1
1:A:289:ASN:O	1:A:292:GLY:N	0.41	2.53	2	1
1:A:605:GLY:O	1:A:609:ARG:NH1	0.41	2.54	2	1
1:A:610:TRP:O	1:A:612:GLU:N	0.41	2.53	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:ASN:O	1:A:132:ASN:OD1	0.41	2.37	7	1
1:A:722:SER:O	1:A:723:HIS:CD2	0.41	2.73	7	1
1:A:88:LEU:C	1:A:90:TYR:N	0.41	2.74	1	1
1:A:431:THR:HG22	1:A:431:THR:O	0.41	2.15	5	1
1:A:453:PHE:C	1:A:455:ASP:H	0.41	2.18	5	1
1:A:584:ASN:CG	1:A:587:TRP:CE3	0.41	2.94	4	1
1:A:619:LYS:O	1:A:670:GLN:OE1	0.41	2.37	4	1
1:A:16:PHE:CD1	1:A:16:PHE:C	0.41	2.94	4	1
1:A:484:ALA:O	1:A:487:ARG:N	0.41	2.53	10	1
1:A:482:ILE:HD13	1:A:482:ILE:C	0.41	2.36	10	1
1:A:721:GLU:OE2	1:A:721:GLU:O	0.41	2.38	9	1
1:A:147:ILE:HG22	1:A:148:ILE:HG12	0.41	1.91	8	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CD2	0.41	2.74	8	1
1:A:418:ASN:C	1:A:419:THR:HG22	0.41	2.36	3	1
1:A:233:ASN:N	1:A:233:ASN:ND2	0.41	2.66	3	2
1:A:108:GLU:OE1	1:A:266:SER:OG	0.41	2.38	3	1
1:A:600:VAL:HG13	1:A:601:GLN:N	0.41	2.29	2	1
1:A:630:GLU:OE1	1:A:634:THR:CG2	0.41	2.68	6	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:235:GLY:O	0.41	2.38	6	1
1:A:441:GLN:O	1:A:441:GLN:CG	0.41	2.68	1	1
1:A:138:LEU:O	1:A:139:TYR:C	0.41	2.58	1	1
1:A:563:THR:OG1	1:A:564:GLU:N	0.41	2.51	1	1
1:A:121:ALA:CB	1:A:274:SER:OG	0.41	2.67	5	1
1:A:524:ASP:O	1:A:527:ARG:CB	0.41	2.67	5	1
1:A:609:ARG:NE	1:A:613:GLN:NE2	0.41	2.68	5	1
1:A:378:GLN:O	1:A:378:GLN:OE1	0.41	2.37	4	1
1:A:85:LEU:O	1:A:86:ARG:C	0.41	2.57	4	1
1:A:591:GLU:OE1	1:A:591:GLU:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:176:GLU:O	1:A:177:SER:C	0.41	2.56	10	1
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:CD1	0.41	2.83	9	1
1:A:615:ILE:C	1:A:615:ILE:HD12	0.41	2.35	8	1
1:A:449:ILE:O	1:A:450:ASN:CG	0.41	2.58	8	1
1:A:241:GLN:NE2	1:A:241:GLN:C	0.41	2.74	8	1
1:A:298:LEU:CD1	1:A:298:LEU:O	0.41	2.68	8	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:290:LEU:C	0.41	2.88	8	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:209:THR:H	0.41	2.28	3	1
1:A:127:ALA:O	1:A:128:LEU:C	0.41	2.58	9	3
1:A:494:LEU:HD22	1:A:494:LEU:O	0.41	2.16	2	1
1:A:292:GLY:C	1:A:294:MET:N	0.41	2.74	2	1
1:A:485:TYR:O	1:A:486:GLU:C	0.41	2.59	5	2
1:A:132:ASN:HD21	1:A:332:ARG:NH2	0.41	2.14	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:ASP:OD1	1:A:175:ASP:C	0.41	2.58	2	1
1:A:424:ILE:HD13	1:A:438:CYS:SG	0.41	2.56	2	1
1:A:694:SER:O	1:A:698:PHE:CD1	0.41	2.74	7	1
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:CZ	0.41	2.68	1	1
1:A:498:LEU:HD23	1:A:499:ARG:HG3	0.41	1.92	1	1
1:A:385:SER:OG	1:A:387:TYR:CZ	0.41	2.72	1	1
1:A:663:MET:O	1:A:667:VAL:N	0.41	2.48	1	1
1:A:538:PRO:O	1:A:539:THR:C	0.41	2.58	4	1
1:A:572:LEU:O	1:A:576:LEU:N	0.41	2.41	10	1
1:A:400:ALA:O	1:A:404:LYS:CD	0.41	2.68	10	1
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:HZ3	0.41	2.29	9	1
1:A:508:MET:O	1:A:509:TRP:CD2	0.41	2.73	9	1
1:A:184:SER:OG	1:A:184:SER:O	0.41	2.27	8	1
1:A:137:SER:OG	1:A:140:ASP:CG	0.41	2.59	8	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.41	2.54	3	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:C	0.41	2.58	1	2
1:A:603:ILE:HG13	1:A:604:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:225:ALA:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:12:ILE:HG21	0.41	2.15	6	1
1:A:111:SER:O	1:A:111:SER:OG	0.41	2.31	6	1
1:A:131:ALA:C	1:A:133:ALA:N	0.41	2.73	1	1
1:A:51:ARG:NH1	1:A:355:ASN:ND2	0.41	2.68	5	1
1:A:381:SER:N	1:A:382:ARG:HH21	0.41	2.12	4	1
1:A:161:GLN:N	1:A:161:GLN:OE1	0.41	2.54	4	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:113:ALA:H	0.41	1.75	10	1
1:A:491:LEU:HG	1:A:492:SER:H	0.41	1.76	10	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CD	0.41	2.59	10	1
1:A:398:GLU:CD	1:A:399:VAL:HG23	0.41	2.36	10	1
1:A:442:ALA:O	1:A:446:VAL:HB	0.41	2.14	9	1
1:A:257:ASN:C	1:A:257:ASN:HD22	0.41	2.18	9	1
1:A:392:LYS:CB	1:A:392:LYS:NZ	0.41	2.84	9	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:88:LEU:C	0.41	2.89	8	1
1:A:699:LEU:C	1:A:701:VAL:H	0.41	2.18	8	1
1:A:416:ALA:C	1:A:418:ASN:H	0.41	2.18	3	1
1:A:697:ILE:O	1:A:701:VAL:HG13	0.41	2.15	3	1
1:A:316:ASP:OD2	1:A:331:GLY:N	0.41	2.43	3	1
1:A:324:GLY:O	1:A:326:GLU:N	0.41	2.54	2	1
1:A:227:THR:HG22	1:A:227:THR:O	0.41	2.16	2	1
1:A:4:THR:HG21	1:A:11:ARG:HE	0.41	1.75	6	1
1:A:359:GLU:CG	1:A:360:GLY:H	0.41	2.28	6	1
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:HB2	0.41	2.15	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:359:GLU:CG	1:A:360:GLY:N	0.41	2.81	7	1
1:A:248:ILE:C	1:A:250:LYS:H	0.41	2.17	7	1
1:A:328:SER:C	1:A:329:LEU:HD12	0.41	2.36	7	1
1:A:142:LEU:O	1:A:143:TYR:C	0.41	2.56	7	1
1:A:253:PRO:C	1:A:255:HIS:H	0.41	2.18	7	1
1:A:161:GLN:CG	1:A:162:ARG:N	0.41	2.83	7	1
1:A:597:ASP:O	1:A:598:ASN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:623:ILE:HD13	1:A:623:ILE:N	0.41	2.29	5	1
1:A:699:LEU:O	1:A:702:LYS:N	0.41	2.54	4	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:OD2	0.41	2.37	4	1
1:A:267:THR:HG21	1:A:333:SER:OG	0.41	2.16	10	1
1:A:289:ASN:O	1:A:290:LEU:C	0.41	2.59	8	1
1:A:112:GLN:O	1:A:113:ALA:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:CB	0.41	2.68	6	1
1:A:233:ASN:O	1:A:234:ASN:CB	0.41	2.67	10	2
1:A:219:TYR:CD1	1:A:219:TYR:N	0.41	2.89	6	1
1:A:547:HIS:N	1:A:547:HIS:ND1	0.41	2.67	7	1
1:A:185:TYR:OH	1:A:256:ILE:HD13	0.41	2.16	7	1
1:A:482:ILE:O	1:A:486:GLU:CB	0.41	2.69	7	1
1:A:143:TYR:C	1:A:143:TYR:CD1	0.41	2.93	7	2
1:A:578:THR:CG2	1:A:579:ILE:N	0.41	2.83	1	1
1:A:495:PHE:CE1	1:A:561:ALA:HB2	0.41	2.50	1	1
1:A:159:ASP:C	1:A:161:GLN:N	0.41	2.74	1	1
1:A:532:THR:CG2	1:A:533:ALA:N	0.41	2.84	1	1
1:A:555:SER:O	1:A:559:ASN:CG	0.41	2.59	1	1
1:A:368:GLY:O	1:A:369:ALA:C	0.41	2.58	5	1
1:A:713:HIS:O	1:A:714:ALA:C	0.41	2.59	5	2
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ASN:N	0.41	2.31	5	1
1:A:43:VAL:O	1:A:44:HIS:C	0.41	2.58	4	1
1:A:329:LEU:C	1:A:330:HIS:CG	0.41	2.93	4	1
1:A:513:ASP:CG	1:A:514:LEU:H	0.41	2.19	4	1
1:A:292:GLY:O	1:A:295:GLN:OE1	0.41	2.39	4	1
1:A:290:LEU:HD11	1:A:370:ILE:HD13	0.41	1.92	10	1
1:A:714:ALA:O	1:A:717:LEU:N	0.41	2.41	10	1
1:A:695:ASP:O	1:A:697:ILE:N	0.41	2.53	10	1
1:A:187:ASP:OD1	1:A:187:ASP:N	0.41	2.49	9	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD1	0.41	2.89	9	1
1:A:13:ASP:CG	1:A:280:ALA:HB1	0.41	2.36	9	1
1:A:439:ILE:HD13	1:A:496:CYS:SG	0.41	2.56	8	1
1:A:526:LEU:HD13	1:A:526:LEU:O	0.41	2.16	8	1
1:A:430:ARG:HH12	1:A:459:ASP:CG	0.41	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:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:CE1	0.41	2.73	8	1
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:CB	0.41	2.69	8	1
1:A:449:ILE:HG13	1:A:503:GLN:H	0.41	1.74	3	1
1:A:575:ASP:C	1:A:577:LEU:H	0.41	2.18	3	1
1:A:373:TYR:O	1:A:377:VAL:CG2	0.41	2.67	2	1
1:A:23:GLU:OE1	1:A:24:VAL:N	0.41	2.54	2	1
1:A:271:CYS:O	1:A:272:GLU:C	0.41	2.58	2	1
1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:CD	0.41	2.59	6	1
1:A:169:TRP:CH2	1:A:172:ARG:NH2	0.41	2.89	6	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:54:LEU:N	0.41	2.84	6	1
1:A:660:LEU:N	1:A:660:LEU:HD12	0.41	2.29	7	1
1:A:632:ARG:H	1:A:632:ARG:HD3	0.41	1.75	5	1
1:A:453:PHE:C	1:A:455:ASP:N	0.41	2.74	5	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:429:ARG:O	0.41	2.54	5	1
1:A:125:ARG:C	1:A:127:ALA:N	0.41	2.71	5	1
1:A:623:ILE:CD1	1:A:623:ILE:H	0.41	2.27	5	1
1:A:170:VAL:O	1:A:174:LEU:HD23	0.41	2.16	5	1
1:A:570:GLU:CB	1:A:571:PRO:HD3	0.41	2.45	5	1
1:A:643:ALA:O	1:A:647:ARG:N	0.41	2.52	5	1
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:OD1	0.41	2.38	4	1
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:C	0.41	2.59	4	1
1:A:290:LEU:H	1:A:290:LEU:CD1	0.41	2.29	4	1
1:A:345:THR:HG21	1:A:360:GLY:HA3	0.41	1.93	10	1
1:A:444:ASN:ND2	1:A:445:ARG:N	0.41	2.68	10	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ARG:C	0.41	2.59	9	1
1:A:421:LYS:NZ	1:A:421:LYS:HB2	0.41	2.31	9	1
1:A:118:VAL:HG22	1:A:268:ILE:HD11	0.41	1.92	9	1
1:A:67:TRP:O	1:A:71:ASN:N	0.41	2.34	8	1
1:A:70:SER:O	1:A:71:ASN:O	0.41	2.39	8	1
1:A:606:TYR:CD1	1:A:606:TYR:C	0.41	2.94	8	1
1:A:491:LEU:C	1:A:491:LEU:CD1	0.41	2.89	8	1
1:A:388:ILE:O	1:A:423:GLY:N	0.41	2.44	3	1
1:A:334:LEU:HD21	1:A:387:TYR:CZ	0.41	2.51	3	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CG	0.41	3.09	3	1
1:A:175:ASP:O	1:A:179:PRO:CD	0.41	2.69	3	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD12	0.41	2.36	3	1
1:A:26:PRO:C	1:A:28:THR:H	0.41	2.19	2	1
1:A:366:MET:C	1:A:366:MET:SD	0.41	2.99	2	1
1:A:424:ILE:CD1	1:A:438:CYS:SG	0.41	3.09	2	1
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:CD	0.41	2.74	6	1
1:A:690:PHE:CD1	1:A:690:PHE:C	0.41	2.92	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:610:TRP:O	1:A:610:TRP:CE3	0.41	2.74	6	1
1:A:171:ARG:NH2	1:A:186:GLN:O	0.41	2.54	7	1
1:A:388:ILE:O	1:A:422:MET:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:278:VAL:O	1:A:278:VAL:CG1	0.41	2.62	1	1
1:A:391:PRO:O	1:A:393:MET:N	0.41	2.54	1	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:273:ASP:N	0.41	2.53	1	1
1:A:186:GLN:OE1	1:A:186:GLN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:14:ALA:O	1:A:15:ASN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:CG	0.41	2.59	5	1
1:A:466:GLU:OE2	1:A:466:GLU:O	0.41	2.39	5	1
1:A:720:LYS:C	1:A:722:SER:H	0.41	2.19	4	1
1:A:542:THR:O	1:A:543:LEU:C	0.41	2.57	4	1
1:A:3:GLN:CD	1:A:3:GLN:O	0.41	2.58	4	1
1:A:691:LYS:O	1:A:695:ASP:OD2	0.41	2.38	4	1
1:A:114:GLY:O	1:A:532:THR:HG22	0.41	2.16	10	1
1:A:503:GLN:CG	1:A:552:ASN:HD21	0.41	2.27	10	1
1:A:541:ALA:O	1:A:542:THR:C	0.41	2.58	10	1
1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:N	0.41	2.48	10	1
1:A:84:PHE:O	1:A:87:GLU:N	0.41	2.53	10	1
1:A:273:ASP:OD2	1:A:455:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:220:ARG:NH1	1:A:319:TYR:CE1	0.41	2.88	9	1
1:A:146:ASP:C	1:A:148:ILE:N	0.41	2.74	9	1
1:A:147:ILE:C	1:A:148:ILE:CG1	0.41	2.89	8	1
1:A:238:ILE:CG2	1:A:239:GLU:N	0.41	2.82	8	1
1:A:583:GLU:OE2	1:A:641:HIS:CD2	0.41	2.74	3	1
1:A:398:GLU:CD	1:A:398:GLU:N	0.41	2.75	3	1
1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:O	0.41	2.68	6	1
1:A:649:GLY:C	1:A:651:LEU:H	0.41	2.20	7	1
1:A:191:PHE:CG	1:A:229:ILE:CD1	0.41	3.04	1	1
1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:CZ2	0.41	2.89	1	1
1:A:560:ILE:HD12	1:A:561:ALA:N	0.41	2.31	1	1
1:A:273:ASP:O	1:A:274:SER:C	0.41	2.58	5	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CZ	0.41	2.74	5	1
1:A:632:ARG:HE	1:A:632:ARG:C	0.41	2.19	5	1
1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:O	0.41	2.38	5	1
1:A:542:THR:O	1:A:546:LEU:CD1	0.41	2.69	5	1
1:A:501:LYS:HZ2	1:A:501:LYS:HB3	0.41	1.76	5	1
1:A:135:TRP:CE3	1:A:135:TRP:O	0.41	2.73	4	1
1:A:333:SER:O	1:A:382:ARG:NH1	0.41	2.50	10	1
1:A:181:GLU:N	1:A:209:THR:O	0.41	2.47	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB3	0.41	2.15	10	1
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:CG	0.41	2.59	10	1
1:A:101:GLU:CG	1:A:101:GLU:O	0.41	2.69	9	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE2	0.41	2.38	9	1
1:A:498:LEU:C	1:A:498:LEU:CD2	0.41	2.90	8	1
1:A:454:LEU:HD12	1:A:507:GLY:O	0.41	2.16	8	1
1:A:584:ASN:C	1:A:584:ASN:OD1	0.40	2.59	3	1
1:A:265:ILE:CD1	1:A:265:ILE:H	0.40	2.22	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:ILE:C	0.40	2.60	6	2
1:A:103:THR:O	1:A:105:ILE:CD1	0.40	2.70	2	1
1:A:26:PRO:O	1:A:28:THR:N	0.40	2.54	2	1
1:A:243:ASP:H	1:A:257:ASN:HD22	0.40	1.59	2	1
1:A:195:ASP:O	1:A:195:ASP:OD1	0.40	2.39	2	1
1:A:713:HIS:O	1:A:717:LEU:N	0.40	2.40	2	1
1:A:517:ASP:O	1:A:518:MET:C	0.40	2.60	6	1
1:A:401:PHE:O	1:A:405:LEU:N	0.40	2.46	6	1
1:A:339:ASN:HD21	1:A:389:VAL:C	0.40	2.20	7	1
1:A:66:GLU:O	1:A:67:TRP:C	0.40	2.58	7	1
1:A:461:MET:C	1:A:463:SER:N	0.40	2.74	7	1
1:A:559:ASN:C	1:A:559:ASN:HD22	0.40	2.19	7	1
1:A:428:GLU:C	1:A:430:ARG:H	0.40	2.19	5	1
1:A:106:ASP:O	1:A:110:THR:N	0.40	2.51	5	1
1:A:83:SER:O	1:A:84:PHE:C	0.40	2.59	9	2
1:A:202:LEU:HG	1:A:207:GLU:H	0.40	1.76	4	1
1:A:296:GLY:O	1:A:332:ARG:NH2	0.40	2.54	4	1
1:A:134:ARG:HG2	1:A:263:ALA:HB3	0.40	1.93	10	1
1:A:38:ASN:O	1:A:42:ILE:CG2	0.40	2.69	10	1
1:A:719:GLU:OE1	1:A:719:GLU:C	0.40	2.59	10	1
1:A:490:VAL:HG22	1:A:529:GLY:O	0.40	2.15	10	1
1:A:346:ILE:H	1:A:359:GLU:HG3	0.40	1.75	9	1
1:A:383:THR:O	1:A:384:GLY:C	0.40	2.57	9	1
1:A:402:ALA:O	1:A:403:ASN:C	0.40	2.59	9	1
1:A:630:GLU:C	1:A:631:ASP:OD1	0.40	2.59	8	1
1:A:282:ASP:C	1:A:282:ASP:OD1	0.40	2.60	8	1
1:A:719:GLU:O	1:A:723:HIS:CE1	0.40	2.74	3	1
1:A:116:GLN:CD	1:A:266:SER:OG	0.40	2.60	2	1
1:A:116:GLN:OE1	1:A:450:ASN:CG	0.40	2.60	6	1
1:A:453:PHE:O	1:A:454:LEU:CB	0.40	2.68	6	1
1:A:597:ASP:OD1	1:A:598:ASN:N	0.40	2.53	6	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CG	0.40	2.69	6	1
1:A:402:ALA:HB1	1:A:406:PHE:CE1	0.40	2.50	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:568:GLU:CA	1:A:568:GLU:OE1	0.40	2.69	1	1
1:A:486:GLU:O	1:A:486:GLU:OE1	0.40	2.39	1	1
1:A:583:GLU:OE1	1:A:645:TRP:CH2	0.40	2.74	4	1
1:A:547:HIS:O	1:A:548:TYR:C	0.40	2.59	10	1
1:A:252:ASP:OD2	1:A:256:ILE:O	0.40	2.38	10	1
1:A:347:PRO:O	1:A:348:VAL:CG2	0.40	2.69	10	1
1:A:430:ARG:O	1:A:431:THR:O	0.40	2.38	10	1
1:A:336:PHE:CE1	1:A:421:LYS:CE	0.40	3.04	9	1
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:CG	0.40	2.60	9	1
1:A:606:TYR:O	1:A:606:TYR:CD1	0.40	2.74	9	1
1:A:569:PHE:HA	1:A:572:LEU:HD12	0.40	1.91	9	1
1:A:651:LEU:O	1:A:651:LEU:HD12	0.40	2.16	8	1
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:CB	0.40	2.68	8	1
1:A:571:PRO:O	1:A:574:ASP:CG	0.40	2.59	3	1
1:A:600:VAL:CG1	1:A:601:GLN:N	0.40	2.84	2	1
1:A:652:THR:O	1:A:653:LYS:C	0.40	2.60	2	1
1:A:135:TRP:CH2	1:A:239:GLU:OE2	0.40	2.75	2	1
1:A:511:MET:O	1:A:513:ASP:OD2	0.40	2.39	6	1
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:C	0.40	2.59	6	1
1:A:367:THR:C	1:A:369:ALA:N	0.40	2.74	6	1
1:A:599:ASN:O	1:A:600:VAL:C	0.40	2.59	6	1
1:A:436:ARG:N	1:A:436:ARG:CD	0.40	2.84	7	1
1:A:334:LEU:N	1:A:334:LEU:CD1	0.40	2.84	7	1
1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:C	0.40	2.60	1	1
1:A:270:ASP:N	1:A:270:ASP:OD1	0.40	2.54	1	1
1:A:437:SER:OG	1:A:438:CYS:N	0.40	2.55	1	1
1:A:509:TRP:CG	1:A:510:ALA:N	0.40	2.89	5	1
1:A:661:GLU:CG	1:A:662:ASN:N	0.40	2.85	5	1
1:A:609:ARG:NH2	1:A:613:GLN:OE1	0.40	2.55	4	1
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:CD1	0.40	2.88	4	1
1:A:148:ILE:O	1:A:149:PRO:C	0.40	2.59	4	1
1:A:668:ASP:O	1:A:669:GLN:C	0.40	2.59	10	1
1:A:270:ASP:C	1:A:338:ARG:HH21	0.40	2.19	9	1
1:A:450:ASN:ND2	1:A:534:TRP:CZ2	0.40	2.89	9	1
1:A:237:HIS:O	1:A:262:GLU:CD	0.40	2.60	8	1
1:A:547:HIS:C	1:A:547:HIS:CD2	0.40	2.95	3	1
1:A:123:ASN:ND2	1:A:125:ARG:H	0.40	2.14	3	1
1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CD	0.40	2.74	7	1
1:A:461:MET:O	1:A:462:HIS:C	0.40	2.58	1	1
1:A:461:MET:O	1:A:465:MET:CB	0.40	2.69	1	1
1:A:495:PHE:CZ	1:A:561:ALA:HB2	0.40	2.51	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:510:ALA:O	1:A:511:MET:C	0.40	2.60	5	1
1:A:403:ASN:ND2	1:A:403:ASN:O	0.40	2.54	5	1
1:A:268:ILE:HD11	1:A:338:ARG:N	0.40	2.31	10	1
1:A:299:GLN:CD	1:A:299:GLN:O	0.40	2.59	9	1
1:A:344:MET:C	1:A:345:THR:OG1	0.40	2.59	9	1
1:A:553:VAL:CG2	1:A:554:GLN:N	0.40	2.85	8	1
1:A:466:GLU:O	1:A:466:GLU:CD	0.40	2.60	8	1
1:A:188:VAL:HG13	1:A:200:ILE:HG23	0.40	1.93	3	1
1:A:545:ALA:O	1:A:549:HIS:CD2	0.40	2.75	3	1
1:A:418:ASN:CG	1:A:419:THR:H	0.40	2.19	6	1
1:A:606:TYR:CD1	1:A:630:GLU:O	0.40	2.75	6	1
1:A:576:LEU:O	1:A:578:THR:N	0.40	2.54	6	1
1:A:270:ASP:CG	1:A:271:CYS:H	0.40	2.19	7	1
1:A:579:ILE:O	1:A:579:ILE:CD1	0.40	2.70	7	1
1:A:353:GLU:O	1:A:354:GLY:C	0.40	2.58	7	1
1:A:145:SER:OG	1:A:539:THR:HG21	0.40	2.16	1	1
1:A:360:GLY:O	1:A:362:LEU:N	0.40	2.55	1	1
1:A:96:GLU:OE1	1:A:96:GLU:N	0.40	2.44	5	1
1:A:22:GLU:O	1:A:26:PRO:CG	0.40	2.70	5	1
1:A:49:GLU:O	1:A:53:LEU:HD12	0.40	2.17	4	1
1:A:550:GLN:O	1:A:550:GLN:HG3	0.40	2.16	10	1
1:A:484:ALA:O	1:A:487:ARG:CG	0.40	2.69	9	1
1:A:702:LYS:HD2	1:A:702:LYS:H	0.40	1.75	9	1
1:A:508:MET:C	1:A:509:TRP:CG	0.40	2.95	9	1
1:A:185:TYR:O	1:A:185:TYR:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:C	0.40	2.60	8	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	677/731 (93%)	520±10 (77±1%)	109±9 (16±1%)	48±4 (7±1%)	3	17
All	All	6770/7310 (93%)	5202 (77%)	1090 (16%)	478 (7%)	3	17

All 180 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	278	VAL	10
1	A	444	ASN	10
1	A	195	ASP	10
1	A	500	GLY	9
1	A	440	ALA	8
1	A	356	GLU	7
1	A	105	ILE	7
1	A	426	ASP	7
1	A	391	PRO	7
1	A	415	MET	7
1	A	330	HIS	7
1	A	121	ALA	6
1	A	417	PRO	6
1	A	445	ARG	6
1	A	414	GLY	6
1	A	211	ARG	6
1	A	314	ASN	5
1	A	394	HIS	5
1	A	358	PRO	5
1	A	513	ASP	5
1	A	325	SER	5
1	A	272	GLU	5
1	A	442	ALA	5
1	A	499	ARG	5
1	A	506	LYS	5
1	A	298	LEU	5
1	A	283	LYS	4
1	A	203	LYS	4
1	A	111	SER	4
1	A	30	LEU	4
1	A	418	ASN	4
1	A	149	PRO	4
1	A	650	ILE	4
1	A	626	VAL	4
1	A	580	PRO	4
1	A	428	GLU	4
1	A	124	ALA	4
1	A	432	SER	4
1	A	74	PRO	4
1	A	150	GLN	4
1	A	378	GLN	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	160	PRO	4
1	A	618	SER	4
1	A	706	GLY	4
1	A	420	LEU	4
1	A	446	VAL	4
1	A	217	VAL	3
1	A	95	PRO	3
1	A	326	GLU	3
1	A	270	ASP	3
1	A	255	HIS	3
1	A	451	THR	3
1	A	76	LYS	3
1	A	122	MET	3
1	A	113	ALA	3
1	A	416	ALA	3
1	A	137	SER	3
1	A	453	PHE	3
1	A	704	PRO	3
1	A	429	ARG	3
1	A	638	SER	3
1	A	179	PRO	3
1	A	585	ALA	3
1	A	392	LYS	3
1	A	348	VAL	3
1	A	197	GLN	3
1	A	120	PRO	3
1	A	280	ALA	3
1	A	90	TYR	3
1	A	384	GLY	3
1	A	135	TRP	3
1	A	345	THR	3
1	A	379	LYS	2
1	A	357	ILE	2
1	A	151	GLU	2
1	A	519	TYR	2
1	A	700	GLY	2
1	A	564	GLU	2
1	A	106	ASP	2
1	A	291	LEU	2
1	A	341	GLY	2
1	A	395	GLY	2
1	A	180	LEU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	637	ILE	2
1	A	152	GLY	2
1	A	372	LEU	2
1	A	505	GLY	2
1	A	26	PRO	2
1	A	511	MET	2
1	A	584	ASN	2
1	A	133	ALA	2
1	A	577	LEU	2
1	A	344	MET	2
1	A	627	ALA	2
1	A	214	ALA	2
1	A	419	THR	2
1	A	226	PRO	2
1	A	452	GLY	2
1	A	456	ARG	2
1	A	466	GLU	2
1	A	342	HIS	2
1	A	360	GLY	2
1	A	249	GLY	2
1	A	508	MET	2
1	A	431	THR	2
1	A	616	GLY	2
1	A	576	LEU	2
1	A	153	ALA	2
1	A	441	GLN	2
1	A	443	ARG	2
1	A	455	ASP	2
1	A	245	ASN	2
1	A	707	TYR	2
1	A	315	ASP	2
1	A	184	SER	2
1	A	393	MET	1
1	A	587	TRP	1
1	A	148	ILE	1
1	A	512	PRO	1
1	A	188	VAL	1
1	A	465	MET	1
1	A	254	ALA	1
1	A	586	ASN	1
1	A	547	HIS	1
1	A	322	ALA	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	632	ARG	1
1	A	29	GLY	1
1	A	501	LYS	1
1	A	492	SER	1
1	A	279	ASP	1
1	A	367	THR	1
1	A	296	GLY	1
1	A	543	LEU	1
1	A	623	ILE	1
1	A	36	TRP	1
1	A	459	ASP	1
1	A	430	ARG	1
1	A	234	ASN	1
1	A	297	THR	1
1	A	542	THR	1
1	A	423	GLY	1
1	A	274	SER	1
1	A	427	GLU	1
1	A	189	VAL	1
1	A	115	PRO	1
1	A	531	ASN	1
1	A	340	VAL	1
1	A	566	ASN	1
1	A	243	ASP	1
1	A	8	SER	1
1	A	705	ASN	1
1	A	3	GLN	1
1	A	78	LYS	1
1	A	721	GLU	1
1	A	646	LEU	1
1	A	699	LEU	1
1	A	313	LEU	1
1	A	583	GLU	1
1	A	271	CYS	1
1	A	210	LEU	1
1	A	550	GLN	1
1	A	619	LYS	1
1	A	72	PRO	1
1	A	578	THR	1
1	A	89	GLY	1
1	A	530	ALA	1
1	A	93	PRO	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	244	ALA	1
1	A	362	LEU	1
1	A	498	LEU	1
1	A	565	PHE	1
1	A	71	ASN	1
1	A	563	THR	1
1	A	507	GLY	1
1	A	454	LEU	1
1	A	227	THR	1
1	A	157	GLY	1
1	A	181	GLU	1
1	A	614	GLY	1
1	A	636	ARG	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	563/607 (93%)	469±4 (83±1%)	94±4 (17±1%)	6	43
All	All	5630/6070 (93%)	4690 (83%)	940 (17%)	6	43

All 396 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	498	LEU	9
1	A	191	PHE	8
1	A	494	LEU	8
1	A	10	LEU	7
1	A	298	LEU	7
1	A	128	LEU	7
1	A	491	LEU	7
1	A	444	ASN	6
1	A	632	ARG	6
1	A	105	ILE	6
1	A	579	ILE	6
1	A	506	LYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	279	ASP	6
1	A	313	LEU	6
1	A	362	LEU	6
1	A	449	ILE	6
1	A	143	TYR	5
1	A	647	ARG	5
1	A	204	ASN	5
1	A	418	ASN	5
1	A	335	LEU	5
1	A	336	PHE	5
1	A	515	MET	5
1	A	387	TYR	5
1	A	433	LEU	5
1	A	12	ILE	5
1	A	499	ARG	5
1	A	551	THR	5
1	A	482	ILE	5
1	A	485	TYR	5
1	A	584	ASN	5
1	A	330	HIS	5
1	A	443	ARG	5
1	A	18	ARG	4
1	A	445	ARG	4
1	A	534	TRP	4
1	A	312	LYS	4
1	A	122	MET	4
1	A	247	ARG	4
1	A	211	ARG	4
1	A	285	LEU	4
1	A	702	LYS	4
1	A	576	LEU	4
1	A	90	TYR	4
1	A	269	LEU	4
1	A	429	ARG	4
1	A	552	ASN	4
1	A	132	ASN	4
1	A	339	ASN	4
1	A	519	TYR	4
1	A	268	ILE	4
1	A	206	LYS	4
1	A	94	GLN	4
1	A	59	ARG	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	266	SER	4
1	A	453	PHE	4
1	A	88	LEU	4
1	A	409	ILE	4
1	A	446	VAL	4
1	A	138	LEU	4
1	A	532	THR	4
1	A	36	TRP	4
1	A	372	LEU	4
1	A	501	LYS	4
1	A	450	ASN	4
1	A	135	TRP	4
1	A	273	ASP	4
1	A	108	GLU	4
1	A	294	MET	4
1	A	646	LEU	4
1	A	283	LYS	3
1	A	586	ASN	3
1	A	182	ASN	3
1	A	30	LEU	3
1	A	139	TYR	3
1	A	186	GLN	3
1	A	537	SER	3
1	A	4	THR	3
1	A	16	PHE	3
1	A	427	GLU	3
1	A	631	ASP	3
1	A	711	LEU	3
1	A	201	GLN	3
1	A	628	LEU	3
1	A	185	TYR	3
1	A	117	LEU	3
1	A	548	TYR	3
1	A	129	ASN	3
1	A	67	TRP	3
1	A	319	TYR	3
1	A	134	ARG	3
1	A	401	PHE	3
1	A	293	LEU	3
1	A	481	TRP	3
1	A	379	LYS	3
1	A	587	TRP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	ILE	3
1	A	81	TYR	3
1	A	278	VAL	3
1	A	376	LYS	3
1	A	421	LYS	3
1	A	557	GLN	3
1	A	76	LYS	3
1	A	234	ASN	3
1	A	45	ASP	3
1	A	338	ARG	3
1	A	91	LEU	3
1	A	142	LEU	3
1	A	232	LYS	3
1	A	208	THR	3
1	A	707	TYR	3
1	A	393	MET	3
1	A	696	LEU	3
1	A	394	HIS	3
1	A	102	THR	3
1	A	641	HIS	3
1	A	451	THR	3
1	A	374	ASP	3
1	A	297	THR	3
1	A	526	LEU	3
1	A	325	SER	3
1	A	412	MET	3
1	A	199	ARG	3
1	A	712	LEU	3
1	A	125	ARG	3
1	A	281	GLU	3
1	A	245	ASN	3
1	A	212	THR	3
1	A	346	ILE	3
1	A	489	ASN	3
1	A	215	GLN	3
1	A	543	LEU	3
1	A	334	LEU	3
1	A	355	ASN	3
1	A	82	LYS	3
1	A	287	TYR	3
1	A	559	ASN	3
1	A	57	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	78	LYS	3
1	A	465	MET	3
1	A	651	LEU	3
1	A	456	ARG	3
1	A	25	LEU	3
1	A	645	TRP	3
1	A	618	SER	3
1	A	420	LEU	3
1	A	345	THR	3
1	A	242	ILE	2
1	A	381	SER	2
1	A	359	GLU	2
1	A	410	GLU	2
1	A	709	GLU	2
1	A	169	TRP	2
1	A	488	ASN	2
1	A	31	ASP	2
1	A	228	CYS	2
1	A	619	LYS	2
1	A	389	VAL	2
1	A	496	CYS	2
1	A	575	ASP	2
1	A	698	PHE	2
1	A	38	ASN	2
1	A	17	LYS	2
1	A	85	LEU	2
1	A	511	MET	2
1	A	574	ASP	2
1	A	432	SER	2
1	A	598	ASN	2
1	A	265	ILE	2
1	A	147	ILE	2
1	A	406	PHE	2
1	A	625	ASN	2
1	A	233	ASN	2
1	A	550	GLN	2
1	A	653	LYS	2
1	A	415	MET	2
1	A	454	LEU	2
1	A	370	ILE	2
1	A	171	ARG	2
1	A	539	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	37	ARG	2
1	A	6	THR	2
1	A	594	GLN	2
1	A	23	GLU	2
1	A	591	GLU	2
1	A	382	ARG	2
1	A	200	ILE	2
1	A	46	LEU	2
1	A	405	LEU	2
1	A	210	LEU	2
1	A	197	GLN	2
1	A	238	ILE	2
1	A	239	GLU	2
1	A	441	GLN	2
1	A	720	LYS	2
1	A	380	ASN	2
1	A	220	ARG	2
1	A	718	ARG	2
1	A	332	ARG	2
1	A	435	LEU	2
1	A	525	GLN	2
1	A	314	ASN	2
1	A	271	CYS	2
1	A	606	TYR	2
1	A	361	ILE	2
1	A	388	ILE	2
1	A	652	THR	2
1	A	604	LEU	2
1	A	569	PHE	2
1	A	663	MET	2
1	A	137	SER	2
1	A	601	GLN	2
1	A	97	ARG	2
1	A	344	MET	2
1	A	638	SER	2
1	A	366	MET	2
1	A	187	ASP	2
1	A	408	ARG	2
1	A	342	HIS	2
1	A	462	HIS	2
1	A	565	PHE	2
1	A	563	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	158	TYR	2
1	A	373	TYR	2
1	A	227	THR	2
1	A	177	SER	2
1	A	299	GLN	2
1	A	250	LYS	2
1	A	522	LYS	2
1	A	237	HIS	2
1	A	609	ARG	2
1	A	343	LEU	2
1	A	19	PHE	2
1	A	636	ARG	2
1	A	436	ARG	2
1	A	671	ASN	2
1	A	69	ARG	2
1	A	715	TRP	2
1	A	267	THR	2
1	A	448	PHE	2
1	A	655	GLN	2
1	A	430	ARG	2
1	A	487	ARG	2
1	A	378	GLN	2
1	A	236	LEU	2
1	A	595	GLU	2
1	A	518	MET	2
1	A	146	ASP	2
1	A	660	LEU	2
1	A	53	LEU	2
1	A	209	THR	2
1	A	257	ASN	2
1	A	383	THR	2
1	A	103	THR	2
1	A	99	THR	2
1	A	109	ILE	2
1	A	542	THR	2
1	A	503	GLN	2
1	A	9	ARG	2
1	A	419	THR	2
1	A	635	LEU	2
1	A	77	ASP	2
1	A	192	LYS	2
1	A	112	GLN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	577	LEU	2
1	A	644	ASN	2
1	A	290	LEU	2
1	A	357	ILE	1
1	A	413	LEU	1
1	A	159	ASP	1
1	A	21	ASP	1
1	A	612	GLU	1
1	A	375	LEU	1
1	A	151	GLU	1
1	A	637	ILE	1
1	A	270	ASP	1
1	A	22	GLU	1
1	A	11	ARG	1
1	A	459	ASP	1
1	A	116	GLN	1
1	A	634	THR	1
1	A	49	GLU	1
1	A	162	ARG	1
1	A	3	GLN	1
1	A	13	ASP	1
1	A	41	GLU	1
1	A	289	ASN	1
1	A	578	THR	1
1	A	56	GLU	1
1	A	126	TYR	1
1	A	58	ASP	1
1	A	670	GLN	1
1	A	544	HIS	1
1	A	140	ASP	1
1	A	243	ASP	1
1	A	252	ASP	1
1	A	437	SER	1
1	A	422	MET	1
1	A	703	GLN	1
1	A	231	LEU	1
1	A	316	ASP	1
1	A	504	ILE	1
1	A	546	LEU	1
1	A	15	ASN	1
1	A	665	LYS	1
1	A	260	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	ARG	1
1	A	65	ASP	1
1	A	7	GLN	1
1	A	86	ARG	1
1	A	629	MET	1
1	A	44	HIS	1
1	A	106	ASP	1
1	A	320	THR	1
1	A	198	LEU	1
1	A	572	LEU	1
1	A	350	TRP	1
1	A	661	GLU	1
1	A	288	ARG	1
1	A	352	SER	1
1	A	161	GLN	1
1	A	262	GLU	1
1	A	54	LEU	1
1	A	428	GLU	1
1	A	207	GLU	1
1	A	216	PHE	1
1	A	333	SER	1
1	A	514	LEU	1
1	A	282	ASP	1
1	A	439	ILE	1
1	A	690	PHE	1
1	A	337	ILE	1
1	A	717	LEU	1
1	A	668	ASP	1
1	A	508	MET	1
1	A	173	PHE	1
1	A	178	LEU	1
1	A	176	GLU	1
1	A	549	HIS	1
1	A	323	ASP	1
1	A	434	ASN	1
1	A	517	ASP	1
1	A	622	ASP	1
1	A	610	TRP	1
1	A	390	LYS	1
1	A	275	VAL	1
1	A	196	LYS	1
1	A	326	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	385	SER	1
1	A	411	THR	1
1	A	630	GLU	1
1	A	650	ILE	1
1	A	531	ASN	1
1	A	272	GLU	1
1	A	317	ARG	1
1	A	404	LYS	1
1	A	425	MET	1
1	A	150	GLN	1
1	A	407	THR	1
1	A	172	ARG	1
1	A	164	GLU	1
1	A	28	THR	1
1	A	219	TYR	1
1	A	71	ASN	1
1	A	599	ASN	1
1	A	509	TRP	1
1	A	654	GLU	1
1	A	96	GLU	1
1	A	241	GLN	1
1	A	295	GLN	1
1	A	662	ASN	1
1	A	460	GLU	1
1	A	564	GLU	1
1	A	492	SER	1
1	A	623	ILE	1
1	A	573	LEU	1
1	A	568	GLU	1
1	A	101	GLU	1
1	A	691	LYS	1
1	A	603	ILE	1
1	A	457	THR	1
1	A	570	GLU	1
1	A	713	HIS	1
1	A	699	LEU	1
1	A	697	ILE	1
1	A	392	LYS	1
1	A	669	GLN	1
1	A	461	MET	1
1	A	592	ILE	1
1	A	398	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	524	ASP	1
1	A	483	LYS	1
1	A	123	ASN	1
1	A	397	GLN	1
1	A	318	HIS	1
1	A	230	LEU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided