



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2022 – 03:20 PM EST

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

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.27
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.27

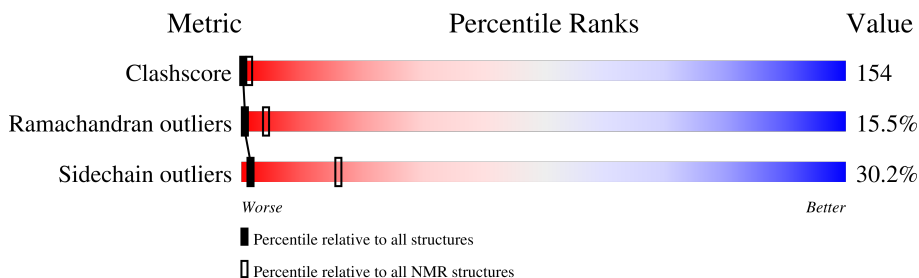
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	189	

2 Ensemble composition and analysis i

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

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:625-A:670, A:694-A:725, A:737-A:775, A:782-A:800 (136)	0.58	12

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

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

The models can be grouped into 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

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

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

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

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

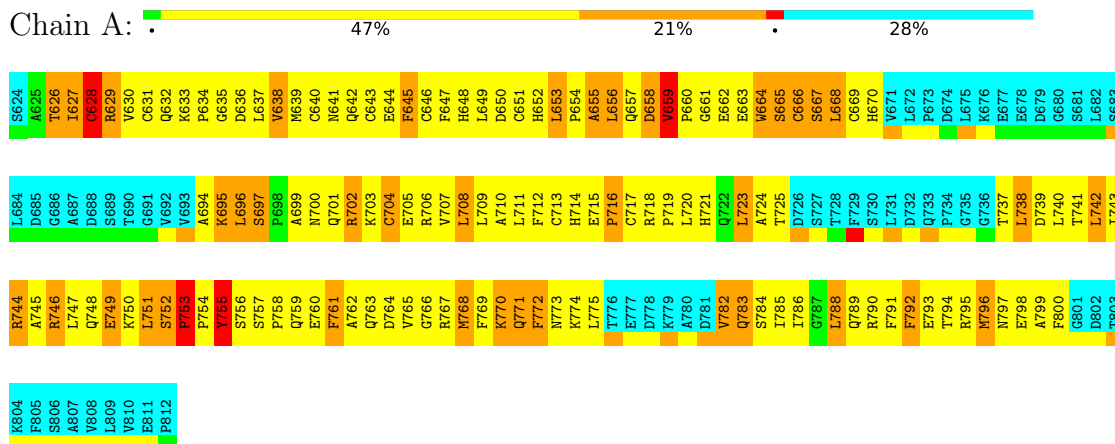
Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Zn
2	A	2	2	2

4 Residue-property plots i

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

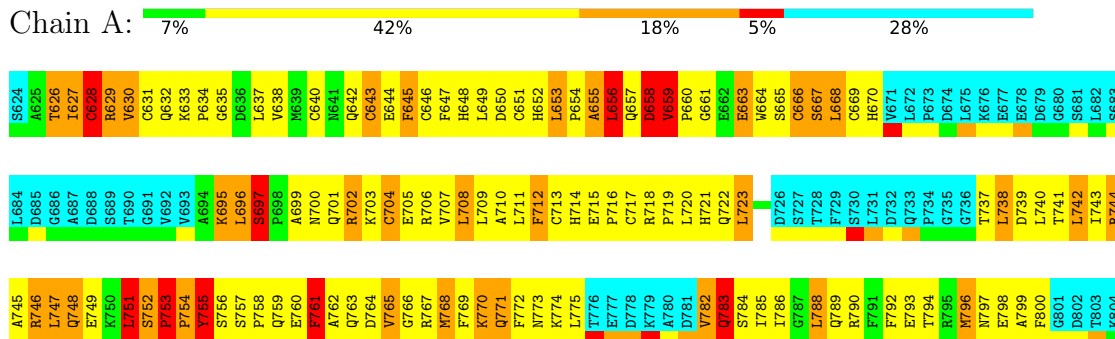


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

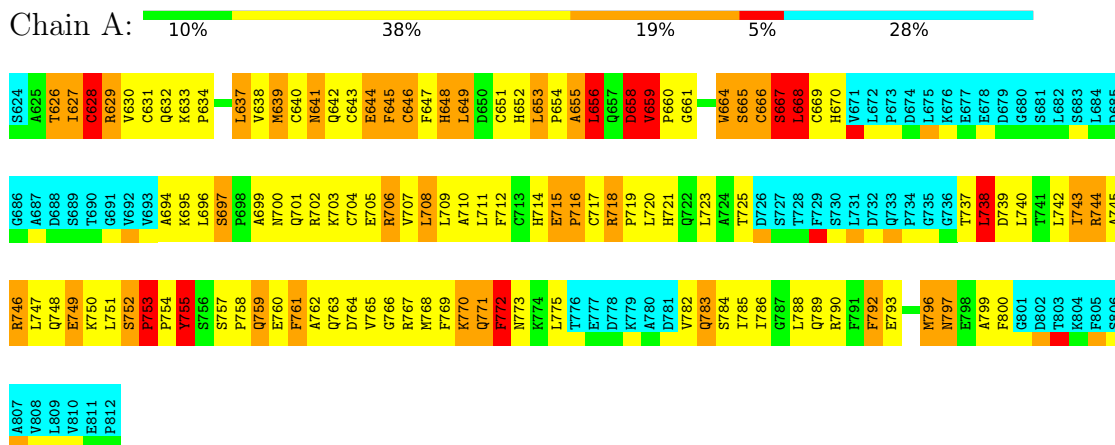
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





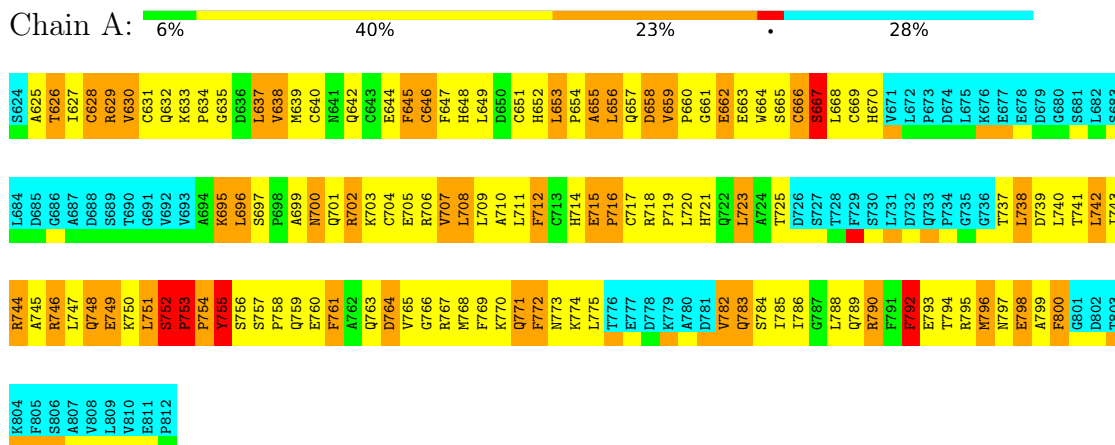
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



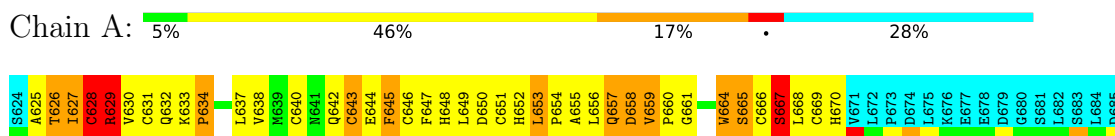
4.2.3 Score per residue for model 3

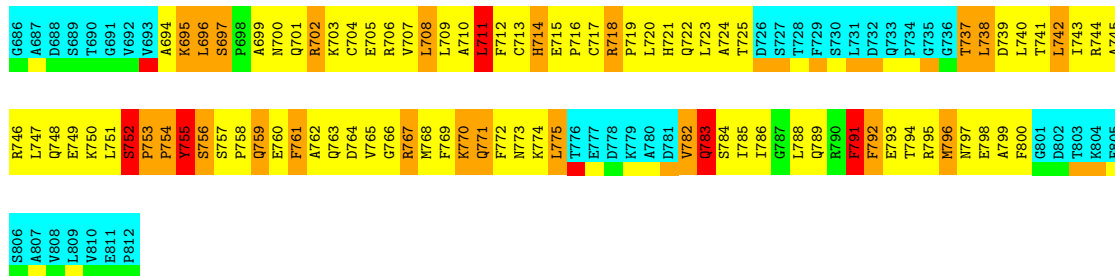
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.4 Score per residue for model 4

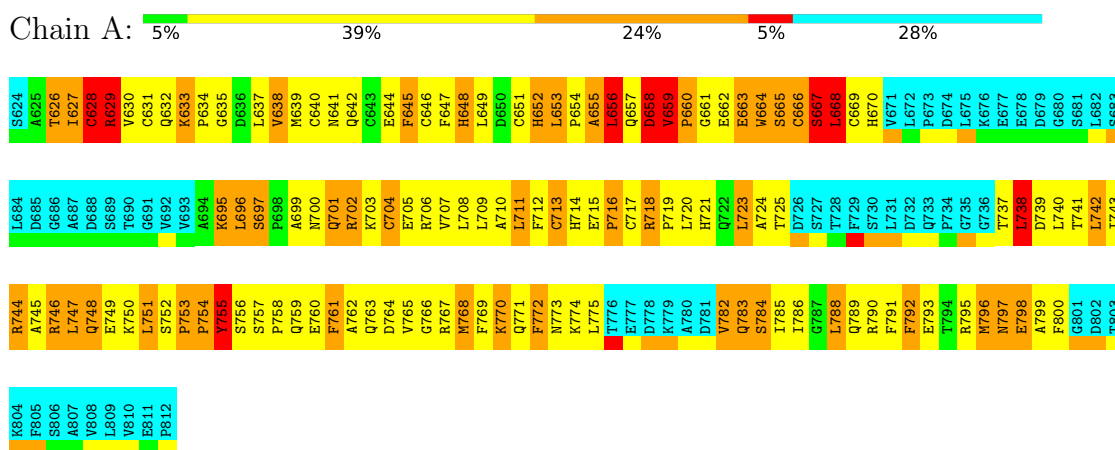
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





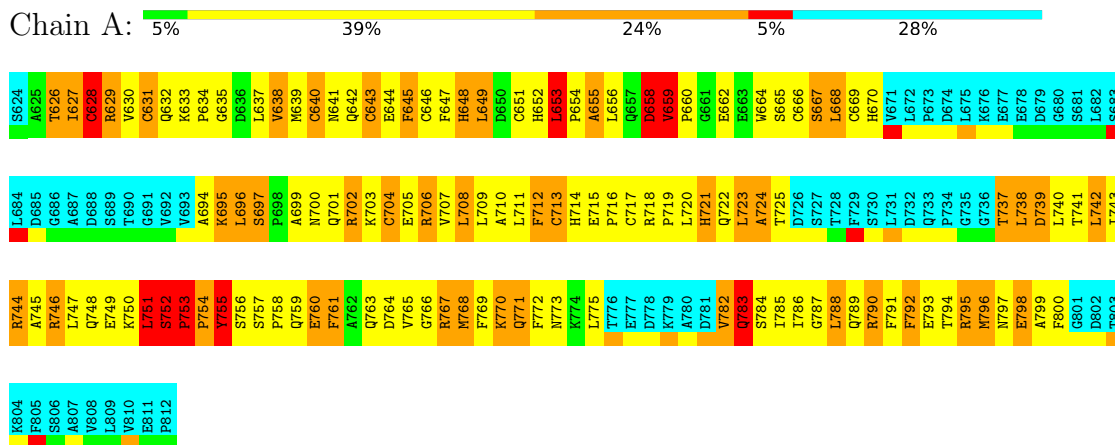
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



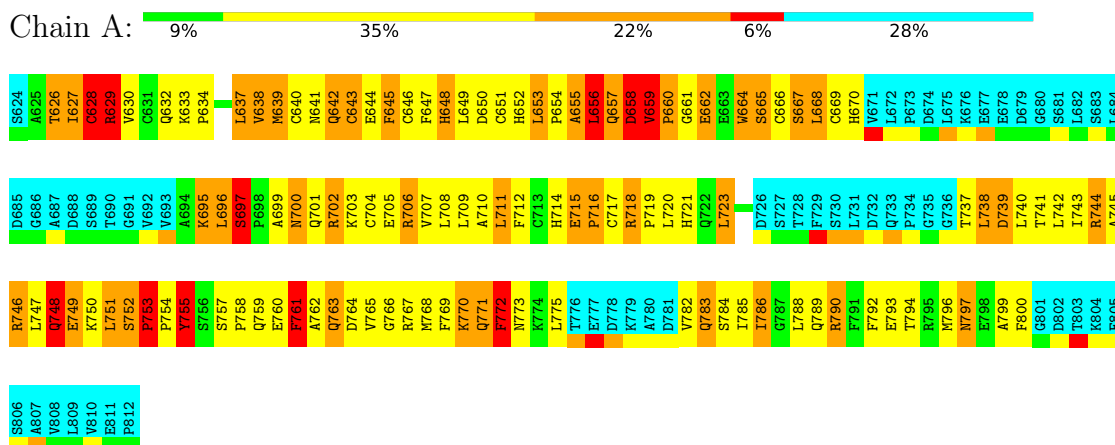
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



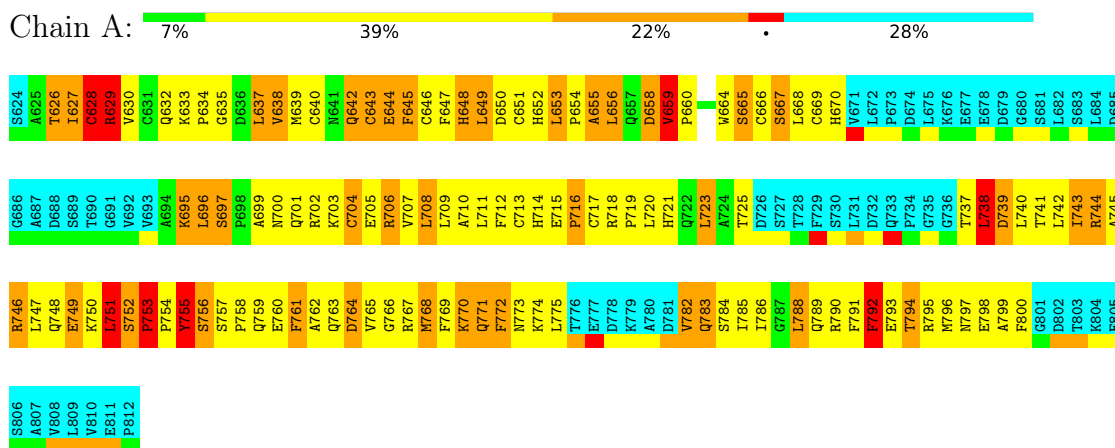
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



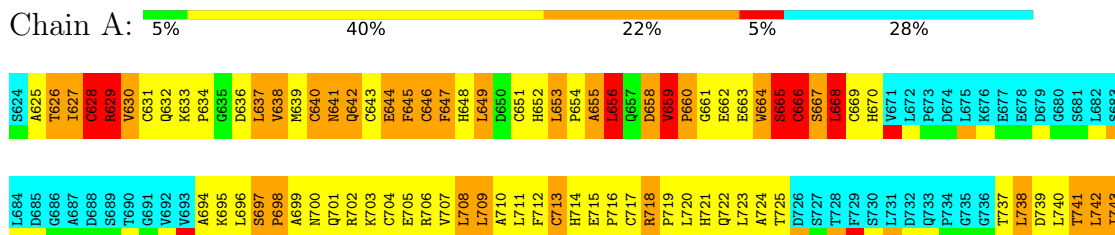
4.2.8 Score per residue for model 8

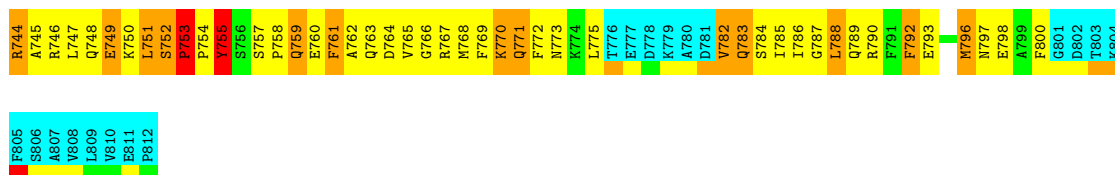
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.9 Score per residue for model 9

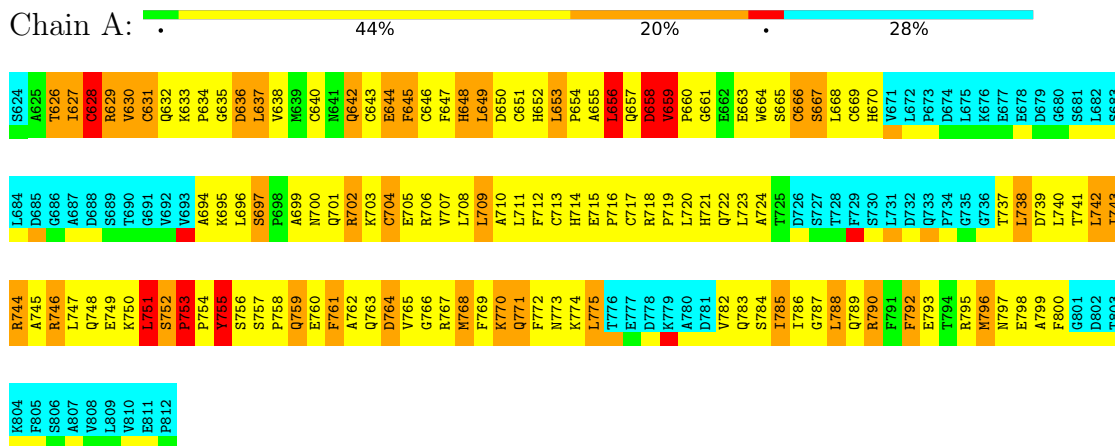
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta





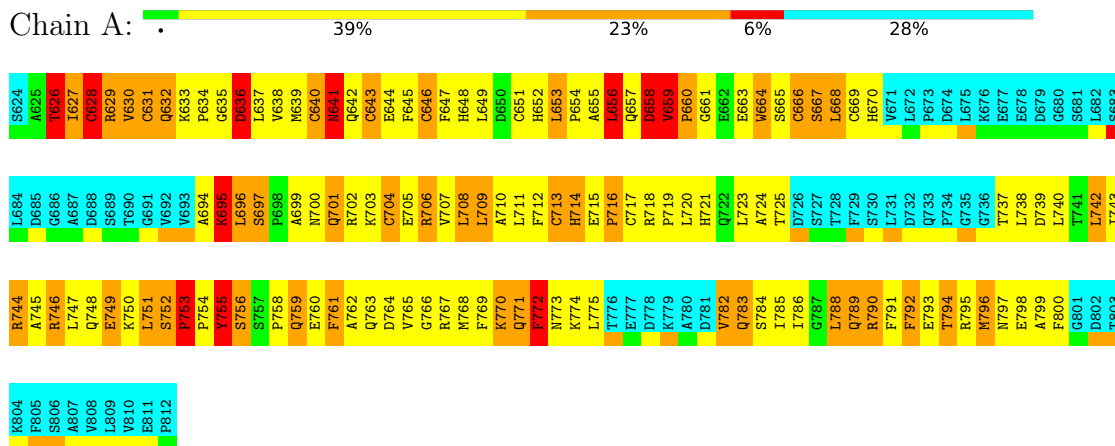
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.11 Score per residue for model 11

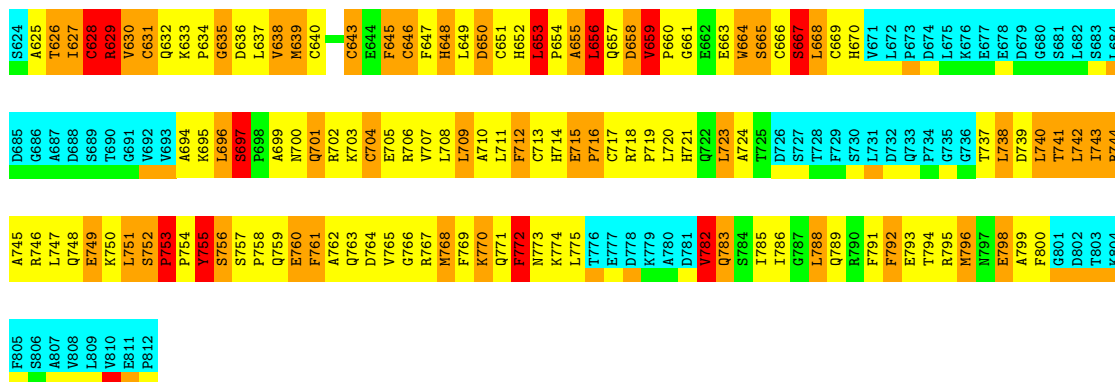
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

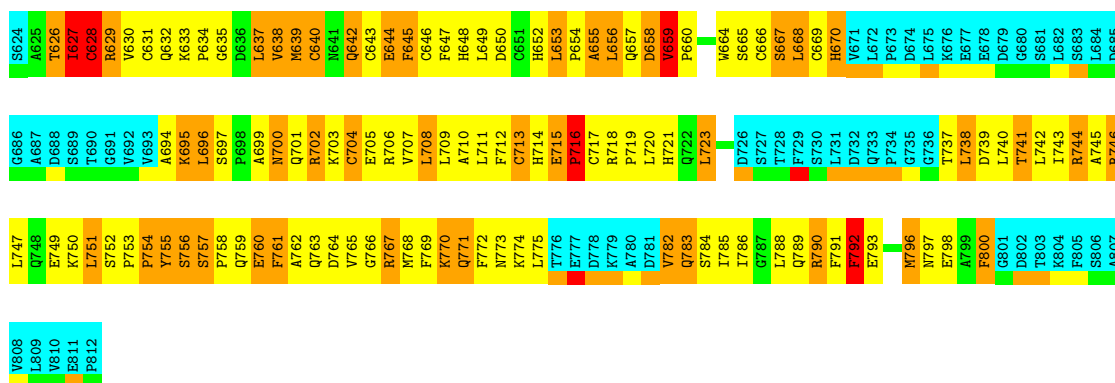




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

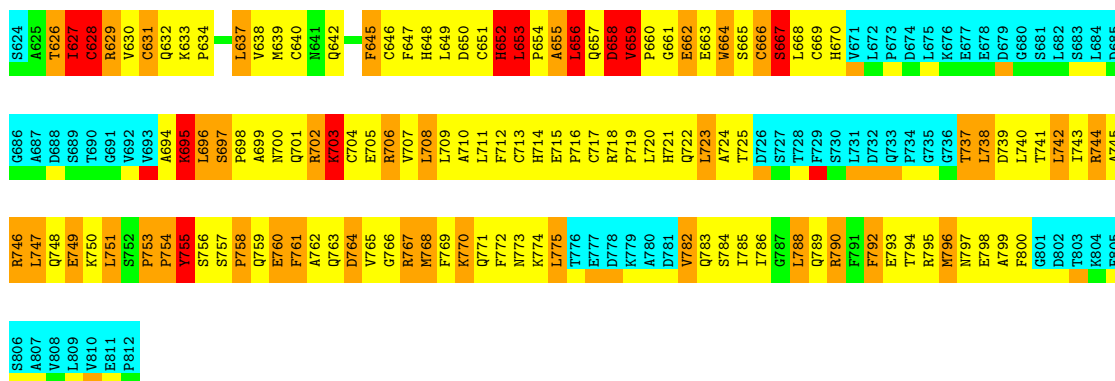
Chain A: 8% 38% 23% 28%



4.2.14 Score per residue for model 14

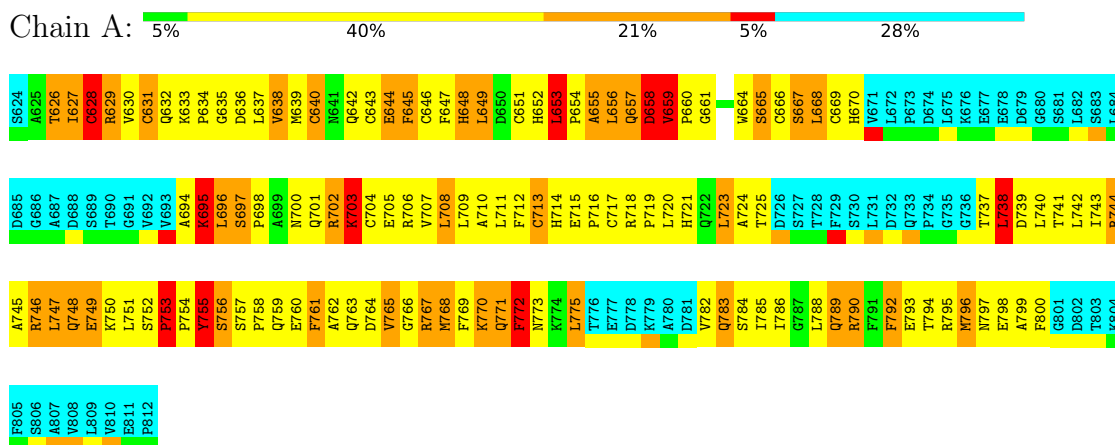
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

Chain A: 5% 41% 20% 6% 28%



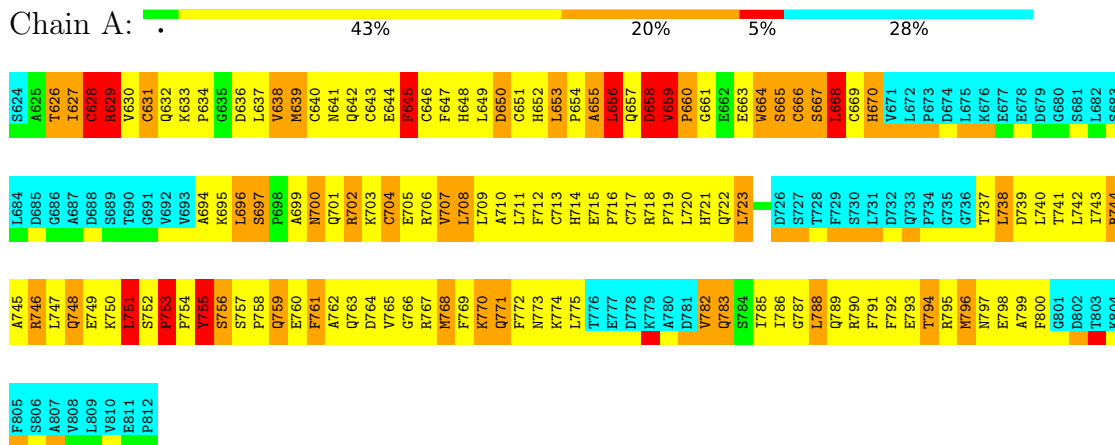
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



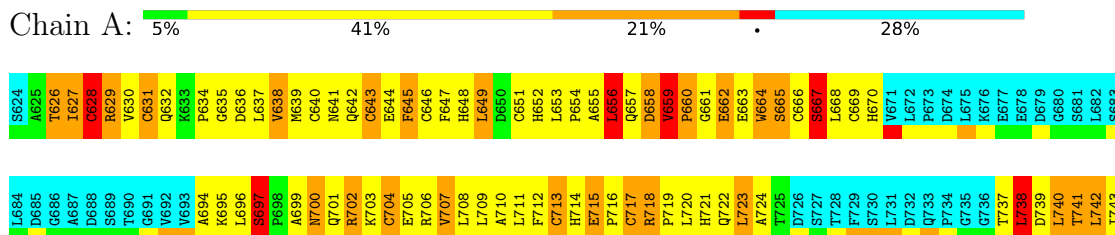
4.2.16 Score per residue for model 16

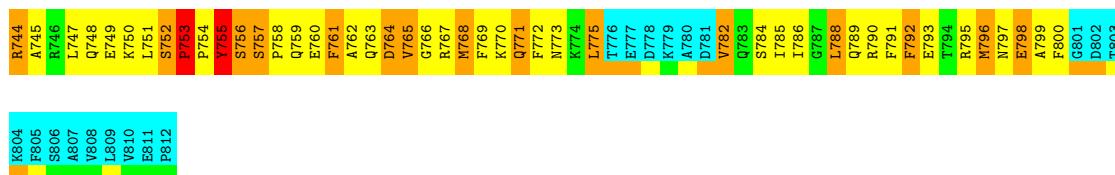
- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

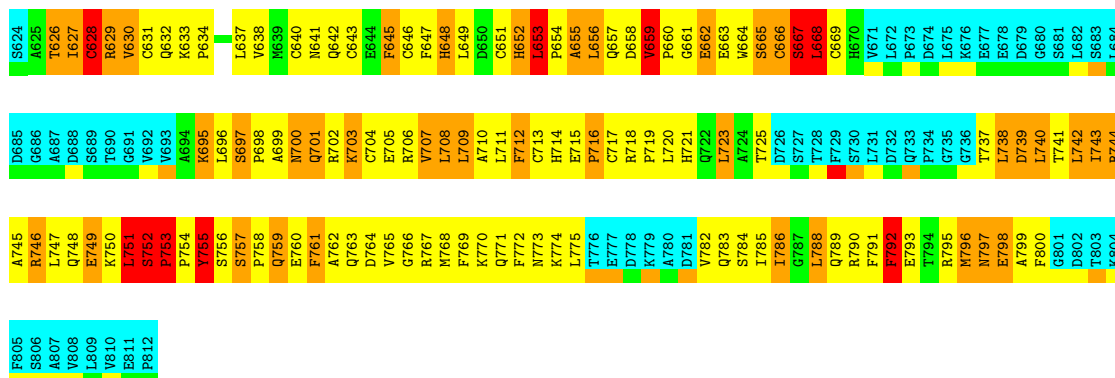




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

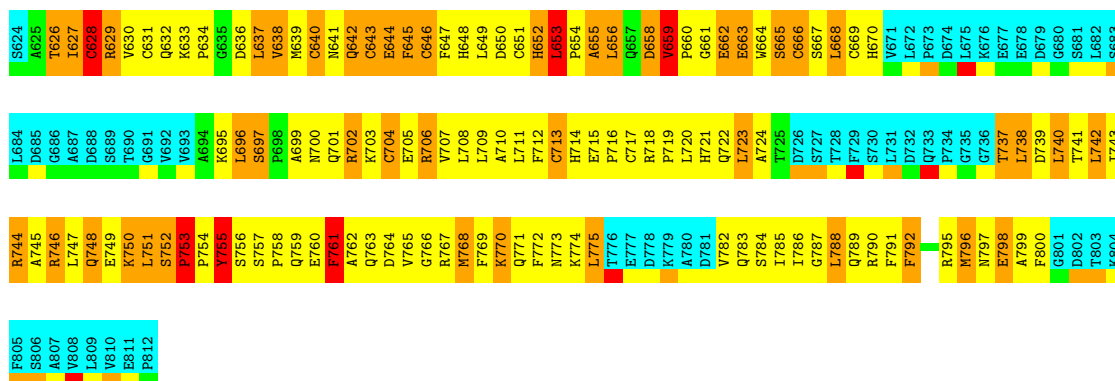
Chain A: 6% 40% 21% 5% 28%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

Chain A: 41% 23% 28%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transcription intermediary factor 1-beta

Chain A: 42% 22% 28%

K804	R744	S624
F805	A745	A625
S806	R746	T626
A807	L747	I627
V808	Q748	D628
L809	E749	S629
V810	K750	V630
E811	L751	C631
P812	S752	Q632
	P753	K633
	P754	P634
	Y755	Q635
	S756	L636
	S757	L637
	P758	V638
	Q759	M639
	E760	C640
	F761	N641
	A762	Q642
	Q763	C643
	D764	E644
	V765	F645
	G766	C646
	R767	F647
	M768	H648
	F769	L649
	K770	D650
	Q771	C651
	F772	H652
	N773	L653
	K774	P654
	L775	A655
	I776	L656
	E777	Q657
	D778	D658
	K779	V659
	A780	P660
	D781	G661
	V782	E662
	Q783	E663
	S784	M664
	I785	S665
	I786	C666
	G787	S667
	L788	L668
	Q789	C669
	R790	H670
	F791	L671
	E792	L672
	E793	P673
	T794	D674
	R795	L675
	M796	K676
	N797	E677
	E798	E678
	A799	D679
	F800	L740
	G801	T741
	D802	L742
	T803	I743
		S683

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

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

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

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

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

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

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1089	1081	1077	333±21
All	All	21820	21620	21540	6658

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 154.

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

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:HE2	0.75	1.40	19	7
1:A:640:CYS:HB2	1:A:666:CYS:HB3	0.75	1.58	3	7
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:CE	0.75	2.10	7	9
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD23	0.75	2.16	9	2
1:A:765:VAL:O	1:A:768:MET:HB2	0.75	1.82	15	16
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:HD11	0.75	1.57	7	9
1:A:638:VAL:O	1:A:646:CYS:HA	0.75	1.82	5	17
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD11	0.75	1.40	18	5
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HG	0.75	1.57	6	2
1:A:720:LEU:HD22	1:A:769:PHE:CZ	0.75	2.17	11	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:HB2	0.75	1.58	16	1
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HD13	0.74	1.82	16	13
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD13	0.74	1.59	3	3
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:CD2	0.74	2.17	16	2
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:HB2	0.74	1.82	8	18
1:A:638:VAL:HG21	1:A:656:LEU:HD21	0.74	1.57	17	1
1:A:751:LEU:HD22	1:A:752:SER:N	0.74	1.97	11	2
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:C	0.74	2.02	19	17
1:A:724:ALA:HB2	1:A:737:THR:HG22	0.74	1.56	6	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:628:CYS:O	0.74	2.44	16	12
1:A:751:LEU:HD13	1:A:752:SER:H	0.74	1.43	11	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD12	0.74	1.58	6	4
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:HD11	0.74	1.57	8	6
1:A:630:VAL:HG11	1:A:651:CYS:HB3	0.74	1.58	10	8
1:A:701:GLN:HA	1:A:704:CYS:SG	0.74	2.22	15	7
1:A:761:PHE:CD1	1:A:762:ALA:N	0.74	2.55	7	8
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE1	0.74	2.13	20	2
1:A:656:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG11	0.74	2.13	16	1
1:A:659:VAL:CB	1:A:660:PRO:HD2	0.74	2.12	16	1
1:A:739:ASP:C	1:A:768:MET:SD	0.74	2.66	20	11
1:A:711:LEU:HD13	1:A:791:PHE:CE2	0.74	2.18	4	1
1:A:649:LEU:HG	1:A:659:VAL:N	0.74	1.98	15	2
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CB	0.74	2.11	10	1
1:A:701:GLN:O	1:A:704:CYS:SG	0.74	2.45	20	3
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:CZ	0.74	2.18	14	4
1:A:765:VAL:HG11	1:A:792:PHE:CD1	0.74	2.18	4	14
1:A:711:LEU:HA	1:A:714:HIS:CE1	0.74	2.17	6	18
1:A:707:VAL:CG2	1:A:708:LEU:N	0.74	2.50	5	2
1:A:742:LEU:HD13	1:A:751:LEU:HD11	0.74	1.57	5	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:HB2	0.74	1.60	9	4
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD12	0.74	2.17	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:628:CYS:O	1:A:630:VAL:N	0.73	2.21	2	20
1:A:711:LEU:CB	1:A:740:LEU:HD11	0.73	2.13	11	6
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:HB3	0.73	1.83	11	6
1:A:752:SER:C	1:A:754:PRO:HD2	0.73	2.04	20	2
1:A:740:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE1	0.73	1.60	5	4
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG12	0.73	1.59	5	2
1:A:749:GLU:HA	1:A:754:PRO:HG3	0.73	1.60	1	1
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CG	0.73	2.36	6	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:HG22	0.73	1.84	2	4
1:A:716:PRO:O	1:A:719:PRO:HD2	0.73	1.82	4	19
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HB2	0.73	1.60	6	6
1:A:711:LEU:HA	1:A:714:HIS:NE2	0.73	1.99	11	12
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG13	0.73	1.59	5	11
1:A:723:LEU:HD12	1:A:738:LEU:O	0.73	1.82	3	8
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HE2	0.73	1.59	7	5
1:A:649:LEU:O	1:A:652:HIS:HB3	0.73	1.82	3	18
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:HE2	0.73	1.59	7	6
1:A:645:PHE:CE2	1:A:668:LEU:HD23	0.73	2.19	7	4
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HD2	0.73	2.13	16	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:768:MET:CE	0.73	2.14	17	2
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:H	0.72	1.44	6	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:O	0.72	2.07	17	5
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CD2	0.72	2.19	5	1
1:A:701:GLN:HB2	1:A:756:SER:O	0.72	1.84	20	2
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HG2	0.72	1.85	15	3
1:A:786:ILE:HG22	1:A:790:ARG:HD2	0.72	1.58	16	2
1:A:738:LEU:CD1	1:A:743:ILE:HD11	0.72	2.15	19	4
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:HD12	0.72	2.18	11	3
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HD21	0.72	2.20	11	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HG2	0.72	1.59	2	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HB2	0.72	1.61	12	4
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CE2	0.72	2.20	19	2
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:NE2	0.72	1.99	19	17
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:HD23	0.72	2.20	19	5
1:A:737:THR:HG23	1:A:738:LEU:N	0.71	1.99	6	1
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:HD13	0.71	2.00	16	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:HD2	0.71	1.43	16	1
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:HG	0.71	1.84	11	12
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:HD13	0.71	2.25	15	2
1:A:640:CYS:SG	1:A:665:SER:HA	0.71	2.24	4	17
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HD12	0.71	1.62	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:LEU:O	1:A:655:ALA:HA	0.71	1.85	5	16
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:HD2	0.71	1.43	7	5
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:HD13	0.71	1.61	13	3
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:HB2	0.71	1.60	10	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:CG	0.71	2.16	19	1
1:A:668:LEU:H	1:A:709:LEU:HD23	0.71	1.45	20	1
1:A:717:CYS:N	1:A:788:LEU:HD21	0.71	2.00	3	3
1:A:648:HIS:O	1:A:651:CYS:N	0.71	2.23	9	2
1:A:653:LEU:HD11	1:A:708:LEU:HB3	0.71	1.61	1	2
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:N	0.70	2.24	3	20
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD22	0.70	1.46	19	8
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:HB2	0.70	1.63	7	5
1:A:765:VAL:HG13	1:A:768:MET:HE3	0.70	1.63	9	5
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:HD2	0.70	1.59	16	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:633:LYS:C	0.70	2.05	3	7
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:CG1	0.70	2.17	9	4
1:A:747:LEU:HD22	1:A:761:PHE:HE2	0.70	1.44	4	2
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:CG2	0.70	2.16	9	4
1:A:708:LEU:HD23	1:A:747:LEU:HD12	0.70	1.63	8	3
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HA	0.70	1.62	15	8
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:CG	0.70	2.16	16	1
1:A:792:PHE:HA	1:A:795:ARG:NH2	0.70	2.02	6	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HA	0.70	1.62	19	2
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD23	0.70	1.47	13	2
1:A:761:PHE:CD1	1:A:761:PHE:C	0.70	2.65	5	14
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG12	0.70	1.87	3	2
1:A:743:ILE:HD11	1:A:765:VAL:N	0.70	2.02	12	3
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HB3	0.70	1.63	9	2
1:A:761:PHE:C	1:A:761:PHE:HD1	0.70	1.90	18	9
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HG3	0.70	1.64	20	2
1:A:792:PHE:HA	1:A:795:ARG:CZ	0.70	2.16	6	1
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CE1	0.70	2.22	13	6
1:A:742:LEU:O	1:A:745:ALA:HB3	0.69	1.87	11	9
1:A:660:PRO:HG3	1:A:664:TRP:CD1	0.69	2.22	16	2
1:A:737:THR:C	1:A:738:LEU:HD13	0.69	2.08	15	2
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CE1	0.69	2.22	17	5
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:HD12	0.69	2.07	11	2
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CA	0.69	2.17	13	4
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:CG	0.69	2.22	9	4
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:CB	0.69	2.17	13	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:HD12	0.69	2.22	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:N	0.69	2.03	5	4
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:HB2	0.69	1.87	4	1
1:A:740:LEU:HD21	1:A:768:MET:CE	0.69	2.17	5	2
1:A:769:PHE:O	1:A:773:ASN:HB2	0.69	1.87	8	12
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HD3	0.69	1.64	15	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:CD1	0.69	2.18	12	1
1:A:703:LYS:CE	1:A:799:ALA:HB3	0.69	2.18	18	2
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:HB2	0.69	1.88	5	10
1:A:786:ILE:HD12	1:A:789:GLN:NE2	0.69	2.03	7	2
1:A:656:LEU:HD11	1:A:660:PRO:HG3	0.69	1.63	9	3
1:A:666:CYS:O	1:A:668:LEU:N	0.69	2.26	11	11
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CG	0.69	2.23	3	1
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:CD2	0.69	2.17	19	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:CD	0.69	2.17	11	6
1:A:707:VAL:HG22	1:A:761:PHE:CZ	0.69	2.22	17	3
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD12	0.69	1.88	5	6
1:A:766:GLY:HA2	1:A:769:PHE:CD2	0.69	2.23	5	4
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD11	0.68	2.23	20	7
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:HB3	0.68	1.88	8	12
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:HB2	0.68	1.88	6	11
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HD13	0.68	2.22	19	6
1:A:660:PRO:HB2	1:A:664:TRP:HB2	0.68	1.64	3	12
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD21	0.68	1.63	2	5
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HD2	0.68	1.66	6	2
1:A:708:LEU:HB3	1:A:744:ARG:HH22	0.68	1.47	17	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HG23	0.68	1.64	14	3
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:HB2	0.68	1.66	4	6
1:A:649:LEU:HD22	1:A:659:VAL:HG12	0.68	1.64	16	1
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:HB3	0.68	1.88	10	2
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HB2	0.68	2.24	6	1
1:A:654:PRO:HA	1:A:748:GLN:NE2	0.68	2.04	6	10
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HB3	0.68	1.88	7	7
1:A:747:LEU:HD11	1:A:761:PHE:CE2	0.68	2.23	8	6
1:A:724:ALA:HB2	1:A:737:THR:O	0.68	1.88	11	3
1:A:742:LEU:HD22	1:A:746:ARG:NH2	0.68	2.04	11	1
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:CD1	0.68	2.19	13	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:CG1	0.68	2.78	9	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:708:LEU:HB3	0.68	2.17	9	6
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HG2	0.68	1.89	18	3
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:HG3	0.68	2.19	5	4
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD23	0.68	1.89	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:HD11	0.68	1.66	7	3
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HG12	0.68	1.64	19	1
1:A:703:LYS:CB	1:A:799:ALA:HB1	0.68	2.18	3	8
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:HB3	0.68	1.65	10	2
1:A:720:LEU:HD22	1:A:769:PHE:CE1	0.68	2.24	11	1
1:A:788:LEU:HD13	1:A:788:LEU:N	0.67	2.02	8	1
1:A:716:PRO:HG2	1:A:788:LEU:HD12	0.67	1.66	9	1
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HG	0.67	1.88	3	3
1:A:755:TYR:CE2	1:A:760:GLU:HB3	0.67	2.24	13	3
1:A:649:LEU:HD22	1:A:659:VAL:CG1	0.67	2.18	16	1
1:A:746:ARG:HD3	1:A:751:LEU:HG	0.67	1.65	18	1
1:A:703:LYS:O	1:A:707:VAL:HG23	0.67	1.89	7	7
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:HD2	0.67	1.65	5	8
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:CA	0.67	2.19	17	6
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:CB	0.67	2.42	6	7
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:LYS:HB2	0.67	1.67	11	7
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:CB	0.67	2.43	16	10
1:A:720:LEU:HD13	1:A:768:MET:CE	0.67	2.18	16	4
1:A:707:VAL:HG13	1:A:795:ARG:HH21	0.67	1.45	6	1
1:A:628:CYS:O	1:A:631:CYS:N	0.67	2.27	9	10
1:A:711:LEU:HG	1:A:740:LEU:CD2	0.67	2.20	4	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD21	0.67	2.25	11	4
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:HB3	0.67	1.65	6	3
1:A:761:PHE:C	1:A:761:PHE:CD1	0.67	2.68	18	2
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:HD12	0.67	2.24	4	8
1:A:696:LEU:HD13	1:A:747:LEU:HD12	0.67	1.65	3	1
1:A:743:ILE:HD11	1:A:761:PHE:O	0.67	1.90	2	1
1:A:720:LEU:HD12	1:A:723:LEU:CD1	0.67	2.15	18	6
1:A:712:PHE:CE2	1:A:740:LEU:HB3	0.66	2.24	6	5
1:A:721:HIS:O	1:A:741:THR:HG22	0.66	1.90	14	3
1:A:769:PHE:HE2	1:A:789:GLN:N	0.66	1.87	15	1
1:A:711:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD22	0.66	1.65	7	1
1:A:744:ARG:O	1:A:747:LEU:HB2	0.66	1.90	15	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:CG1	0.66	2.20	19	1
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:HB2	0.66	1.89	16	9
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG13	0.66	1.68	1	3
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CG	0.66	2.26	3	6
1:A:696:LEU:HD23	1:A:696:LEU:H	0.66	1.48	8	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:H	0.66	1.50	17	1
1:A:666:CYS:SG	1:A:668:LEU:HD13	0.66	2.31	20	1
1:A:717:CYS:O	1:A:718:ARG:C	0.66	2.34	3	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:630:VAL:HG12	1:A:631:CYS:N	0.66	2.05	20	7
1:A:738:LEU:CD1	1:A:742:LEU:HD13	0.66	2.21	18	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:647:PHE:O	0.66	1.90	5	10
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:HG2	0.66	2.05	15	4
1:A:703:LYS:HG2	1:A:799:ALA:HB1	0.66	1.67	5	2
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:LEU:H	0.66	1.51	5	1
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD11	0.66	2.25	18	3
1:A:701:GLN:N	1:A:757:SER:HB3	0.66	2.05	13	1
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:OG	0.66	2.14	13	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:768:MET:HE1	0.66	1.67	17	2
1:A:769:PHE:CD2	1:A:789:GLN:HG2	0.66	2.25	17	13
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:N	0.66	2.06	17	4
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:HD13	0.66	1.66	15	1
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:HB2	0.66	1.90	15	1
1:A:746:ARG:NE	1:A:751:LEU:HD13	0.66	2.06	2	2
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:HD2	0.66	1.67	6	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:HG2	0.66	1.67	13	2
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HB3	0.66	2.25	13	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD12	0.66	1.67	7	4
1:A:653:LEU:N	1:A:709:LEU:HD23	0.66	2.05	13	3
1:A:755:TYR:HE1	1:A:761:PHE:HB3	0.66	1.51	18	6
1:A:628:CYS:O	1:A:628:CYS:SG	0.66	2.53	6	8
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:N	0.66	2.29	16	11
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HD22	0.66	1.66	7	5
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:CG	0.66	2.21	15	9
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:HG3	0.66	2.06	7	3
1:A:745:ALA:O	1:A:748:GLN:N	0.66	2.29	9	2
1:A:647:PHE:C	1:A:649:LEU:H	0.65	1.94	2	17
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CD1	0.65	2.26	3	2
1:A:706:ARG:HD3	1:A:799:ALA:HB2	0.65	1.66	2	2
1:A:717:CYS:HB3	1:A:788:LEU:HD21	0.65	1.68	13	2
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:LEU:N	0.65	2.06	5	1
1:A:648:HIS:HB2	1:A:651:CYS:SG	0.65	2.31	19	11
1:A:765:VAL:HG22	1:A:768:MET:HE1	0.65	1.68	3	2
1:A:653:LEU:CD2	1:A:705:GLU:HA	0.65	2.21	13	3
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CG	0.65	2.25	5	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CD2	0.65	2.26	13	1
1:A:711:LEU:HB3	1:A:717:CYS:SG	0.65	2.31	20	1
1:A:753:PRO:HB2	1:A:754:PRO:CD	0.65	2.21	6	15
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HD2	0.65	2.22	3	4
1:A:746:ARG:HD3	1:A:751:LEU:HD13	0.65	1.69	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:N	0.65	2.30	5	10
1:A:695:LYS:C	1:A:756:SER:HA	0.65	2.11	5	5
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:NH2	0.65	2.05	17	1
1:A:765:VAL:HG23	1:A:769:PHE:CE2	0.65	2.26	19	1
1:A:788:LEU:O	1:A:789:GLN:C	0.65	2.35	18	7
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:HD22	0.65	1.68	4	2
1:A:668:LEU:HG	1:A:709:LEU:HD23	0.65	1.69	4	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:CD1	0.65	2.26	18	7
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:HB3	0.65	1.90	12	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CB	0.65	2.21	18	1
1:A:712:PHE:CE1	1:A:740:LEU:HB3	0.65	2.26	9	7
1:A:720:LEU:HD13	1:A:772:PHE:CD2	0.65	2.26	18	6
1:A:645:PHE:CE1	1:A:666:CYS:SG	0.65	2.90	19	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:CD2	0.65	2.84	20	1
1:A:755:TYR:CE1	1:A:760:GLU:CB	0.65	2.80	12	2
1:A:711:LEU:HD22	1:A:792:PHE:CD2	0.65	2.26	16	1
1:A:747:LEU:HB2	1:A:761:PHE:HD2	0.65	1.52	5	1
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:CD	0.65	2.73	16	1
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:N	0.65	2.30	6	8
1:A:705:GLU:N	1:A:747:LEU:HD21	0.65	2.07	3	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HB2	0.65	1.69	17	1
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:HB2	0.65	1.66	2	2
1:A:653:LEU:HD21	1:A:747:LEU:HD23	0.64	1.68	4	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:H	0.64	1.52	19	4
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HB3	0.64	1.69	8	2
1:A:738:LEU:HD22	1:A:768:MET:CG	0.64	2.21	17	1
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:HB2	0.64	1.92	9	7
1:A:707:VAL:CG1	1:A:761:PHE:CE1	0.64	2.80	3	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:C	0.64	2.13	7	3
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CA	0.64	2.22	19	2
1:A:649:LEU:CD2	1:A:656:LEU:HD23	0.64	2.23	18	6
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:CE1	0.64	2.85	4	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CE1	0.64	2.26	9	5
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:H	0.64	1.48	13	1
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HB	0.64	1.93	6	9
1:A:711:LEU:HB3	1:A:740:LEU:HD11	0.64	1.68	11	3
1:A:739:ASP:HA	1:A:768:MET:SD	0.64	2.31	1	4
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HB2	0.64	1.68	7	20
1:A:704:CYS:SG	1:A:705:GLU:N	0.64	2.70	20	2
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:HG2	0.64	1.69	20	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:HB3	0.64	1.68	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:757:SER:CB	1:A:758:PRO:HD2	0.64	2.23	13	2
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:CG1	0.64	2.22	8	7
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:CE1	0.64	2.28	19	6
1:A:740:LEU:HG	1:A:768:MET:SD	0.64	2.33	10	5
1:A:703:LYS:HD2	1:A:704:CYS:N	0.64	2.07	15	1
1:A:707:VAL:HG13	1:A:792:PHE:CZ	0.64	2.26	16	1
1:A:755:TYR:CE2	1:A:761:PHE:HB3	0.64	2.27	20	1
1:A:700:ASN:O	1:A:758:PRO:HG3	0.64	1.93	1	8
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:HD22	0.64	2.07	12	2
1:A:638:VAL:CG1	1:A:659:VAL:HG12	0.64	2.23	3	4
1:A:628:CYS:O	1:A:632:GLN:N	0.64	2.30	8	12
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:H	0.64	1.52	9	5
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:HG3	0.64	2.21	17	3
1:A:747:LEU:CG	1:A:755:TYR:OH	0.64	2.45	20	1
1:A:638:VAL:HG13	1:A:664:TRP:CZ3	0.64	2.28	18	4
1:A:723:LEU:HD22	1:A:775:LEU:HD11	0.64	1.69	17	1
1:A:714:HIS:O	1:A:717:CYS:SG	0.63	2.56	5	18
1:A:785:ILE:C	1:A:789:GLN:HG3	0.63	2.12	1	4
1:A:638:VAL:HG11	1:A:660:PRO:CD	0.63	2.23	19	11
1:A:653:LEU:HB3	1:A:654:PRO:CD	0.63	2.23	14	6
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HG	0.63	1.70	18	2
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:O	0.63	1.92	15	2
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:HD2	0.63	1.92	20	9
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:CG1	0.63	2.23	5	5
1:A:720:LEU:HD22	1:A:768:MET:HE3	0.63	1.69	8	2
1:A:649:LEU:HG	1:A:656:LEU:HB2	0.63	1.70	12	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:N	0.63	2.32	20	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:658:ASP:CA	0.63	2.23	12	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:664:TRP:CE3	0.63	2.27	9	9
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD13	0.63	2.28	8	2
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD22	0.63	1.71	9	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:CG	0.63	2.23	6	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:HD21	0.63	1.54	15	1
1:A:757:SER:HB3	1:A:758:PRO:CD	0.63	2.23	20	1
1:A:758:PRO:HB2	1:A:762:ALA:HB2	0.63	1.70	20	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:H	0.63	1.54	1	2
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:HD13	0.63	1.94	19	5
1:A:652:HIS:HB2	1:A:656:LEU:HD22	0.63	1.71	16	2
1:A:708:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD12	0.63	2.23	19	3
1:A:696:LEU:HD13	1:A:747:LEU:CD1	0.63	2.23	3	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE3	0.63	2.17	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:C	1:A:742:LEU:HD21	0.63	2.14	7	2
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:HB2	0.63	1.69	13	2
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:HG3	0.63	1.94	20	2
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:CB	0.63	2.18	9	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD11	0.63	2.28	2	5
1:A:656:LEU:HD21	1:A:660:PRO:CG	0.63	2.22	7	6
1:A:746:ARG:HE	1:A:751:LEU:HD13	0.62	1.54	2	2
1:A:711:LEU:C	1:A:717:CYS:SG	0.62	2.77	17	3
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HG3	0.62	1.94	6	1
1:A:718:ARG:HG3	1:A:719:PRO:HD3	0.62	1.71	4	2
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CB	0.62	2.24	8	3
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:CD1	0.62	2.82	17	8
1:A:665:SER:HB3	1:A:670:HIS:HB2	0.62	1.70	11	1
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:HB2	0.62	1.69	16	14
1:A:740:LEU:HD23	1:A:768:MET:CE	0.62	2.23	3	4
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:HB2	0.62	1.94	8	13
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG13	0.62	1.95	5	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:701:GLN:CA	0.62	2.24	16	2
1:A:630:VAL:HG11	1:A:647:PHE:CE2	0.62	2.29	9	1
1:A:628:CYS:N	1:A:637:LEU:HG	0.62	2.09	3	5
1:A:769:PHE:HB3	1:A:785:ILE:CG2	0.62	2.23	11	3
1:A:755:TYR:CE2	1:A:758:PRO:HA	0.62	2.30	16	7
1:A:638:VAL:HG21	1:A:656:LEU:CD2	0.62	2.24	17	2
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:CG1	0.62	2.23	16	1
1:A:656:LEU:HD23	1:A:659:VAL:HG11	0.62	1.70	16	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:743:ILE:HG13	0.62	1.70	18	1
1:A:666:CYS:SG	1:A:668:LEU:CD1	0.62	2.87	20	1
1:A:626:THR:O	1:A:646:CYS:SG	0.62	2.55	2	13
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HB2	0.62	2.10	5	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:758:PRO:N	0.62	2.09	7	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:CD1	0.62	2.25	8	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD22	0.62	1.69	11	1
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:CD1	0.62	2.30	15	2
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:NH1	0.62	2.08	17	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:765:VAL:HG12	0.62	2.24	19	1
1:A:755:TYR:HE2	1:A:761:PHE:HB3	0.62	1.54	20	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HD12	0.62	1.69	2	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:746:ARG:HH11	0.62	1.54	3	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CZ	0.62	2.30	5	1
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HD2	0.62	1.53	8	2
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HB2	0.62	1.95	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:HD23	0.62	1.71	7	4
1:A:656:LEU:HB3	1:A:659:VAL:HB	0.62	1.71	16	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:CD1	0.62	2.24	1	4
1:A:653:LEU:CD1	1:A:705:GLU:O	0.62	2.48	17	6
1:A:665:SER:CB	1:A:669:CYS:SG	0.62	2.87	7	5
1:A:755:TYR:H	1:A:760:GLU:HG2	0.62	1.55	4	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:760:GLU:OE2	0.62	1.95	6	1
1:A:708:LEU:O	1:A:711:LEU:N	0.62	2.33	18	1
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE3	0.62	2.25	2	3
1:A:645:PHE:CD2	1:A:668:LEU:HD23	0.62	2.29	16	2
1:A:652:HIS:CG	1:A:652:HIS:O	0.62	2.53	14	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD23	0.62	1.72	15	2
1:A:639:MET:HA	1:A:645:PHE:O	0.62	1.93	2	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:HD12	0.62	1.70	7	2
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:HG2	0.62	1.72	16	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:CD1	0.62	2.23	4	2
1:A:653:LEU:CG	1:A:708:LEU:HB3	0.62	2.25	14	4
1:A:758:PRO:O	1:A:759:GLN:C	0.62	2.36	20	2
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:HB	0.62	1.55	18	3
1:A:696:LEU:N	1:A:756:SER:HA	0.61	2.10	3	3
1:A:668:LEU:CD2	1:A:710:ALA:HB2	0.61	2.22	5	3
1:A:755:TYR:CE2	1:A:760:GLU:HB2	0.61	2.30	6	1
1:A:717:CYS:HB3	1:A:788:LEU:HD11	0.61	1.72	9	2
1:A:652:HIS:HD1	1:A:656:LEU:HD22	0.61	1.54	12	1
1:A:738:LEU:O	1:A:738:LEU:HD13	0.61	1.94	17	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:NE2	0.61	2.10	1	1
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:CB	0.61	2.48	4	10
1:A:747:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CD2	0.61	2.29	11	5
1:A:660:PRO:O	1:A:662:GLU:N	0.61	2.33	19	8
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:CD1	0.61	2.25	5	5
1:A:701:GLN:HE22	1:A:747:LEU:HD22	0.61	1.54	1	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:796:MET:HE3	0.61	1.71	13	5
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:HB2	0.61	2.25	17	7
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:HB2	0.61	1.71	3	2
1:A:720:LEU:CD1	1:A:723:LEU:HD11	0.61	2.17	3	5
1:A:696:LEU:HG	1:A:697:SER:N	0.61	2.08	16	2
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:CD1	0.61	2.83	9	1
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD22	0.61	1.72	19	1
1:A:668:LEU:O	1:A:668:LEU:HD22	0.61	1.95	20	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:HG2	0.61	1.71	14	3
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:HA	0.61	2.34	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:HD3	0.61	1.96	4	2
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:CE1	0.61	2.30	15	2
1:A:701:GLN:HG3	1:A:704:CYS:SG	0.61	2.36	20	1
1:A:665:SER:O	1:A:669:CYS:HB2	0.61	1.96	1	9
1:A:720:LEU:CA	1:A:723:LEU:HD21	0.61	2.22	12	5
1:A:630:VAL:HA	1:A:713:CYS:HA	0.61	1.72	14	6
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:N	0.61	2.33	10	2
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:CB	0.61	2.25	16	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CZ	0.61	2.26	17	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:H	0.61	2.08	1	5
1:A:667:SER:C	1:A:669:CYS:H	0.61	1.98	9	10
1:A:765:VAL:CG1	1:A:769:PHE:CZ	0.61	2.84	13	13
1:A:755:TYR:CZ	1:A:761:PHE:HB3	0.61	2.31	11	4
1:A:653:LEU:HB3	1:A:654:PRO:HD3	0.61	1.73	5	15
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HD22	0.61	1.73	20	4
1:A:712:PHE:O	1:A:717:CYS:SG	0.61	2.58	18	11
1:A:740:LEU:HD22	1:A:768:MET:SD	0.61	2.35	6	3
1:A:745:ALA:O	1:A:749:GLU:N	0.61	2.34	11	15
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:CA	0.61	2.23	11	3
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:HB2	0.61	1.96	13	12
1:A:717:CYS:SG	1:A:740:LEU:HD21	0.61	2.35	17	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HB2	0.61	1.73	14	6
1:A:665:SER:O	1:A:666:CYS:C	0.61	2.38	9	8
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:HB2	0.61	1.96	12	3
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:HA	0.61	1.72	7	1
1:A:702:ARG:HG3	1:A:703:LYS:HD3	0.61	1.73	19	1
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:N	0.61	2.33	13	10
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:HD22	0.61	2.36	20	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:CD	0.61	2.26	1	16
1:A:712:PHE:CZ	1:A:744:ARG:HD3	0.61	2.30	13	7
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:HB3	0.61	1.96	2	3
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CD2	0.61	2.31	16	4
1:A:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:CD2	0.61	2.26	9	1
1:A:788:LEU:HD23	1:A:789:GLN:N	0.61	2.11	11	1
1:A:695:LYS:HB3	1:A:756:SER:HB2	0.61	1.72	13	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:HB3	0.61	1.71	18	2
1:A:638:VAL:HG13	1:A:647:PHE:HB2	0.61	1.71	17	1
1:A:753:PRO:N	1:A:754:PRO:HD2	0.60	2.10	1	2
1:A:755:TYR:CD1	1:A:760:GLU:HG2	0.60	2.31	7	4
1:A:746:ARG:HD2	1:A:751:LEU:HB3	0.60	1.72	3	1
1:A:627:ILE:O	1:A:629:ARG:N	0.60	2.34	5	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:645:PHE:CB	1:A:666:CYS:SG	0.60	2.90	1	3
1:A:626:THR:O	1:A:634:PRO:HA	0.60	1.96	3	1
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:HZ	0.60	1.55	4	2
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:HB2	0.60	1.96	17	2
1:A:769:PHE:HE1	1:A:788:LEU:HD23	0.60	1.53	9	1
1:A:637:LEU:HD12	1:A:647:PHE:C	0.60	2.16	10	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:757:SER:C	0.60	2.15	13	1
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:HD3	0.60	2.25	12	5
1:A:638:VAL:HG12	1:A:660:PRO:C	0.60	2.17	16	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:742:LEU:HD13	0.60	1.73	18	1
1:A:761:PHE:CD2	1:A:762:ALA:N	0.60	2.70	1	1
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:HB2	0.60	1.72	15	4
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HG12	0.60	1.56	10	2
1:A:655:ALA:HB1	1:A:657:GLN:HG3	0.60	1.73	15	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CZ	0.60	2.27	17	1
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:CH2	0.60	2.89	2	4
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:CG2	0.60	2.26	2	3
1:A:744:ARG:C	1:A:744:ARG:HD2	0.60	2.17	6	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CB	0.60	2.26	13	2
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:O	0.60	1.96	1	3
1:A:720:LEU:CG	1:A:740:LEU:HD21	0.60	2.26	7	3
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:CG	0.60	2.26	3	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD23	0.60	1.72	14	6
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HD23	0.60	1.74	6	4
1:A:762:ALA:CA	1:A:765:VAL:HG12	0.60	2.26	5	2
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:CD2	0.60	2.27	16	4
1:A:627:ILE:HA	1:A:637:LEU:HD21	0.60	1.72	8	2
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:CB	0.60	2.80	12	4
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HG3	0.60	1.97	8	10
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:HB	0.60	1.97	8	12
1:A:708:LEU:N	1:A:761:PHE:HZ	0.60	1.94	13	2
1:A:738:LEU:CD2	1:A:767:ARG:HB3	0.60	2.25	13	3
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:CB	0.60	2.25	12	10
1:A:771:GLN:C	1:A:775:LEU:HD13	0.60	2.17	7	2
1:A:795:ARG:HA	1:A:798:GLU:HB2	0.60	1.73	6	8
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HZ3	0.60	1.39	4	2
1:A:765:VAL:HG22	1:A:768:MET:HE2	0.60	1.72	13	4
1:A:702:ARG:O	1:A:706:ARG:HG3	0.60	1.97	10	2
1:A:638:VAL:CG1	1:A:647:PHE:O	0.60	2.49	11	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:744:ARG:HD2	0.60	1.74	14	1
1:A:703:LYS:HZ3	1:A:799:ALA:HB3	0.60	1.57	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:HG12	0.60	1.72	11	4
1:A:649:LEU:CA	1:A:656:LEU:HB2	0.60	2.27	16	3
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CD2	0.60	2.26	8	1
1:A:629:ARG:HH22	1:A:666:CYS:HB2	0.60	1.57	9	1
1:A:630:VAL:HG11	1:A:647:PHE:CD2	0.60	2.31	9	1
1:A:765:VAL:CG2	1:A:792:PHE:CE1	0.60	2.85	19	1
1:A:638:VAL:HG21	1:A:660:PRO:CG	0.59	2.27	14	5
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HD22	0.59	2.12	9	1
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CA	0.59	2.27	10	1
1:A:626:THR:C	1:A:627:ILE:HG13	0.59	2.17	6	14
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:HB2	0.59	1.97	20	12
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:N	0.59	2.12	13	7
1:A:699:ALA:O	1:A:702:ARG:HB2	0.59	1.97	20	12
1:A:709:LEU:HA	1:A:712:PHE:HB2	0.59	1.73	8	10
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:N	0.59	2.35	20	2
1:A:720:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HD21	0.59	1.72	5	1
1:A:746:ARG:N	1:A:751:LEU:HB2	0.59	2.11	7	4
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:H	0.59	2.00	11	1
1:A:666:CYS:O	1:A:666:CYS:SG	0.59	2.61	11	6
1:A:720:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD21	0.59	2.27	2	4
1:A:772:PHE:HE2	1:A:788:LEU:HD23	0.59	1.54	4	1
1:A:648:HIS:O	1:A:650:ASP:N	0.59	2.35	19	3
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:CE	0.59	2.51	15	1
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:HG	0.59	1.97	18	1
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:HD3	0.59	2.27	18	6
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HA	0.59	2.13	1	12
1:A:744:ARG:CZ	1:A:748:GLN:HG3	0.59	2.28	2	1
1:A:703:LYS:HD3	1:A:800:PHE:HA	0.59	1.73	13	4
1:A:711:LEU:HD12	1:A:788:LEU:HD11	0.59	1.73	4	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:HG3	0.59	1.72	5	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:HA	0.59	1.75	8	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HG12	0.59	2.13	11	2
1:A:717:CYS:CB	1:A:788:LEU:HD21	0.59	2.27	13	1
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CG	0.59	2.09	15	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:714:HIS:NE2	0.59	2.12	17	2
1:A:638:VAL:O	1:A:638:VAL:HG13	0.59	1.97	1	1
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:OD1	0.59	1.96	3	1
1:A:701:GLN:HG3	1:A:747:LEU:HD11	0.59	1.74	16	2
1:A:740:LEU:HA	1:A:743:ILE:CD1	0.59	2.28	10	1
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CG	0.59	2.55	17	5
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:HA	0.59	2.32	12	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:LEU:C	1:A:658:ASP:H	0.59	1.99	4	7
1:A:738:LEU:HD12	1:A:768:MET:HG3	0.59	1.73	13	2
1:A:757:SER:HB3	1:A:760:GLU:HB2	0.59	1.75	7	1
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:SD	0.59	2.90	16	1
1:A:765:VAL:HG12	1:A:769:PHE:CE2	0.59	2.32	4	10
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:O	0.59	1.97	13	2
1:A:707:VAL:O	1:A:710:ALA:HB3	0.59	1.97	16	6
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CZ	0.59	2.33	5	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:659:VAL:CG2	0.59	2.27	16	1
1:A:652:HIS:O	1:A:655:ALA:N	0.59	2.36	18	13
1:A:695:LYS:HG3	1:A:755:TYR:C	0.59	2.18	4	1
1:A:737:THR:HA	1:A:771:GLN:HG3	0.59	1.74	13	5
1:A:630:VAL:HG23	1:A:721:HIS:CE1	0.59	2.33	9	2
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CB	0.59	2.27	11	2
1:A:703:LYS:HD3	1:A:796:MET:HE2	0.59	1.74	15	1
1:A:665:SER:O	1:A:666:CYS:O	0.59	2.21	16	4
1:A:761:PHE:CG	1:A:762:ALA:N	0.59	2.70	7	4
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:CB	0.59	2.28	3	2
1:A:710:ALA:O	1:A:714:HIS:CE1	0.59	2.56	4	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CE2	0.59	2.32	13	5
1:A:626:THR:HA	1:A:646:CYS:SG	0.59	2.38	16	3
1:A:751:LEU:HD21	1:A:753:PRO:HD2	0.59	1.74	11	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CE2	0.59	2.84	16	1
1:A:696:LEU:O	1:A:700:ASN:HB2	0.59	1.98	15	10
1:A:707:VAL:HB	1:A:761:PHE:CZ	0.59	2.32	6	5
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:CD2	0.59	2.23	12	10
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:CB	0.59	2.27	16	6
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:CG2	0.59	2.28	1	10
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:HG3	0.59	1.98	1	7
1:A:752:SER:HB2	1:A:753:PRO:CD	0.59	2.27	17	11
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:N	0.59	2.35	18	8
1:A:665:SER:HB3	1:A:669:CYS:SG	0.59	2.38	8	3
1:A:720:LEU:HD22	1:A:788:LEU:HD21	0.59	1.72	15	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HD2	0.59	1.97	6	1
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HD12	0.59	1.98	14	1
1:A:719:PRO:HB2	1:A:772:PHE:CZ	0.58	2.33	15	6
1:A:637:LEU:CB	1:A:646:CYS:HB3	0.58	2.28	13	4
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:OD1	0.58	2.21	3	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:HB2	0.58	1.72	11	9
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CE2	0.58	2.32	13	5
1:A:718:ARG:HG2	1:A:719:PRO:HD3	0.58	1.73	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:789:GLN:O	1:A:793:GLU:HB2	0.58	1.97	16	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:HB3	0.58	1.74	19	1
1:A:707:VAL:O	1:A:710:ALA:N	0.58	2.36	1	5
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:HB3	0.58	1.75	7	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:660:PRO:HG3	0.58	1.74	3	1
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:HG3	0.58	1.75	16	5
1:A:742:LEU:HD12	1:A:751:LEU:HD11	0.58	1.74	14	2
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:HG22	0.58	1.97	14	2
1:A:758:PRO:O	1:A:760:GLU:N	0.58	2.36	20	1
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:HG13	0.58	1.98	19	6
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:HD22	0.58	2.33	16	4
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:HB2	0.58	1.74	7	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:CD2	0.58	2.84	9	2
1:A:627:ILE:C	1:A:646:CYS:SG	0.58	2.81	19	1
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:CD1	0.58	2.66	15	2
1:A:744:ARG:NH1	1:A:747:LEU:HD13	0.58	2.14	12	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:659:VAL:CG1	0.58	2.28	16	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:646:CYS:O	0.58	1.99	15	14
1:A:753:PRO:O	1:A:754:PRO:O	0.58	2.21	4	4
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HB2	0.58	1.76	15	4
1:A:630:VAL:HG13	1:A:712:PHE:CD1	0.58	2.34	3	2
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HD22	0.58	1.98	19	3
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CG	0.58	2.33	5	1
1:A:738:LEU:N	1:A:738:LEU:CD1	0.58	2.61	6	3
1:A:717:CYS:HB2	1:A:740:LEU:HD21	0.58	1.73	11	3
1:A:749:GLU:HG3	1:A:753:PRO:HA	0.58	1.75	19	2
1:A:644:GLU:O	1:A:645:PHE:C	0.58	2.42	17	8
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HB2	0.58	1.75	18	11
1:A:747:LEU:CD1	1:A:761:PHE:CD2	0.58	2.86	12	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:CD2	0.58	2.29	9	3
1:A:628:CYS:CA	1:A:637:LEU:HD11	0.58	2.28	10	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:768:MET:SD	0.58	2.38	15	3
1:A:701:GLN:HA	1:A:757:SER:HA	0.58	1.73	20	2
1:A:738:LEU:O	1:A:738:LEU:HD22	0.58	1.98	15	1
1:A:664:TRP:CG	1:A:665:SER:N	0.58	2.71	4	17
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:NE	0.58	2.37	12	2
1:A:792:PHE:O	1:A:796:MET:HB3	0.58	1.98	8	6
1:A:704:CYS:SG	1:A:762:ALA:HB2	0.58	2.39	13	3
1:A:712:PHE:HA	1:A:721:HIS:CE1	0.58	2.34	11	2
1:A:769:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HG23	0.58	2.33	11	1
1:A:666:CYS:HB3	1:A:668:LEU:HD12	0.58	1.74	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:707:VAL:CG2	1:A:796:MET:HB2	0.58	2.28	9	5
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:HA	0.58	1.76	12	5
1:A:711:LEU:HD23	1:A:795:ARG:HH12	0.58	1.59	6	1
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HD23	0.58	2.28	7	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:761:PHE:HE2	0.58	2.21	20	1
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:H	0.58	1.59	17	5
1:A:765:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CE1	0.58	2.85	16	3
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HD12	0.58	2.29	10	1
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD21	0.58	2.34	13	4
1:A:748:GLN:O	1:A:749:GLU:HB2	0.58	1.99	14	8
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HD23	0.58	1.76	5	3
1:A:751:LEU:HG	1:A:752:SER:H	0.58	1.58	4	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HG2	0.58	2.26	16	2
1:A:738:LEU:HD21	1:A:764:ASP:C	0.58	2.19	17	3
1:A:708:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HA	0.57	2.28	15	7
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HB2	0.57	1.76	5	6
1:A:772:PHE:CG	1:A:785:ILE:HD12	0.57	2.34	13	6
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:HG3	0.57	1.98	16	5
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:HB3	0.57	1.73	3	5
1:A:738:LEU:HD22	1:A:764:ASP:HB3	0.57	1.76	16	4
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:HD13	0.57	1.73	15	2
1:A:638:VAL:CG2	1:A:647:PHE:HB2	0.57	2.25	20	3
1:A:760:GLU:HG3	1:A:761:PHE:H	0.57	1.58	6	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:HB2	0.57	2.29	11	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:HB2	0.57	1.76	13	2
1:A:712:PHE:CD1	1:A:740:LEU:HG	0.57	2.34	19	1
1:A:720:LEU:HD21	1:A:772:PHE:CD2	0.57	2.33	8	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:656:LEU:HD23	0.57	1.73	11	2
1:A:653:LEU:HG	1:A:709:LEU:N	0.57	2.14	14	3
1:A:712:PHE:CE1	1:A:744:ARG:HG3	0.57	2.34	15	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:659:VAL:HG13	0.57	1.74	16	1
1:A:652:HIS:ND1	1:A:654:PRO:HD2	0.57	2.15	16	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:768:MET:HG3	0.57	2.28	16	7
1:A:746:ARG:HB2	1:A:751:LEU:HD22	0.57	1.75	3	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:747:LEU:CD2	0.57	2.29	4	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:744:ARG:HB2	0.57	1.76	4	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HB2	0.57	1.75	17	5
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:CD2	0.57	2.49	16	1
1:A:643:CYS:O	1:A:645:PHE:N	0.57	2.37	8	8
1:A:647:PHE:CD2	1:A:652:HIS:HA	0.57	2.34	19	6
1:A:743:ILE:HG22	1:A:761:PHE:CE2	0.57	2.35	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:639:MET:O	1:A:640:CYS:C	0.57	2.43	6	10
1:A:627:ILE:CA	1:A:637:LEU:HD21	0.57	2.30	8	3
1:A:751:LEU:HG	1:A:752:SER:N	0.57	2.14	12	1
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:N	0.57	2.37	18	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:SD	0.57	2.40	19	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:646:CYS:SG	0.57	2.40	17	8
1:A:626:THR:CB	1:A:637:LEU:HD12	0.57	2.28	18	11
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:CD	0.57	2.82	7	8
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CD1	0.57	2.87	19	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HG2	0.57	1.77	14	1
1:A:707:VAL:HG12	1:A:708:LEU:N	0.57	2.13	16	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:738:LEU:C	0.57	2.18	2	2
1:A:638:VAL:HG22	1:A:649:LEU:CD1	0.57	2.28	15	3
1:A:652:HIS:CE1	1:A:654:PRO:HD2	0.57	2.35	6	5
1:A:655:ALA:O	1:A:656:LEU:C	0.57	2.42	7	2
1:A:696:LEU:O	1:A:696:LEU:HD12	0.57	1.98	7	1
1:A:737:THR:O	1:A:737:THR:HG22	0.57	2.00	10	1
1:A:707:VAL:HG22	1:A:761:PHE:HZ	0.57	1.59	20	2
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:HB2	0.57	1.77	4	10
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CD2	0.57	2.35	4	4
1:A:754:PRO:O	1:A:755:TYR:O	0.57	2.23	4	2
1:A:639:MET:O	1:A:639:MET:HG3	0.57	1.99	6	2
1:A:634:PRO:CA	1:A:637:LEU:HD11	0.57	2.27	1	5
1:A:773:ASN:CG	1:A:785:ILE:HG13	0.57	2.20	13	9
1:A:773:ASN:CB	1:A:785:ILE:HG13	0.57	2.30	3	8
1:A:703:LYS:HA	1:A:799:ALA:HB1	0.57	1.77	4	5
1:A:649:LEU:HB3	1:A:656:LEU:CB	0.57	2.30	14	7
1:A:640:CYS:SG	1:A:645:PHE:HB2	0.57	2.40	7	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:HE2	0.57	1.58	7	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HG2	0.57	2.30	15	1
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CD2	0.57	2.11	15	1
1:A:720:LEU:HB2	1:A:772:PHE:CE2	0.57	2.34	19	2
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD22	0.57	2.34	3	2
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:HB3	0.57	1.99	15	2
1:A:788:LEU:HD13	1:A:788:LEU:H	0.57	1.58	8	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:746:ARG:HH21	0.57	1.59	18	1
1:A:753:PRO:CD	1:A:754:PRO:HD2	0.57	2.28	5	3
1:A:772:PHE:CZ	1:A:785:ILE:HD13	0.57	2.35	4	4
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HG	0.57	1.75	8	4
1:A:767:ARG:O	1:A:770:LYS:N	0.56	2.37	15	13
1:A:630:VAL:CG2	1:A:631:CYS:N	0.56	2.68	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:739:ASP:O	1:A:768:MET:SD	0.56	2.63	9	2
1:A:723:LEU:HD23	1:A:737:THR:CG2	0.56	2.29	10	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:CG	0.56	2.29	13	1
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:NE1	0.56	2.15	15	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:NH2	0.56	2.68	17	1
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:CB	0.56	2.30	3	3
1:A:639:MET:HA	1:A:644:GLU:O	0.56	1.99	5	1
1:A:792:PHE:HD2	1:A:793:GLU:HG2	0.56	1.61	20	5
1:A:708:LEU:CD2	1:A:747:LEU:HD12	0.56	2.30	20	2
1:A:653:LEU:HD12	1:A:705:GLU:HA	0.56	1.77	11	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:HD2	0.56	2.13	11	4
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:CD2	0.56	2.29	13	2
1:A:627:ILE:O	1:A:627:ILE:HD12	0.56	2.00	19	9
1:A:649:LEU:CD1	1:A:658:ASP:C	0.56	2.74	11	3
1:A:665:SER:OG	1:A:670:HIS:HB2	0.56	2.01	14	6
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB3	0.56	2.30	14	6
1:A:759:GLN:HG2	1:A:763:GLN:HG3	0.56	1.76	5	2
1:A:711:LEU:HD13	1:A:791:PHE:HE2	0.56	1.59	4	1
1:A:775:LEU:HD23	1:A:775:LEU:C	0.56	2.19	17	3
1:A:627:ILE:HD13	1:A:632:GLN:HB3	0.56	1.75	6	5
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HB3	0.56	2.15	15	3
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:HD2	0.56	1.60	10	4
1:A:638:VAL:HG12	1:A:661:GLY:N	0.56	2.15	16	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:CD2	0.56	2.30	16	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:HA	0.56	2.15	17	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:740:LEU:HD12	0.56	1.77	18	1
1:A:747:LEU:CA	1:A:755:TYR:OH	0.56	2.52	20	1
1:A:720:LEU:HD13	1:A:768:MET:HE3	0.56	1.76	10	4
1:A:660:PRO:HG3	1:A:664:TRP:CG	0.56	2.35	16	5
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:HG3	0.56	1.77	13	1
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:HB2	0.56	2.00	20	11
1:A:705:GLU:HG2	1:A:744:ARG:NH2	0.56	2.14	2	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:649:LEU:HD21	0.56	1.77	14	2
1:A:630:VAL:HG13	1:A:721:HIS:HE1	0.56	1.61	6	3
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HA	0.56	1.78	6	1
1:A:788:LEU:HA	1:A:791:PHE:HB2	0.56	1.76	11	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:799:ALA:HB3	0.56	2.16	18	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HG2	0.56	2.00	1	6
1:A:755:TYR:N	1:A:760:GLU:HG2	0.56	2.15	4	1
1:A:705:GLU:O	1:A:709:LEU:HB2	0.56	2.00	9	1
1:A:649:LEU:CG	1:A:656:LEU:HB2	0.56	2.31	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:696:LEU:HD11	1:A:760:GLU:HB2	0.56	1.77	20	1
1:A:709:LEU:O	1:A:710:ALA:C	0.56	2.44	7	13
1:A:740:LEU:HD22	1:A:740:LEU:H	0.56	1.61	18	3
1:A:638:VAL:CG1	1:A:660:PRO:CD	0.56	2.84	8	5
1:A:746:ARG:CA	1:A:751:LEU:HG	0.56	2.30	11	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:HA	0.56	1.78	12	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:795:ARG:O	0.56	2.34	14	2
1:A:765:VAL:HB	1:A:768:MET:HE2	0.56	1.77	15	1
1:A:659:VAL:O	1:A:660:PRO:O	0.56	2.23	16	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HD13	0.56	2.01	17	1
1:A:718:ARG:HB2	1:A:719:PRO:HD3	0.56	1.78	13	12
1:A:652:HIS:CB	1:A:656:LEU:HD22	0.56	2.31	2	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:HB2	0.56	1.78	2	2
1:A:716:PRO:HB3	1:A:784:SER:O	0.56	2.00	2	8
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:HD23	0.56	2.35	7	2
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:O	0.56	2.00	8	8
1:A:696:LEU:HD21	1:A:701:GLN:HG2	0.56	1.77	7	1
1:A:627:ILE:HA	1:A:633:LYS:O	0.56	2.01	20	13
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HD3	0.56	2.00	11	16
1:A:783:GLN:HA	1:A:786:ILE:HB	0.56	1.76	13	11
1:A:667:SER:C	1:A:669:CYS:N	0.56	2.58	5	10
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HD3	0.56	2.30	9	4
1:A:711:LEU:O	1:A:717:CYS:CB	0.56	2.54	11	1
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:HG13	0.56	2.01	20	2
1:A:769:PHE:HB3	1:A:789:GLN:OE1	0.56	2.01	1	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:660:PRO:HD2	0.56	2.30	2	5
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:SG	0.56	2.64	4	3
1:A:747:LEU:HD13	1:A:761:PHE:CG	0.56	2.35	5	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CD1	0.56	2.36	19	2
1:A:764:ASP:O	1:A:767:ARG:CB	0.56	2.54	19	6
1:A:695:LYS:HB3	1:A:696:LEU:HD23	0.56	1.78	8	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:742:LEU:HB3	0.56	1.78	14	1
1:A:630:VAL:HG13	1:A:721:HIS:CE1	0.56	2.36	20	3
1:A:752:SER:HB3	1:A:753:PRO:HD2	0.56	1.78	15	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:750:LYS:HE2	0.56	2.15	18	1
1:A:700:ASN:HB2	1:A:757:SER:OG	0.56	2.01	20	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HD3	0.55	1.79	1	6
1:A:695:LYS:HB3	1:A:755:TYR:O	0.55	2.01	14	3
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HD13	0.55	1.78	3	1
1:A:651:CYS:O	1:A:653:LEU:N	0.55	2.39	18	3
1:A:656:LEU:HG	1:A:660:PRO:CD	0.55	2.31	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HB3	0.55	1.61	15	3
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:O	0.55	2.63	10	3
1:A:630:VAL:HG22	1:A:712:PHE:HB3	0.55	1.77	17	3
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:NH1	0.55	2.16	17	1
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:N	0.55	2.40	20	1
1:A:764:ASP:O	1:A:768:MET:HG3	0.55	2.02	4	3
1:A:647:PHE:O	1:A:649:LEU:HD23	0.55	2.01	16	4
1:A:769:PHE:CZ	1:A:792:PHE:HB2	0.55	2.36	10	7
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HB3	0.55	2.36	13	2
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:CB	0.55	2.31	19	1
1:A:744:ARG:O	1:A:748:GLN:N	0.55	2.39	4	3
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:HB2	0.55	1.79	13	6
1:A:631:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HE3	0.55	1.78	5	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:CG	0.55	2.89	5	1
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:CG	0.55	2.54	6	3
1:A:738:LEU:CB	1:A:742:LEU:HD11	0.55	2.31	15	2
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HG	0.55	1.78	20	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:796:MET:HE1	0.55	1.78	1	2
1:A:783:GLN:HE21	1:A:783:GLN:C	0.55	2.04	12	2
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:CD2	0.55	2.88	4	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:747:LEU:HD12	0.55	1.79	5	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:709:LEU:HG	0.55	1.78	6	2
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:HD2	0.55	1.62	9	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:658:ASP:HA	0.55	1.77	12	1
1:A:765:VAL:CG2	1:A:769:PHE:CZ	0.55	2.89	20	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:764:ASP:O	0.55	2.54	19	5
1:A:717:CYS:CA	1:A:788:LEU:HD21	0.55	2.30	13	5
1:A:664:TRP:CH2	1:A:666:CYS:HA	0.55	2.37	15	4
1:A:633:LYS:HB2	1:A:648:HIS:CE1	0.55	2.37	11	1
1:A:699:ALA:HB1	1:A:703:LYS:NZ	0.55	2.16	17	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD21	0.55	1.61	3	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD23	0.55	1.76	5	1
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD22	0.55	2.01	15	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG12	0.55	2.31	16	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:HD3	0.55	1.79	20	1
1:A:640:CYS:C	1:A:642:GLN:H	0.55	2.05	3	17
1:A:649:LEU:HD23	1:A:649:LEU:N	0.55	2.15	9	5
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD12	0.55	1.61	3	2
1:A:718:ARG:O	1:A:721:HIS:HB2	0.55	2.01	17	4
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:HB3	0.55	2.02	12	2
1:A:755:TYR:CE1	1:A:760:GLU:HB2	0.55	2.36	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:711:LEU:HB2	1:A:792:PHE:CD2	0.55	2.36	16	1
1:A:711:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE1	0.55	2.31	17	1
1:A:783:GLN:HE21	1:A:783:GLN:HA	0.55	1.61	11	4
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HG2	0.55	1.78	6	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:HB	0.55	1.79	6	1
1:A:696:LEU:HD12	1:A:700:ASN:CB	0.55	2.32	8	1
1:A:751:LEU:H	1:A:751:LEU:CD1	0.55	2.15	9	2
1:A:742:LEU:HA	1:A:751:LEU:HD11	0.55	1.76	17	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:743:ILE:CD1	0.55	2.31	2	1
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:H	0.55	1.62	4	4
1:A:710:ALA:HB2	1:A:795:ARG:HG3	0.55	1.79	3	4
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:O	0.55	2.01	16	3
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:C	0.55	2.45	9	2
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CD2	0.55	2.60	17	5
1:A:711:LEU:O	1:A:717:CYS:HB2	0.55	2.02	11	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:767:ARG:HD3	0.55	1.79	14	1
1:A:720:LEU:HD11	1:A:772:PHE:CD2	0.55	2.37	16	5
1:A:627:ILE:HD12	1:A:632:GLN:HG2	0.55	1.79	3	1
1:A:769:PHE:HZ	1:A:788:LEU:HD11	0.55	1.60	11	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:NH2	0.55	2.17	20	1
1:A:707:VAL:O	1:A:708:LEU:C	0.54	2.45	1	5
1:A:717:CYS:SG	1:A:721:HIS:NE2	0.54	2.81	3	10
1:A:752:SER:N	1:A:753:PRO:CD	0.54	2.70	1	2
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:N	0.54	2.17	16	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HB2	0.54	2.32	20	1
1:A:770:LYS:O	1:A:774:LYS:HG2	0.54	2.01	19	9
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HG3	0.54	2.03	6	5
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:HD21	0.54	2.32	16	3
1:A:723:LEU:HD21	1:A:772:PHE:HB2	0.54	1.80	11	2
1:A:708:LEU:HA	1:A:711:LEU:HD12	0.54	1.78	19	6
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:HG	0.54	1.78	11	1
1:A:721:HIS:N	1:A:740:LEU:HD23	0.54	2.17	12	7
1:A:630:VAL:HG13	1:A:712:PHE:HD1	0.54	1.62	3	3
1:A:695:LYS:HG2	1:A:756:SER:HB3	0.54	1.78	3	1
1:A:753:PRO:HD2	1:A:754:PRO:HD2	0.54	1.79	5	2
1:A:652:HIS:O	1:A:652:HIS:CG	0.54	2.61	5	3
1:A:762:ALA:HB1	1:A:792:PHE:HZ	0.54	1.61	5	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:HG3	0.54	1.79	8	5
1:A:745:ALA:HB1	1:A:750:LYS:CB	0.54	2.31	13	1
1:A:765:VAL:HG23	1:A:768:MET:HE3	0.54	1.79	20	1
1:A:645:PHE:HB2	1:A:666:CYS:HB3	0.54	1.79	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LEU:HD12	1:A:723:LEU:HD22	0.54	1.79	11	3
1:A:720:LEU:HD11	1:A:768:MET:C	0.54	2.23	7	2
1:A:751:LEU:CD1	1:A:752:SER:H	0.54	2.14	11	2
1:A:717:CYS:HG	1:A:721:HIS:CD2	0.54	2.19	12	2
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:NH1	0.54	2.69	17	1
1:A:645:PHE:CD2	1:A:666:CYS:SG	0.54	3.00	20	5
1:A:653:LEU:HG	1:A:705:GLU:O	0.54	2.03	12	2
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:CB	0.54	2.33	12	2
1:A:753:PRO:CG	1:A:754:PRO:HD2	0.54	2.33	4	2
1:A:711:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD2	0.54	2.32	7	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CZ	0.54	2.37	16	3
1:A:696:LEU:HD22	1:A:755:TYR:HB2	0.54	1.78	15	2
1:A:738:LEU:CA	1:A:742:LEU:HD11	0.54	2.32	15	1
1:A:749:GLU:HA	1:A:752:SER:O	0.54	2.02	15	1
1:A:666:CYS:O	1:A:669:CYS:HB2	0.54	2.02	20	1
1:A:651:CYS:HA	1:A:744:ARG:HH12	0.54	1.63	5	1
1:A:706:ARG:HE	1:A:799:ALA:HB2	0.54	1.62	6	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HD23	0.54	1.80	11	1
1:A:631:CYS:SG	1:A:633:LYS:HB2	0.54	2.43	13	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:756:SER:N	0.54	2.75	20	1
1:A:753:PRO:HB2	1:A:754:PRO:HD3	0.54	1.80	6	7
1:A:630:VAL:HG22	1:A:631:CYS:N	0.54	2.17	9	5
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HD22	0.54	1.78	8	3
1:A:716:PRO:C	1:A:719:PRO:HD2	0.54	2.23	9	2
1:A:638:VAL:HG22	1:A:639:MET:H	0.54	1.62	14	1
1:A:738:LEU:HG	1:A:768:MET:HG3	0.54	1.77	19	1
1:A:655:ALA:O	1:A:656:LEU:O	0.54	2.26	17	6
1:A:746:ARG:HG3	1:A:754:PRO:HA	0.54	1.79	1	1
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:N	0.54	2.40	1	9
1:A:789:GLN:O	1:A:792:PHE:HB3	0.54	2.03	19	6
1:A:643:CYS:O	1:A:644:GLU:HB3	0.54	2.03	10	2
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:CD	0.54	2.56	17	3
1:A:740:LEU:CD2	1:A:765:VAL:HG23	0.54	2.33	5	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:785:ILE:HG13	0.54	2.18	10	5
1:A:720:LEU:HD22	1:A:768:MET:CE	0.54	2.32	8	2
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HG22	0.54	1.79	16	2
1:A:695:LYS:HB2	1:A:756:SER:HB3	0.54	1.79	20	1
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:CG	0.54	2.33	20	1
1:A:765:VAL:C	1:A:768:MET:HB2	0.54	2.23	14	4
1:A:696:LEU:HD12	1:A:696:LEU:C	0.54	2.22	7	1
1:A:741:THR:CA	1:A:744:ARG:HB3	0.54	2.33	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:703:LYS:HZ3	1:A:799:ALA:CB	0.54	2.16	18	2
1:A:708:LEU:HB3	1:A:744:ARG:NH2	0.54	2.18	17	1
1:A:712:PHE:CZ	1:A:740:LEU:HB3	0.54	2.37	17	1
1:A:738:LEU:CG	1:A:768:MET:HG3	0.54	2.33	19	1
1:A:659:VAL:C	1:A:661:GLY:H	0.54	2.06	9	8
1:A:703:LYS:CA	1:A:799:ALA:HB1	0.54	2.33	4	3
1:A:747:LEU:HB2	1:A:755:TYR:OH	0.54	2.02	4	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:CB	0.54	2.33	5	1
1:A:745:ALA:HA	1:A:750:LYS:HE2	0.54	1.79	5	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD11	0.54	1.63	8	1
1:A:629:ARG:HD3	1:A:630:VAL:N	0.54	2.19	9	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:709:LEU:HD23	0.54	2.22	12	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:755:TYR:HB3	0.54	1.80	16	1
1:A:796:MET:O	1:A:800:PHE:HB2	0.53	2.03	9	12
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:HG12	0.53	1.79	5	1
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:HB3	0.53	2.38	13	3
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HB3	0.53	2.34	12	3
1:A:716:PRO:HG3	1:A:784:SER:HB2	0.53	1.78	11	2
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:CB	0.53	2.56	16	4
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:HE2	0.53	1.78	11	1
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HB	0.53	1.63	15	2
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CD2	0.53	2.38	16	2
1:A:630:VAL:O	1:A:718:ARG:HD3	0.53	2.03	1	2
1:A:627:ILE:HA	1:A:634:PRO:HA	0.53	1.80	8	2
1:A:743:ILE:O	1:A:747:LEU:HG	0.53	2.03	13	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:767:ARG:HB3	0.53	2.33	17	1
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:HB2	0.53	1.79	19	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:HA	0.53	2.33	12	4
1:A:715:GLU:HA	1:A:718:ARG:HB3	0.53	1.80	4	2
1:A:652:HIS:HD1	1:A:656:LEU:HD13	0.53	1.60	16	2
1:A:668:LEU:HD11	1:A:709:LEU:HB3	0.53	1.80	10	2
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:HG13	0.53	1.81	12	1
1:A:626:THR:CG2	1:A:637:LEU:HD12	0.53	2.34	16	4
1:A:707:VAL:HG11	1:A:796:MET:HB2	0.53	1.79	14	2
1:A:652:HIS:HB3	1:A:656:LEU:H	0.53	1.62	17	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:796:MET:HB2	0.53	2.34	17	1
1:A:647:PHE:C	1:A:649:LEU:N	0.53	2.60	5	15
1:A:629:ARG:HD2	1:A:713:CYS:SG	0.53	2.44	4	1
1:A:745:ALA:O	1:A:751:LEU:HD12	0.53	2.04	11	2
1:A:720:LEU:CD2	1:A:723:LEU:HD11	0.53	2.33	14	3
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CD2	0.53	2.33	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:707:VAL:HG11	1:A:792:PHE:CE1	0.53	2.39	4	5
1:A:717:CYS:SG	1:A:718:ARG:N	0.53	2.81	5	10
1:A:656:LEU:C	1:A:658:ASP:N	0.53	2.61	15	6
1:A:629:ARG:HE	1:A:713:CYS:HB2	0.53	1.64	9	1
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:N	0.53	2.60	10	2
1:A:769:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD23	0.53	2.37	15	1
1:A:640:CYS:C	1:A:642:GLN:N	0.53	2.62	6	17
1:A:715:GLU:N	1:A:716:PRO:HD2	0.53	2.18	1	4
1:A:649:LEU:CD2	1:A:649:LEU:N	0.53	2.71	2	2
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:CD1	0.53	2.92	2	6
1:A:707:VAL:CG1	1:A:708:LEU:N	0.53	2.72	18	3
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:HB2	0.53	2.33	19	8
1:A:720:LEU:O	1:A:740:LEU:N	0.53	2.41	8	1
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:HD22	0.53	2.39	11	1
1:A:721:HIS:CA	1:A:740:LEU:HD23	0.53	2.33	12	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:HA	0.53	1.80	13	2
1:A:652:HIS:ND1	1:A:656:LEU:CD1	0.53	2.71	16	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD23	0.53	1.81	5	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:HB3	0.53	2.31	9	2
1:A:641:ASN:ND2	1:A:663:GLU:HA	0.53	2.19	16	1
1:A:696:LEU:HG	1:A:757:SER:N	0.53	2.19	3	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:761:PHE:CE2	0.53	2.39	10	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:CD	0.53	2.34	13	1
1:A:701:GLN:CA	1:A:757:SER:HA	0.53	2.34	20	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:654:PRO:HD2	0.53	2.38	3	7
1:A:745:ALA:CB	1:A:750:LYS:HB2	0.53	2.33	7	8
1:A:747:LEU:HB2	1:A:761:PHE:CD2	0.53	2.38	16	3
1:A:710:ALA:HB1	1:A:795:ARG:CD	0.53	2.33	6	1
1:A:668:LEU:HG	1:A:710:ALA:HA	0.53	1.81	20	1
1:A:700:ASN:O	1:A:758:PRO:HD3	0.53	2.04	20	1
1:A:742:LEU:HD23	1:A:743:ILE:N	0.53	2.19	2	1
1:A:743:ILE:HG23	1:A:761:PHE:CB	0.53	2.32	9	3
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HD23	0.53	1.78	12	1
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CE2	0.53	2.39	16	1
1:A:653:LEU:HG	1:A:744:ARG:NH2	0.53	2.19	17	1
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:HB2	0.52	1.79	2	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:705:GLU:HA	0.52	1.80	4	3
1:A:696:LEU:HD21	1:A:758:PRO:HA	0.52	1.80	4	1
1:A:765:VAL:CG1	1:A:768:MET:HE2	0.52	2.34	7	2
1:A:756:SER:N	1:A:760:GLU:OE1	0.52	2.42	6	2
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:CB	0.52	2.57	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:741:THR:HA	1:A:744:ARG:HB3	0.52	1.78	17	5
1:A:645:PHE:HB2	1:A:666:CYS:SG	0.52	2.44	10	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:HB2	0.52	2.04	19	1
1:A:716:PRO:O	1:A:772:PHE:CZ	0.52	2.62	6	8
1:A:768:MET:O	1:A:772:PHE:HB3	0.52	2.05	3	2
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:HG	0.52	2.34	5	2
1:A:761:PHE:HD1	1:A:762:ALA:N	0.52	2.02	18	4
1:A:738:LEU:O	1:A:743:ILE:HG13	0.52	2.05	6	1
1:A:708:LEU:O	1:A:711:LEU:HB2	0.52	2.04	20	3
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HB2	0.52	1.79	10	1
1:A:703:LYS:C	1:A:703:LYS:CD	0.52	2.71	15	1
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:HD1	0.52	1.88	1	4
1:A:709:LEU:O	1:A:712:PHE:HB2	0.52	2.04	6	4
1:A:707:VAL:HG21	1:A:796:MET:HE2	0.52	1.81	4	3
1:A:792:PHE:CD2	1:A:793:GLU:HG3	0.52	2.39	3	6
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HG	0.52	1.80	14	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:CE2	0.52	3.02	18	1
1:A:702:ARG:NH1	1:A:706:ARG:HE	0.52	2.03	19	1
1:A:721:HIS:NE2	1:A:740:LEU:HD23	0.52	2.18	19	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CB	0.52	2.34	8	8
1:A:638:VAL:HG13	1:A:649:LEU:HD21	0.52	1.81	5	2
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CZ	0.52	2.38	13	3
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HB2	0.52	2.39	8	3
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:NH1	0.52	2.19	15	1
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:HG13	0.52	2.04	19	1
1:A:715:GLU:O	1:A:719:PRO:HD2	0.52	2.04	11	10
1:A:786:ILE:O	1:A:789:GLN:N	0.52	2.43	1	6
1:A:696:LEU:O	1:A:701:GLN:N	0.52	2.42	3	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:721:HIS:HE1	0.52	1.63	4	3
1:A:718:ARG:HG3	1:A:719:PRO:CD	0.52	2.33	4	2
1:A:628:CYS:HB2	1:A:648:HIS:H	0.52	1.65	16	3
1:A:639:MET:HA	1:A:646:CYS:HA	0.52	1.80	11	1
1:A:631:CYS:HA	1:A:718:ARG:HD3	0.52	1.81	12	1
1:A:703:LYS:HD3	1:A:703:LYS:C	0.52	2.25	18	2
1:A:724:ALA:HB2	1:A:738:LEU:N	0.52	2.18	19	1
1:A:741:THR:O	1:A:744:ARG:HG3	0.52	2.05	19	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:HH21	0.52	1.64	20	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:755:TYR:N	0.52	2.71	20	1
1:A:703:LYS:HD2	1:A:799:ALA:HB1	0.52	1.82	1	3
1:A:752:SER:H	1:A:753:PRO:HD2	0.52	1.64	1	3
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HB2	0.52	1.82	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:710:ALA:O	1:A:714:HIS:ND1	0.52	2.43	12	2
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:HD3	0.52	1.82	5	2
1:A:642:GLN:HE21	1:A:642:GLN:HA	0.52	1.64	9	1
1:A:642:GLN:HG3	1:A:665:SER:HB3	0.52	1.82	9	1
1:A:697:SER:HB2	1:A:700:ASN:HB2	0.52	1.82	20	2
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CG	0.52	2.39	14	1
1:A:653:LEU:H	1:A:709:LEU:HD13	0.52	1.65	16	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:700:ASN:C	0.52	2.25	16	1
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:HB2	0.52	1.81	20	3
1:A:708:LEU:CD1	1:A:744:ARG:CA	0.52	2.87	7	5
1:A:639:MET:HG2	1:A:644:GLU:HA	0.52	1.82	3	3
1:A:790:ARG:HD3	1:A:790:ARG:N	0.52	2.19	5	1
1:A:631:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HD3	0.52	1.82	9	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:CB	0.52	2.34	12	2
1:A:767:ARG:CA	1:A:770:LYS:HB2	0.52	2.35	11	1
1:A:654:PRO:HA	1:A:748:GLN:CD	0.52	2.25	15	1
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HB3	0.52	2.04	15	2
1:A:711:LEU:HD22	1:A:792:PHE:CE2	0.52	2.40	16	1
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:HB3	0.52	2.05	18	2
1:A:720:LEU:O	1:A:722:GLN:N	0.52	2.43	6	2
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:HB3	0.52	1.82	1	5
1:A:773:ASN:HD21	1:A:782:VAL:HA	0.52	1.64	16	9
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:CB	0.52	2.58	18	15
1:A:653:LEU:HD12	1:A:653:LEU:C	0.52	2.25	4	3
1:A:696:LEU:HD22	1:A:700:ASN:C	0.52	2.25	11	2
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HD23	0.52	2.30	8	1
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HD22	0.52	2.04	8	1
1:A:694:ALA:HA	1:A:697:SER:HA	0.52	1.81	14	1
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:H	0.52	2.17	18	2
1:A:769:PHE:CD1	1:A:788:LEU:HD13	0.52	2.39	20	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:701:GLN:HA	0.52	1.81	1	2
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:HH2	0.52	2.23	2	2
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HD12	0.52	1.82	20	2
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HE3	0.52	1.65	11	2
1:A:700:ASN:HA	1:A:703:LYS:HB3	0.52	1.81	15	1
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:HG12	0.52	2.05	20	2
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:CG2	0.52	2.35	18	1
1:A:696:LEU:H	1:A:756:SER:HB3	0.52	1.64	20	1
1:A:628:CYS:O	1:A:629:ARG:C	0.52	2.47	3	20
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:CA	0.52	2.34	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:760:GLU:O	1:A:764:ASP:OD2	0.52	2.28	3	1
1:A:771:GLN:O	1:A:774:LYS:HB2	0.52	2.05	3	2
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CB	0.52	2.87	15	3
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:CD	0.52	2.83	6	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:649:LEU:CD2	0.51	2.34	4	1
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:HB2	0.51	2.05	4	5
1:A:667:SER:H	1:A:709:LEU:CD2	0.51	2.17	7	1
1:A:772:PHE:CG	1:A:785:ILE:HD13	0.51	2.40	10	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG13	0.51	2.35	17	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CD1	0.51	3.03	10	6
1:A:742:LEU:CD1	1:A:751:LEU:HD11	0.51	2.32	5	2
1:A:759:GLN:O	1:A:760:GLU:C	0.51	2.49	6	3
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CD1	0.51	2.41	8	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:HD1	0.51	2.19	9	1
1:A:773:ASN:HA	1:A:785:ILE:HD12	0.51	1.82	11	1
1:A:773:ASN:ND2	1:A:782:VAL:HB	0.51	2.20	15	2
1:A:740:LEU:HD23	1:A:740:LEU:N	0.51	2.21	16	1
1:A:643:CYS:O	1:A:644:GLU:CB	0.51	2.58	10	2
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:CA	0.51	2.34	15	2
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:HB3	0.51	2.04	3	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:721:HIS:CD2	0.51	3.03	12	4
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HB	0.51	1.82	5	1
1:A:788:LEU:O	1:A:790:ARG:N	0.51	2.43	18	5
1:A:721:HIS:CD2	1:A:740:LEU:CD2	0.51	2.93	11	1
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HG	0.51	2.34	19	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:765:VAL:HB	0.51	1.81	5	2
1:A:759:GLN:HA	1:A:762:ALA:HB3	0.51	1.81	2	1
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:CB	0.51	2.31	5	4
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HA	0.51	2.19	13	1
1:A:720:LEU:C	1:A:740:LEU:HD23	0.51	2.26	17	1
1:A:640:CYS:O	1:A:642:GLN:N	0.51	2.43	6	8
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:N	0.51	2.73	11	5
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CD2	0.51	2.35	15	3
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HB2	0.51	2.36	16	3
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HE2	0.51	1.64	4	1
1:A:696:LEU:HD23	1:A:696:LEU:N	0.51	2.20	8	1
1:A:628:CYS:HB2	1:A:648:HIS:N	0.51	2.20	16	3
1:A:706:ARG:HG2	1:A:799:ALA:HB2	0.51	1.83	19	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HD12	0.51	2.35	2	1
1:A:721:HIS:HD2	1:A:740:LEU:HD12	0.51	1.66	5	3
1:A:630:VAL:CG1	1:A:631:CYS:N	0.51	2.72	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:HD13	0.51	2.21	13	4
1:A:649:LEU:CD2	1:A:649:LEU:H	0.51	2.19	11	2
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD13	0.51	1.83	9	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:HG	0.51	1.83	20	2
1:A:751:LEU:HD13	1:A:752:SER:N	0.51	2.18	11	2
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:C	0.51	2.26	11	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:761:PHE:CE2	0.51	3.03	11	4
1:A:701:GLN:CA	1:A:704:CYS:SG	0.51	2.97	15	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:HB	0.51	1.83	16	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:771:GLN:HE22	0.51	1.66	5	2
1:A:783:GLN:C	1:A:783:GLN:NE2	0.51	2.64	12	2
1:A:790:ARG:N	1:A:790:ARG:HD2	0.51	2.20	3	4
1:A:772:PHE:O	1:A:775:LEU:CD2	0.51	2.58	19	3
1:A:649:LEU:HD22	1:A:656:LEU:CD2	0.51	2.27	5	2
1:A:739:ASP:O	1:A:741:THR:N	0.51	2.44	18	2
1:A:648:HIS:O	1:A:649:LEU:CB	0.51	2.59	5	11
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:HB3	0.51	1.81	18	10
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:CD1	0.51	2.93	2	1
1:A:710:ALA:O	1:A:711:LEU:C	0.51	2.48	4	1
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:HG21	0.51	1.81	6	1
1:A:639:MET:HG2	1:A:644:GLU:O	0.51	2.04	17	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CB	0.51	2.19	10	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:653:LEU:N	0.51	2.78	12	2
1:A:714:HIS:CE1	1:A:788:LEU:HD23	0.51	2.41	13	1
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:O	0.51	2.28	14	16
1:A:627:ILE:HA	1:A:633:LYS:C	0.51	2.27	19	6
1:A:653:LEU:CD1	1:A:708:LEU:HB3	0.51	2.35	1	2
1:A:769:PHE:CD2	1:A:789:GLN:CG	0.51	2.94	2	5
1:A:746:ARG:C	1:A:748:GLN:N	0.51	2.62	3	1
1:A:746:ARG:NH2	1:A:753:PRO:O	0.51	2.43	3	1
1:A:766:GLY:O	1:A:769:PHE:HB2	0.51	2.05	12	5
1:A:782:VAL:O	1:A:785:ILE:N	0.51	2.44	4	7
1:A:772:PHE:CE2	1:A:785:ILE:HD13	0.51	2.41	4	5
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:CZ2	0.51	2.41	6	3
1:A:739:ASP:N	1:A:742:LEU:HD21	0.51	2.21	15	3
1:A:745:ALA:O	1:A:746:ARG:C	0.51	2.49	9	2
1:A:696:LEU:HG	1:A:755:TYR:HB3	0.51	1.81	18	3
1:A:715:GLU:HB2	1:A:716:PRO:HD3	0.51	1.83	11	2
1:A:790:ARG:O	1:A:794:THR:HB	0.51	2.05	16	2
1:A:701:GLN:HG3	1:A:756:SER:O	0.51	2.06	13	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:796:MET:HE1	0.51	2.45	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:646:CYS:C	1:A:647:PHE:CD1	0.51	2.84	17	2
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CG	0.51	2.36	20	1
1:A:737:THR:HA	1:A:771:GLN:CD	0.51	2.27	1	2
1:A:740:LEU:O	1:A:744:ARG:N	0.51	2.44	3	3
1:A:758:PRO:HG2	1:A:800:PHE:CZ	0.51	2.41	7	2
1:A:773:ASN:HA	1:A:785:ILE:HG13	0.51	1.82	3	5
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:HD2	0.51	2.21	13	5
1:A:720:LEU:HD13	1:A:768:MET:HE1	0.51	1.83	14	3
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:O	0.51	2.05	18	2
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HD13	0.51	1.82	16	1
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:CD2	0.50	2.36	2	6
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CE1	0.50	2.41	14	3
1:A:752:SER:HB3	1:A:753:PRO:CD	0.50	2.36	7	3
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HD3	0.50	1.83	5	4
1:A:706:ARG:HD2	1:A:799:ALA:HB2	0.50	1.83	7	1
1:A:765:VAL:CA	1:A:768:MET:HE2	0.50	2.35	7	1
1:A:717:CYS:HA	1:A:720:LEU:HB3	0.50	1.82	18	3
1:A:708:LEU:N	1:A:761:PHE:CZ	0.50	2.78	13	1
1:A:738:LEU:O	1:A:768:MET:HA	0.50	2.06	15	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HG2	0.50	2.06	10	3
1:A:711:LEU:O	1:A:714:HIS:CD2	0.50	2.64	9	8
1:A:708:LEU:HD11	1:A:740:LEU:HA	0.50	1.81	4	2
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:HB2	0.50	2.06	10	4
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HD11	0.50	1.83	8	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:CG1	0.50	2.36	11	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HA	0.50	1.81	11	1
1:A:741:THR:HG23	1:A:744:ARG:NH2	0.50	2.22	15	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:C	0.50	2.79	17	1
1:A:755:TYR:CE2	1:A:761:PHE:HA	0.50	2.42	1	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:666:CYS:N	0.50	2.84	3	10
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HG3	0.50	1.82	8	3
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CD1	0.50	2.41	5	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HG13	0.50	2.36	14	2
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:HG21	0.50	1.82	19	1
1:A:765:VAL:O	1:A:768:MET:CB	0.50	2.58	15	3
1:A:769:PHE:O	1:A:772:PHE:HB3	0.50	2.06	14	6
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HB	0.50	2.07	8	2
1:A:773:ASN:ND2	1:A:785:ILE:HB	0.50	2.22	5	6
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:HG3	0.50	2.36	3	1
1:A:628:CYS:SG	1:A:630:VAL:HG22	0.50	2.47	4	1
1:A:708:LEU:HD21	1:A:744:ARG:N	0.50	2.21	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:739:ASP:O	1:A:743:ILE:HG13	0.50	2.06	10	3
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:CB	0.50	2.59	10	5
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG23	0.50	1.83	7	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:755:TYR:CD2	0.50	2.41	12	4
1:A:720:LEU:CD2	1:A:769:PHE:CZ	0.50	2.91	11	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HG	0.50	2.41	15	1
1:A:630:VAL:HA	1:A:712:PHE:O	0.50	2.06	18	1
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CE2	0.50	2.94	13	5
1:A:737:THR:O	1:A:771:GLN:HG3	0.50	2.07	2	6
1:A:769:PHE:O	1:A:773:ASN:CB	0.50	2.60	11	5
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:N	0.50	2.44	4	4
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:CA	0.50	2.36	8	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HD2	0.50	1.83	12	1
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HG2	0.50	1.83	13	1
1:A:702:ARG:HH12	1:A:706:ARG:HE	0.50	1.50	19	1
1:A:701:GLN:N	1:A:757:SER:OG	0.50	2.45	20	1
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:CB	0.50	2.35	2	2
1:A:769:PHE:HA	1:A:772:PHE:CD2	0.50	2.41	9	1
1:A:771:GLN:HA	1:A:774:LYS:HB2	0.50	1.83	19	2
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:CD	0.50	2.80	13	1
1:A:790:ARG:CD	1:A:790:ARG:N	0.50	2.75	13	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:744:ARG:N	0.50	2.21	16	1
1:A:792:PHE:CD2	1:A:793:GLU:HG2	0.50	2.41	1	6
1:A:708:LEU:CD2	1:A:761:PHE:CE2	0.50	2.94	4	2
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:CB	0.50	2.59	16	5
1:A:795:ARG:HA	1:A:798:GLU:CB	0.50	2.36	12	2
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HD13	0.50	2.06	8	1
1:A:769:PHE:CD1	1:A:788:LEU:HD23	0.50	2.42	8	1
1:A:746:ARG:HH21	1:A:760:GLU:HG3	0.50	1.67	10	1
1:A:749:GLU:HA	1:A:753:PRO:O	0.50	2.06	10	2
1:A:772:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HD13	0.50	2.41	10	1
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:CB	0.50	2.20	18	3
1:A:699:ALA:HA	1:A:702:ARG:HB2	0.50	1.84	8	10
1:A:748:GLN:NE2	1:A:750:LYS:NZ	0.50	2.60	3	1
1:A:696:LEU:O	1:A:697:SER:HB2	0.50	2.07	5	4
1:A:705:GLU:HA	1:A:747:LEU:HD21	0.50	1.83	4	2
1:A:695:LYS:HG3	1:A:755:TYR:O	0.50	2.07	18	3
1:A:708:LEU:HD23	1:A:740:LEU:HD12	0.50	1.84	12	1
1:A:748:GLN:O	1:A:749:GLU:CB	0.50	2.60	12	2
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:CD2	0.50	2.95	5	2
1:A:788:LEU:O	1:A:791:PHE:N	0.50	2.45	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD22	0.50	1.67	9	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:HD2	0.50	1.66	14	2
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CD1	0.50	2.36	15	1
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:CG	0.50	2.37	19	1
1:A:762:ALA:CA	1:A:765:VAL:HG13	0.49	2.37	20	3
1:A:667:SER:O	1:A:669:CYS:N	0.49	2.45	18	7
1:A:746:ARG:NH2	1:A:751:LEU:HD22	0.49	2.22	2	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:665:SER:CA	0.49	3.00	11	3
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:O	0.49	2.44	7	2
1:A:708:LEU:CD2	1:A:744:ARG:CA	0.49	2.89	18	2
1:A:720:LEU:HD11	1:A:788:LEU:CD2	0.49	2.37	5	1
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:HB3	0.49	2.07	8	2
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:HE	0.49	1.65	9	1
1:A:723:LEU:HD22	1:A:772:PHE:CB	0.49	2.36	12	2
1:A:626:THR:O	1:A:646:CYS:HB2	0.49	2.07	4	5
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HG3	0.49	1.84	2	1
1:A:782:VAL:O	1:A:784:SER:N	0.49	2.45	9	4
1:A:704:CYS:O	1:A:707:VAL:CB	0.49	2.59	6	1
1:A:662:GLU:C	1:A:663:GLU:HG3	0.49	2.26	20	5
1:A:695:LYS:HB3	1:A:756:SER:CB	0.49	2.36	13	1
1:A:738:LEU:N	1:A:738:LEU:HD22	0.49	2.22	18	1
1:A:746:ARG:HB2	1:A:755:TYR:CZ	0.49	2.42	19	1
1:A:751:LEU:HB3	1:A:753:PRO:HD2	0.49	1.84	1	1
1:A:769:PHE:CA	1:A:772:PHE:HB3	0.49	2.37	9	8
1:A:704:CYS:SG	1:A:747:LEU:CD1	0.49	3.00	18	4
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:CE	0.49	2.90	5	5
1:A:742:LEU:HD23	1:A:751:LEU:HD11	0.49	1.83	3	1
1:A:649:LEU:CA	1:A:656:LEU:HD12	0.49	2.27	4	1
1:A:667:SER:OG	1:A:706:ARG:HA	0.49	2.06	7	1
1:A:667:SER:OG	1:A:709:LEU:HB3	0.49	2.07	7	1
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD22	0.49	1.65	11	1
1:A:744:ARG:HE	1:A:748:GLN:HE21	0.49	1.51	12	1
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:CD	0.49	2.60	19	1
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HD22	0.49	2.07	3	2
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:NZ	0.49	2.06	8	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:709:LEU:N	0.49	2.70	15	2
1:A:790:ARG:HD2	1:A:790:ARG:N	0.49	2.21	6	1
1:A:638:VAL:HG23	1:A:647:PHE:H	0.49	1.68	8	1
1:A:723:LEU:H	1:A:739:ASP:HB3	0.49	1.67	8	2
1:A:752:SER:HB2	1:A:753:PRO:HD2	0.49	1.84	13	2
1:A:721:HIS:N	1:A:740:LEU:HD12	0.49	2.22	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:CD1	0.49	2.76	14	6
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:HG13	0.49	1.84	5	3
1:A:717:CYS:O	1:A:721:HIS:N	0.49	2.46	17	4
1:A:738:LEU:HD11	1:A:768:MET:CG	0.49	2.38	5	1
1:A:723:LEU:CD1	1:A:739:ASP:HA	0.49	2.36	7	1
1:A:755:TYR:CE1	1:A:761:PHE:N	0.49	2.80	10	7
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:HG13	0.49	2.07	11	2
1:A:653:LEU:HD12	1:A:705:GLU:CA	0.49	2.38	11	1
1:A:649:LEU:HG	1:A:656:LEU:CB	0.49	2.38	20	2
1:A:712:PHE:HA	1:A:717:CYS:SG	0.49	2.48	17	1
1:A:764:ASP:HA	1:A:767:ARG:HD3	0.49	1.82	20	2
1:A:766:GLY:HA2	1:A:769:PHE:HD2	0.49	1.64	19	1
1:A:717:CYS:HG	1:A:788:LEU:HD23	0.49	1.67	20	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HB3	0.49	2.38	17	3
1:A:701:GLN:HG2	1:A:747:LEU:HD11	0.49	1.85	6	3
1:A:703:LYS:CG	1:A:799:ALA:HB1	0.49	2.36	6	2
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HD21	0.49	2.37	5	1
1:A:633:LYS:HB2	1:A:648:HIS:HE1	0.49	1.65	11	5
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:HG3	0.49	2.08	6	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:709:LEU:CD1	0.49	2.96	9	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:709:LEU:HD21	0.49	2.43	9	1
1:A:626:THR:O	1:A:627:ILE:C	0.49	2.49	11	4
1:A:630:VAL:HG22	1:A:713:CYS:N	0.49	2.23	19	2
1:A:757:SER:CB	1:A:758:PRO:CD	0.49	2.90	20	2
1:A:717:CYS:SG	1:A:717:CYS:O	0.49	2.71	17	1
1:A:640:CYS:HB3	1:A:644:GLU:N	0.49	2.23	19	1
1:A:643:CYS:C	1:A:645:PHE:H	0.49	2.10	18	6
1:A:638:VAL:HG22	1:A:664:TRP:CE3	0.49	2.41	2	3
1:A:647:PHE:CD2	1:A:664:TRP:CZ2	0.49	3.01	8	2
1:A:743:ILE:HA	1:A:746:ARG:HG3	0.49	1.85	19	2
1:A:791:PHE:O	1:A:795:ARG:HD3	0.49	2.08	6	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:CG	0.49	2.38	13	2
1:A:629:ARG:CZ	1:A:645:PHE:CD2	0.49	2.95	9	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CD2	0.49	2.37	9	1
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:HD2	0.49	2.38	9	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HB2	0.49	1.85	9	2
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:OH	0.49	2.66	16	3
1:A:707:VAL:CG2	1:A:761:PHE:CE1	0.49	2.95	14	3
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:HB3	0.49	1.84	17	1
1:A:756:SER:O	1:A:757:SER:CB	0.49	2.60	18	2
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:CD1	0.49	2.65	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:CB	0.49	2.60	3	2
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:CD	0.49	2.90	6	16
1:A:629:ARG:HA	1:A:629:ARG:HE	0.49	1.67	12	3
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD11	0.49	1.66	16	3
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:HD12	0.49	2.22	14	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:743:ILE:CD1	0.49	2.28	15	1
1:A:656:LEU:CG	1:A:659:VAL:HG21	0.49	2.33	16	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:767:ARG:CB	0.49	2.37	1	2
1:A:769:PHE:O	1:A:785:ILE:HG21	0.49	2.08	4	3
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:N	0.49	2.46	7	2
1:A:738:LEU:HD23	1:A:764:ASP:HB3	0.49	1.84	10	1
1:A:763:GLN:O	1:A:767:ARG:HG3	0.49	2.08	14	2
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:HE3	0.49	2.07	15	1
1:A:630:VAL:HG23	1:A:647:PHE:CE1	0.49	2.43	19	1
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CB	0.49	2.61	2	4
1:A:653:LEU:HA	1:A:744:ARG:HD2	0.49	1.84	9	2
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:CE2	0.49	2.43	4	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:795:ARG:NH2	0.49	2.67	6	1
1:A:641:ASN:HB3	1:A:664:TRP:O	0.49	2.07	16	5
1:A:706:ARG:NE	1:A:799:ALA:HB2	0.49	2.23	11	1
1:A:649:LEU:O	1:A:652:HIS:CB	0.48	2.61	1	5
1:A:668:LEU:HD21	1:A:710:ALA:N	0.48	2.23	10	3
1:A:640:CYS:SG	1:A:642:GLN:HB2	0.48	2.48	16	2
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:CG	0.48	2.37	9	2
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:CD1	0.48	2.35	2	2
1:A:710:ALA:O	1:A:713:CYS:HB3	0.48	2.08	4	1
1:A:706:ARG:HG3	1:A:799:ALA:HB2	0.48	1.84	5	1
1:A:740:LEU:HD23	1:A:765:VAL:HG23	0.48	1.84	5	1
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:N	0.48	2.45	6	2
1:A:746:ARG:HE	1:A:751:LEU:HG	0.48	1.67	8	1
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:CD2	0.48	2.70	13	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:764:ASP:HB3	0.48	1.84	14	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:767:ARG:HB3	0.48	1.84	18	1
1:A:652:HIS:O	1:A:709:LEU:HD11	0.48	2.08	19	1
1:A:718:ARG:HB3	1:A:719:PRO:HD3	0.48	1.83	2	1
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:HD11	0.48	1.83	3	1
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:N	0.48	2.23	14	3
1:A:746:ARG:CB	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.96	14	1
1:A:659:VAL:CB	1:A:660:PRO:CD	0.48	2.89	16	1
1:A:705:GLU:HG3	1:A:747:LEU:HD21	0.48	1.84	18	2
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:CD2	0.48	2.76	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:LEU:HD11	1:A:664:TRP:NE1	0.48	2.22	19	1
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:HD2	0.48	1.84	20	1
1:A:652:HIS:CG	1:A:656:LEU:HD22	0.48	2.43	2	1
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:HD13	0.48	2.08	3	1
1:A:711:LEU:CD1	1:A:765:VAL:HG21	0.48	2.38	5	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:714:HIS:CE1	0.48	2.43	7	1
1:A:771:GLN:C	1:A:775:LEU:HG	0.48	2.29	12	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:757:SER:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:747:LEU:CD2	1:A:761:PHE:CE2	0.48	2.97	18	2
1:A:786:ILE:HG22	1:A:790:ARG:CD	0.48	2.37	16	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:792:PHE:CD1	0.48	2.43	18	1
1:A:668:LEU:HB3	1:A:709:LEU:HB3	0.48	1.85	20	1
1:A:755:TYR:HD2	1:A:760:GLU:CG	0.48	2.22	20	1
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:HB2	0.48	2.28	10	6
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:CD2	0.48	2.38	3	2
1:A:649:LEU:HD23	1:A:649:LEU:H	0.48	1.67	9	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:760:GLU:HB3	0.48	2.44	18	5
1:A:626:THR:C	1:A:637:LEU:HD21	0.48	2.28	11	1
1:A:636:ASP:O	1:A:649:LEU:HD23	0.48	2.09	11	1
1:A:638:VAL:HG13	1:A:638:VAL:O	0.48	2.09	18	2
1:A:786:ILE:HG13	1:A:790:ARG:NE	0.48	2.23	13	1
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:HD21	0.48	1.83	17	3
1:A:746:ARG:CD	1:A:751:LEU:HD13	0.48	2.38	14	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:711:LEU:HD23	0.48	1.84	16	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:CB	0.48	2.38	16	1
1:A:743:ILE:HG12	1:A:764:ASP:HB3	0.48	1.85	17	1
1:A:708:LEU:HD11	1:A:740:LEU:CA	0.48	2.38	4	1
1:A:660:PRO:C	1:A:662:GLU:N	0.48	2.66	5	7
1:A:714:HIS:CD2	1:A:717:CYS:HB3	0.48	2.42	8	4
1:A:708:LEU:CD1	1:A:743:ILE:HG22	0.48	2.38	16	2
1:A:669:CYS:SG	1:A:670:HIS:N	0.48	2.86	17	2
1:A:647:PHE:CD2	1:A:652:HIS:N	0.48	2.82	9	1
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:HA	0.48	1.86	13	1
1:A:703:LYS:HG3	1:A:800:PHE:HD1	0.48	1.69	14	1
1:A:762:ALA:HA	1:A:765:VAL:HG23	0.48	1.84	18	1
1:A:753:PRO:N	1:A:754:PRO:CD	0.48	2.77	1	2
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:HG3	0.48	2.08	2	4
1:A:747:LEU:CB	1:A:755:TYR:OH	0.48	2.62	4	2
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:CB	0.48	2.61	4	3
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CG	0.48	2.39	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:653:LEU:HG	1:A:708:LEU:HB3	0.48	1.85	14	3
1:A:629:ARG:NH1	1:A:645:PHE:HB3	0.48	2.24	9	1
1:A:626:THR:CB	1:A:637:LEU:HD23	0.48	2.39	10	2
1:A:743:ILE:HG22	1:A:744:ARG:N	0.48	2.23	12	1
1:A:794:THR:O	1:A:798:GLU:HB2	0.48	2.09	15	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:646:CYS:C	0.48	2.28	17	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:HD22	0.48	1.84	18	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.44	20	1
1:A:747:LEU:HD23	1:A:755:TYR:CE1	0.48	2.43	20	1
1:A:765:VAL:C	1:A:767:ARG:N	0.48	2.66	20	1
1:A:649:LEU:HD13	1:A:656:LEU:CG	0.48	2.38	2	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:CD1	0.48	2.97	5	3
1:A:645:PHE:HB3	1:A:647:PHE:HE1	0.48	1.69	7	6
1:A:629:ARG:NH2	1:A:645:PHE:HD2	0.48	2.07	9	1
1:A:753:PRO:CG	1:A:754:PRO:HD3	0.48	2.38	13	1
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:HD13	0.48	1.69	14	1
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:HD2	0.48	1.85	15	2
1:A:659:VAL:HG22	1:A:660:PRO:CD	0.48	2.34	16	1
1:A:711:LEU:CB	1:A:740:LEU:HD21	0.48	2.38	19	1
1:A:637:LEU:HD13	1:A:637:LEU:N	0.48	2.23	2	3
1:A:723:LEU:HD11	1:A:772:PHE:HA	0.48	1.86	4	2
1:A:702:ARG:O	1:A:706:ARG:HG2	0.48	2.09	17	3
1:A:633:LYS:O	1:A:637:LEU:HD11	0.48	2.08	8	1
1:A:647:PHE:HB2	1:A:664:TRP:CH2	0.48	2.44	11	2
1:A:654:PRO:HA	1:A:744:ARG:HH21	0.48	1.68	12	1
1:A:796:MET:SD	1:A:800:PHE:CZ	0.48	3.07	14	1
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:HB2	0.48	2.08	2	2
1:A:648:HIS:HB2	1:A:651:CYS:HB2	0.48	1.84	7	3
1:A:723:LEU:HD12	1:A:739:ASP:CA	0.48	2.39	7	1
1:A:772:PHE:CE2	1:A:788:LEU:CD1	0.48	2.94	13	1
1:A:653:LEU:C	1:A:655:ALA:H	0.48	2.12	15	2
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:N	0.48	2.77	15	1
1:A:769:PHE:CG	1:A:789:GLN:HG2	0.48	2.44	18	2
1:A:661:GLY:C	1:A:663:GLU:H	0.48	2.12	10	3
1:A:715:GLU:HB3	1:A:716:PRO:CD	0.48	2.39	15	3
1:A:745:ALA:HA	1:A:750:LYS:HE3	0.48	1.85	7	4
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:NE2	0.48	2.24	10	2
1:A:751:LEU:N	1:A:751:LEU:CD1	0.48	2.77	11	2
1:A:696:LEU:CD1	1:A:755:TYR:HD2	0.48	2.21	11	4
1:A:696:LEU:HG	1:A:755:TYR:CD2	0.48	2.44	18	3
1:A:714:HIS:HD2	1:A:717:CYS:SG	0.48	2.30	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:HB3	0.48	1.86	11	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:750:LYS:HZ2	0.48	2.21	15	1
1:A:721:HIS:O	1:A:722:GLN:HG2	0.48	2.09	17	2
1:A:738:LEU:HG	1:A:764:ASP:O	0.48	2.09	18	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:788:LEU:HD23	0.48	2.48	20	1
1:A:652:HIS:O	1:A:653:LEU:C	0.47	2.53	2	11
1:A:765:VAL:CA	1:A:768:MET:HB2	0.47	2.38	16	7
1:A:708:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CA	0.47	2.38	18	2
1:A:703:LYS:O	1:A:706:ARG:HB3	0.47	2.08	6	2
1:A:711:LEU:CD2	1:A:740:LEU:HD21	0.47	2.29	9	1
1:A:668:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HD23	0.47	2.39	14	1
1:A:647:PHE:CD1	1:A:664:TRP:CH2	0.47	3.02	17	1
1:A:668:LEU:HD23	1:A:706:ARG:HA	0.47	1.84	19	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:747:LEU:CD1	0.47	2.39	19	1
1:A:717:CYS:SG	1:A:720:LEU:HD23	0.47	2.49	20	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:761:PHE:O	0.47	2.60	2	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:659:VAL:HG13	0.47	2.38	3	1
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:HB2	0.47	2.09	18	2
1:A:700:ASN:HD22	1:A:703:LYS:HD2	0.47	1.69	3	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:647:PHE:CE1	0.47	2.98	9	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:744:ARG:HB2	0.47	2.39	17	1
1:A:786:ILE:HG23	1:A:790:ARG:NE	0.47	2.24	19	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD21	0.47	2.44	2	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:N	0.47	2.75	2	1
1:A:656:LEU:O	1:A:658:ASP:N	0.47	2.47	15	2
1:A:785:ILE:C	1:A:789:GLN:HE21	0.47	2.12	17	5
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HG	0.47	2.39	8	1
1:A:794:THR:HG22	1:A:795:ARG:N	0.47	2.24	8	1
1:A:723:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HB2	0.47	2.38	12	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:708:LEU:HB2	0.47	2.39	13	1
1:A:770:LYS:O	1:A:773:ASN:ND2	0.47	2.47	20	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:O	0.47	2.32	1	2
1:A:701:GLN:HG3	1:A:747:LEU:CD1	0.47	2.40	4	2
1:A:772:PHE:CE2	1:A:785:ILE:HA	0.47	2.43	4	2
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:CD2	0.47	2.40	5	2
1:A:737:THR:CG2	1:A:738:LEU:N	0.47	2.67	6	2
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:HD3	0.47	2.39	8	3
1:A:704:CYS:HB2	1:A:761:PHE:CD1	0.47	2.44	7	2
1:A:752:SER:CB	1:A:753:PRO:HD2	0.47	2.39	7	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:CB	0.47	2.39	14	2
1:A:707:VAL:CG2	1:A:761:PHE:CZ	0.47	2.97	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:711:LEU:HD13	1:A:792:PHE:HB2	0.47	1.86	16	1
1:A:711:LEU:HD13	1:A:792:PHE:CB	0.47	2.39	16	1
1:A:723:LEU:CB	1:A:739:ASP:HB3	0.47	2.39	2	2
1:A:744:ARG:CZ	1:A:748:GLN:CG	0.47	2.92	2	1
1:A:696:LEU:O	1:A:700:ASN:CB	0.47	2.62	3	3
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:HD3	0.47	2.45	3	2
1:A:757:SER:OG	1:A:760:GLU:HB2	0.47	2.10	3	1
1:A:708:LEU:O	1:A:709:LEU:C	0.47	2.49	18	2
1:A:638:VAL:CG2	1:A:664:TRP:CZ3	0.47	2.98	5	3
1:A:638:VAL:HG23	1:A:664:TRP:CZ3	0.47	2.44	5	2
1:A:707:VAL:HG23	1:A:711:LEU:CD1	0.47	2.40	5	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:HD11	0.47	2.40	17	3
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:H	0.47	2.21	6	1
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:N	0.47	2.42	7	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:755:TYR:HE2	0.47	2.33	18	2
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:O	0.47	2.10	9	2
1:A:630:VAL:CG2	1:A:647:PHE:CE2	0.47	2.98	20	2
1:A:637:LEU:HA	1:A:647:PHE:O	0.47	2.10	20	2
1:A:668:LEU:H	1:A:668:LEU:HD22	0.47	1.69	16	1
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:O	0.47	2.32	17	7
1:A:796:MET:HE2	1:A:800:PHE:CE1	0.47	2.44	19	2
1:A:700:ASN:ND2	1:A:703:LYS:NZ	0.47	2.63	7	1
1:A:648:HIS:O	1:A:651:CYS:HB2	0.47	2.10	9	1
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:CD2	0.47	2.93	9	1
1:A:653:LEU:C	1:A:655:ALA:N	0.47	2.68	19	3
1:A:668:LEU:N	1:A:709:LEU:HD23	0.47	2.22	20	1
1:A:794:THR:O	1:A:797:ASN:HB3	0.47	2.09	1	3
1:A:653:LEU:C	1:A:744:ARG:HE	0.47	2.12	2	1
1:A:628:CYS:HB2	1:A:637:LEU:HD12	0.47	1.87	3	2
1:A:640:CYS:HA	1:A:664:TRP:O	0.47	2.08	3	1
1:A:765:VAL:HG22	1:A:768:MET:CE	0.47	2.39	3	1
1:A:652:HIS:ND1	1:A:664:TRP:HZ2	0.47	2.08	6	4
1:A:706:ARG:O	1:A:710:ALA:HB2	0.47	2.10	13	4
1:A:720:LEU:CD2	1:A:788:LEU:HD21	0.47	2.37	4	1
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:N	0.47	2.43	16	4
1:A:796:MET:O	1:A:800:PHE:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:638:VAL:HG12	1:A:662:GLU:HA	0.47	1.86	6	1
1:A:705:GLU:O	1:A:706:ARG:C	0.47	2.52	6	1
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:CD	0.47	2.53	6	1
1:A:667:SER:H	1:A:709:LEU:HD23	0.47	1.70	7	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:755:TYR:HB2	0.47	2.25	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:629:ARG:NE	1:A:647:PHE:CE1	0.47	2.83	9	1
1:A:713:CYS:SG	1:A:714:HIS:N	0.47	2.88	11	2
1:A:739:ASP:O	1:A:742:LEU:HB3	0.47	2.10	20	2
1:A:664:TRP:CZ2	1:A:666:CYS:HA	0.47	2.45	19	3
1:A:703:LYS:HG2	1:A:799:ALA:HB3	0.47	1.87	15	3
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:HA	0.47	1.85	17	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:740:LEU:CD1	0.47	2.93	19	2
1:A:738:LEU:HD11	1:A:746:ARG:NH2	0.47	2.25	18	1
1:A:742:LEU:HD12	1:A:746:ARG:HE	0.47	1.70	19	1
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CG	0.47	2.98	7	5
1:A:715:GLU:O	1:A:716:PRO:C	0.47	2.52	5	3
1:A:747:LEU:HD13	1:A:755:TYR:OH	0.47	2.10	4	1
1:A:716:PRO:HA	1:A:784:SER:HB3	0.47	1.87	5	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HD2	0.47	2.22	5	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HE21	0.47	1.69	19	3
1:A:764:ASP:O	1:A:765:VAL:C	0.47	2.51	6	2
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:CD1	0.47	2.38	8	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:747:LEU:HD13	0.47	2.25	14	1
1:A:788:LEU:O	1:A:792:PHE:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:720:LEU:C	1:A:740:LEU:HG	0.47	2.30	7	1
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:HD1	0.47	1.93	7	2
1:A:714:HIS:CD2	1:A:788:LEU:CD1	0.47	2.98	15	2
1:A:767:ARG:HG2	1:A:771:GLN:NE2	0.47	2.24	15	2
1:A:786:ILE:CG2	1:A:790:ARG:HD3	0.47	2.35	10	1
1:A:719:PRO:HB2	1:A:772:PHE:CE1	0.47	2.45	13	2
1:A:786:ILE:O	1:A:787:GLY:C	0.47	2.53	16	1
1:A:666:CYS:O	1:A:667:SER:C	0.47	2.53	18	9
1:A:720:LEU:CD1	1:A:768:MET:HB3	0.47	2.34	3	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:CG	0.47	2.40	9	2
1:A:665:SER:OG	1:A:669:CYS:HB3	0.47	2.10	11	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:755:TYR:CD2	0.47	2.45	16	1
1:A:752:SER:N	1:A:753:PRO:HD2	0.46	2.25	1	1
1:A:758:PRO:HB2	1:A:800:PHE:CZ	0.46	2.45	9	3
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:CD2	0.46	2.40	2	1
1:A:626:THR:C	1:A:637:LEU:HD23	0.46	2.30	3	1
1:A:697:SER:HB3	1:A:700:ASN:CB	0.46	2.39	4	1
1:A:633:LYS:HD2	1:A:633:LYS:N	0.46	2.23	9	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HD11	0.46	1.87	16	1
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:HZ	0.46	1.65	16	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:HB2	0.46	1.86	20	1
1:A:706:ARG:CD	1:A:799:ALA:HB2	0.46	2.41	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:637:LEU:HG	1:A:646:CYS:CB	0.46	2.38	10	1
1:A:744:ARG:HH12	1:A:747:LEU:HD13	0.46	1.67	12	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:788:LEU:CD1	0.46	2.98	13	1
1:A:707:VAL:HG11	1:A:796:MET:HE3	0.46	1.87	17	1
1:A:627:ILE:CG2	1:A:634:PRO:HD3	0.46	2.39	1	2
1:A:758:PRO:O	1:A:761:PHE:HD2	0.46	1.93	1	1
1:A:656:LEU:HD22	1:A:660:PRO:CG	0.46	2.34	4	2
1:A:711:LEU:HG	1:A:795:ARG:HH22	0.46	1.70	6	1
1:A:761:PHE:CZ	1:A:765:VAL:HG21	0.46	2.45	7	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:750:LYS:HB3	0.46	2.40	16	2
1:A:696:LEU:HB2	1:A:757:SER:OG	0.46	2.09	13	1
1:A:668:LEU:CD1	1:A:709:LEU:HB3	0.46	2.39	14	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:NE	0.46	2.83	17	1
1:A:738:LEU:HB3	1:A:768:MET:CG	0.46	2.40	18	1
1:A:668:LEU:HA	1:A:706:ARG:HD3	0.46	1.86	1	1
1:A:704:CYS:CB	1:A:761:PHE:CD2	0.46	2.99	1	1
1:A:707:VAL:C	1:A:709:LEU:N	0.46	2.64	1	1
1:A:760:GLU:O	1:A:763:GLN:HB2	0.46	2.11	1	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:708:LEU:CB	0.46	2.92	7	3
1:A:707:VAL:O	1:A:711:LEU:N	0.46	2.48	5	2
1:A:758:PRO:CB	1:A:800:PHE:HZ	0.46	2.24	4	1
1:A:765:VAL:HG22	1:A:769:PHE:CZ	0.46	2.46	5	1
1:A:640:CYS:HB2	1:A:645:PHE:HB2	0.46	1.88	18	3
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:CE2	0.46	2.68	6	2
1:A:645:PHE:HB3	1:A:647:PHE:CE1	0.46	2.45	10	2
1:A:746:ARG:N	1:A:751:LEU:HG	0.46	2.24	9	2
1:A:668:LEU:HD11	1:A:710:ALA:CA	0.46	2.41	16	2
1:A:765:VAL:HG21	1:A:792:PHE:CD1	0.46	2.46	15	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:744:ARG:NH2	0.46	2.81	17	1
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:CE1	0.46	2.46	8	3
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:CD1	0.46	2.63	2	4
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CG	0.46	2.41	3	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:CE2	0.46	2.45	4	1
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:HD2	0.46	2.41	5	1
1:A:645:PHE:CB	1:A:666:CYS:HB3	0.46	2.40	18	2
1:A:699:ALA:O	1:A:702:ARG:CB	0.46	2.63	7	2
1:A:715:GLU:HB2	1:A:716:PRO:CD	0.46	2.41	11	2
1:A:696:LEU:CB	1:A:757:SER:OG	0.46	2.64	13	1
1:A:782:VAL:O	1:A:786:ILE:HB	0.46	2.11	14	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:711:LEU:CD1	0.46	2.34	18	1
1:A:737:THR:O	1:A:768:MET:HA	0.46	2.11	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HE	0.46	1.68	2	1
1:A:745:ALA:O	1:A:750:LYS:N	0.46	2.49	6	3
1:A:746:ARG:HG2	1:A:755:TYR:CD2	0.46	2.45	3	1
1:A:704:CYS:HA	1:A:707:VAL:CG2	0.46	2.40	13	2
1:A:663:GLU:O	1:A:664:TRP:O	0.46	2.33	5	1
1:A:638:VAL:HG22	1:A:639:MET:N	0.46	2.25	14	1
1:A:769:PHE:HB3	1:A:789:GLN:CG	0.46	2.41	20	2
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:MET:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:696:LEU:HD22	1:A:701:GLN:N	0.46	2.24	11	4
1:A:765:VAL:O	1:A:769:PHE:CG	0.46	2.69	14	6
1:A:793:GLU:O	1:A:797:ASN:HB3	0.46	2.11	18	2
1:A:627:ILE:O	1:A:646:CYS:SG	0.46	2.73	3	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD11	0.46	2.46	5	1
1:A:652:HIS:CD2	1:A:656:LEU:HD22	0.46	2.46	6	1
1:A:714:HIS:ND1	1:A:791:PHE:CD1	0.46	2.83	6	2
1:A:767:ARG:O	1:A:768:MET:C	0.46	2.53	17	8
1:A:642:GLN:CG	1:A:665:SER:HB3	0.46	2.40	9	1
1:A:647:PHE:CZ	1:A:709:LEU:HD13	0.46	2.44	9	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:CD2	0.46	2.98	11	1
1:A:786:ILE:HG13	1:A:789:GLN:HE21	0.46	1.69	12	1
1:A:753:PRO:CB	1:A:754:PRO:HD3	0.46	2.41	13	1
1:A:784:SER:O	1:A:788:LEU:CB	0.46	2.63	15	1
1:A:634:PRO:HA	1:A:637:LEU:CD1	0.46	2.36	1	1
1:A:641:ASN:OD1	1:A:642:GLN:HG2	0.46	2.10	2	1
1:A:716:PRO:C	1:A:788:LEU:HD21	0.46	2.31	3	2
1:A:773:ASN:CA	1:A:785:ILE:HG13	0.46	2.41	3	3
1:A:790:ARG:N	1:A:790:ARG:CD	0.46	2.78	7	4
1:A:710:ALA:CB	1:A:795:ARG:HG3	0.46	2.41	5	1
1:A:738:LEU:CD1	1:A:768:MET:CG	0.46	2.94	7	3
1:A:742:LEU:O	1:A:751:LEU:CD1	0.46	2.64	19	3
1:A:656:LEU:HD21	1:A:664:TRP:CE2	0.46	2.46	6	2
1:A:743:ILE:CG1	1:A:764:ASP:HB3	0.46	2.41	8	1
1:A:668:LEU:HD13	1:A:709:LEU:HD23	0.46	1.88	14	1
1:A:747:LEU:HD11	1:A:761:PHE:HD2	0.46	1.70	14	1
1:A:703:LYS:NZ	1:A:758:PRO:HA	0.46	2.26	15	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:HB2	0.46	2.26	16	1
1:A:707:VAL:HG12	1:A:761:PHE:CZ	0.46	2.45	16	1
1:A:638:VAL:O	1:A:664:TRP:CZ3	0.46	2.69	2	2
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:CD1	0.46	2.94	2	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:747:LEU:HB3	0.46	2.26	2	1
1:A:746:ARG:CB	1:A:755:TYR:CZ	0.46	2.99	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:665:SER:O	1:A:670:HIS:CB	0.46	2.64	5	4
1:A:653:LEU:HD22	1:A:709:LEU:H	0.46	1.69	4	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:723:LEU:HD22	0.46	2.41	11	2
1:A:665:SER:CB	1:A:670:HIS:HB2	0.46	2.41	9	2
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:HB2	0.46	2.36	6	1
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:CD2	0.46	2.34	6	1
1:A:652:HIS:CG	1:A:654:PRO:HD2	0.46	2.45	10	4
1:A:788:LEU:C	1:A:790:ARG:N	0.46	2.68	11	3
1:A:737:THR:HG22	1:A:738:LEU:O	0.46	2.11	16	7
1:A:738:LEU:CD1	1:A:764:ASP:HB3	0.46	2.41	13	2
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CB	0.46	2.41	20	2
1:A:704:CYS:HB2	1:A:758:PRO:HD3	0.46	1.87	13	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:CZ	0.46	2.94	17	1
1:A:742:LEU:CD1	1:A:743:ILE:N	0.46	2.72	18	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:758:PRO:CD	0.46	2.40	20	1
1:A:785:ILE:HA	1:A:788:LEU:HD11	0.46	1.87	20	1
1:A:720:LEU:HA	1:A:723:LEU:CG	0.45	2.41	14	3
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:HB2	0.45	2.11	1	2
1:A:758:PRO:HB3	1:A:800:PHE:CE1	0.45	2.46	3	1
1:A:721:HIS:HB3	1:A:722:GLN:NE2	0.45	2.26	4	2
1:A:711:LEU:HD23	1:A:795:ARG:NH1	0.45	2.24	6	1
1:A:716:PRO:CG	1:A:788:LEU:HB2	0.45	2.41	6	1
1:A:653:LEU:CB	1:A:709:LEU:HG	0.45	2.41	8	1
1:A:696:LEU:HD11	1:A:701:GLN:HA	0.45	1.88	16	2
1:A:720:LEU:HD23	1:A:723:LEU:CD1	0.45	2.39	14	3
1:A:755:TYR:HE1	1:A:761:PHE:N	0.45	2.10	9	1
1:A:626:THR:CG2	1:A:637:LEU:HD23	0.45	2.41	10	2
1:A:633:LYS:O	1:A:648:HIS:CE1	0.45	2.69	20	3
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:CB	0.45	2.79	10	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:705:GLU:CA	0.45	2.41	13	1
1:A:743:ILE:HG12	1:A:761:PHE:HB2	0.45	1.88	2	1
1:A:653:LEU:CB	1:A:654:PRO:CD	0.45	2.95	13	3
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:HD2	0.45	2.10	5	2
1:A:757:SER:O	1:A:760:GLU:N	0.45	2.49	5	3
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:CG	0.45	2.79	7	2
1:A:629:ARG:HE	1:A:713:CYS:CB	0.45	2.24	9	1
1:A:628:CYS:N	1:A:637:LEU:HD13	0.45	2.25	12	1
1:A:704:CYS:C	1:A:706:ARG:N	0.45	2.67	15	1
1:A:708:LEU:HB2	1:A:761:PHE:CZ	0.45	2.46	16	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:744:ARG:CB	0.45	2.92	17	1
1:A:717:CYS:O	1:A:720:LEU:HB2	0.45	2.10	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:738:LEU:HD12	1:A:743:ILE:CD1	0.45	2.38	1	2
1:A:723:LEU:CD1	1:A:772:PHE:HB2	0.45	2.41	2	1
1:A:746:ARG:HD3	1:A:754:PRO:HG2	0.45	1.89	4	1
1:A:772:PHE:CA	1:A:775:LEU:HD22	0.45	2.41	4	2
1:A:714:HIS:CE1	1:A:791:PHE:CD1	0.45	3.04	16	2
1:A:746:ARG:HG3	1:A:751:LEU:HD13	0.45	1.87	5	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:768:MET:CG	0.45	2.41	7	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:664:TRP:CZ3	0.45	2.46	8	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:CD2	0.45	2.98	11	1
1:A:711:LEU:HB2	1:A:740:LEU:HD11	0.45	1.87	12	2
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:CG	0.45	2.40	11	1
1:A:696:LEU:HG	1:A:701:GLN:HA	0.45	1.88	15	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:750:LYS:HE3	0.45	2.26	15	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HH22	0.45	2.24	17	1
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HH22	0.45	1.70	17	1
1:A:721:HIS:CA	1:A:740:LEU:HD12	0.45	2.40	20	1
1:A:665:SER:C	1:A:669:CYS:HB2	0.45	2.32	5	2
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HG	0.45	2.46	4	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:755:TYR:HB3	0.45	2.42	17	2
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:CB	0.45	2.64	13	1
1:A:757:SER:N	1:A:760:GLU:HG2	0.45	2.27	15	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:658:ASP:CA	0.45	2.42	17	1
1:A:783:GLN:HE22	1:A:786:ILE:HG21	0.45	1.72	18	1
1:A:628:CYS:HB2	1:A:647:PHE:HA	0.45	1.89	20	1
1:A:628:CYS:C	1:A:630:VAL:N	0.45	2.70	3	7
1:A:720:LEU:O	1:A:721:HIS:C	0.45	2.55	14	4
1:A:708:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CG	0.45	2.39	2	1
1:A:763:GLN:O	1:A:767:ARG:HB2	0.45	2.12	5	1
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:CB	0.45	2.65	7	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:743:ILE:CG2	0.45	2.93	8	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:CE	0.45	2.93	11	2
1:A:649:LEU:HD13	1:A:659:VAL:CG1	0.45	2.41	12	1
1:A:655:ALA:CB	1:A:657:GLN:HG3	0.45	2.41	15	1
1:A:666:CYS:C	1:A:668:LEU:H	0.45	2.14	17	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:CA	0.45	2.80	17	1
1:A:709:LEU:CD1	1:A:713:CYS:SG	0.45	3.05	1	1
1:A:704:CYS:CA	1:A:707:VAL:HG13	0.45	2.42	5	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:768:MET:N	0.45	2.80	6	1
1:A:701:GLN:CB	1:A:756:SER:O	0.45	2.63	13	1
1:A:783:GLN:O	1:A:783:GLN:NE2	0.45	2.50	13	1
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:CG	0.45	2.65	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:629:ARG:HG3	1:A:645:PHE:HA	0.45	1.87	15	2
1:A:665:SER:C	1:A:670:HIS:HB2	0.45	2.31	8	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:637:LEU:HD23	0.45	1.89	11	1
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:HD12	0.45	1.89	12	1
1:A:655:ALA:HB3	1:A:657:GLN:HE21	0.45	1.71	13	1
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:HD2	0.45	2.32	13	1
1:A:745:ALA:HB2	1:A:750:LYS:NZ	0.45	2.27	14	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:653:LEU:C	0.45	2.32	17	1
1:A:738:LEU:O	1:A:739:ASP:HB3	0.45	2.12	18	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:HG3	0.45	1.88	2	1
1:A:769:PHE:HZ	1:A:792:PHE:HB2	0.45	1.71	18	4
1:A:711:LEU:O	1:A:712:PHE:C	0.45	2.54	9	3
1:A:743:ILE:HD11	1:A:764:ASP:CB	0.45	2.41	7	1
1:A:668:LEU:HA	1:A:706:ARG:HB2	0.45	1.88	8	1
1:A:708:LEU:CG	1:A:761:PHE:CZ	0.45	2.99	16	2
1:A:626:THR:HB	1:A:637:LEU:CD1	0.45	2.40	14	2
1:A:703:LYS:HE2	1:A:799:ALA:CA	0.45	2.41	14	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:750:LYS:CE	0.45	2.79	18	1
1:A:700:ASN:C	1:A:758:PRO:HD3	0.45	2.32	20	1
1:A:720:LEU:C	1:A:722:GLN:N	0.45	2.66	14	4
1:A:699:ALA:C	1:A:703:LYS:HE2	0.45	2.32	13	4
1:A:706:ARG:HB2	1:A:799:ALA:HB2	0.45	1.89	4	1
1:A:791:PHE:O	1:A:794:THR:HB	0.45	2.12	4	1
1:A:648:HIS:C	1:A:649:LEU:HG	0.45	2.32	7	2
1:A:656:LEU:O	1:A:657:GLN:CG	0.45	2.65	7	1
1:A:744:ARG:O	1:A:748:GLN:HB2	0.45	2.10	7	3
1:A:714:HIS:NE2	1:A:788:LEU:HB3	0.45	2.26	8	2
1:A:739:ASP:H	1:A:742:LEU:CD1	0.45	2.19	8	1
1:A:657:GLN:O	1:A:658:ASP:HB3	0.45	2.12	12	1
1:A:769:PHE:CE1	1:A:788:LEU:HD13	0.45	2.47	13	1
1:A:656:LEU:HD22	1:A:660:PRO:HB3	0.45	1.87	15	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:785:ILE:O	0.45	2.70	15	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:792:PHE:CZ	0.45	2.99	16	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:746:ARG:NH1	0.45	2.25	3	1
1:A:711:LEU:CD2	1:A:795:ARG:HH12	0.45	2.24	6	1
1:A:755:TYR:CZ	1:A:761:PHE:CD2	0.45	3.05	9	2
1:A:720:LEU:HD21	1:A:768:MET:SD	0.45	2.51	13	2
1:A:738:LEU:HD22	1:A:743:ILE:HG12	0.45	1.89	11	1
1:A:790:ARG:HA	1:A:790:ARG:NE	0.45	2.27	11	1
1:A:716:PRO:HB2	1:A:788:LEU:HG	0.45	1.89	18	3
1:A:720:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD2	0.45	2.42	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CB	0.45	2.42	15	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:658:ASP:HA	0.45	2.42	17	1
1:A:704:CYS:HB2	1:A:761:PHE:CG	0.44	2.47	1	2
1:A:653:LEU:CD1	1:A:705:GLU:HA	0.44	2.40	15	6
1:A:786:ILE:HG22	1:A:787:GLY:N	0.44	2.27	6	2
1:A:718:ARG:CG	1:A:719:PRO:HD3	0.44	2.40	9	2
1:A:759:GLN:HB3	1:A:763:GLN:HE21	0.44	1.72	11	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:768:MET:HG3	0.44	1.87	12	1
1:A:739:ASP:HA	1:A:768:MET:HG2	0.44	1.88	15	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:711:LEU:HD12	0.44	2.36	18	1
1:A:653:LEU:HD12	1:A:709:LEU:CG	0.44	2.39	19	1
1:A:649:LEU:HD21	1:A:659:VAL:H	0.44	1.71	20	1
1:A:695:LYS:HB2	1:A:756:SER:CB	0.44	2.42	20	1
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:HB2	0.44	1.87	3	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:708:LEU:HB3	0.44	1.89	4	1
1:A:786:ILE:O	1:A:790:ARG:N	0.44	2.50	6	2
1:A:649:LEU:CD1	1:A:649:LEU:N	0.44	2.80	8	1
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HB2	0.44	2.46	8	1
1:A:792:PHE:HD2	1:A:793:GLU:HG3	0.44	1.72	18	3
1:A:647:PHE:CZ	1:A:713:CYS:HB2	0.44	2.47	11	1
1:A:772:PHE:CE1	1:A:785:ILE:HD11	0.44	2.48	11	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:701:GLN:NE2	0.44	2.80	12	1
1:A:756:SER:H	1:A:760:GLU:HG2	0.44	1.73	12	1
1:A:698:PRO:O	1:A:702:ARG:CG	0.44	2.65	14	1
1:A:716:PRO:HB3	1:A:784:SER:HB2	0.44	1.90	15	1
1:A:745:ALA:HA	1:A:748:GLN:HB2	0.44	1.89	19	1
1:A:639:MET:CG	1:A:644:GLU:HA	0.44	2.43	3	1
1:A:738:LEU:HD22	1:A:764:ASP:HB2	0.44	1.88	3	1
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:CD2	0.44	2.80	10	2
1:A:743:ILE:HD12	1:A:768:MET:CE	0.44	2.42	11	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:788:LEU:HD21	0.44	2.47	11	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CG	0.44	2.42	14	1
1:A:769:PHE:HD2	1:A:785:ILE:HG22	0.44	1.71	15	1
1:A:720:LEU:HD12	1:A:788:LEU:HD11	0.44	1.88	17	1
1:A:721:HIS:O	1:A:741:THR:CG2	0.44	2.66	17	1
1:A:704:CYS:HB2	1:A:747:LEU:HD22	0.44	1.88	18	1
1:A:709:LEU:O	1:A:713:CYS:HB3	0.44	2.13	18	1
1:A:788:LEU:HD12	1:A:791:PHE:CD2	0.44	2.48	4	1
1:A:699:ALA:HA	1:A:702:ARG:HB3	0.44	1.89	19	2
1:A:642:GLN:HG2	1:A:665:SER:OG	0.44	2.13	16	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:CD1	0.44	2.42	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:708:LEU:HA	1:A:792:PHE:HE2	0.44	1.72	16	1
1:A:737:THR:O	1:A:737:THR:CG2	0.44	2.64	3	2
1:A:641:ASN:CB	1:A:664:TRP:O	0.44	2.66	18	3
1:A:660:PRO:HB2	1:A:664:TRP:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:773:ASN:HD22	1:A:785:ILE:HG13	0.44	1.72	10	1
1:A:643:CYS:HB2	1:A:645:PHE:CD1	0.44	2.47	12	1
1:A:744:ARG:NE	1:A:748:GLN:HE21	0.44	2.10	12	1
1:A:703:LYS:HE2	1:A:800:PHE:N	0.44	2.27	14	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HD11	0.44	2.42	17	1
1:A:708:LEU:HG	1:A:761:PHE:CD2	0.44	2.47	19	1
1:A:655:ALA:O	1:A:657:GLN:HG3	0.44	2.12	4	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:HD2	0.44	1.89	5	2
1:A:700:ASN:N	1:A:700:ASN:HD22	0.44	2.10	7	1
1:A:783:GLN:NE2	1:A:786:ILE:HG21	0.44	2.27	8	1
1:A:718:ARG:N	1:A:719:PRO:CD	0.44	2.81	9	1
1:A:639:MET:HG3	1:A:646:CYS:SG	0.44	2.53	11	1
1:A:758:PRO:HG2	1:A:800:PHE:HZ	0.44	1.73	12	1
1:A:742:LEU:HG	1:A:746:ARG:HH21	0.44	1.72	14	1
1:A:740:LEU:CD2	1:A:768:MET:HE1	0.44	2.43	15	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:795:ARG:HD2	0.44	1.90	17	1
1:A:782:VAL:HA	1:A:785:ILE:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:HD22	0.44	2.43	1	1
1:A:653:LEU:HD23	1:A:744:ARG:CD	0.44	2.42	3	1
1:A:660:PRO:CB	1:A:664:TRP:HB2	0.44	2.42	16	3
1:A:772:PHE:O	1:A:772:PHE:CD1	0.44	2.71	3	1
1:A:785:ILE:HG22	1:A:789:GLN:HE21	0.44	1.73	10	2
1:A:790:ARG:HA	1:A:790:ARG:HE	0.44	1.72	11	2
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:N	0.44	2.51	19	2
1:A:701:GLN:HE21	1:A:747:LEU:CD2	0.44	2.26	9	1
1:A:628:CYS:HA	1:A:637:LEU:HD11	0.44	1.89	10	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:C	0.44	2.53	10	1
1:A:745:ALA:CB	1:A:751:LEU:CB	0.44	2.95	12	1
1:A:700:ASN:HA	1:A:703:LYS:HB2	0.44	1.90	14	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:HA	0.44	1.90	14	1
1:A:742:LEU:HA	1:A:751:LEU:CD1	0.44	2.42	17	1
1:A:696:LEU:HD12	1:A:700:ASN:HB3	0.44	1.88	19	1
1:A:773:ASN:CB	1:A:785:ILE:HG21	0.44	2.34	20	1
1:A:791:PHE:O	1:A:795:ARG:HG2	0.44	2.12	20	1
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:CZ	0.44	2.71	5	6
1:A:702:ARG:O	1:A:705:GLU:HB2	0.44	2.13	3	1
1:A:664:TRP:CE2	1:A:665:SER:O	0.44	2.71	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:667:SER:CA	1:A:670:HIS:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:772:PHE:CD1	1:A:785:ILE:HD11	0.44	2.47	11	2
1:A:788:LEU:HA	1:A:791:PHE:HB3	0.44	1.88	20	2
1:A:647:PHE:HZ	1:A:709:LEU:HD21	0.44	1.73	2	1
1:A:772:PHE:CD1	1:A:772:PHE:C	0.44	2.91	12	3
1:A:653:LEU:HB2	1:A:709:LEU:CD1	0.44	2.43	3	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HB2	0.44	2.12	3	1
1:A:746:ARG:CA	1:A:751:LEU:HB2	0.44	2.43	3	1
1:A:757:SER:OG	1:A:758:PRO:HD2	0.44	2.13	4	1
1:A:762:ALA:C	1:A:765:VAL:HG12	0.44	2.32	5	1
1:A:660:PRO:C	1:A:662:GLU:H	0.44	2.16	7	2
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD12	0.44	2.47	9	1
1:A:720:LEU:O	1:A:723:LEU:HB2	0.44	2.13	11	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:HG12	0.44	2.43	11	1
1:A:769:PHE:HB3	1:A:785:ILE:HG23	0.44	1.89	11	1
1:A:635:GLY:O	1:A:636:ASP:C	0.44	2.55	12	1
1:A:701:GLN:HG3	1:A:756:SER:C	0.44	2.33	13	1
1:A:739:ASP:OD1	1:A:742:LEU:N	0.44	2.51	14	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:649:LEU:HD22	0.43	2.43	2	1
1:A:696:LEU:HB3	1:A:701:GLN:HB2	0.43	1.90	3	1
1:A:640:CYS:SG	1:A:643:CYS:N	0.43	2.86	4	3
1:A:652:HIS:HE2	1:A:667:SER:CB	0.43	2.26	17	1
1:A:656:LEU:HD11	1:A:664:TRP:CD1	0.43	2.48	19	1
1:A:696:LEU:CG	1:A:757:SER:HB2	0.43	2.42	20	1
1:A:717:CYS:C	1:A:721:HIS:CD2	0.43	2.91	20	1
1:A:747:LEU:HA	1:A:755:TYR:HE1	0.43	1.71	20	1
1:A:627:ILE:N	1:A:637:LEU:HD23	0.43	2.28	2	2
1:A:628:CYS:CA	1:A:637:LEU:HG	0.43	2.42	2	3
1:A:696:LEU:CD1	1:A:747:LEU:HD12	0.43	2.43	2	1
1:A:667:SER:HA	1:A:670:HIS:C	0.43	2.33	4	3
1:A:746:ARG:HH11	1:A:751:LEU:HB3	0.43	1.73	3	1
1:A:748:GLN:NE2	1:A:750:LYS:HZ1	0.43	2.11	3	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:HB2	0.43	1.89	4	2
1:A:643:CYS:O	1:A:643:CYS:SG	0.43	2.76	11	2
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LYS:HB2	0.43	2.12	8	1
1:A:629:ARG:CZ	1:A:645:PHE:HD2	0.43	2.25	9	1
1:A:652:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HA	0.43	1.89	17	2
1:A:786:ILE:O	1:A:789:GLN:HB2	0.43	2.12	10	1
1:A:668:LEU:H	1:A:709:LEU:HD12	0.43	1.72	12	1
1:A:742:LEU:O	1:A:746:ARG:HB2	0.43	2.13	13	1
1:A:703:LYS:C	1:A:706:ARG:HB2	0.43	2.34	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:755:TYR:CG	1:A:756:SER:N	0.43	2.82	20	1
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HG	0.43	2.43	12	3
1:A:738:LEU:HG	1:A:764:ASP:HB3	0.43	1.90	2	2
1:A:659:VAL:HA	1:A:660:PRO:HD3	0.43	1.65	8	3
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:CD2	0.43	3.01	11	1
1:A:638:VAL:HB	1:A:659:VAL:CG2	0.43	2.43	14	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HB2	0.43	2.13	14	1
1:A:668:LEU:CD2	1:A:706:ARG:O	0.43	2.66	2	1
1:A:717:CYS:O	1:A:721:HIS:CD2	0.43	2.72	4	1
1:A:788:LEU:O	1:A:788:LEU:HG	0.43	2.11	5	1
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:CB	0.43	2.66	7	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:738:LEU:N	0.43	2.27	7	1
1:A:796:MET:CE	1:A:800:PHE:CE1	0.43	3.01	7	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:745:ALA:C	1:A:751:LEU:CD1	0.43	2.85	9	1
1:A:743:ILE:HG21	1:A:761:PHE:CD1	0.43	2.48	11	2
1:A:790:ARG:O	1:A:794:THR:OG1	0.43	2.35	14	1
1:A:695:LYS:HD3	1:A:754:PRO:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:637:LEU:CD2	1:A:648:HIS:CD2	0.43	3.02	15	3
1:A:660:PRO:CG	1:A:664:TRP:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:720:LEU:HG	1:A:740:LEU:CD2	0.43	2.44	7	2
1:A:740:LEU:HD23	1:A:768:MET:HE3	0.43	1.88	2	1
1:A:761:PHE:O	1:A:765:VAL:N	0.43	2.51	18	2
1:A:627:ILE:HB	1:A:632:GLN:CA	0.43	2.43	15	2
1:A:665:SER:HB2	1:A:669:CYS:SG	0.43	2.54	7	1
1:A:627:ILE:HD12	1:A:632:GLN:HA	0.43	1.90	8	1
1:A:788:LEU:H	1:A:788:LEU:HD22	0.43	1.73	8	1
1:A:629:ARG:CD	1:A:630:VAL:N	0.43	2.82	9	1
1:A:637:LEU:N	1:A:637:LEU:HD13	0.43	2.28	9	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:709:LEU:HD11	0.43	2.48	9	1
1:A:701:GLN:NE2	1:A:705:GLU:CD	0.43	2.71	10	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:646:CYS:HB2	0.43	1.90	11	1
1:A:759:GLN:O	1:A:763:GLN:CG	0.43	2.67	20	2
1:A:668:LEU:N	1:A:668:LEU:CD1	0.43	2.81	14	1
1:A:697:SER:O	1:A:701:GLN:N	0.43	2.44	16	1
1:A:744:ARG:HH11	1:A:744:ARG:CG	0.43	2.27	17	1
1:A:707:VAL:O	1:A:709:LEU:N	0.43	2.51	1	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:O	0.43	2.50	2	1
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:LYS:CG	0.43	2.44	17	2
1:A:710:ALA:O	1:A:713:CYS:SG	0.43	2.77	5	1
1:A:625:ALA:O	1:A:627:ILE:N	0.43	2.52	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:708:LEU:HD11	1:A:743:ILE:HG21	0.43	1.89	9	2
1:A:795:ARG:HD3	1:A:798:GLU:OE1	0.43	2.13	11	1
1:A:795:ARG:O	1:A:798:GLU:HB3	0.43	2.13	12	1
1:A:744:ARG:CZ	1:A:750:LYS:NZ	0.43	2.81	15	1
1:A:650:ASP:HA	1:A:655:ALA:HB1	0.43	1.89	16	1
1:A:696:LEU:CB	1:A:755:TYR:HB3	0.43	2.43	16	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:649:LEU:CD2	0.43	2.96	18	1
1:A:720:LEU:O	1:A:739:ASP:HA	0.43	2.14	18	1
1:A:755:TYR:CD1	1:A:755:TYR:C	0.43	2.92	20	1
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CG	0.43	2.43	1	1
1:A:714:HIS:NE2	1:A:791:PHE:CE1	0.43	2.86	4	1
1:A:710:ALA:HB3	1:A:795:ARG:CZ	0.43	2.44	6	1
1:A:715:GLU:HB3	1:A:716:PRO:HD3	0.43	1.90	8	2
1:A:629:ARG:HG2	1:A:713:CYS:SG	0.43	2.54	11	1
1:A:755:TYR:OH	1:A:761:PHE:CB	0.43	2.67	11	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:CZ	0.43	2.43	12	1
1:A:647:PHE:HE2	1:A:709:LEU:HD21	0.43	1.70	13	1
1:A:741:THR:HA	1:A:744:ARG:HH11	0.43	1.74	13	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HH12	0.43	2.26	17	1
1:A:741:THR:O	1:A:742:LEU:C	0.43	2.57	17	1
1:A:652:HIS:O	1:A:654:PRO:N	0.43	2.51	18	1
1:A:701:GLN:OE1	1:A:747:LEU:O	0.43	2.37	1	1
1:A:755:TYR:HB3	1:A:760:GLU:CD	0.43	2.34	1	1
1:A:715:GLU:O	1:A:718:ARG:CB	0.43	2.66	2	3
1:A:773:ASN:OD1	1:A:782:VAL:HG13	0.43	2.14	2	1
1:A:754:PRO:O	1:A:755:TYR:HB2	0.43	2.11	13	3
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LEU:N	0.43	2.51	7	2
1:A:714:HIS:CD2	1:A:716:PRO:HB2	0.43	2.49	13	1
1:A:796:MET:O	1:A:796:MET:HG3	0.43	2.13	13	1
1:A:744:ARG:HE	1:A:750:LYS:HE2	0.43	1.73	14	1
1:A:626:THR:HG22	1:A:637:LEU:HD12	0.43	1.90	16	1
1:A:651:CYS:O	1:A:652:HIS:C	0.43	2.56	1	1
1:A:696:LEU:HD21	1:A:758:PRO:N	0.43	2.29	2	2
1:A:700:ASN:HB3	1:A:758:PRO:CG	0.43	2.44	7	2
1:A:668:LEU:N	1:A:709:LEU:CD2	0.43	2.82	4	1
1:A:707:VAL:CG2	1:A:796:MET:HE3	0.43	2.38	12	2
1:A:647:PHE:CE2	1:A:709:LEU:CD1	0.43	3.01	8	1
1:A:645:PHE:CD1	1:A:645:PHE:N	0.43	2.87	10	2
1:A:771:GLN:O	1:A:774:LYS:N	0.43	2.48	12	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:792:PHE:HD1	0.43	1.73	13	1
1:A:721:HIS:HA	1:A:740:LEU:HG	0.43	1.90	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:630:VAL:HG22	1:A:712:PHE:C	0.43	2.35	19	1
1:A:653:LEU:O	1:A:748:GLN:NE2	0.43	2.51	19	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:788:LEU:HD11	0.43	2.44	19	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:748:GLN:HG3	0.43	2.28	2	1
1:A:660:PRO:HG2	1:A:664:TRP:CD1	0.43	2.49	3	2
1:A:696:LEU:HD12	1:A:755:TYR:CD2	0.43	2.49	4	1
1:A:714:HIS:ND1	1:A:714:HIS:N	0.43	2.65	4	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:649:LEU:CD1	0.43	2.96	6	2
1:A:711:LEU:N	1:A:795:ARG:NH1	0.43	2.67	6	1
1:A:739:ASP:OD1	1:A:742:LEU:HG	0.43	2.14	7	1
1:A:647:PHE:CE1	1:A:666:CYS:HB2	0.43	2.49	14	2
1:A:751:LEU:CD2	1:A:753:PRO:HD2	0.43	2.43	11	1
1:A:746:ARG:HD2	1:A:755:TYR:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:649:LEU:HD11	1:A:659:VAL:HG12	0.43	1.90	15	1
1:A:698:PRO:O	1:A:702:ARG:HG3	0.43	2.14	15	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:HG3	0.43	2.48	15	1
1:A:638:VAL:HG11	1:A:649:LEU:HD22	0.43	1.89	17	1
1:A:714:HIS:HD2	1:A:717:CYS:H	0.43	1.57	17	1
1:A:764:ASP:C	1:A:767:ARG:HB2	0.43	2.34	20	1
1:A:738:LEU:HA	1:A:742:LEU:HD22	0.42	1.90	2	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:743:ILE:CD1	0.42	2.96	2	1
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:C	0.42	2.34	11	2
1:A:716:PRO:CB	1:A:788:LEU:HB3	0.42	2.44	5	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:744:ARG:CD	0.42	2.44	9	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:667:SER:HB3	0.42	2.28	10	1
1:A:639:MET:O	1:A:641:ASN:N	0.42	2.52	11	2
1:A:647:PHE:HB2	1:A:664:TRP:CZ3	0.42	2.49	11	1
1:A:708:LEU:CD2	1:A:747:LEU:HG	0.42	2.44	15	1
1:A:746:ARG:O	1:A:753:PRO:O	0.42	2.36	15	1
1:A:769:PHE:CZ	1:A:788:LEU:HG	0.42	2.49	15	1
1:A:704:CYS:CA	1:A:707:VAL:HB	0.42	2.43	16	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:747:LEU:HD21	0.42	1.91	17	1
1:A:635:GLY:C	1:A:637:LEU:HG	0.42	2.35	5	4
1:A:746:ARG:HD2	1:A:751:LEU:HD13	0.42	1.90	1	1
1:A:656:LEU:HB3	1:A:660:PRO:HD3	0.42	1.91	4	1
1:A:746:ARG:CB	1:A:751:LEU:HD23	0.42	2.38	4	1
1:A:708:LEU:HD12	1:A:761:PHE:CD2	0.42	2.49	10	1
1:A:744:ARG:HH12	1:A:747:LEU:HB3	0.42	1.74	12	1
1:A:629:ARG:HG2	1:A:646:CYS:H	0.42	1.73	14	1
1:A:653:LEU:HD22	1:A:705:GLU:HG2	0.42	1.91	15	1
1:A:782:VAL:C	1:A:784:SER:H	0.42	2.17	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:703:LYS:HD2	1:A:799:ALA:O	0.42	2.14	16	1
1:A:653:LEU:CG	1:A:744:ARG:NH2	0.42	2.81	17	1
1:A:704:CYS:O	1:A:761:PHE:HZ	0.42	1.97	17	1
1:A:747:LEU:HD21	1:A:761:PHE:CD1	0.42	2.49	1	1
1:A:744:ARG:O	1:A:747:LEU:HB3	0.42	2.15	2	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:708:LEU:HB3	0.42	1.90	4	1
1:A:704:CYS:C	1:A:707:VAL:HG13	0.42	2.34	5	1
1:A:737:THR:HG23	1:A:739:ASP:N	0.42	2.29	6	1
1:A:656:LEU:CD2	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.97	9	1
1:A:696:LEU:CD1	1:A:701:GLN:HG3	0.42	2.44	10	1
1:A:772:PHE:O	1:A:775:LEU:HB2	0.42	2.12	11	1
1:A:759:GLN:HG2	1:A:763:GLN:NE2	0.42	2.29	13	1
1:A:740:LEU:C	1:A:742:LEU:N	0.42	2.71	20	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:712:PHE:CD2	0.42	3.02	2	1
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:O	0.42	2.14	5	1
1:A:631:CYS:O	1:A:632:GLN:HB2	0.42	2.15	9	2
1:A:629:ARG:HA	1:A:629:ARG:NE	0.42	2.30	7	1
1:A:747:LEU:HD23	1:A:755:TYR:CD2	0.42	2.49	7	2
1:A:701:GLN:C	1:A:704:CYS:HG	0.42	2.17	15	1
1:A:708:LEU:HD23	1:A:740:LEU:CD1	0.42	2.45	17	1
1:A:723:LEU:HB2	1:A:737:THR:HG22	0.42	1.90	5	1
1:A:711:LEU:HG	1:A:788:LEU:HD22	0.42	1.92	7	1
1:A:768:MET:HE3	1:A:768:MET:HB3	0.42	1.72	14	2
1:A:630:VAL:HB	1:A:712:PHE:HB3	0.42	1.92	14	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:761:PHE:HZ	0.42	2.27	19	1
1:A:638:VAL:O	1:A:638:VAL:CG1	0.42	2.67	1	1
1:A:658:ASP:O	1:A:659:VAL:C	0.42	2.57	14	5
1:A:744:ARG:HH11	1:A:748:GLN:HE21	0.42	1.56	1	1
1:A:738:LEU:HD23	1:A:743:ILE:HG13	0.42	1.90	2	1
1:A:785:ILE:O	1:A:788:LEU:HB2	0.42	2.14	3	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:701:GLN:HE21	0.42	1.74	5	1
1:A:704:CYS:SG	1:A:758:PRO:HB3	0.42	2.54	16	2
1:A:656:LEU:HD21	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.45	7	1
1:A:718:ARG:HB2	1:A:719:PRO:CD	0.42	2.44	16	2
1:A:656:LEU:CG	1:A:660:PRO:CD	0.42	2.98	9	1
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HB2	0.42	2.15	13	1
1:A:746:ARG:HG3	1:A:751:LEU:HB3	0.42	1.90	13	1
1:A:700:ASN:CA	1:A:703:LYS:HE2	0.42	2.44	15	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:767:ARG:HB2	0.42	1.92	16	1
1:A:636:ASP:O	1:A:649:LEU:HG	0.42	2.15	19	1
1:A:767:ARG:O	1:A:770:LYS:HB2	0.42	2.15	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:701:GLN:O	1:A:702:ARG:C	0.42	2.56	20	1
1:A:700:ASN:O	1:A:704:CYS:SG	0.42	2.75	5	2
1:A:653:LEU:O	1:A:744:ARG:HD3	0.42	2.14	6	1
1:A:704:CYS:O	1:A:705:GLU:C	0.42	2.58	6	1
1:A:761:PHE:CE1	1:A:796:MET:HE3	0.42	2.50	7	1
1:A:705:GLU:HG3	1:A:747:LEU:HD22	0.42	1.90	9	1
1:A:742:LEU:HD22	1:A:746:ARG:HH21	0.42	1.74	11	1
1:A:742:LEU:CD1	1:A:751:LEU:HD13	0.42	2.45	12	1
1:A:627:ILE:HG22	1:A:634:PRO:HA	0.42	1.89	13	1
1:A:696:LEU:CB	1:A:757:SER:CB	0.42	2.98	13	1
1:A:769:PHE:CE2	1:A:789:GLN:CA	0.42	3.03	15	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:755:TYR:HD2	0.42	2.22	16	1
1:A:626:THR:C	1:A:646:CYS:SG	0.42	2.98	19	1
1:A:717:CYS:HG	1:A:788:LEU:CD2	0.42	2.26	20	1
1:A:625:ALA:O	1:A:627:ILE:HG12	0.42	2.14	3	1
1:A:667:SER:HG	1:A:706:ARG:HA	0.42	1.73	7	1
1:A:739:ASP:O	1:A:740:LEU:C	0.42	2.58	10	2
1:A:783:GLN:HE21	1:A:786:ILE:HB	0.42	1.75	11	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:768:MET:SD	0.42	3.08	13	1
1:A:742:LEU:HG	1:A:746:ARG:NH2	0.42	2.30	14	1
1:A:635:GLY:O	1:A:637:LEU:HG	0.42	2.14	20	2
1:A:772:PHE:C	1:A:775:LEU:HD22	0.42	2.34	19	2
1:A:711:LEU:CG	1:A:740:LEU:HD11	0.42	2.45	17	1
1:A:628:CYS:H	1:A:637:LEU:HD21	0.42	1.75	19	1
1:A:722:GLN:C	1:A:723:LEU:HG	0.42	2.34	19	1
1:A:708:LEU:O	1:A:712:PHE:CD1	0.42	2.73	1	1
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:CD2	0.42	2.98	3	1
1:A:629:ARG:N	1:A:646:CYS:O	0.42	2.53	5	1
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:HD23	0.42	2.29	5	1
1:A:708:LEU:HA	1:A:711:LEU:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:751:LEU:CD2	1:A:752:SER:N	0.42	2.77	11	2
1:A:755:TYR:HA	1:A:760:GLU:OE1	0.42	2.15	11	1
1:A:653:LEU:HG	1:A:654:PRO:HD3	0.42	1.92	13	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:C	0.42	2.34	14	1
1:A:717:CYS:N	1:A:788:LEU:CD1	0.42	2.82	15	1
1:A:707:VAL:CG1	1:A:796:MET:HE3	0.42	2.45	17	1
1:A:746:ARG:HB3	1:A:755:TYR:CE2	0.42	2.50	20	1
1:A:714:HIS:CD2	1:A:717:CYS:SG	0.42	3.13	11	3
1:A:696:LEU:HA	1:A:757:SER:N	0.42	2.30	4	2
1:A:647:PHE:O	1:A:649:LEU:N	0.42	2.53	5	1
1:A:720:LEU:O	1:A:740:LEU:HG	0.42	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:667:SER:HB3	1:A:709:LEU:CG	0.42	2.45	9	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:767:ARG:CB	0.42	2.45	9	1
1:A:756:SER:C	1:A:757:SER:OG	0.42	2.57	13	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:705:GLU:C	0.42	2.34	15	1
1:A:649:LEU:HA	1:A:656:LEU:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:665:SER:HB2	1:A:670:HIS:CG	0.42	2.48	16	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:769:PHE:HE1	0.42	1.75	16	1
1:A:762:ALA:O	1:A:763:GLN:C	0.42	2.58	19	1
1:A:741:THR:C	1:A:744:ARG:HB3	0.41	2.35	7	1
1:A:653:LEU:HD13	1:A:744:ARG:HD2	0.41	1.91	10	2
1:A:638:VAL:HG12	1:A:649:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:772:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HD13	0.41	2.50	10	1
1:A:745:ALA:HB1	1:A:751:LEU:CB	0.41	2.44	12	1
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:HE2	0.41	2.14	15	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:744:ARG:CG	0.41	2.82	17	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:740:LEU:CD1	0.41	2.98	18	1
1:A:710:ALA:HB1	1:A:791:PHE:CE1	0.41	2.50	19	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:768:MET:CG	0.41	2.96	19	1
1:A:668:LEU:HD12	1:A:709:LEU:HD23	0.41	1.90	20	1
1:A:746:ARG:O	1:A:748:GLN:N	0.41	2.52	3	1
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:HA	0.41	2.15	5	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:788:LEU:CD2	0.41	2.99	5	1
1:A:743:ILE:O	1:A:746:ARG:HB2	0.41	2.14	5	1
1:A:715:GLU:H	1:A:716:PRO:HD2	0.41	1.75	6	1
1:A:630:VAL:CG1	1:A:651:CYS:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:629:ARG:NH1	1:A:645:PHE:C	0.41	2.74	9	1
1:A:715:GLU:HA	1:A:718:ARG:HG2	0.41	1.92	13	2
1:A:769:PHE:CD2	1:A:785:ILE:HG22	0.41	2.50	15	1
1:A:771:GLN:O	1:A:772:PHE:C	0.41	2.58	20	1
1:A:708:LEU:HD22	1:A:761:PHE:HE1	0.41	1.75	1	1
1:A:737:THR:HG23	1:A:771:GLN:HG3	0.41	1.91	15	2
1:A:740:LEU:HD23	1:A:743:ILE:HD12	0.41	1.92	5	1
1:A:757:SER:C	1:A:759:GLN:N	0.41	2.73	5	1
1:A:700:ASN:ND2	1:A:703:LYS:HZ1	0.41	2.13	7	1
1:A:711:LEU:HD11	1:A:788:LEU:HB3	0.41	1.93	7	1
1:A:743:ILE:CG2	1:A:761:PHE:O	0.41	2.69	10	1
1:A:710:ALA:HB1	1:A:791:PHE:CD1	0.41	2.50	11	2
1:A:746:ARG:HA	1:A:751:LEU:CD1	0.41	2.45	11	1
1:A:649:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:704:CYS:C	1:A:761:PHE:CE2	0.41	2.94	13	1
1:A:652:HIS:CE1	1:A:664:TRP:HZ2	0.41	2.34	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:664:TRP:O	1:A:665:SER:OG	0.41	2.31	16	1
1:A:697:SER:OG	1:A:698:PRO:HD2	0.41	2.15	18	1
1:A:666:CYS:O	1:A:670:HIS:HB3	0.41	2.16	1	1
1:A:744:ARG:NH1	1:A:748:GLN:NE2	0.41	2.67	1	1
1:A:667:SER:CB	1:A:709:LEU:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:705:GLU:CG	1:A:747:LEU:HD23	0.41	2.45	5	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:CB	0.41	2.41	6	1
1:A:637:LEU:HB3	1:A:646:CYS:HB3	0.41	1.93	13	2
1:A:697:SER:O	1:A:700:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:794:THR:HG23	1:A:798:GLU:OE1	0.41	2.15	11	1
1:A:710:ALA:CB	1:A:795:ARG:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:708:LEU:HD21	1:A:743:ILE:C	0.41	2.35	13	1
1:A:712:PHE:CD2	1:A:721:HIS:CE1	0.41	3.08	13	1
1:A:703:LYS:HE3	1:A:796:MET:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:738:LEU:HD12	1:A:742:LEU:CD1	0.41	2.45	18	1
1:A:645:PHE:HB3	1:A:666:CYS:SG	0.41	2.55	1	1
1:A:795:ARG:C	1:A:797:ASN:N	0.41	2.72	5	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CG	0.41	3.14	7	2
1:A:667:SER:O	1:A:706:ARG:HG2	0.41	2.16	10	1
1:A:645:PHE:CE2	1:A:713:CYS:SG	0.41	3.12	12	1
1:A:720:LEU:CD1	1:A:772:PHE:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:641:ASN:HD22	1:A:642:GLN:NE2	0.41	2.13	17	1
1:A:665:SER:OG	1:A:670:HIS:CB	0.41	2.69	19	1
1:A:642:GLN:NE2	1:A:665:SER:HB2	0.41	2.30	3	1
1:A:667:SER:O	1:A:670:HIS:N	0.41	2.53	11	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:740:LEU:HD22	0.41	1.93	3	1
1:A:772:PHE:C	1:A:775:LEU:H	0.41	2.18	3	1
1:A:656:LEU:H	1:A:656:LEU:HG	0.41	1.47	4	1
1:A:737:THR:O	1:A:738:LEU:HG	0.41	2.15	5	2
1:A:742:LEU:HD13	1:A:751:LEU:HD21	0.41	1.91	6	1
1:A:716:PRO:HG2	1:A:788:LEU:CD1	0.41	2.42	9	1
1:A:630:VAL:HA	1:A:713:CYS:CA	0.41	2.44	14	1
1:A:708:LEU:CB	1:A:761:PHE:CZ	0.41	3.04	16	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:668:LEU:C	0.41	2.36	20	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:705:GLU:CA	0.41	2.98	8	1
1:A:772:PHE:C	1:A:774:LYS:N	0.41	2.74	8	1
1:A:709:LEU:HD23	1:A:709:LEU:HA	0.41	1.80	11	1
1:A:652:HIS:HD2	1:A:656:LEU:HD13	0.41	1.75	13	1
1:A:649:LEU:CD2	1:A:659:VAL:HG23	0.41	2.42	14	1
1:A:700:ASN:O	1:A:703:LYS:N	0.41	2.54	15	1
1:A:769:PHE:CD2	1:A:785:ILE:O	0.41	2.74	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:709:LEU:O	1:A:712:PHE:N	0.41	2.54	17	1
1:A:761:PHE:O	1:A:764:ASP:CB	0.41	2.69	17	1
1:A:653:LEU:CD2	1:A:744:ARG:HB2	0.41	2.45	18	1
1:A:738:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:768:MET:CA	0.41	2.46	5	1
1:A:696:LEU:HB2	1:A:755:TYR:HB3	0.41	1.92	7	1
1:A:746:ARG:O	1:A:755:TYR:N	0.41	2.53	11	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:648:HIS:NE2	0.41	2.31	15	1
1:A:716:PRO:O	1:A:772:PHE:HZ	0.41	1.98	19	1
1:A:747:LEU:N	1:A:755:TYR:CZ	0.41	2.89	20	1
1:A:658:ASP:C	1:A:659:VAL:HG22	0.41	2.35	10	2
1:A:708:LEU:HD12	1:A:747:LEU:HD23	0.41	1.92	2	1
1:A:755:TYR:CD2	1:A:760:GLU:HG2	0.41	2.51	2	3
1:A:653:LEU:HD12	1:A:744:ARG:HD2	0.41	1.93	4	1
1:A:772:PHE:C	1:A:785:ILE:HD12	0.41	2.37	20	2
1:A:641:ASN:HD22	1:A:642:GLN:HE22	0.41	1.58	7	1
1:A:745:ALA:HB3	1:A:751:LEU:HB2	0.41	1.91	7	1
1:A:787:GLY:HA2	1:A:790:ARG:HE	0.41	1.76	10	1
1:A:695:LYS:CG	1:A:696:LEU:H	0.41	2.29	11	1
1:A:738:LEU:HD21	1:A:746:ARG:NH2	0.41	2.30	11	1
1:A:653:LEU:HD21	1:A:708:LEU:C	0.41	2.36	12	1
1:A:782:VAL:O	1:A:785:ILE:HB	0.41	2.16	12	1
1:A:699:ALA:O	1:A:703:LYS:HE2	0.41	2.16	13	1
1:A:791:PHE:O	1:A:792:PHE:C	0.41	2.59	13	1
1:A:629:ARG:O	1:A:713:CYS:O	0.41	2.38	14	1
1:A:696:LEU:HD13	1:A:757:SER:O	0.41	2.16	15	1
1:A:738:LEU:HD11	1:A:767:ARG:CD	0.41	2.42	15	1
1:A:786:ILE:HA	1:A:789:GLN:HG3	0.41	1.92	16	1
1:A:643:CYS:SG	1:A:645:PHE:CD2	0.41	3.14	19	1
1:A:770:LYS:HA	1:A:773:ASN:ND2	0.41	2.30	20	1
1:A:720:LEU:CD2	1:A:772:PHE:CG	0.41	3.00	1	1
1:A:746:ARG:NH1	1:A:752:SER:OG	0.41	2.54	2	1
1:A:712:PHE:CE2	1:A:740:LEU:CB	0.41	3.04	3	1
1:A:625:ALA:O	1:A:626:THR:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:696:LEU:HD23	1:A:758:PRO:N	0.41	2.31	4	1
1:A:743:ILE:CD1	1:A:768:MET:SD	0.41	3.09	4	1
1:A:652:HIS:HA	1:A:709:LEU:HD21	0.41	1.92	5	1
1:A:796:MET:HE2	1:A:800:PHE:CD1	0.41	2.51	6	1
1:A:638:VAL:HG13	1:A:659:VAL:HA	0.41	1.92	9	1
1:A:708:LEU:CD1	1:A:743:ILE:CG2	0.41	2.99	9	1
1:A:638:VAL:CG2	1:A:659:VAL:HG12	0.41	2.45	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:653:LEU:HD11	1:A:747:LEU:HD12	0.41	1.93	13	1
1:A:631:CYS:SG	1:A:633:LYS:HG3	0.41	2.56	16	1
1:A:743:ILE:HD13	1:A:761:PHE:O	0.40	2.16	4	1
1:A:755:TYR:HD2	1:A:760:GLU:CD	0.40	2.19	6	1
1:A:723:LEU:H	1:A:739:ASP:CB	0.40	2.29	8	1
1:A:741:THR:OG1	1:A:750:LYS:NZ	0.40	2.53	8	1
1:A:759:GLN:HB3	1:A:763:GLN:NE2	0.40	2.31	8	2
1:A:795:ARG:O	1:A:798:GLU:HB2	0.40	2.16	14	1
1:A:723:LEU:HD13	1:A:772:PHE:HA	0.40	1.92	20	1
1:A:748:GLN:HB3	1:A:750:LYS:HB2	0.40	1.93	20	1
1:A:629:ARG:O	1:A:632:GLN:HG3	0.40	2.17	1	1
1:A:753:PRO:O	1:A:754:PRO:C	0.40	2.59	1	1
1:A:788:LEU:O	1:A:791:PHE:HD2	0.40	1.99	4	1
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:CD1	0.40	2.45	5	1
1:A:709:LEU:C	1:A:709:LEU:HD12	0.40	2.36	6	1
1:A:696:LEU:CD2	1:A:701:GLN:HG2	0.40	2.44	7	1
1:A:742:LEU:O	1:A:746:ARG:HG2	0.40	2.15	14	1
1:A:646:CYS:O	1:A:647:PHE:CD1	0.40	2.74	17	1
1:A:721:HIS:C	1:A:739:ASP:HB2	0.40	2.35	18	1
1:A:739:ASP:CA	1:A:768:MET:SD	0.40	3.09	18	1
1:A:704:CYS:HB3	1:A:761:PHE:CE1	0.40	2.52	19	1
1:A:787:GLY:O	1:A:791:PHE:HB2	0.40	2.16	19	1
1:A:738:LEU:HB2	1:A:742:LEU:HD22	0.40	1.93	2	1
1:A:738:LEU:HD13	1:A:764:ASP:HA	0.40	1.92	4	1
1:A:637:LEU:HB3	1:A:647:PHE:N	0.40	2.30	7	1
1:A:645:PHE:HE2	1:A:668:LEU:HD23	0.40	1.68	7	1
1:A:629:ARG:HG3	1:A:646:CYS:O	0.40	2.16	9	1
1:A:649:LEU:HD12	1:A:656:LEU:CG	0.40	2.46	12	1
1:A:695:LYS:HG2	1:A:755:TYR:O	0.40	2.17	12	1
1:A:715:GLU:C	1:A:717:CYS:N	0.40	2.75	12	1
1:A:751:LEU:CG	1:A:752:SER:N	0.40	2.77	12	1
1:A:765:VAL:HG12	1:A:769:PHE:CE1	0.40	2.51	12	1
1:A:794:THR:HA	1:A:797:ASN:HB3	0.40	1.94	16	1
1:A:668:LEU:HD22	1:A:795:ARG:HH11	0.40	1.76	17	1
1:A:765:VAL:HB	1:A:768:MET:CE	0.40	2.46	19	1
1:A:634:PRO:HA	1:A:637:LEU:HD21	0.40	1.93	8	1
1:A:772:PHE:HA	1:A:775:LEU:CG	0.40	2.46	8	1
1:A:654:PRO:HB3	1:A:705:GLU:OE2	0.40	2.16	9	1
1:A:661:GLY:C	1:A:663:GLU:N	0.40	2.74	11	1
1:A:667:SER:HB2	1:A:709:LEU:HD12	0.40	1.93	13	1
1:A:652:HIS:NE2	1:A:654:PRO:CG	0.40	2.80	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:707:VAL:HB	1:A:761:PHE:HZ	0.40	1.77	15	1
1:A:638:VAL:CG1	1:A:647:PHE:HB2	0.40	2.46	17	1
1:A:758:PRO:O	1:A:762:ALA:HB3	0.40	2.15	18	1
1:A:696:LEU:HG	1:A:701:GLN:HB2	0.40	1.92	19	1
1:A:721:HIS:O	1:A:722:GLN:HG3	0.40	2.17	20	1
1:A:755:TYR:O	1:A:756:SER:OG	0.40	2.35	3	1
1:A:761:PHE:HA	1:A:764:ASP:CG	0.40	2.36	3	1
1:A:751:LEU:CG	1:A:752:SER:H	0.40	2.25	4	1
1:A:629:ARG:HG2	1:A:645:PHE:CE2	0.40	2.52	6	1
1:A:637:LEU:HD21	1:A:646:CYS:CB	0.40	2.45	11	1
1:A:723:LEU:CD2	1:A:768:MET:O	0.40	2.69	11	1
1:A:723:LEU:HB3	1:A:775:LEU:CD1	0.40	2.46	12	1
1:A:695:LYS:O	1:A:756:SER:C	0.40	2.60	18	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	136/189 (72%)	82±4 (60±3%)	33±3 (24±3%)	21±3 (16±2%)	0 4
All	All	2720/3780 (72%)	1632 (60%)	666 (24%)	422 (16%)	0 4

All 58 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	628	CYS	20
1	A	629	ARG	20
1	A	658	ASP	20
1	A	627	ILE	19
1	A	659	VAL	18
1	A	655	ALA	17
1	A	697	SER	17
1	A	753	PRO	17
1	A	645	PHE	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	752	SER	15
1	A	738	LEU	14
1	A	656	LEU	12
1	A	644	GLU	11
1	A	666	CYS	11
1	A	755	TYR	11
1	A	667	SER	11
1	A	749	GLU	11
1	A	664	TRP	10
1	A	653	LEU	10
1	A	751	LEU	9
1	A	648	HIS	9
1	A	754	PRO	8
1	A	724	ALA	8
1	A	695	LYS	7
1	A	668	LEU	7
1	A	661	GLY	7
1	A	662	GLU	7
1	A	640	CYS	7
1	A	630	VAL	6
1	A	783	GLN	6
1	A	756	SER	6
1	A	660	PRO	6
1	A	792	PHE	5
1	A	665	SER	4
1	A	657	GLN	3
1	A	652	HIS	3
1	A	739	ASP	3
1	A	740	LEU	3
1	A	711	LEU	2
1	A	663	GLU	2
1	A	641	ASN	2
1	A	748	GLN	2
1	A	636	ASP	2
1	A	625	ALA	2
1	A	737	THR	2
1	A	757	SER	2
1	A	721	HIS	1
1	A	649	LEU	1
1	A	698	PRO	1
1	A	626	THR	1
1	A	635	GLY	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	782	VAL	1
1	A	716	PRO	1
1	A	800	PHE	1
1	A	703	LYS	1
1	A	775	LEU	1
1	A	765	VAL	1
1	A	758	PRO	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	123/167 (74%)	86±4 (70±3%)	37±4 (30±3%)	1	16
All	All	2460/3340 (74%)	1717 (70%)	743 (30%)	1	16

All 101 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	659	VAL	20
1	A	626	THR	19
1	A	628	CYS	19
1	A	744	ARG	19
1	A	761	PHE	19
1	A	656	LEU	18
1	A	796	MET	18
1	A	667	SER	17
1	A	770	LYS	17
1	A	746	ARG	16
1	A	753	PRO	16
1	A	653	LEU	15
1	A	696	LEU	15
1	A	771	GLN	15
1	A	708	LEU	14
1	A	723	LEU	14
1	A	742	LEU	14
1	A	751	LEU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	782	VAL	14
1	A	783	GLN	14
1	A	788	LEU	14
1	A	702	ARG	13
1	A	638	VAL	13
1	A	668	LEU	12
1	A	755	TYR	12
1	A	713	CYS	12
1	A	658	ASP	11
1	A	704	CYS	11
1	A	768	MET	11
1	A	738	LEU	10
1	A	643	CYS	9
1	A	650	ASP	9
1	A	637	LEU	9
1	A	716	PRO	9
1	A	665	SER	9
1	A	631	CYS	9
1	A	706	ARG	8
1	A	790	ARG	8
1	A	695	LYS	8
1	A	748	GLN	7
1	A	649	LEU	7
1	A	743	ILE	7
1	A	759	GLN	7
1	A	798	GLU	7
1	A	629	ARG	7
1	A	639	MET	6
1	A	646	CYS	6
1	A	715	GLU	6
1	A	718	ARG	6
1	A	700	ASN	6
1	A	764	ASP	6
1	A	767	ARG	6
1	A	775	LEU	6
1	A	642	GLN	6
1	A	636	ASP	6
1	A	712	PHE	5
1	A	741	THR	5
1	A	772	PHE	5
1	A	797	ASN	5
1	A	707	VAL	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	794	THR	5
1	A	709	LEU	5
1	A	697	SER	4
1	A	747	LEU	4
1	A	641	ASN	4
1	A	645	PHE	4
1	A	752	SER	4
1	A	701	GLN	4
1	A	760	GLU	4
1	A	663	GLU	3
1	A	765	VAL	3
1	A	786	ILE	3
1	A	756	SER	3
1	A	670	HIS	3
1	A	703	LYS	3
1	A	634	PRO	2
1	A	711	LEU	2
1	A	714	HIS	2
1	A	737	THR	2
1	A	784	SER	2
1	A	630	VAL	2
1	A	722	GLN	2
1	A	789	GLN	2
1	A	627	ILE	2
1	A	652	HIS	2
1	A	800	PHE	1
1	A	791	PHE	1
1	A	633	LYS	1
1	A	739	ASP	1
1	A	795	ARG	1
1	A	763	GLN	1
1	A	647	PHE	1
1	A	666	CYS	1
1	A	785	ILE	1
1	A	632	GLN	1
1	A	757	SER	1
1	A	758	PRO	1
1	A	717	CYS	1
1	A	740	LEU	1
1	A	750	LYS	1
1	A	773	ASN	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

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

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided