



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:03 PM BST

PDB ID : 1BU9
Title : SOLUTION STRUCTURE OF P18-INK4C, 21 STRUCTURES
Authors : Byeon, I.-J.L.; Li, J.; Tsai, M.-D.
Deposited on : 1998-09-15

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

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

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

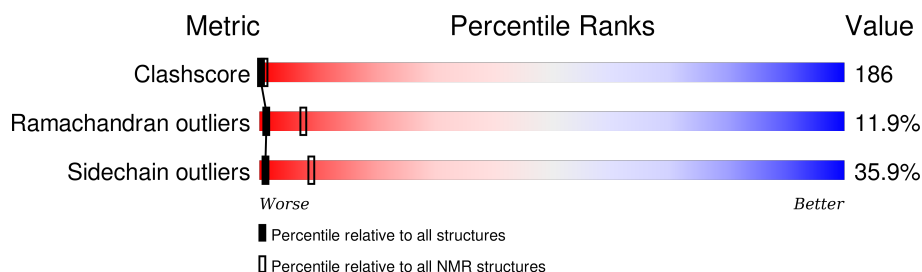
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 168 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 18 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|-----------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:8-A:162 (155) | 0.34 | 18 |

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

| Cluster number | Models |
|----------------|------------------------------------|
| 1 | 1, 2, 6, 7, 10, 11, 14, 17, 18, 20 |
| 2 | 3, 4, 8, 9, 12, 13, 15, 16, 21 |
| 3 | 5, 19 |

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2537 atoms, of which 1262 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR).

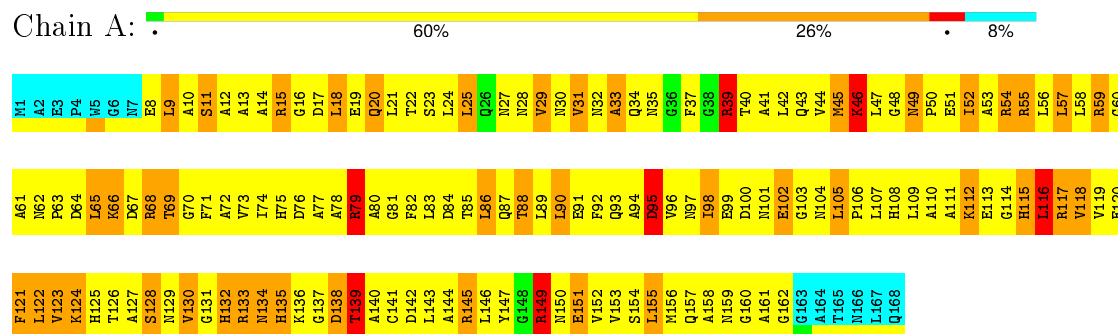
| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| 1 | A | 168 | Total | C | H | N | O | S | 0 |
| | | | 2537 | 784 | 1262 | 243 | 244 | 4 | |

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

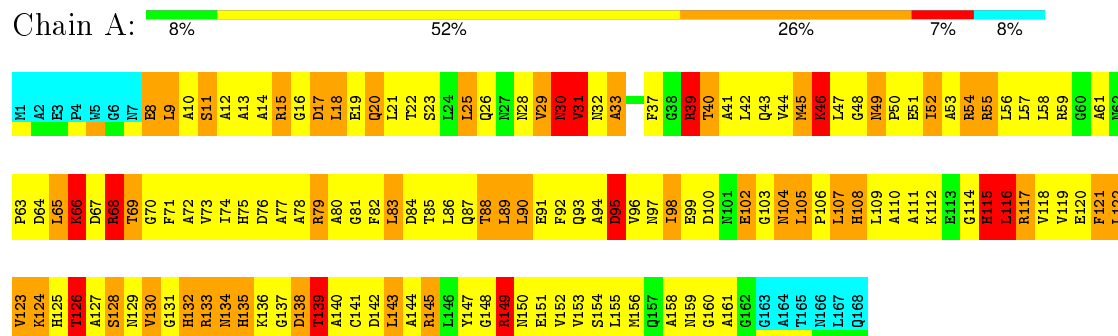


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

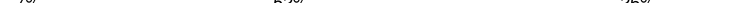
4.2.1 Score per residue for model 1

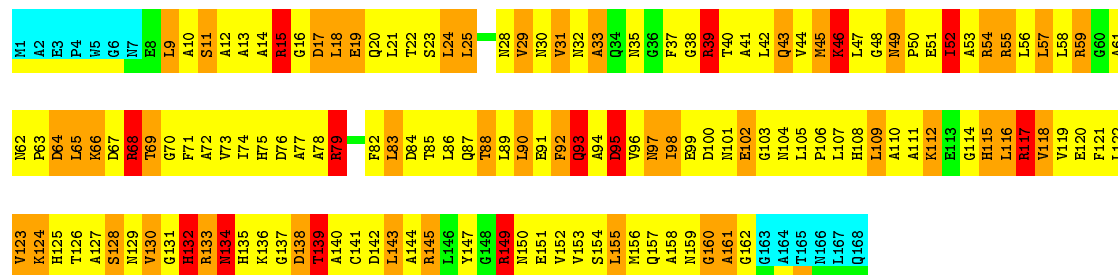
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

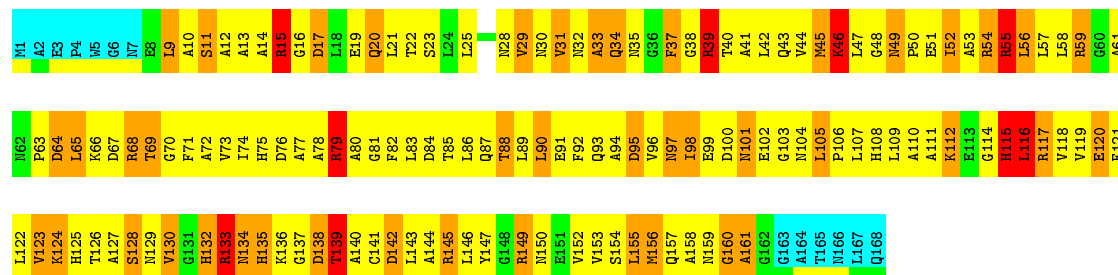
Chain A: 



4.2.3 Score per residue for model 3

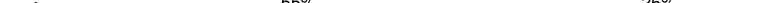
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

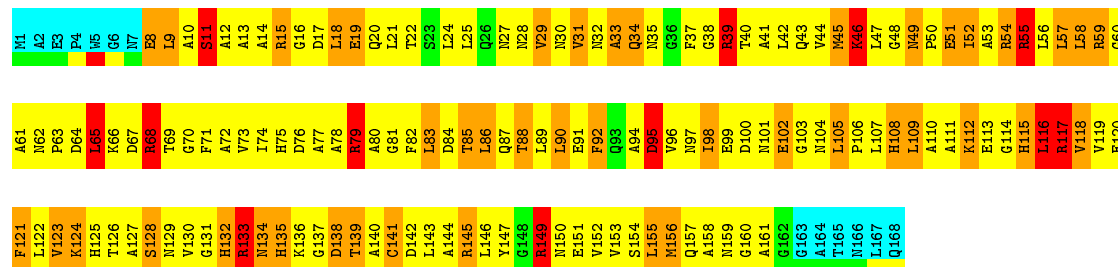
Chain A: 



4.2.4 Score per residue for model 4

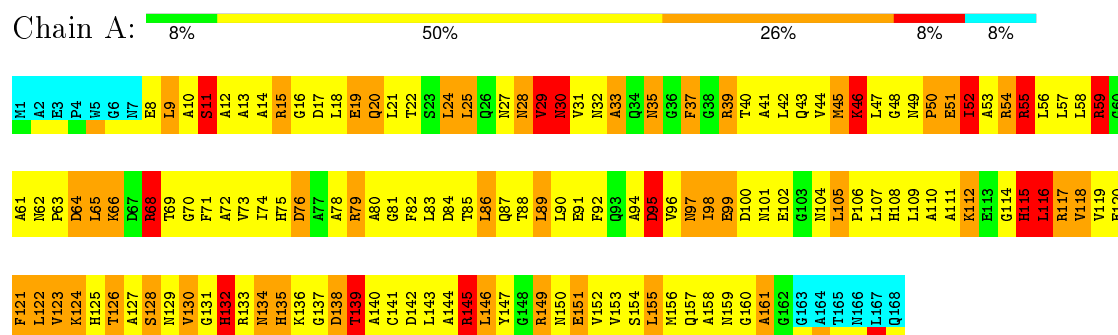
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

Chain A:  55% 26% 7% 8%



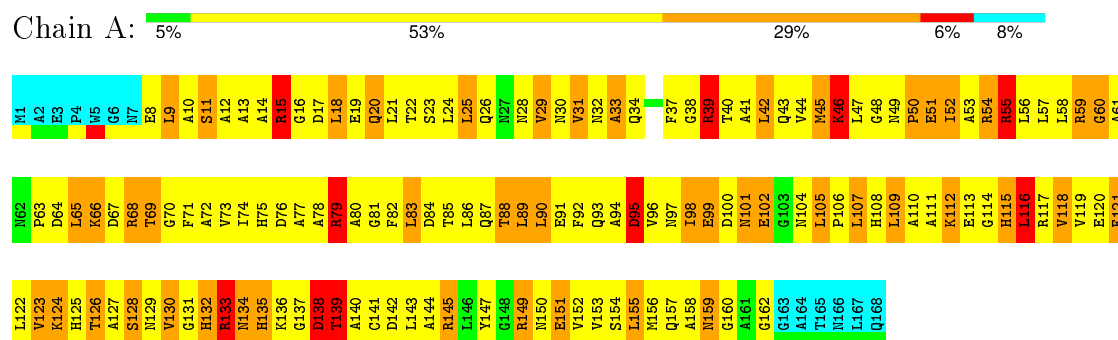
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



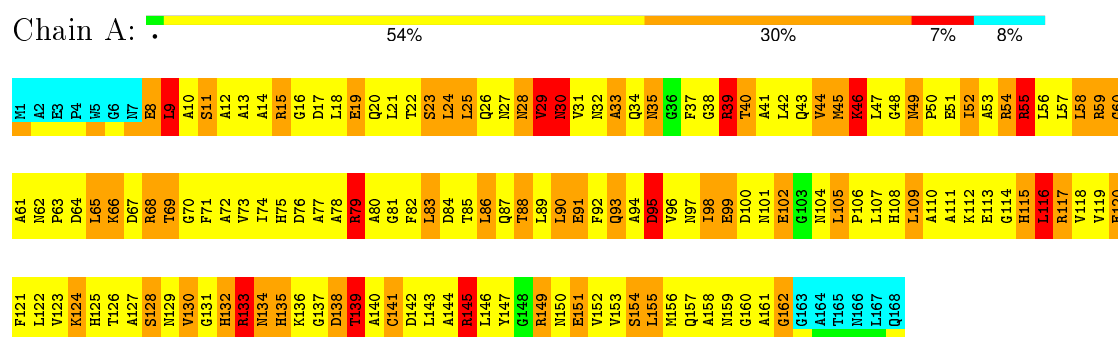
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



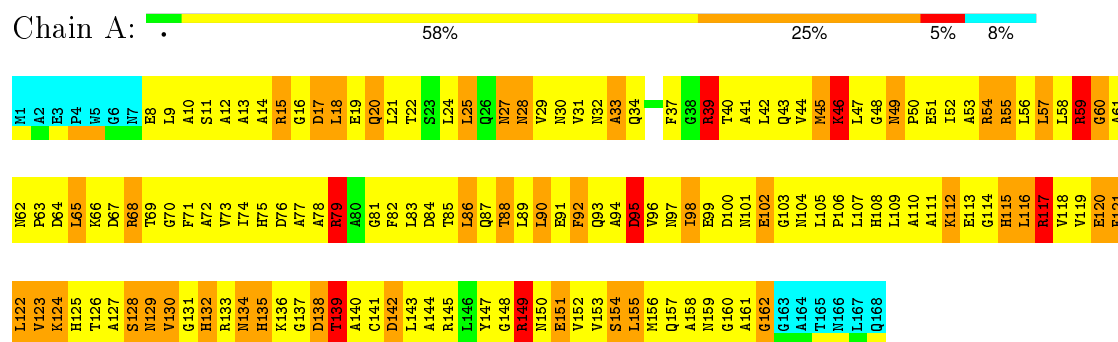
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



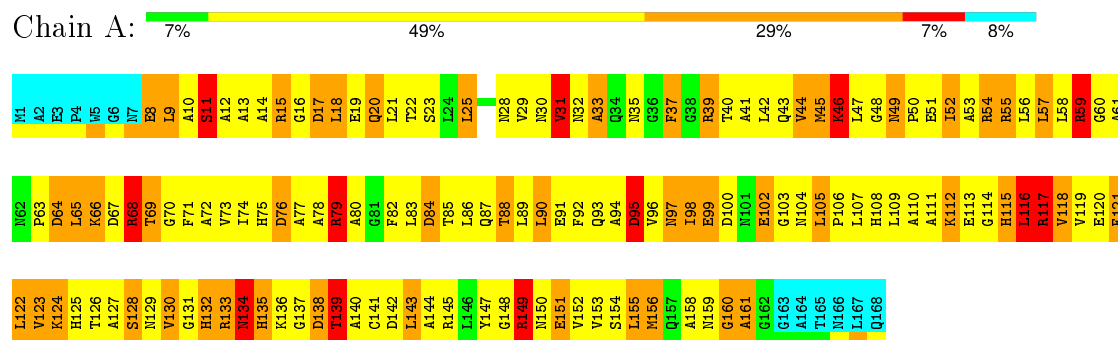
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



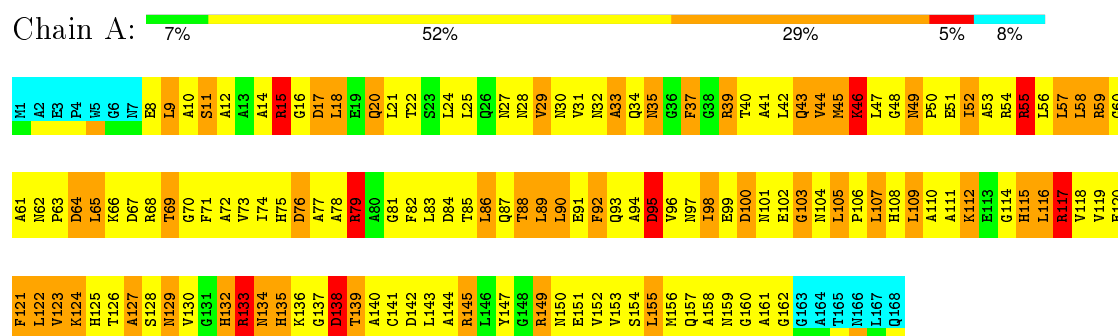
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



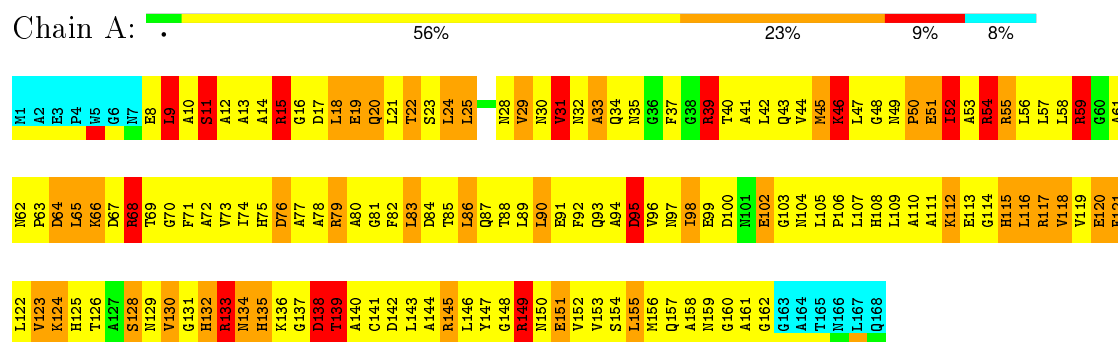
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



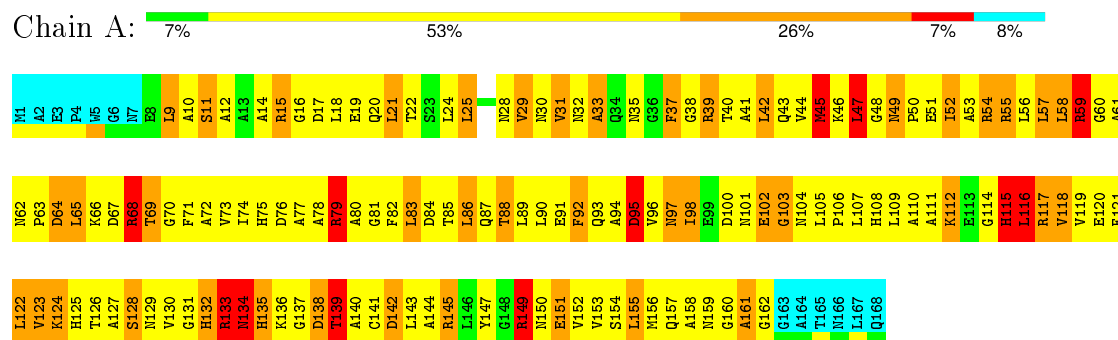
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



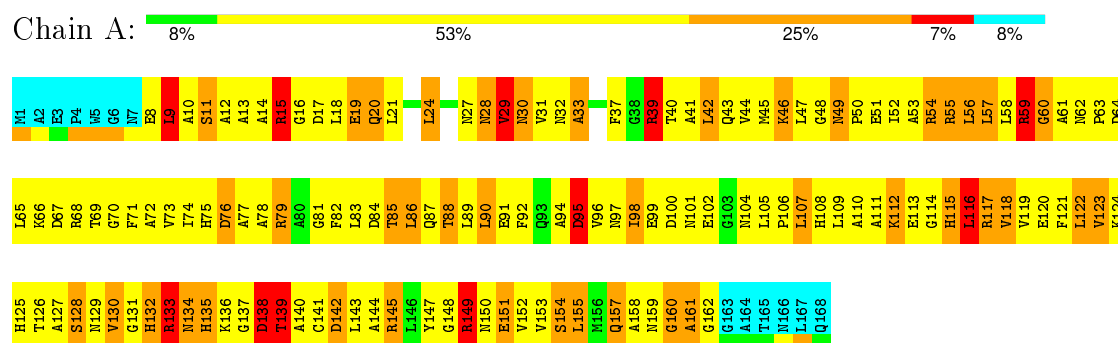
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



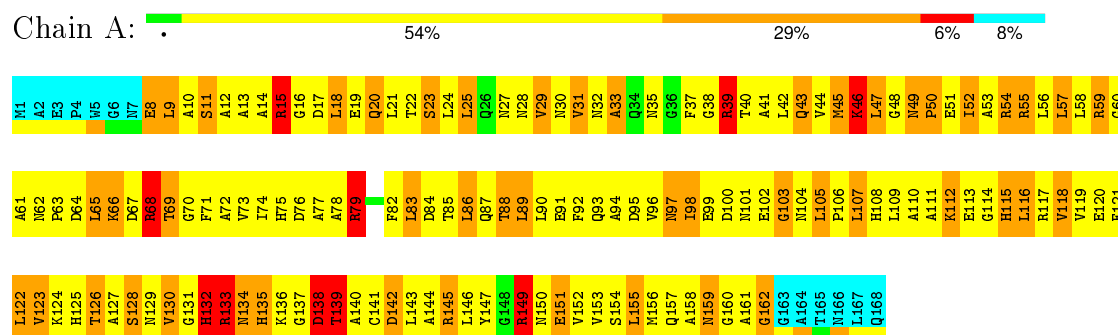
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



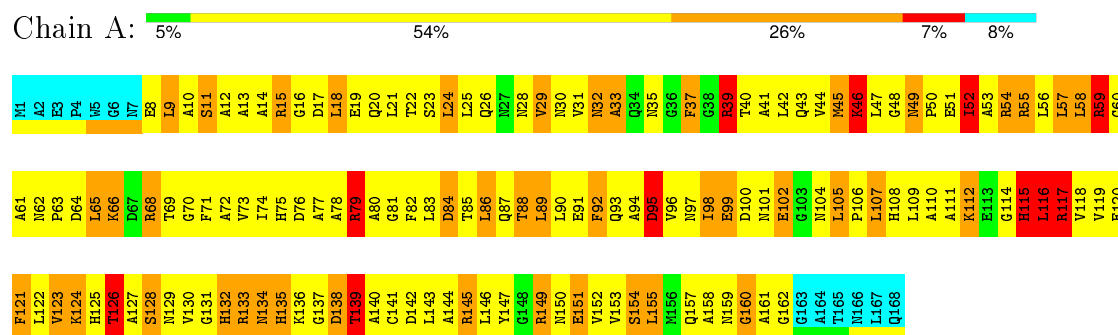
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



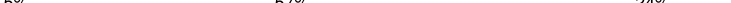
4.2.16 Score per residue for model 16

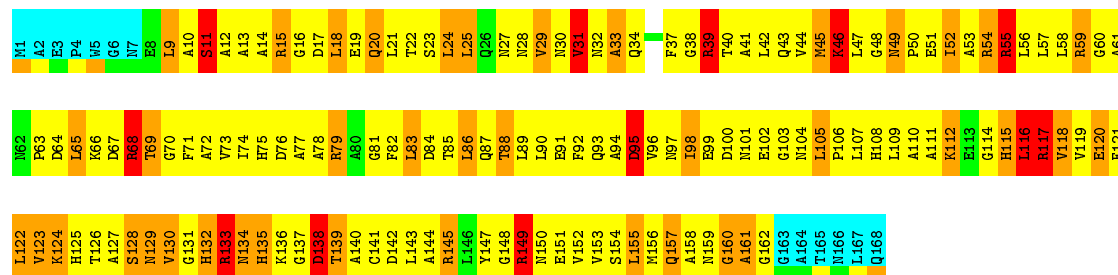
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

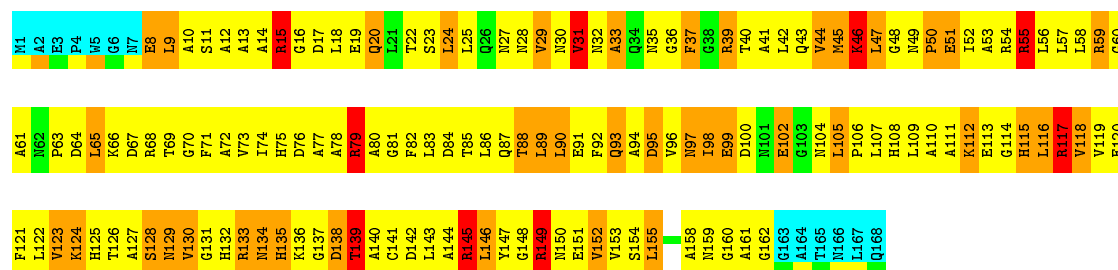
Chain A:  5% 57% 24% 7% 8%



4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

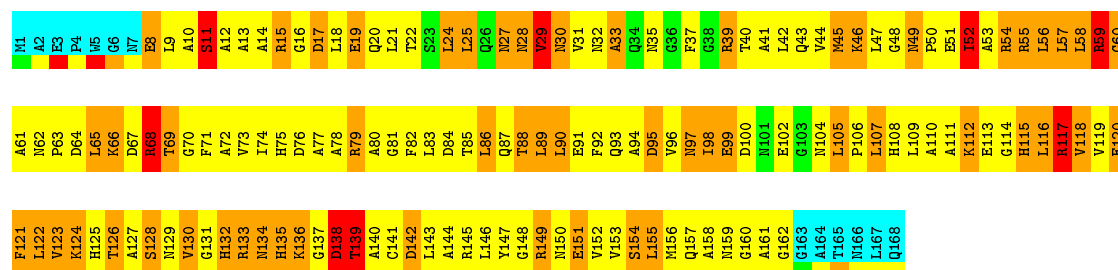
Chain A:  5% 57% 24% 5% 8%



4.2.19 Score per residue for model 19

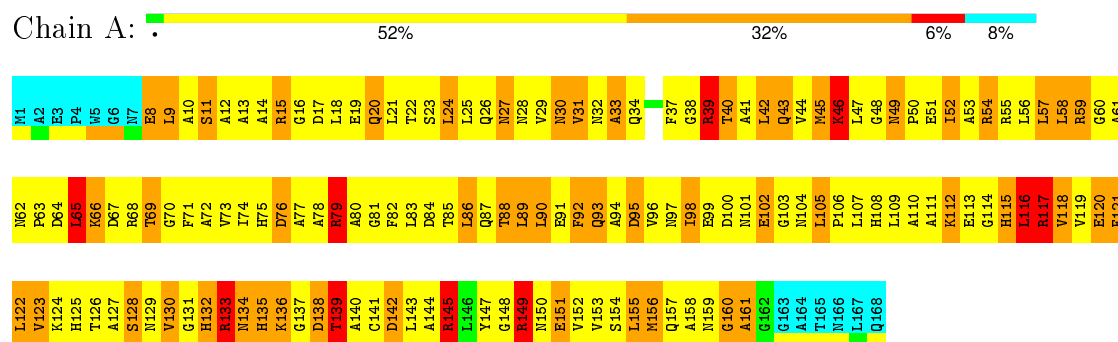
- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)

Chain A:  50% 33% 5% 8%



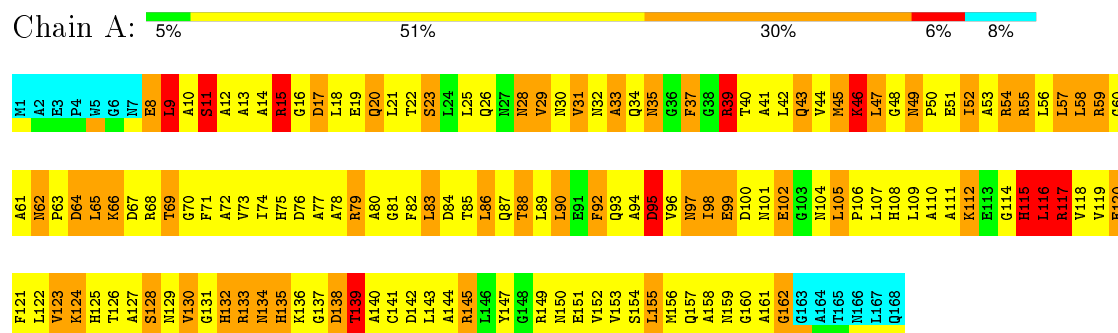
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PROTEIN (CYCLIN-DEPENDENT KINASE 6 INHIBITOR)



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING*.

Of the 50 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *CLOSEST TO MEAN STRUCTURE WHICH SHOWS GOOD AGREEMENT WITH THE CONSTRAINTS*.

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

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

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

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|-----|-------|--------------|---------------------|-------------|---------------------|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 1.04±0.00 | 0±0/1193 (0.0±0.0%) | 1.29±0.01 | 1±1/1614 (0.0±0.0%) |
| All | All | 1.04 | 0/25053 (0.0%) | 1.29 | 16/33894 (0.0%) |

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|-----|-------|-----------|-----------|
| 1 | A | 0.0±0.0 | 10.2±0.9 |
| All | All | 0 | 214 |

There are no bond-length outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|---------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 132 | HIS | N-CA-CB | -5.67 | 100.39 | 110.60 | 4 | 1 |
| 1 | A | 92 | PHE | N-CA-CB | -5.61 | 100.50 | 110.60 | 16 | 9 |
| 1 | A | 115 | HIS | N-CA-CB | -5.38 | 100.92 | 110.60 | 16 | 6 |

There are no chirality outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1 | A | 15 | ARG | Sidechain | 21 |
| 1 | A | 59 | ARG | Sidechain | 20 |
| 1 | A | 79 | ARG | Sidechain | 20 |
| 1 | A | 39 | ARG | Sidechain | 20 |
| 1 | A | 68 | ARG | Sidechain | 20 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1 | A | 55 | ARG | Sidechain | 19 |
| 1 | A | 133 | ARG | Sidechain | 19 |
| 1 | A | 54 | ARG | Sidechain | 19 |
| 1 | A | 117 | ARG | Sidechain | 19 |
| 1 | A | 149 | ARG | Sidechain | 19 |
| 1 | A | 145 | ARG | Sidechain | 18 |

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 | 1178 | 1174 | 1174 | 436±16 |
| All | All | 24738 | 24654 | 24654 | 9163 |

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 186.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:132:HIS:CD2 | 1.19 | 1.71 | 18 | 16 |
| 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:108:HIS:CE1 | 1.17 | 1.72 | 2 | 1 |
| 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:144:ALA:HB2 | 1.16 | 1.16 | 19 | 20 |
| 1:A:96:VAL:HG23 | 1:A:122:LEU:HD23 | 1.13 | 1.14 | 16 | 8 |
| 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:98:ILE:HD12 | 1.12 | 1.13 | 9 | 21 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:126:THR:HG22 | 1.10 | 1.22 | 20 | 4 |
| 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:65:LEU:HD12 | 1.09 | 1.20 | 3 | 8 |
| 1:A:107:LEU:HD21 | 1:A:119:VAL:HG13 | 1.09 | 1.12 | 4 | 5 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1.06 | 1.11 | 6 | 6 |
| 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 1.06 | 1.14 | 20 | 19 |
| 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1.04 | 1.18 | 15 | 13 |
| 1:A:78:ALA:HB1 | 1:A:110:ALA:HB2 | 1.03 | 1.12 | 3 | 15 |
| 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:85:THR:HG21 | 1.03 | 1.26 | 2 | 9 |
| 1:A:96:VAL:HG23 | 1:A:122:LEU:HD12 | 1.03 | 1.30 | 9 | 4 |
| 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 1.03 | 1.26 | 18 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:126:THR:HG23 | 1.02 | 1.08 | 16 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:126:THR:HG21 | 1.02 | 1.25 | 21 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:24:LEU:HD23 | 1.02 | 1.22 | 5 | 5 |
| 1:A:116:LEU:HD21 | 1:A:155:LEU:HD23 | 1.02 | 1.26 | 11 | 1 |
| 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:CD1 | 1.01 | 1.85 | 12 | 19 |
| 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:44:VAL:CG2 | 1.01 | 1.85 | 12 | 18 |
| 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:144:ALA:CB | 1.00 | 1.86 | 18 | 10 |
| 1:A:111:ALA:CB | 1:A:144:ALA:HB2 | 1.00 | 1.87 | 5 | 12 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.99 | 1.92 | 14 | 2 |
| 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.99 | 1.02 | 4 | 1 |
| 1:A:73:VAL:HG22 | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.98 | 1.34 | 13 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HD12 | 1:A:98:ILE:CG2 | 0.98 | 1.87 | 20 | 20 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:140:ALA:HB1 | 0.98 | 1.28 | 8 | 5 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:53:ALA:HB2 | 0.97 | 1.99 | 15 | 21 |
| 1:A:33:ALA:O | 1:A:40:THR:HG23 | 0.97 | 1.58 | 20 | 3 |
| 1:A:30:ASN:CB | 1:A:33:ALA:HB2 | 0.97 | 1.89 | 6 | 17 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:HD12 | 0.96 | 1.90 | 20 | 21 |
| 1:A:96:VAL:HG21 | 1:A:126:THR:CB | 0.96 | 1.89 | 11 | 3 |
| 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:HB3 | 0.96 | 1.38 | 21 | 5 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:73:VAL:HG21 | 0.96 | 1.90 | 11 | 1 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:73:VAL:HG12 | 0.96 | 1.60 | 1 | 5 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.96 | 1.38 | 14 | 10 |
| 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:CB | 0.95 | 1.90 | 17 | 6 |
| 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.95 | 1.33 | 1 | 4 |
| 1:A:108:HIS:HB3 | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.95 | 1.38 | 18 | 9 |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.95 | 1.95 | 16 | 15 |
| 1:A:33:ALA:O | 1:A:40:THR:HG22 | 0.95 | 1.62 | 4 | 13 |
| 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:121:PHE:CZ | 0.95 | 1.95 | 7 | 1 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:CG | 0.94 | 1.92 | 2 | 6 |
| 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.94 | 1.97 | 11 | 3 |
| 1:A:114:GLY:HA2 | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.94 | 1.38 | 7 | 13 |
| 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.94 | 1.92 | 10 | 21 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:119:VAL:HG23 | 0.94 | 1.39 | 5 | 14 |
| 1:A:10:ALA:O | 1:A:14:ALA:HB3 | 0.94 | 1.62 | 6 | 19 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 0.94 | 1.93 | 5 | 2 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:CG | 0.93 | 1.98 | 14 | 7 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:82:PHE:CG | 0.93 | 1.99 | 14 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.93 | 1.37 | 11 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:91:GLU:N | 0.93 | 1.78 | 4 | 9 |
| 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:76:ASP:O | 0.93 | 1.64 | 6 | 8 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.93 | 1.78 | 9 | 12 |
| 1:A:39:ARG:HG2 | 1:A:44:VAL:HG12 | 0.92 | 1.41 | 18 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.92 | 1.95 | 20 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.91 | 2.00 | 8 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:121:PHE:CB | 0.91 | 1.94 | 13 | 14 |
| 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:44:VAL:HB | 0.91 | 1.41 | 7 | 12 |
| 1:A:96:VAL:HG23 | 1:A:122:LEU:CD1 | 0.90 | 1.96 | 14 | 4 |
| 1:A:39:ARG:CG | 1:A:44:VAL:HG13 | 0.90 | 1.96 | 21 | 4 |
| 1:A:107:LEU:HD21 | 1:A:119:VAL:CG1 | 0.90 | 1.97 | 4 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.90 | 2.01 | 3 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HA | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.90 | 1.44 | 9 | 20 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:CD | 0.89 | 1.88 | 10 | 4 |
| 1:A:96:VAL:HG21 | 1:A:126:THR:HB | 0.89 | 1.43 | 4 | 3 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.89 | 1.44 | 2 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.89 | 2.02 | 2 | 8 |
| 1:A:116:LEU:HD23 | 1:A:117:ARG:N | 0.89 | 1.82 | 19 | 12 |
| 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:33:ALA:HB2 | 0.89 | 1.44 | 8 | 17 |
| 1:A:66:LYS:CE | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.89 | 1.97 | 17 | 11 |
| 1:A:120:GLU:O | 1:A:123:VAL:HG12 | 0.89 | 1.67 | 17 | 19 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:CB | 0.89 | 1.97 | 3 | 9 |
| 1:A:149:ARG:O | 1:A:153:VAL:HG23 | 0.89 | 1.67 | 13 | 21 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.89 | 2.01 | 13 | 12 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:140:ALA:HB1 | 0.89 | 1.42 | 13 | 3 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.89 | 1.98 | 15 | 8 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.89 | 2.61 | 4 | 5 |
| 1:A:79:ARG:CG | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.88 | 1.98 | 6 | 10 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:121:PHE:CE2 | 0.88 | 2.04 | 21 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.88 | 1.45 | 15 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.88 | 1.99 | 21 | 4 |
| 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:42:LEU:O | 0.88 | 1.68 | 11 | 3 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.87 | 1.68 | 21 | 3 |
| 1:A:57:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:O | 0.87 | 1.69 | 21 | 10 |
| 1:A:97:ASN:HA | 1:A:105:LEU:HD13 | 0.87 | 1.43 | 4 | 2 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:CB | 0.87 | 1.98 | 2 | 7 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:118:VAL:CG1 | 0.87 | 1.99 | 6 | 18 |
| 1:A:132:HIS:CE1 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.87 | 2.04 | 4 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.86 | 2.05 | 1 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:41:ALA:HB2 | 0.86 | 1.46 | 11 | 11 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.86 | 1.85 | 3 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:65:LEU:CD1 | 0.86 | 2.00 | 3 | 3 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.86 | 1.46 | 1 | 3 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.86 | 2.00 | 8 | 10 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.86 | 2.05 | 10 | 13 |
| 1:A:83:LEU:HD22 | 1:A:118:VAL:HA | 0.86 | 1.48 | 18 | 10 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:56:LEU:CD2 | 0.86 | 2.01 | 12 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:CG | 0.86 | 1.91 | 6 | 4 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:122:LEU:CB | 0.85 | 2.00 | 18 | 5 |
| 1:A:8:GLU:OE1 | 1:A:24:LEU:HD22 | 0.85 | 1.71 | 4 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:126:THR:HG21 | 0.85 | 1.46 | 3 | 2 |
| 1:A:71:PHE:CE2 | 1:A:109:LEU:HD21 | 0.85 | 2.06 | 3 | 5 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:21:LEU:HD21 | 0.85 | 2.00 | 6 | 4 |
| 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:24:LEU:CD2 | 0.85 | 2.01 | 5 | 3 |
| 1:A:146:LEU:HD11 | 1:A:147:TYR:CE1 | 0.85 | 2.07 | 18 | 1 |
| 1:A:111:ALA:HA | 1:A:152:VAL:HG11 | 0.84 | 1.48 | 12 | 21 |
| 1:A:97:ASN:C | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.84 | 1.91 | 21 | 10 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:42:LEU:HD13 | 0.84 | 1.73 | 18 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.84 | 1.47 | 5 | 3 |
| 1:A:99:GLU:CG | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.84 | 2.02 | 17 | 10 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:126:THR:HG22 | 0.84 | 2.01 | 20 | 5 |
| 1:A:71:PHE:HA | 1:A:75:HIS:ND1 | 0.84 | 1.87 | 10 | 21 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:119:VAL:HG23 | 0.84 | 2.01 | 5 | 17 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:OE1 | 0.83 | 1.73 | 11 | 3 |
| 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:99:GLU:N | 0.83 | 1.87 | 2 | 4 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:119:VAL:HG13 | 0.83 | 2.00 | 4 | 3 |
| 1:A:96:VAL:HG21 | 1:A:122:LEU:O | 0.83 | 1.74 | 2 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD11 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.83 | 1.49 | 8 | 5 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:41:ALA:HB1 | 0.83 | 2.04 | 14 | 9 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.83 | 2.01 | 16 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:CG | 0.83 | 1.94 | 2 | 5 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:77:ALA:HA | 0.82 | 1.51 | 10 | 5 |
| 1:A:28:ASN:O | 1:A:29:VAL:HG13 | 0.82 | 1.73 | 19 | 20 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:121:PHE:CG | 0.82 | 2.10 | 17 | 10 |
| 1:A:39:ARG:HG2 | 1:A:44:VAL:HG13 | 0.82 | 1.50 | 4 | 5 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:44:VAL:HG23 | 0.82 | 1.50 | 7 | 1 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.81 | 1.51 | 4 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:56:LEU:CD2 | 0.81 | 1.97 | 4 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.81 | 2.05 | 20 | 4 |
| 1:A:8:GLU:OE1 | 1:A:24:LEU:HD21 | 0.81 | 1.75 | 10 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HD12 | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.81 | 1.49 | 20 | 20 |
| 1:A:63:PRO:HB2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 0.81 | 1.52 | 8 | 1 |
| 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:N | 0.81 | 1.90 | 19 | 1 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:89:LEU:HD13 | 0.81 | 2.05 | 8 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CG | 1:A:44:VAL:HG12 | 0.81 | 2.05 | 18 | 2 |
| 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:22:THR:N | 0.80 | 1.91 | 10 | 3 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.80 | 1.50 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:63:PRO:HA | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.80 | 1.52 | 13 | 5 |
| 1:A:116:LEU:CD2 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.80 | 2.05 | 11 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.80 | 1.77 | 18 | 8 |
| 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:85:THR:CG2 | 0.80 | 2.07 | 3 | 7 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:126:THR:HG22 | 0.80 | 1.54 | 10 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.80 | 1.53 | 4 | 4 |
| 1:A:74:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.80 | 1.53 | 3 | 5 |
| 1:A:96:VAL:HG23 | 1:A:122:LEU:CD2 | 0.79 | 1.98 | 5 | 5 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:126:THR:HG21 | 0.79 | 2.07 | 11 | 2 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.79 | 2.06 | 11 | 2 |
| 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:76:ASP:HB3 | 0.79 | 1.52 | 1 | 8 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:132:HIS:CG | 0.79 | 2.13 | 13 | 4 |
| 1:A:79:ARG:HG3 | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.79 | 1.51 | 13 | 8 |
| 1:A:57:LEU:HD12 | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.79 | 2.13 | 16 | 11 |
| 1:A:105:LEU:HB2 | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.79 | 1.54 | 4 | 8 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.79 | 1.55 | 21 | 6 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:98:ILE:HG22 | 0.79 | 1.78 | 14 | 1 |
| 1:A:18:LEU:HD22 | 1:A:51:GLU:CD | 0.79 | 1.99 | 12 | 1 |
| 1:A:108:HIS:HD2 | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.78 | 1.37 | 10 | 12 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.78 | 2.08 | 10 | 3 |
| 1:A:108:HIS:ND1 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.78 | 1.94 | 1 | 12 |
| 1:A:83:LEU:HD22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 0.78 | 1.55 | 9 | 1 |
| 1:A:16:GLY:N | 1:A:46:LYS:HG3 | 0.78 | 1.93 | 10 | 8 |
| 1:A:74:ILE:CG1 | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.78 | 2.09 | 8 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:55:ARG:O | 0.78 | 1.79 | 21 | 2 |
| 1:A:66:LYS:HE3 | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.78 | 1.55 | 3 | 8 |
| 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:33:ALA:HB2 | 0.78 | 1.53 | 16 | 17 |
| 1:A:74:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.78 | 1.55 | 18 | 10 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.77 | 1.94 | 2 | 5 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:HG13 | 0.77 | 1.80 | 20 | 10 |
| 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:17:ASP:HB3 | 0.77 | 1.56 | 3 | 6 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.77 | 2.67 | 20 | 16 |
| 1:A:107:LEU:O | 1:A:107:LEU:HD23 | 0.77 | 1.77 | 4 | 2 |
| 1:A:146:LEU:HD11 | 1:A:147:TYR:CD1 | 0.77 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.77 | 1.78 | 2 | 1 |
| 1:A:108:HIS:HB3 | 1:A:143:LEU:HD13 | 0.77 | 1.54 | 10 | 10 |
| 1:A:50:PRO:HA | 1:A:85:THR:HG23 | 0.77 | 1.55 | 2 | 6 |
| 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:55:ARG:HB3 | 0.77 | 1.56 | 12 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CG2 | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.76 | 2.10 | 5 | 20 |
| 1:A:42:LEU:CG | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.76 | 2.10 | 13 | 6 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:121:PHE:HB3 | 0.76 | 1.55 | 13 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:160:GLY:O | 0.76 | 1.80 | 2 | 3 |
| 1:A:108:HIS:O | 1:A:111:ALA:HB3 | 0.76 | 1.80 | 18 | 12 |
| 1:A:114:GLY:CA | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.76 | 2.10 | 7 | 13 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:82:PHE:CB | 0.76 | 2.10 | 14 | 2 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.76 | 1.56 | 17 | 1 |
| 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:119:VAL:N | 0.76 | 1.96 | 4 | 21 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CG | 0.76 | 2.16 | 7 | 8 |
| 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.76 | 2.16 | 9 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.76 | 1.58 | 7 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HG | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.75 | 1.56 | 13 | 6 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:44:VAL:HG11 | 0.75 | 1.56 | 6 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG22 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.75 | 1.82 | 18 | 1 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:44:VAL:HG22 | 0.75 | 1.58 | 2 | 19 |
| 1:A:107:LEU:HD21 | 1:A:156:MET:SD | 0.75 | 2.22 | 21 | 3 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:21:LEU:CD1 | 0.75 | 2.12 | 19 | 1 |
| 1:A:97:ASN:HA | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.75 | 1.57 | 18 | 11 |
| 1:A:107:LEU:HD11 | 1:A:119:VAL:HG13 | 0.75 | 1.56 | 2 | 5 |
| 1:A:96:VAL:O | 1:A:105:LEU:HD11 | 0.75 | 1.82 | 19 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CZ | 1:A:44:VAL:HG11 | 0.75 | 2.12 | 7 | 7 |
| 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.75 | 1.59 | 19 | 3 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.74 | 2.69 | 1 | 3 |
| 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:17:ASP:CB | 0.74 | 2.11 | 9 | 20 |
| 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:87:GLN:N | 0.74 | 1.97 | 9 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:132:HIS:HD2 | 0.74 | 1.41 | 10 | 10 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:HG3 | 0.74 | 1.57 | 10 | 3 |
| 1:A:132:HIS:ND1 | 1:A:133:ARG:N | 0.74 | 2.36 | 11 | 4 |
| 1:A:74:ILE:HG12 | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.74 | 1.57 | 8 | 1 |
| 1:A:50:PRO:HB3 | 1:A:85:THR:CA | 0.74 | 2.12 | 11 | 21 |
| 1:A:57:LEU:HD21 | 1:A:92:PHE:HB2 | 0.74 | 1.57 | 6 | 2 |
| 1:A:74:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:CG | 0.74 | 2.12 | 20 | 20 |
| 1:A:130:VAL:HG23 | 1:A:130:VAL:O | 0.74 | 1.83 | 9 | 6 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:HG23 | 0.74 | 1.83 | 7 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:117:ARG:HD3 | 0.74 | 1.60 | 18 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:65:LEU:CD1 | 0.74 | 2.12 | 1 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.74 | 1.97 | 3 | 3 |
| 1:A:64:ASP:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 0.74 | 1.60 | 12 | 4 |
| 1:A:73:VAL:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 0.74 | 1.58 | 8 | 1 |
| 1:A:8:GLU:OE1 | 1:A:24:LEU:HD11 | 0.74 | 1.82 | 11 | 1 |
| 1:A:39:ARG:NE | 1:A:44:VAL:HG11 | 0.73 | 1.98 | 7 | 10 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:126:THR:HG22 | 0.73 | 1.58 | 5 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HG | 1:A:126:THR:HG22 | 0.73 | 1.58 | 2 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:21:LEU:CG | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.73 | 2.12 | 19 | 4 |
| 1:A:17:ASP:O | 1:A:21:LEU:HD23 | 0.73 | 1.83 | 4 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HB2 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.73 | 2.19 | 11 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:85:THR:HG21 | 0.73 | 1.59 | 7 | 7 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:121:PHE:CZ | 0.73 | 2.18 | 21 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD21 | 1:A:92:PHE:CB | 0.73 | 2.14 | 6 | 2 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:HG21 | 0.73 | 1.84 | 1 | 5 |
| 1:A:128:SER:O | 1:A:130:VAL:HG13 | 0.73 | 1.84 | 16 | 2 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:HB3 | 0.72 | 1.59 | 10 | 7 |
| 1:A:10:ALA:HA | 1:A:44:VAL:HG21 | 0.72 | 1.59 | 8 | 17 |
| 1:A:47:LEU:CD2 | 1:A:85:THR:HG21 | 0.72 | 2.12 | 20 | 7 |
| 1:A:17:ASP:O | 1:A:21:LEU:HD13 | 0.72 | 1.84 | 8 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:O | 0.72 | 1.84 | 11 | 6 |
| 1:A:78:ALA:HB3 | 1:A:106:PRO:HB2 | 0.72 | 1.60 | 14 | 1 |
| 1:A:71:PHE:HA | 1:A:75:HIS:CE1 | 0.72 | 2.20 | 19 | 21 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:122:LEU:HD13 | 0.72 | 1.62 | 15 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:107:LEU:O | 0.72 | 1.84 | 11 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB3 | 1:A:119:VAL:CG2 | 0.72 | 2.14 | 5 | 12 |
| 1:A:130:VAL:O | 1:A:130:VAL:HG23 | 0.71 | 1.83 | 21 | 7 |
| 1:A:57:LEU:CA | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.71 | 2.13 | 9 | 17 |
| 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.71 | 1.99 | 19 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:42:LEU:C | 0.71 | 2.05 | 19 | 4 |
| 1:A:96:VAL:HG21 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.71 | 2.15 | 11 | 2 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:126:THR:HG21 | 0.71 | 2.15 | 3 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CB | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.71 | 2.73 | 11 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HG | 1:A:118:VAL:HG22 | 0.71 | 1.61 | 1 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.71 | 1.61 | 6 | 1 |
| 1:A:13:ALA:CA | 1:A:21:LEU:HD11 | 0.71 | 2.15 | 3 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CG | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.71 | 2.74 | 1 | 10 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.71 | 2.16 | 18 | 9 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:58:LEU:HD23 | 0.71 | 1.86 | 11 | 13 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:HD12 | 0.71 | 1.86 | 21 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.71 | 1.63 | 14 | 3 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.71 | 2.21 | 17 | 2 |
| 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 0.70 | 1.63 | 14 | 8 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:HD23 | 0.70 | 2.16 | 4 | 5 |
| 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:17:ASP:HB2 | 0.70 | 1.61 | 5 | 18 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:HB3 | 0.70 | 1.62 | 21 | 8 |
| 1:A:105:LEU:HB3 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.70 | 2.21 | 19 | 2 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:CG | 0.70 | 2.74 | 9 | 11 |
| 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.70 | 1.63 | 5 | 9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:99:GLU:H | 0.70 | 1.45 | 2 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:126:THR:HG22 | 0.70 | 1.61 | 4 | 7 |
| 1:A:74:ILE:HD11 | 1:A:95:ASP:N | 0.70 | 2.00 | 2 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:21:LEU:CD2 | 0.70 | 2.05 | 6 | 1 |
| 1:A:21:LEU:CD2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.70 | 2.16 | 16 | 3 |
| 1:A:57:LEU:HG | 1:A:92:PHE:CG | 0.70 | 2.22 | 19 | 12 |
| 1:A:107:LEU:HB2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.70 | 1.62 | 20 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:CB | 0.70 | 2.17 | 4 | 1 |
| 1:A:42:LEU:C | 1:A:42:LEU:HD13 | 0.70 | 2.06 | 18 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:77:ALA:CA | 0.70 | 2.17 | 9 | 4 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:GLU:N | 0.70 | 2.01 | 16 | 1 |
| 1:A:70:GLY:O | 1:A:100:ASP:HA | 0.70 | 1.87 | 4 | 21 |
| 1:A:54:ARG:HD2 | 1:A:88:THR:HG23 | 0.70 | 1.63 | 2 | 4 |
| 1:A:79:ARG:HG2 | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.70 | 1.63 | 6 | 5 |
| 1:A:31:VAL:HG13 | 1:A:60:GLY:O | 0.70 | 1.86 | 18 | 2 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:47:LEU:N | 0.69 | 2.24 | 4 | 20 |
| 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.69 | 2.02 | 6 | 3 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:122:LEU:CB | 0.69 | 2.16 | 2 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HB2 | 1:A:94:ALA:HB2 | 0.69 | 1.63 | 8 | 4 |
| 1:A:117:ARG:HD2 | 1:A:118:VAL:HG23 | 0.69 | 1.62 | 9 | 3 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:HG22 | 0.69 | 1.87 | 11 | 4 |
| 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:121:PHE:CD1 | 0.69 | 2.22 | 18 | 1 |
| 1:A:97:ASN:C | 1:A:105:LEU:HD11 | 0.69 | 2.08 | 11 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CG2 | 1:A:106:PRO:CG | 0.69 | 2.70 | 9 | 19 |
| 1:A:108:HIS:CB | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.69 | 2.17 | 18 | 4 |
| 1:A:63:PRO:HB2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.69 | 1.64 | 15 | 3 |
| 1:A:116:LEU:HD11 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.69 | 2.16 | 8 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.69 | 2.22 | 3 | 13 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.69 | 2.17 | 2 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HA | 1:A:122:LEU:HD13 | 0.69 | 1.63 | 6 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.69 | 2.17 | 1 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:96:VAL:HG22 | 0.69 | 1.65 | 10 | 1 |
| 1:A:90:LEU:C | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.69 | 2.08 | 19 | 2 |
| 1:A:86:LEU:CD1 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.69 | 2.18 | 2 | 1 |
| 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:ILE:HG22 | 0.69 | 1.64 | 14 | 1 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:CD | 0.69 | 2.08 | 11 | 2 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.69 | 2.76 | 10 | 11 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.69 | 1.86 | 8 | 2 |
| 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:HB2 | 0.69 | 1.65 | 19 | 1 |
| 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:HD23 | 0.69 | 2.02 | 19 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:C | 0.69 | 2.09 | 11 | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:83:LEU:HD13 | 1:A:118:VAL:HA | 0.68 | 1.63 | 13 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.68 | 2.18 | 14 | 2 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CG | 0.68 | 2.76 | 6 | 9 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.68 | 2.77 | 4 | 9 |
| 1:A:154:SER:O | 1:A:158:ALA:HB3 | 0.68 | 1.88 | 4 | 21 |
| 1:A:43:GLN:HG2 | 1:A:73:VAL:HG22 | 0.68 | 1.63 | 3 | 2 |
| 1:A:143:LEU:HD22 | 1:A:147:TYR:CE2 | 0.68 | 2.23 | 5 | 9 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.68 | 2.18 | 4 | 4 |
| 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.68 | 2.04 | 4 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:57:LEU:O | 0.68 | 1.89 | 12 | 7 |
| 1:A:57:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:O | 0.68 | 1.87 | 3 | 8 |
| 1:A:74:ILE:HD12 | 1:A:98:ILE:CB | 0.68 | 2.18 | 20 | 6 |
| 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.68 | 2.18 | 5 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:59:ARG:HG3 | 0.68 | 1.66 | 8 | 1 |
| 1:A:121:PHE:CD1 | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.68 | 2.81 | 17 | 1 |
| 1:A:140:ALA:HB3 | 1:A:156:MET:CE | 0.68 | 2.19 | 4 | 1 |
| 1:A:133:ARG:HB2 | 1:A:137:GLY:CA | 0.68 | 2.19 | 5 | 1 |
| 1:A:138:ASP:HA | 1:A:142:ASP:CB | 0.67 | 2.19 | 1 | 21 |
| 1:A:49:ASN:N | 1:A:49:ASN:OD1 | 0.67 | 2.26 | 12 | 8 |
| 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:35:ASN:HD21 | 0.67 | 1.47 | 9 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HG3 | 1:A:44:VAL:HG13 | 0.67 | 1.65 | 21 | 2 |
| 1:A:71:PHE:CG | 1:A:75:HIS:ND1 | 0.67 | 2.61 | 7 | 20 |
| 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.67 | 2.25 | 14 | 13 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:HG2 | 0.67 | 1.64 | 1 | 4 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:106:PRO:CD | 0.67 | 2.43 | 4 | 18 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:44:VAL:HG13 | 0.67 | 1.67 | 1 | 5 |
| 1:A:41:ALA:HA | 1:A:44:VAL:CG2 | 0.67 | 2.19 | 21 | 15 |
| 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.67 | 1.67 | 20 | 5 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.67 | 1.89 | 3 | 6 |
| 1:A:142:ASP:O | 1:A:146:LEU:HD12 | 0.67 | 1.90 | 3 | 5 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.67 | 1.89 | 20 | 20 |
| 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:C | 0.67 | 2.08 | 8 | 6 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:OE2 | 0.67 | 1.87 | 10 | 2 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:HB2 | 0.67 | 1.66 | 17 | 3 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.67 | 1.90 | 7 | 8 |
| 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.67 | 1.66 | 12 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:HB1 | 0.67 | 1.66 | 3 | 3 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:118:VAL:HG12 | 0.67 | 1.67 | 6 | 14 |
| 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.67 | 2.04 | 16 | 1 |
| 1:A:77:ALA:CB | 1:A:85:THR:HG22 | 0.67 | 2.20 | 4 | 5 |
| 1:A:31:VAL:HG11 | 1:A:60:GLY:O | 0.66 | 1.90 | 12 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:85:THR:HG21 | 0.66 | 1.66 | 14 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:47:LEU:HD23 | 0.66 | 1.68 | 6 | 3 |
| 1:A:96:VAL:HG13 | 1:A:97:ASN:HD22 | 0.66 | 1.50 | 20 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.66 | 1.67 | 16 | 3 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:47:LEU:HD23 | 0.66 | 1.90 | 1 | 4 |
| 1:A:41:ALA:CA | 1:A:44:VAL:HG23 | 0.66 | 2.19 | 7 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:85:THR:CG2 | 0.66 | 2.20 | 14 | 13 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:86:LEU:HD11 | 0.66 | 2.15 | 19 | 3 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.66 | 2.78 | 17 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HB2 | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.66 | 2.06 | 2 | 5 |
| 1:A:74:ILE:HG23 | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.66 | 1.65 | 14 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:MET:H | 0.66 | 1.49 | 21 | 2 |
| 1:A:137:GLY:O | 1:A:139:THR:N | 0.66 | 2.28 | 13 | 21 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.66 | 2.20 | 15 | 2 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:41:ALA:HB1 | 0.66 | 1.66 | 14 | 2 |
| 1:A:97:ASN:O | 1:A:105:LEU:HD11 | 0.66 | 1.91 | 11 | 1 |
| 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:20:GLN:HB3 | 0.66 | 1.68 | 3 | 12 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:N | 0.66 | 2.06 | 19 | 3 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:46:LYS:N | 0.66 | 2.28 | 4 | 3 |
| 1:A:90:LEU:C | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.66 | 2.10 | 4 | 2 |
| 1:A:74:ILE:HG23 | 1:A:106:PRO:CG | 0.66 | 2.21 | 14 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:122:LEU:CB | 0.66 | 2.21 | 12 | 3 |
| 1:A:97:ASN:HA | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.66 | 2.20 | 20 | 3 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:140:ALA:N | 0.66 | 2.63 | 14 | 20 |
| 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:161:ALA:CB | 0.66 | 2.21 | 1 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.66 | 2.59 | 1 | 1 |
| 1:A:106:PRO:CA | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.66 | 2.20 | 17 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:122:LEU:HB2 | 0.65 | 1.68 | 18 | 2 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:57:LEU:HD13 | 0.65 | 1.91 | 15 | 3 |
| 1:A:57:LEU:HD11 | 1:A:92:PHE:CG | 0.65 | 2.25 | 13 | 5 |
| 1:A:116:LEU:C | 1:A:116:LEU:HD13 | 0.65 | 2.11 | 11 | 1 |
| 1:A:30:ASN:O | 1:A:33:ALA:N | 0.65 | 2.25 | 13 | 4 |
| 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.65 | 2.07 | 3 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CB | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.65 | 2.21 | 18 | 14 |
| 1:A:47:LEU:CB | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.65 | 2.80 | 10 | 19 |
| 1:A:43:GLN:HA | 1:A:73:VAL:HG22 | 0.65 | 1.68 | 14 | 5 |
| 1:A:86:LEU:CD1 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.65 | 2.80 | 9 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:CB | 0.65 | 2.20 | 13 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CB | 0.65 | 2.22 | 7 | 8 |
| 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:C | 0.65 | 2.11 | 12 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HG3 | 0.65 | 1.69 | 2 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:24:LEU:O | 1:A:29:VAL:HG13 | 0.65 | 1.91 | 8 | 1 |
| 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:98:ILE:C | 0.65 | 2.11 | 17 | 1 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:CB | 0.65 | 2.45 | 10 | 4 |
| 1:A:96:VAL:HG23 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.65 | 1.68 | 3 | 2 |
| 1:A:134:ASN:ND2 | 1:A:143:LEU:HD11 | 0.65 | 2.07 | 7 | 1 |
| 1:A:132:HIS:CE1 | 1:A:140:ALA:CB | 0.65 | 2.80 | 4 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.65 | 2.27 | 18 | 17 |
| 1:A:25:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HG21 | 0.65 | 1.69 | 8 | 1 |
| 1:A:113:GLU:CB | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.65 | 2.80 | 15 | 11 |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:41:ALA:HB2 | 0.65 | 2.22 | 19 | 1 |
| 1:A:78:ALA:HB1 | 1:A:110:ALA:CB | 0.64 | 2.07 | 3 | 1 |
| 1:A:75:HIS:HA | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.64 | 1.69 | 9 | 19 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:24:LEU:HD23 | 0.64 | 1.69 | 13 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.64 | 2.61 | 20 | 4 |
| 1:A:108:HIS:HE1 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.64 | 2.11 | 17 | 5 |
| 1:A:129:ASN:HB3 | 1:A:132:HIS:CB | 0.64 | 2.21 | 1 | 1 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:110:ALA:HB2 | 0.64 | 2.07 | 3 | 1 |
| 1:A:54:ARG:CG | 1:A:58:LEU:CD2 | 0.64 | 2.75 | 20 | 14 |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:CE2 | 0.64 | 2.27 | 21 | 3 |
| 1:A:34:GLN:HG3 | 1:A:40:THR:HG22 | 0.64 | 1.67 | 17 | 1 |
| 1:A:58:LEU:CD2 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.64 | 2.81 | 2 | 6 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:44:VAL:HG13 | 0.64 | 1.93 | 14 | 2 |
| 1:A:13:ALA:CA | 1:A:21:LEU:HD21 | 0.64 | 2.23 | 4 | 1 |
| 1:A:65:LEU:HD12 | 1:A:65:LEU:O | 0.64 | 1.93 | 4 | 1 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:37:PHE:CD1 | 0.64 | 2.51 | 6 | 4 |
| 1:A:10:ALA:O | 1:A:14:ALA:CB | 0.64 | 2.46 | 4 | 10 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:52:ILE:HD11 | 0.64 | 2.08 | 12 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:126:THR:HB | 0.64 | 1.68 | 3 | 2 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:127:ALA:H | 0.64 | 1.53 | 1 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD11 | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.64 | 2.28 | 13 | 4 |
| 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.64 | 2.28 | 19 | 2 |
| 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:161:ALA:CA | 0.64 | 2.23 | 1 | 7 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:39:ARG:O | 0.64 | 1.92 | 2 | 5 |
| 1:A:14:ALA:CB | 1:A:44:VAL:HG23 | 0.64 | 2.12 | 15 | 4 |
| 1:A:18:LEU:HD22 | 1:A:51:GLU:OE2 | 0.64 | 1.93 | 18 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HG | 1:A:73:VAL:HG21 | 0.63 | 1.69 | 5 | 3 |
| 1:A:71:PHE:CD1 | 1:A:75:HIS:ND1 | 0.63 | 2.67 | 19 | 18 |
| 1:A:85:THR:O | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.63 | 1.93 | 10 | 1 |
| 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.63 | 2.07 | 2 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CG | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.63 | 2.23 | 18 | 7 |
| 1:A:146:LEU:HD21 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.63 | 2.27 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:86:LEU:N | 0.63 | 2.31 | 13 | 20 |
| 1:A:160:GLY:O | 1:A:161:ALA:HB2 | 0.63 | 1.93 | 13 | 4 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.63 | 2.80 | 17 | 13 |
| 1:A:138:ASP:HB2 | 1:A:143:LEU:HD21 | 0.63 | 1.68 | 1 | 5 |
| 1:A:47:LEU:H | 1:A:47:LEU:HD22 | 0.63 | 1.54 | 8 | 4 |
| 1:A:146:LEU:C | 1:A:146:LEU:HD12 | 0.63 | 2.13 | 18 | 1 |
| 1:A:79:ARG:HB2 | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.63 | 1.70 | 14 | 4 |
| 1:A:64:ASP:O | 1:A:66:LYS:N | 0.63 | 2.31 | 14 | 19 |
| 1:A:86:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.63 | 2.81 | 8 | 10 |
| 1:A:57:LEU:C | 1:A:57:LEU:HD13 | 0.63 | 2.13 | 9 | 5 |
| 1:A:47:LEU:HB3 | 1:A:82:PHE:CG | 0.63 | 2.28 | 9 | 19 |
| 1:A:97:ASN:CA | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.63 | 2.23 | 21 | 9 |
| 1:A:106:PRO:CA | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.63 | 2.22 | 4 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:132:HIS:CG | 0.63 | 2.86 | 11 | 4 |
| 1:A:57:LEU:CD2 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.63 | 2.81 | 19 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:122:LEU:CB | 0.63 | 2.24 | 13 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.63 | 2.24 | 15 | 3 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:H | 0.63 | 1.52 | 18 | 3 |
| 1:A:74:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.63 | 1.70 | 20 | 3 |
| 1:A:145:ARG:HA | 1:A:153:VAL:HG21 | 0.63 | 1.69 | 6 | 21 |
| 1:A:74:ILE:HD11 | 1:A:94:ALA:CB | 0.63 | 2.23 | 8 | 1 |
| 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:44:VAL:CB | 0.62 | 2.24 | 16 | 16 |
| 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:35:ASN:ND2 | 0.62 | 2.08 | 9 | 1 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:CG | 0.62 | 2.52 | 21 | 17 |
| 1:A:121:PHE:CD1 | 1:A:122:LEU:N | 0.62 | 2.67 | 19 | 14 |
| 1:A:97:ASN:HA | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.62 | 1.69 | 2 | 1 |
| 1:A:133:ARG:O | 1:A:134:ASN:O | 0.62 | 2.17 | 11 | 17 |
| 1:A:121:PHE:CD1 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.62 | 2.29 | 9 | 2 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.62 | 2.67 | 1 | 2 |
| 1:A:74:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:CB | 0.62 | 2.24 | 19 | 19 |
| 1:A:153:VAL:HG12 | 1:A:157:GLN:NE2 | 0.62 | 2.09 | 16 | 4 |
| 1:A:45:MET:HE2 | 1:A:47:LEU:HD13 | 0.62 | 1.71 | 7 | 6 |
| 1:A:47:LEU:HB3 | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.62 | 2.30 | 21 | 16 |
| 1:A:57:LEU:HA | 1:A:61:ALA:CB | 0.62 | 2.25 | 19 | 20 |
| 1:A:57:LEU:CD2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.62 | 2.24 | 3 | 6 |
| 1:A:107:LEU:HB3 | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.62 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:143:LEU:N | 1:A:143:LEU:CD2 | 0.62 | 2.62 | 1 | 1 |
| 1:A:72:ALA:O | 1:A:75:HIS:N | 0.62 | 2.32 | 7 | 20 |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 0.62 | 2.24 | 16 | 5 |
| 1:A:39:ARG:NE | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.62 | 2.63 | 13 | 9 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:HG23 | 0.62 | 2.25 | 18 | 13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:71:PHE:CA | 1:A:75:HIS:HD1 | 0.62 | 2.08 | 10 | 3 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:140:ALA:HB3 | 0.62 | 2.10 | 16 | 5 |
| 1:A:39:ARG:NH1 | 1:A:44:VAL:HG11 | 0.61 | 2.10 | 20 | 1 |
| 1:A:66:LYS:CE | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.61 | 2.78 | 12 | 9 |
| 1:A:145:ARG:CA | 1:A:153:VAL:HG21 | 0.61 | 2.25 | 6 | 5 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:HD13 | 0.61 | 2.26 | 8 | 3 |
| 1:A:37:PHE:N | 1:A:37:PHE:CD1 | 0.61 | 2.68 | 9 | 2 |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:24:LEU:HD23 | 0.61 | 2.13 | 5 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HG21 | 0.61 | 1.72 | 21 | 1 |
| 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.61 | 1.72 | 2 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CG | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.61 | 2.78 | 2 | 5 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:119:VAL:HG13 | 0.61 | 2.24 | 7 | 3 |
| 1:A:75:HIS:CE1 | 1:A:99:GLU:O | 0.61 | 2.53 | 2 | 3 |
| 1:A:83:LEU:HD22 | 1:A:118:VAL:CA | 0.61 | 2.25 | 3 | 6 |
| 1:A:63:PRO:HB2 | 1:A:94:ALA:HB1 | 0.61 | 1.72 | 6 | 13 |
| 1:A:74:ILE:CA | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.61 | 2.23 | 3 | 1 |
| 1:A:143:LEU:O | 1:A:147:TYR:CD2 | 0.61 | 2.53 | 18 | 21 |
| 1:A:75:HIS:CG | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.61 | 2.82 | 5 | 2 |
| 1:A:57:LEU:C | 1:A:57:LEU:CD1 | 0.61 | 2.68 | 21 | 8 |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:151:GLU:HB3 | 0.61 | 1.72 | 10 | 5 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.61 | 2.77 | 11 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HB2 | 1:A:56:LEU:HD11 | 0.61 | 1.73 | 13 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.61 | 2.77 | 13 | 5 |
| 1:A:133:ARG:CA | 1:A:139:THR:HG22 | 0.61 | 2.26 | 5 | 13 |
| 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:85:THR:CG2 | 0.61 | 2.25 | 13 | 7 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:85:THR:HG23 | 0.61 | 1.72 | 18 | 4 |
| 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.61 | 1.73 | 7 | 1 |
| 1:A:129:ASN:HB2 | 1:A:132:HIS:CG | 0.61 | 2.31 | 7 | 5 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:CD1 | 0.61 | 2.78 | 11 | 7 |
| 1:A:126:THR:O | 1:A:127:ALA:HB2 | 0.61 | 1.95 | 10 | 1 |
| 1:A:14:ALA:C | 1:A:46:LYS:CG | 0.61 | 2.69 | 12 | 2 |
| 1:A:13:ALA:N | 1:A:21:LEU:HD21 | 0.61 | 2.11 | 4 | 1 |
| 1:A:29:VAL:O | 1:A:31:VAL:N | 0.61 | 2.33 | 13 | 5 |
| 1:A:57:LEU:HG | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.61 | 1.71 | 3 | 7 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:CG2 | 0.61 | 2.79 | 21 | 16 |
| 1:A:111:ALA:CA | 1:A:119:VAL:HG21 | 0.61 | 2.26 | 4 | 2 |
| 1:A:63:PRO:CG | 1:A:94:ALA:HA | 0.61 | 2.26 | 1 | 18 |
| 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:122:LEU:HD11 | 0.61 | 1.72 | 4 | 3 |
| 1:A:98:ILE:CG2 | 1:A:98:ILE:O | 0.60 | 2.49 | 19 | 10 |
| 1:A:54:ARG:CG | 1:A:58:LEU:HD21 | 0.60 | 2.25 | 14 | 11 |
| 1:A:88:THR:O | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.60 | 2.54 | 8 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.60 | 2.11 | 20 | 4 |
| 1:A:74:ILE:CD1 | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.60 | 2.24 | 20 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:CB | 0.60 | 2.25 | 16 | 5 |
| 1:A:71:PHE:CB | 1:A:75:HIS:HD1 | 0.60 | 2.07 | 17 | 2 |
| 1:A:99:GLU:CG | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.60 | 2.64 | 19 | 1 |
| 1:A:97:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.60 | 2.54 | 9 | 9 |
| 1:A:108:HIS:NE2 | 1:A:140:ALA:N | 0.60 | 2.49 | 13 | 13 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:HB3 | 0.60 | 1.72 | 4 | 1 |
| 1:A:18:LEU:HD21 | 1:A:51:GLU:OE2 | 0.60 | 1.96 | 11 | 2 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:CB | 0.60 | 2.49 | 21 | 5 |
| 1:A:105:LEU:HB3 | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.60 | 2.11 | 11 | 1 |
| 1:A:50:PRO:CB | 1:A:85:THR:HA | 0.60 | 2.26 | 17 | 21 |
| 1:A:9:LEU:CD2 | 1:A:41:ALA:CB | 0.60 | 2.79 | 6 | 4 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:107:LEU:C | 0.60 | 2.17 | 4 | 3 |
| 1:A:83:LEU:HD13 | 1:A:87:GLN:HG3 | 0.60 | 1.72 | 9 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:57:LEU:C | 0.60 | 2.70 | 10 | 3 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:98:ILE:CG2 | 0.60 | 2.50 | 7 | 8 |
| 1:A:37:PHE:CB | 1:A:39:ARG:NH2 | 0.60 | 2.65 | 2 | 3 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.60 | 2.79 | 12 | 12 |
| 1:A:71:PHE:HA | 1:A:75:HIS:HD1 | 0.60 | 1.52 | 10 | 2 |
| 1:A:102:GLU:CA | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.60 | 2.84 | 11 | 8 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.60 | 2.70 | 4 | 1 |
| 1:A:47:LEU:CD2 | 1:A:82:PHE:CB | 0.60 | 2.80 | 14 | 2 |
| 1:A:123:VAL:O | 1:A:127:ALA:HB2 | 0.60 | 1.96 | 8 | 1 |
| 1:A:13:ALA:N | 1:A:21:LEU:HD11 | 0.60 | 2.11 | 3 | 2 |
| 1:A:39:ARG:O | 1:A:39:ARG:CD | 0.60 | 2.50 | 3 | 5 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:94:ALA:HB2 | 0.60 | 2.26 | 10 | 18 |
| 1:A:39:ARG:O | 1:A:39:ARG:HD3 | 0.60 | 1.97 | 21 | 4 |
| 1:A:46:LYS:CB | 1:A:52:ILE:HD12 | 0.60 | 2.27 | 5 | 10 |
| 1:A:71:PHE:CD1 | 1:A:75:HIS:CE1 | 0.60 | 2.89 | 7 | 9 |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:21:LEU:CD1 | 0.60 | 2.80 | 15 | 1 |
| 1:A:144:ALA:HB1 | 1:A:152:VAL:HB | 0.60 | 1.73 | 1 | 7 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:122:LEU:HD13 | 0.60 | 1.72 | 10 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.60 | 2.27 | 7 | 9 |
| 1:A:40:THR:HG21 | 1:A:65:LEU:HD13 | 0.60 | 1.72 | 2 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:121:PHE:CZ | 0.60 | 2.31 | 17 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CG | 1:A:140:ALA:HA | 0.60 | 2.30 | 1 | 15 |
| 1:A:74:ILE:O | 1:A:77:ALA:HB3 | 0.60 | 1.97 | 12 | 6 |
| 1:A:39:ARG:N | 1:A:39:ARG:CD | 0.60 | 2.65 | 16 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD23 | 1:A:117:ARG:H | 0.60 | 1.52 | 9 | 9 |
| 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:82:PHE:CE2 | 0.60 | 2.31 | 4 | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:41:ALA:CB | 0.60 | 2.80 | 19 | 7 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:21:LEU:HD13 | 0.60 | 1.73 | 19 | 1 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:118:VAL:HG11 | 0.60 | 1.72 | 20 | 7 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:73:VAL:CG1 | 0.60 | 2.50 | 7 | 6 |
| 1:A:79:ARG:CB | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.59 | 2.26 | 14 | 3 |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:CD1 | 0.59 | 2.32 | 8 | 9 |
| 1:A:71:PHE:CA | 1:A:75:HIS:ND1 | 0.59 | 2.65 | 10 | 14 |
| 1:A:57:LEU:HG | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.59 | 2.32 | 16 | 13 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:45:MET:C | 0.59 | 2.40 | 20 | 20 |
| 1:A:47:LEU:HB2 | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.59 | 2.32 | 6 | 18 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:86:LEU:HB3 | 0.59 | 1.74 | 4 | 7 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:13:ALA:HB3 | 0.59 | 1.97 | 15 | 7 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:22:THR:N | 0.59 | 2.65 | 9 | 3 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:45:MET:N | 0.59 | 2.66 | 9 | 12 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.59 | 2.48 | 21 | 12 |
| 1:A:35:ASN:CB | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.59 | 2.65 | 16 | 3 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:122:LEU:CB | 0.59 | 2.80 | 10 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:140:ALA:CB | 0.59 | 2.17 | 8 | 5 |
| 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:CZ | 0.59 | 2.31 | 21 | 1 |
| 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:21:LEU:HD11 | 0.59 | 1.73 | 2 | 2 |
| 1:A:10:ALA:CB | 1:A:39:ARG:CZ | 0.59 | 2.80 | 6 | 1 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:49:ASN:N | 0.59 | 2.34 | 20 | 9 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:CD2 | 0.59 | 2.55 | 8 | 19 |
| 1:A:97:ASN:O | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.59 | 1.96 | 21 | 4 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:37:PHE:O | 0.59 | 2.55 | 17 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:CB | 0.59 | 2.27 | 13 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:125:HIS:HB3 | 0.59 | 1.74 | 17 | 2 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:140:ALA:CB | 0.59 | 2.66 | 2 | 3 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:HA | 0.59 | 1.98 | 9 | 19 |
| 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:20:GLN:HG2 | 0.59 | 1.75 | 14 | 9 |
| 1:A:21:LEU:O | 1:A:25:LEU:HD23 | 0.59 | 1.97 | 8 | 1 |
| 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CE1 | 0.59 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:CB | 0.59 | 2.50 | 14 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.59 | 1.72 | 11 | 1 |
| 1:A:143:LEU:HD23 | 1:A:143:LEU:N | 0.59 | 2.12 | 1 | 3 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:37:PHE:N | 0.59 | 2.71 | 12 | 2 |
| 1:A:133:ARG:HB3 | 1:A:137:GLY:CA | 0.59 | 2.28 | 9 | 16 |
| 1:A:129:ASN:HD21 | 1:A:140:ALA:HB3 | 0.59 | 1.58 | 12 | 6 |
| 1:A:149:ARG:CD | 1:A:152:VAL:CG2 | 0.59 | 2.80 | 11 | 5 |
| 1:A:74:ILE:HD11 | 1:A:94:ALA:HB1 | 0.59 | 1.75 | 4 | 5 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:105:LEU:CB | 0.59 | 2.51 | 1 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:70:GLY:O | 0.59 | 1.98 | 2 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD22 | 1:A:55:ARG:O | 0.59 | 1.97 | 14 | 1 |
| 1:A:54:ARG:CG | 1:A:88:THR:HG23 | 0.59 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:132:HIS:HD2 | 0.59 | 1.56 | 11 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:140:ALA:CA | 0.59 | 2.85 | 7 | 17 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:57:LEU:C | 0.59 | 2.18 | 13 | 6 |
| 1:A:129:ASN:CG | 1:A:132:HIS:CG | 0.59 | 2.76 | 4 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:58:LEU:CD2 | 0.59 | 2.28 | 12 | 14 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.59 | 1.73 | 10 | 2 |
| 1:A:69:THR:O | 1:A:71:PHE:CD1 | 0.59 | 2.56 | 9 | 7 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.59 | 2.32 | 1 | 6 |
| 1:A:8:GLU:OE2 | 1:A:12:ALA:HB2 | 0.59 | 1.97 | 13 | 1 |
| 1:A:88:THR:HG22 | 1:A:92:PHE:CE2 | 0.58 | 2.33 | 16 | 2 |
| 1:A:54:ARG:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 0.58 | 1.75 | 14 | 5 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.58 | 2.56 | 14 | 14 |
| 1:A:138:ASP:CA | 1:A:142:ASP:HB3 | 0.58 | 2.28 | 9 | 2 |
| 1:A:73:VAL:HG13 | 1:A:89:LEU:CD1 | 0.58 | 2.27 | 8 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 0.58 | 1.75 | 1 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:92:PHE:CE1 | 0.58 | 2.56 | 6 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:53:ALA:HB1 | 0.58 | 1.73 | 16 | 1 |
| 1:A:128:SER:HB3 | 1:A:130:VAL:HG13 | 0.58 | 1.74 | 15 | 3 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:CG2 | 0.58 | 2.51 | 11 | 4 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:44:VAL:CG2 | 0.58 | 2.51 | 7 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:CD2 | 0.58 | 2.33 | 21 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.58 | 1.75 | 11 | 2 |
| 1:A:75:HIS:CA | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.58 | 2.29 | 9 | 14 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:115:HIS:HB2 | 0.58 | 1.75 | 10 | 6 |
| 1:A:102:GLU:HA | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.58 | 2.33 | 11 | 13 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:131:GLY:N | 0.58 | 2.36 | 5 | 11 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:47:LEU:HD13 | 0.58 | 1.97 | 18 | 3 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB3 | 0.58 | 1.74 | 4 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:92:PHE:CE2 | 0.58 | 2.56 | 14 | 1 |
| 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:39:ARG:CZ | 0.58 | 2.28 | 6 | 1 |
| 1:A:114:GLY:O | 1:A:116:LEU:N | 0.58 | 2.37 | 2 | 21 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:CB | 0.58 | 2.51 | 11 | 17 |
| 1:A:133:ARG:HG2 | 1:A:139:THR:HG22 | 0.58 | 1.75 | 21 | 14 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.58 | 2.81 | 10 | 3 |
| 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:20:GLN:NE2 | 0.58 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD12 | 1:A:151:GLU:HB3 | 0.58 | 1.75 | 19 | 1 |
| 1:A:89:LEU:CD2 | 1:A:89:LEU:N | 0.58 | 2.65 | 8 | 1 |
| 1:A:146:LEU:CD1 | 1:A:147:TYR:CD1 | 0.58 | 2.87 | 18 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:HE1 | 0.58 | 1.52 | 15 | 2 |
| 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:119:VAL:HG21 | 0.58 | 1.75 | 9 | 2 |
| 1:A:73:VAL:HG12 | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.58 | 1.75 | 2 | 2 |
| 1:A:27:ASN:O | 1:A:28:ASN:CB | 0.58 | 2.50 | 13 | 6 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:HB2 | 0.58 | 1.99 | 21 | 5 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:39:ARG:N | 0.58 | 2.66 | 4 | 4 |
| 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:132:HIS:HD2 | 0.58 | 1.59 | 11 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE2 | 1:A:47:LEU:HD23 | 0.58 | 1.75 | 19 | 2 |
| 1:A:96:VAL:HG22 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.58 | 2.12 | 20 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HA | 1:A:73:VAL:CG1 | 0.58 | 2.28 | 7 | 5 |
| 1:A:90:LEU:CG | 1:A:126:THR:CG2 | 0.58 | 2.82 | 3 | 3 |
| 1:A:47:LEU:CB | 1:A:82:PHE:CG | 0.58 | 2.87 | 9 | 14 |
| 1:A:96:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:HD23 | 0.58 | 1.74 | 10 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.58 | 2.67 | 4 | 1 |
| 1:A:66:LYS:CD | 1:A:70:GLY:O | 0.58 | 2.52 | 4 | 10 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:90:LEU:HD12 | 0.58 | 1.98 | 1 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CB | 1:A:39:ARG:CZ | 0.58 | 2.82 | 8 | 3 |
| 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:161:ALA:HA | 0.58 | 1.76 | 13 | 7 |
| 1:A:50:PRO:HB3 | 1:A:85:THR:HA | 0.58 | 1.75 | 5 | 17 |
| 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.57 | 2.34 | 13 | 11 |
| 1:A:10:ALA:CB | 1:A:39:ARG:NE | 0.57 | 2.67 | 6 | 1 |
| 1:A:143:LEU:CD2 | 1:A:147:TYR:CE2 | 0.57 | 2.87 | 10 | 8 |
| 1:A:113:GLU:CB | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.57 | 2.67 | 18 | 8 |
| 1:A:14:ALA:O | 1:A:46:LYS:CE | 0.57 | 2.53 | 18 | 20 |
| 1:A:118:VAL:CG1 | 1:A:119:VAL:N | 0.57 | 2.67 | 9 | 20 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:52:ILE:HD11 | 0.57 | 1.99 | 19 | 10 |
| 1:A:57:LEU:CG | 1:A:92:PHE:CG | 0.57 | 2.87 | 19 | 12 |
| 1:A:74:ILE:HD12 | 1:A:98:ILE:HG22 | 0.57 | 1.76 | 19 | 1 |
| 1:A:73:VAL:CG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.57 | 2.21 | 13 | 1 |
| 1:A:126:THR:O | 1:A:127:ALA:HB3 | 0.57 | 1.98 | 8 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:72:ALA:N | 0.57 | 2.14 | 4 | 3 |
| 1:A:18:LEU:HD22 | 1:A:51:GLU:CG | 0.57 | 2.30 | 12 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD22 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.57 | 2.35 | 14 | 2 |
| 1:A:108:HIS:N | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.57 | 2.53 | 1 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:126:THR:CG2 | 0.57 | 2.80 | 3 | 4 |
| 1:A:108:HIS:HB3 | 1:A:143:LEU:CD1 | 0.57 | 2.29 | 8 | 18 |
| 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.57 | 1.76 | 19 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG23 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.57 | 1.77 | 14 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.57 | 1.74 | 17 | 2 |
| 1:A:70:GLY:O | 1:A:100:ASP:CA | 0.57 | 2.52 | 9 | 10 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.57 | 2.29 | 3 | 9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:75:HIS:O | 1:A:79:ARG:N | 0.57 | 2.38 | 15 | 21 |
| 1:A:70:GLY:O | 1:A:100:ASP:CB | 0.57 | 2.53 | 20 | 6 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:107:LEU:CB | 0.57 | 2.83 | 10 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:117:ARG:N | 0.57 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:64:ASP:O | 1:A:65:LEU:C | 0.57 | 2.43 | 4 | 14 |
| 1:A:53:ALA:O | 1:A:57:LEU:N | 0.57 | 2.36 | 12 | 16 |
| 1:A:54:ARG:C | 1:A:58:LEU:HD23 | 0.57 | 2.20 | 6 | 9 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:52:ILE:CG1 | 0.57 | 2.67 | 12 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.57 | 2.52 | 7 | 6 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:70:GLY:CA | 0.57 | 2.30 | 2 | 1 |
| 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:MET:N | 0.57 | 2.15 | 4 | 10 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:94:ALA:CB | 0.57 | 2.83 | 7 | 18 |
| 1:A:16:GLY:N | 1:A:46:LYS:CD | 0.57 | 2.68 | 2 | 8 |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:HE2 | 0.57 | 1.60 | 21 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HG2 | 1:A:94:ALA:CA | 0.57 | 2.30 | 13 | 3 |
| 1:A:108:HIS:ND1 | 1:A:140:ALA:CB | 0.57 | 2.67 | 1 | 2 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:61:ALA:CB | 0.57 | 2.83 | 13 | 1 |
| 1:A:149:ARG:CD | 1:A:149:ARG:N | 0.57 | 2.67 | 3 | 4 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:LYS:N | 0.57 | 2.38 | 4 | 21 |
| 1:A:16:GLY:N | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.57 | 2.15 | 5 | 13 |
| 1:A:112:LYS:HG2 | 1:A:147:TYR:CE2 | 0.57 | 2.35 | 9 | 14 |
| 1:A:72:ALA:O | 1:A:75:HIS:HB2 | 0.57 | 2.00 | 21 | 21 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:133:ARG:N | 0.57 | 2.38 | 15 | 15 |
| 1:A:66:LYS:HD3 | 1:A:72:ALA:N | 0.57 | 2.15 | 9 | 7 |
| 1:A:57:LEU:CD2 | 1:A:61:ALA:O | 0.56 | 2.53 | 11 | 16 |
| 1:A:63:PRO:HB2 | 1:A:94:ALA:CB | 0.56 | 2.30 | 14 | 21 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:53:ALA:N | 0.56 | 2.78 | 12 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:39:ARG:O | 0.56 | 2.53 | 11 | 3 |
| 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:CD | 0.56 | 2.30 | 2 | 11 |
| 1:A:123:VAL:HG11 | 1:A:155:LEU:HD12 | 0.56 | 1.77 | 16 | 1 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:95:ASP:CB | 0.56 | 2.54 | 13 | 5 |
| 1:A:37:PHE:C | 1:A:37:PHE:CD1 | 0.56 | 2.78 | 21 | 1 |
| 1:A:47:LEU:O | 1:A:82:PHE:CD1 | 0.56 | 2.58 | 6 | 2 |
| 1:A:74:ILE:HG23 | 1:A:106:PRO:CD | 0.56 | 2.30 | 14 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:125:HIS:CB | 0.56 | 2.82 | 14 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CB | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.56 | 2.68 | 11 | 1 |
| 1:A:47:LEU:CD1 | 1:A:76:ASP:O | 0.56 | 2.53 | 16 | 8 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:CD2 | 0.56 | 2.83 | 19 | 6 |
| 1:A:43:GLN:HG3 | 1:A:73:VAL:HG22 | 0.56 | 1.76 | 21 | 4 |
| 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:61:ALA:CB | 0.56 | 2.30 | 20 | 1 |
| 1:A:130:VAL:HG23 | 1:A:131:GLY:N | 0.56 | 2.16 | 7 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:73:VAL:HG12 | 1:A:89:LEU:HD11 | 0.56 | 1.77 | 3 | 2 |
| 1:A:66:LYS:CD | 1:A:72:ALA:N | 0.56 | 2.68 | 9 | 7 |
| 1:A:143:LEU:HD22 | 1:A:147:TYR:OH | 0.56 | 2.00 | 19 | 6 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:24:LEU:HD12 | 0.56 | 1.78 | 7 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD22 | 1:A:92:PHE:HB3 | 0.56 | 1.78 | 17 | 3 |
| 1:A:108:HIS:NE2 | 1:A:132:HIS:O | 0.56 | 2.38 | 4 | 3 |
| 1:A:77:ALA:O | 1:A:82:PHE:N | 0.56 | 2.37 | 21 | 17 |
| 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.56 | 2.36 | 6 | 5 |
| 1:A:149:ARG:CD | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.56 | 2.31 | 9 | 6 |
| 1:A:66:LYS:CG | 1:A:70:GLY:O | 0.56 | 2.54 | 2 | 4 |
| 1:A:123:VAL:HG12 | 1:A:124:LYS:HG2 | 0.56 | 1.75 | 20 | 1 |
| 1:A:56:LEU:O | 1:A:60:GLY:N | 0.56 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:21:LEU:HD11 | 0.56 | 2.31 | 2 | 1 |
| 1:A:138:ASP:HA | 1:A:142:ASP:HB2 | 0.56 | 1.77 | 1 | 18 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:59:ARG:HB2 | 0.56 | 1.77 | 5 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:140:ALA:CB | 0.56 | 2.88 | 1 | 2 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:139:THR:C | 0.56 | 2.79 | 1 | 19 |
| 1:A:116:LEU:CD2 | 1:A:117:ARG:N | 0.56 | 2.66 | 19 | 4 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CB | 0.56 | 2.80 | 21 | 6 |
| 1:A:79:ARG:HD2 | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.56 | 1.76 | 19 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CG | 1:A:109:LEU:HD11 | 0.56 | 2.35 | 1 | 2 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:58:LEU:CD2 | 0.56 | 2.54 | 3 | 11 |
| 1:A:50:PRO:O | 1:A:88:THR:HG21 | 0.56 | 2.01 | 17 | 6 |
| 1:A:121:PHE:CD1 | 1:A:121:PHE:C | 0.56 | 2.79 | 8 | 9 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:57:LEU:N | 0.56 | 2.39 | 19 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HB3 | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.56 | 1.76 | 5 | 10 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.56 | 2.30 | 10 | 2 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:126:THR:N | 0.56 | 2.39 | 10 | 8 |
| 1:A:9:LEU:CD2 | 1:A:24:LEU:HD23 | 0.56 | 2.30 | 20 | 4 |
| 1:A:107:LEU:CB | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.56 | 2.30 | 20 | 1 |
| 1:A:96:VAL:O | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.56 | 2.38 | 20 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:C | 0.56 | 2.20 | 1 | 1 |
| 1:A:124:LYS:C | 1:A:125:HIS:CG | 0.56 | 2.78 | 10 | 15 |
| 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:N | 0.56 | 2.16 | 17 | 8 |
| 1:A:39:ARG:CZ | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.56 | 2.84 | 7 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HD12 | 1:A:98:ILE:HB | 0.55 | 1.78 | 20 | 5 |
| 1:A:65:LEU:O | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.55 | 2.01 | 20 | 1 |
| 1:A:45:MET:HG3 | 1:A:47:LEU:HD21 | 0.55 | 1.76 | 19 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CG2 | 1:A:75:HIS:N | 0.55 | 2.69 | 14 | 1 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:137:GLY:N | 0.55 | 2.39 | 6 | 12 |
| 1:A:39:ARG:HG2 | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.55 | 2.30 | 16 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:53:ALA:O | 1:A:56:LEU:N | 0.55 | 2.39 | 6 | 11 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:47:LEU:HD22 | 0.55 | 1.78 | 5 | 4 |
| 1:A:141:CYS:O | 1:A:145:ARG:CB | 0.55 | 2.55 | 4 | 6 |
| 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:44:VAL:HG21 | 0.55 | 1.75 | 12 | 1 |
| 1:A:130:VAL:CG2 | 1:A:131:GLY:N | 0.55 | 2.68 | 4 | 2 |
| 1:A:58:LEU:N | 1:A:58:LEU:CD2 | 0.55 | 2.65 | 19 | 1 |
| 1:A:66:LYS:CD | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.55 | 2.31 | 14 | 3 |
| 1:A:132:HIS:HD1 | 1:A:133:ARG:N | 0.55 | 2.00 | 11 | 2 |
| 1:A:63:PRO:HG2 | 1:A:94:ALA:HA | 0.55 | 1.78 | 20 | 20 |
| 1:A:111:ALA:CA | 1:A:152:VAL:HG11 | 0.55 | 2.30 | 6 | 5 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:126:THR:HG21 | 0.55 | 2.17 | 21 | 1 |
| 1:A:97:ASN:CG | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.55 | 2.80 | 14 | 10 |
| 1:A:124:LYS:HB3 | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.55 | 2.36 | 14 | 18 |
| 1:A:104:ASN:OD1 | 1:A:134:ASN:CB | 0.55 | 2.55 | 18 | 4 |
| 1:A:83:LEU:HB2 | 1:A:118:VAL:HG22 | 0.55 | 1.79 | 9 | 2 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.55 | 2.39 | 10 | 1 |
| 1:A:31:VAL:CG1 | 1:A:60:GLY:O | 0.55 | 2.55 | 17 | 5 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:72:ALA:HB2 | 0.55 | 1.77 | 7 | 1 |
| 1:A:71:PHE:CD2 | 1:A:109:LEU:HD21 | 0.55 | 2.37 | 3 | 1 |
| 1:A:124:LYS:C | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.55 | 2.80 | 9 | 5 |
| 1:A:65:LEU:O | 1:A:65:LEU:CD1 | 0.55 | 2.55 | 20 | 1 |
| 1:A:140:ALA:HB3 | 1:A:156:MET:HE1 | 0.55 | 1.79 | 4 | 3 |
| 1:A:21:LEU:HA | 1:A:24:LEU:HD12 | 0.55 | 1.77 | 4 | 1 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:85:THR:CG2 | 0.55 | 2.84 | 14 | 1 |
| 1:A:150:ASN:O | 1:A:153:VAL:N | 0.55 | 2.39 | 9 | 21 |
| 1:A:32:ASN:O | 1:A:33:ALA:O | 0.55 | 2.25 | 7 | 19 |
| 1:A:62:ASN:O | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.55 | 2.02 | 12 | 5 |
| 1:A:138:ASP:CA | 1:A:142:ASP:HB2 | 0.55 | 2.30 | 1 | 9 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:NE2 | 0.55 | 2.39 | 10 | 6 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:52:ILE:CD1 | 0.55 | 2.70 | 12 | 1 |
| 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:85:THR:HG22 | 0.55 | 1.77 | 4 | 2 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:125:HIS:CB | 0.55 | 2.31 | 14 | 2 |
| 1:A:47:LEU:O | 1:A:48:GLY:C | 0.55 | 2.45 | 14 | 21 |
| 1:A:149:ARG:N | 1:A:149:ARG:CD | 0.55 | 2.70 | 16 | 9 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:CG | 0.55 | 2.55 | 2 | 6 |
| 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:C | 0.55 | 2.21 | 9 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HG13 | 1:A:124:LYS:HD3 | 0.55 | 1.79 | 14 | 5 |
| 1:A:73:VAL:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.55 | 1.78 | 10 | 2 |
| 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.55 | 1.77 | 3 | 3 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:98:ILE:HB | 0.55 | 2.02 | 15 | 16 |
| 1:A:12:ALA:CB | 1:A:17:ASP:HB2 | 0.55 | 2.32 | 5 | 17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:102:GLU:C | 1:A:135:HIS:CD2 | 0.55 | 2.80 | 2 | 1 |
| 1:A:143:LEU:CD2 | 1:A:147:TYR:OH | 0.55 | 2.55 | 3 | 8 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.55 | 2.37 | 18 | 8 |
| 1:A:150:ASN:OD1 | 1:A:151:GLU:N | 0.55 | 2.40 | 8 | 6 |
| 1:A:74:ILE:CD1 | 1:A:94:ALA:HB1 | 0.55 | 2.32 | 10 | 2 |
| 1:A:100:ASP:N | 1:A:100:ASP:OD1 | 0.55 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:117:ARG:N | 0.55 | 2.70 | 11 | 1 |
| 1:A:133:ARG:CG | 1:A:139:THR:HG22 | 0.55 | 2.32 | 3 | 11 |
| 1:A:124:LYS:HG2 | 1:A:125:HIS:CE1 | 0.55 | 2.36 | 15 | 8 |
| 1:A:45:MET:HB2 | 1:A:52:ILE:CG2 | 0.55 | 2.32 | 18 | 17 |
| 1:A:133:ARG:CB | 1:A:137:GLY:HA2 | 0.55 | 2.32 | 5 | 21 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:138:ASP:N | 0.55 | 2.39 | 11 | 16 |
| 1:A:92:PHE:O | 1:A:93:GLN:CG | 0.55 | 2.55 | 16 | 1 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:48:GLY:N | 0.55 | 2.40 | 12 | 3 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.55 | 2.55 | 12 | 7 |
| 1:A:129:ASN:CB | 1:A:132:HIS:HB2 | 0.55 | 2.32 | 18 | 5 |
| 1:A:21:LEU:C | 1:A:21:LEU:HD12 | 0.55 | 2.23 | 10 | 2 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:47:LEU:CD2 | 0.55 | 2.31 | 17 | 3 |
| 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:77:ALA:HA | 0.55 | 1.79 | 2 | 2 |
| 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.54 | 2.70 | 3 | 2 |
| 1:A:30:ASN:O | 1:A:32:ASN:N | 0.54 | 2.39 | 15 | 17 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:140:ALA:HA | 0.54 | 2.36 | 6 | 12 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:103:GLY:N | 0.54 | 2.40 | 2 | 9 |
| 1:A:75:HIS:NE2 | 1:A:99:GLU:O | 0.54 | 2.39 | 14 | 3 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:44:VAL:HG22 | 0.54 | 2.01 | 7 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HG | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.54 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:22:THR:HG23 | 1:A:55:ARG:NH2 | 0.54 | 2.17 | 6 | 1 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:65:LEU:O | 0.54 | 2.40 | 3 | 3 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:46:LYS:C | 0.54 | 2.43 | 7 | 14 |
| 1:A:154:SER:O | 1:A:158:ALA:CB | 0.54 | 2.55 | 4 | 20 |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:151:GLU:CG | 0.54 | 2.32 | 7 | 3 |
| 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:CA | 0.54 | 2.32 | 14 | 3 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:13:ALA:CB | 0.54 | 2.55 | 15 | 4 |
| 1:A:75:HIS:O | 1:A:79:ARG:CB | 0.54 | 2.55 | 19 | 9 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:136:LYS:N | 0.54 | 2.40 | 19 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:37:PHE:C | 0.54 | 2.80 | 8 | 3 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:43:GLN:N | 0.54 | 2.40 | 12 | 14 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:92:PHE:N | 0.54 | 2.41 | 9 | 9 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:98:ILE:N | 0.54 | 2.40 | 8 | 10 |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:70:GLY:C | 0.54 | 2.23 | 2 | 12 |
| 1:A:46:LYS:HB2 | 1:A:52:ILE:HD12 | 0.54 | 1.78 | 10 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:61:ALA:CB | 0.54 | 2.82 | 20 | 1 |
| 1:A:97:ASN:O | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.54 | 2.41 | 19 | 1 |
| 1:A:141:CYS:HB3 | 1:A:156:MET:HE2 | 0.54 | 1.79 | 19 | 3 |
| 1:A:132:HIS:CE1 | 1:A:133:ARG:C | 0.54 | 2.81 | 11 | 3 |
| 1:A:133:ARG:HB3 | 1:A:137:GLY:HA2 | 0.54 | 1.77 | 1 | 16 |
| 1:A:141:CYS:SG | 1:A:142:ASP:N | 0.54 | 2.80 | 7 | 20 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:117:ARG:O | 0.54 | 2.55 | 17 | 5 |
| 1:A:75:HIS:N | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.54 | 2.17 | 2 | 11 |
| 1:A:97:ASN:O | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.54 | 2.55 | 9 | 5 |
| 1:A:97:ASN:CB | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.54 | 2.89 | 19 | 6 |
| 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:61:ALA:CB | 0.54 | 2.28 | 5 | 4 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:67:ASP:CB | 0.54 | 2.69 | 17 | 1 |
| 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:98:ILE:CG2 | 0.54 | 2.33 | 15 | 15 |
| 1:A:105:LEU:HB2 | 1:A:106:PRO:CD | 0.54 | 2.33 | 17 | 8 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.54 | 2.69 | 7 | 6 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:133:ARG:CG | 0.54 | 2.56 | 1 | 11 |
| 1:A:149:ARG:HD2 | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.54 | 1.77 | 9 | 2 |
| 1:A:111:ALA:HA | 1:A:152:VAL:CG1 | 0.54 | 2.33 | 4 | 5 |
| 1:A:45:MET:HE2 | 1:A:47:LEU:CD1 | 0.54 | 2.32 | 11 | 2 |
| 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.54 | 2.38 | 17 | 3 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:139:THR:CG2 | 0.54 | 2.55 | 4 | 1 |
| 1:A:65:LEU:CD1 | 1:A:65:LEU:O | 0.54 | 2.55 | 4 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.54 | 2.55 | 11 | 1 |
| 1:A:52:ILE:O | 1:A:56:LEU:CD2 | 0.54 | 2.55 | 3 | 1 |
| 1:A:80:ALA:O | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.54 | 2.41 | 12 | 12 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:104:ASN:N | 0.54 | 2.41 | 11 | 7 |
| 1:A:64:ASP:CG | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.54 | 2.76 | 13 | 9 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:91:GLU:N | 0.54 | 2.67 | 15 | 8 |
| 1:A:97:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:ND1 | 0.54 | 2.40 | 13 | 4 |
| 1:A:90:LEU:CG | 1:A:126:THR:HG22 | 0.54 | 2.31 | 2 | 5 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:122:LEU:CB | 0.54 | 2.85 | 4 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.54 | 1.79 | 11 | 6 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:52:ILE:CD1 | 0.54 | 2.56 | 19 | 11 |
| 1:A:41:ALA:O | 1:A:45:MET:N | 0.54 | 2.37 | 7 | 9 |
| 1:A:45:MET:HE3 | 1:A:47:LEU:CD1 | 0.54 | 2.33 | 12 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CG | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.54 | 2.76 | 8 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.54 | 1.79 | 19 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:CG | 0.54 | 2.32 | 13 | 2 |
| 1:A:74:ILE:CG1 | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.54 | 2.32 | 11 | 1 |
| 1:A:65:LEU:HB2 | 1:A:73:VAL:HG23 | 0.54 | 1.80 | 12 | 2 |
| 1:A:104:ASN:OD1 | 1:A:104:ASN:N | 0.54 | 2.39 | 1 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.54 | 2.54 | 1 | 5 |
| 1:A:99:GLU:CD | 1:A:132:HIS:HE2 | 0.54 | 2.06 | 10 | 1 |
| 1:A:79:ARG:CD | 1:A:109:LEU:HD23 | 0.54 | 2.33 | 19 | 1 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.54 | 2.03 | 10 | 12 |
| 1:A:99:GLU:HA | 1:A:105:LEU:HA | 0.54 | 1.79 | 17 | 18 |
| 1:A:105:LEU:CG | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.54 | 2.91 | 4 | 5 |
| 1:A:116:LEU:HD22 | 1:A:151:GLU:OE2 | 0.54 | 2.02 | 18 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD22 | 0.54 | 1.79 | 11 | 1 |
| 1:A:89:LEU:HB3 | 1:A:94:ALA:CB | 0.53 | 2.33 | 19 | 15 |
| 1:A:73:VAL:CG1 | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.53 | 2.33 | 9 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.53 | 1.80 | 20 | 2 |
| 1:A:49:ASN:CG | 1:A:50:PRO:HD2 | 0.53 | 2.24 | 6 | 4 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:73:VAL:HG21 | 0.53 | 1.76 | 11 | 2 |
| 1:A:69:THR:O | 1:A:101:ASN:N | 0.53 | 2.41 | 14 | 3 |
| 1:A:83:LEU:CD1 | 1:A:121:PHE:CB | 0.53 | 2.86 | 17 | 2 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.53 | 2.56 | 4 | 1 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.53 | 2.56 | 2 | 1 |
| 1:A:87:GLN:HG2 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.53 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.53 | 2.79 | 8 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:57:LEU:HD12 | 0.53 | 2.03 | 6 | 1 |
| 1:A:98:ILE:CD1 | 1:A:98:ILE:C | 0.53 | 2.76 | 17 | 2 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:125:HIS:CB | 0.53 | 2.57 | 9 | 14 |
| 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.53 | 2.38 | 16 | 6 |
| 1:A:62:ASN:O | 1:A:65:LEU:CG | 0.53 | 2.57 | 21 | 6 |
| 1:A:8:GLU:HB3 | 1:A:24:LEU:HD21 | 0.53 | 1.79 | 16 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:39:ARG:HG3 | 0.53 | 2.37 | 14 | 4 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:OE1 | 0.53 | 2.56 | 9 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD21 | 1:A:59:ARG:CD | 0.53 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:134:ASN:N | 0.53 | 2.41 | 10 | 4 |
| 1:A:105:LEU:CD1 | 1:A:107:LEU:HB3 | 0.53 | 2.32 | 18 | 4 |
| 1:A:39:ARG:HD2 | 1:A:39:ARG:C | 0.53 | 2.24 | 1 | 4 |
| 1:A:33:ALA:O | 1:A:40:THR:CG2 | 0.53 | 2.55 | 7 | 5 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:55:ARG:O | 0.53 | 2.55 | 17 | 4 |
| 1:A:39:ARG:C | 1:A:39:ARG:CD | 0.53 | 2.77 | 14 | 6 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:129:ASN:HB2 | 0.53 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:ND1 | 0.53 | 2.41 | 20 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:HB2 | 0.53 | 1.80 | 17 | 3 |
| 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HG12 | 0.53 | 1.80 | 14 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:108:HIS:NE2 | 0.53 | 2.18 | 1 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.53 | 1.80 | 6 | 1 |
| 1:A:28:ASN:O | 1:A:29:VAL:CG1 | 0.53 | 2.57 | 15 | 12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:105:LEU:CB | 1:A:106:PRO:CD | 0.53 | 2.86 | 18 | 12 |
| 1:A:50:PRO:HB3 | 1:A:85:THR:N | 0.53 | 2.17 | 11 | 15 |
| 1:A:99:GLU:CA | 1:A:104:ASN:O | 0.53 | 2.56 | 10 | 7 |
| 1:A:66:LYS:CG | 1:A:72:ALA:N | 0.53 | 2.71 | 10 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:C | 0.53 | 2.24 | 5 | 1 |
| 1:A:45:MET:CA | 1:A:52:ILE:HG21 | 0.53 | 2.34 | 4 | 4 |
| 1:A:130:VAL:HG23 | 1:A:131:GLY:H | 0.53 | 1.61 | 1 | 2 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:94:ALA:N | 0.53 | 2.42 | 1 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.53 | 2.56 | 9 | 9 |
| 1:A:11:SER:OG | 1:A:12:ALA:N | 0.53 | 2.41 | 10 | 4 |
| 1:A:108:HIS:O | 1:A:111:ALA:N | 0.53 | 2.41 | 4 | 2 |
| 1:A:53:ALA:O | 1:A:57:LEU:CB | 0.53 | 2.57 | 13 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.53 | 2.22 | 1 | 1 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.53 | 2.03 | 13 | 10 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:87:GLN:HG3 | 0.53 | 2.02 | 13 | 21 |
| 1:A:107:LEU:C | 1:A:107:LEU:CD1 | 0.53 | 2.77 | 13 | 2 |
| 1:A:88:THR:O | 1:A:92:PHE:HB2 | 0.53 | 2.03 | 15 | 11 |
| 1:A:45:MET:HB2 | 1:A:52:ILE:HG22 | 0.53 | 1.80 | 6 | 13 |
| 1:A:58:LEU:HG | 1:A:92:PHE:CZ | 0.53 | 2.39 | 9 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:60:GLY:N | 0.53 | 2.42 | 19 | 6 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:134:ASN:CB | 0.53 | 2.56 | 14 | 2 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.53 | 2.42 | 20 | 2 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:62:ASN:O | 0.53 | 2.56 | 8 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:H | 0.53 | 1.64 | 14 | 4 |
| 1:A:90:LEU:HG | 1:A:126:THR:HG23 | 0.53 | 1.79 | 8 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CD2 | 1:A:132:HIS:HD2 | 0.53 | 2.17 | 3 | 2 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:71:PHE:O | 0.53 | 2.41 | 3 | 1 |
| 1:A:75:HIS:NE2 | 1:A:104:ASN:O | 0.53 | 2.42 | 10 | 1 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:86:LEU:HD13 | 0.53 | 2.17 | 18 | 1 |
| 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:ILE:CG2 | 0.53 | 2.32 | 14 | 1 |
| 1:A:130:VAL:CG2 | 1:A:130:VAL:O | 0.53 | 2.56 | 21 | 8 |
| 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:161:ALA:HB2 | 0.53 | 1.80 | 1 | 3 |
| 1:A:39:ARG:HB3 | 1:A:44:VAL:HG12 | 0.53 | 1.79 | 5 | 1 |
| 1:A:70:GLY:CA | 1:A:101:ASN:OD1 | 0.53 | 2.57 | 12 | 1 |
| 1:A:63:PRO:C | 1:A:73:VAL:CG1 | 0.53 | 2.76 | 13 | 3 |
| 1:A:66:LYS:HE3 | 1:A:98:ILE:CD1 | 0.53 | 2.34 | 13 | 3 |
| 1:A:58:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:CE1 | 0.53 | 2.91 | 8 | 1 |
| 1:A:97:ASN:OD1 | 1:A:129:ASN:CB | 0.53 | 2.57 | 8 | 1 |
| 1:A:108:HIS:O | 1:A:111:ALA:CB | 0.53 | 2.56 | 17 | 2 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:45:MET:HG2 | 0.53 | 2.04 | 7 | 17 |
| 1:A:138:ASP:CA | 1:A:142:ASP:CB | 0.53 | 2.86 | 2 | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:143:LEU:CD1 | 0.53 | 2.89 | 10 | 3 |
| 1:A:39:ARG:NE | 1:A:67:ASP:CB | 0.53 | 2.72 | 10 | 1 |
| 1:A:133:ARG:CA | 1:A:137:GLY:HA2 | 0.53 | 2.34 | 11 | 5 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:HD13 | 0.53 | 2.04 | 3 | 7 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:CG1 | 0.53 | 2.56 | 3 | 9 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:45:MET:O | 0.53 | 2.26 | 14 | 10 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:66:LYS:O | 0.53 | 2.42 | 8 | 10 |
| 1:A:87:GLN:NE2 | 1:A:121:PHE:CD2 | 0.53 | 2.77 | 9 | 1 |
| 1:A:62:ASN:O | 1:A:65:LEU:HG | 0.53 | 2.04 | 20 | 6 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:70:GLY:HA2 | 0.53 | 1.80 | 2 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.53 | 2.39 | 19 | 1 |
| 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:92:PHE:HZ | 0.53 | 1.54 | 8 | 1 |
| 1:A:67:ASP:OD1 | 1:A:71:PHE:N | 0.53 | 2.42 | 6 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HB2 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.53 | 2.38 | 11 | 1 |
| 1:A:92:PHE:O | 1:A:93:GLN:HB2 | 0.52 | 2.04 | 2 | 11 |
| 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.52 | 1.80 | 16 | 2 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:59:ARG:CD | 0.52 | 2.87 | 9 | 2 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 0.52 | 2.33 | 19 | 1 |
| 1:A:106:PRO:O | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.52 | 2.57 | 4 | 1 |
| 1:A:106:PRO:C | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.52 | 2.77 | 4 | 1 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.52 | 2.61 | 11 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HD2 | 1:A:70:GLY:O | 0.52 | 2.05 | 15 | 8 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.52 | 2.34 | 10 | 1 |
| 1:A:67:ASP:O | 1:A:70:GLY:N | 0.52 | 2.42 | 12 | 4 |
| 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:76:ASP:HB3 | 0.52 | 1.80 | 12 | 3 |
| 1:A:63:PRO:CG | 1:A:92:PHE:O | 0.52 | 2.57 | 8 | 1 |
| 1:A:130:VAL:O | 1:A:130:VAL:CG2 | 0.52 | 2.57 | 5 | 1 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:52:ILE:CG2 | 0.52 | 2.97 | 12 | 1 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:11:SER:CB | 0.52 | 2.58 | 7 | 4 |
| 1:A:39:ARG:HG3 | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.52 | 2.34 | 8 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CG | 1:A:39:ARG:CZ | 0.52 | 2.92 | 2 | 3 |
| 1:A:78:ALA:O | 1:A:79:ARG:C | 0.52 | 2.48 | 8 | 20 |
| 1:A:121:PHE:O | 1:A:124:LYS:O | 0.52 | 2.28 | 10 | 11 |
| 1:A:57:LEU:HD11 | 1:A:92:PHE:HB3 | 0.52 | 1.82 | 21 | 10 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:118:VAL:HA | 0.52 | 1.80 | 9 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:70:GLY:O | 0.52 | 2.05 | 10 | 3 |
| 1:A:39:ARG:HD2 | 1:A:39:ARG:O | 0.52 | 2.04 | 13 | 4 |
| 1:A:45:MET:CB | 1:A:52:ILE:HG22 | 0.52 | 2.34 | 18 | 8 |
| 1:A:51:GLU:O | 1:A:54:ARG:HB2 | 0.52 | 2.05 | 6 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.52 | 2.34 | 6 | 1 |
| 1:A:54:ARG:CG | 1:A:88:THR:CG2 | 0.52 | 2.87 | 6 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:129:ASN:N | 0.52 | 2.41 | 18 | 3 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:GLN:N | 0.52 | 2.42 | 20 | 9 |
| 1:A:54:ARG:HG2 | 1:A:58:LEU:CD2 | 0.52 | 2.35 | 20 | 10 |
| 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:98:ILE:HG23 | 0.52 | 1.81 | 18 | 9 |
| 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:52:ILE:CD1 | 0.52 | 2.35 | 9 | 5 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:N | 0.52 | 2.43 | 19 | 4 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.52 | 2.57 | 21 | 1 |
| 1:A:45:MET:HG3 | 1:A:47:LEU:CD2 | 0.52 | 2.35 | 19 | 1 |
| 1:A:81:GLY:CA | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.52 | 2.72 | 17 | 2 |
| 1:A:114:GLY:CA | 1:A:149:ARG:HG2 | 0.52 | 2.34 | 16 | 13 |
| 1:A:150:ASN:OD1 | 1:A:150:ASN:N | 0.52 | 2.42 | 1 | 4 |
| 1:A:97:ASN:C | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.52 | 2.78 | 12 | 5 |
| 1:A:108:HIS:O | 1:A:112:LYS:N | 0.52 | 2.42 | 6 | 8 |
| 1:A:14:ALA:HA | 1:A:46:LYS:HG2 | 0.52 | 1.81 | 12 | 7 |
| 1:A:99:GLU:HA | 1:A:105:LEU:CA | 0.52 | 2.35 | 4 | 7 |
| 1:A:68:ARG:O | 1:A:101:ASN:ND2 | 0.52 | 2.43 | 12 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:156:MET:SD | 0.52 | 2.98 | 19 | 2 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:39:ARG:C | 0.52 | 2.78 | 11 | 3 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:132:HIS:O | 0.52 | 2.62 | 4 | 1 |
| 1:A:100:ASP:OD2 | 1:A:101:ASN:N | 0.52 | 2.43 | 10 | 3 |
| 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:C | 0.52 | 2.25 | 16 | 1 |
| 1:A:53:ALA:O | 1:A:54:ARG:C | 0.52 | 2.48 | 12 | 14 |
| 1:A:37:PHE:HB3 | 1:A:39:ARG:CZ | 0.52 | 2.35 | 21 | 5 |
| 1:A:10:ALA:CA | 1:A:44:VAL:HG21 | 0.52 | 2.35 | 13 | 2 |
| 1:A:16:GLY:CA | 1:A:46:LYS:HG3 | 0.52 | 2.35 | 8 | 5 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:39:ARG:HD2 | 0.52 | 2.40 | 2 | 3 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:58:LEU:CD1 | 0.52 | 2.35 | 19 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CG2 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.52 | 2.34 | 14 | 1 |
| 1:A:50:PRO:CB | 1:A:85:THR:CA | 0.52 | 2.87 | 1 | 5 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:ASN:ND2 | 0.52 | 2.42 | 13 | 8 |
| 1:A:66:LYS:NZ | 1:A:100:ASP:O | 0.52 | 2.43 | 15 | 1 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:CB | 0.52 | 2.57 | 9 | 2 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:96:VAL:N | 0.52 | 2.43 | 11 | 6 |
| 1:A:156:MET:HB3 | 1:A:161:ALA:HB3 | 0.52 | 1.81 | 2 | 1 |
| 1:A:22:THR:HG22 | 1:A:26:GLN:OE1 | 0.52 | 2.04 | 16 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:132:HIS:CG | 0.52 | 2.39 | 20 | 1 |
| 1:A:153:VAL:CG1 | 1:A:157:GLN:NE2 | 0.52 | 2.73 | 8 | 5 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:102:GLU:N | 0.52 | 2.41 | 4 | 6 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:122:LEU:HB2 | 0.52 | 1.82 | 13 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:121:PHE:HB2 | 0.52 | 1.81 | 11 | 3 |
| 1:A:19:GLU:O | 1:A:22:THR:N | 0.52 | 2.43 | 19 | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:115:HIS:N | 0.52 | 2.41 | 21 | 10 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:89:LEU:CD2 | 0.52 | 2.87 | 15 | 2 |
| 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:CD1 | 0.52 | 2.35 | 15 | 1 |
| 1:A:121:PHE:C | 1:A:121:PHE:CD1 | 0.52 | 2.82 | 20 | 7 |
| 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:143:LEU:HD11 | 0.52 | 1.64 | 20 | 3 |
| 1:A:150:ASN:N | 1:A:150:ASN:OD1 | 0.52 | 2.42 | 14 | 4 |
| 1:A:18:LEU:CD2 | 1:A:51:GLU:OE2 | 0.52 | 2.58 | 13 | 2 |
| 1:A:96:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:CD1 | 0.52 | 2.35 | 11 | 1 |
| 1:A:115:HIS:HB3 | 1:A:118:VAL:HB | 0.51 | 1.82 | 16 | 21 |
| 1:A:143:LEU:CD2 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.51 | 2.93 | 20 | 6 |
| 1:A:49:ASN:O | 1:A:52:ILE:HG13 | 0.51 | 2.04 | 14 | 18 |
| 1:A:138:ASP:HA | 1:A:142:ASP:HB3 | 0.51 | 1.83 | 20 | 9 |
| 1:A:99:GLU:HA | 1:A:104:ASN:O | 0.51 | 2.05 | 21 | 7 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:118:VAL:HA | 0.51 | 2.35 | 9 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CZ | 1:A:67:ASP:OD2 | 0.51 | 2.57 | 10 | 1 |
| 1:A:128:SER:O | 1:A:130:VAL:N | 0.51 | 2.42 | 12 | 3 |
| 1:A:39:ARG:NH1 | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.51 | 2.73 | 20 | 3 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:47:LEU:CD2 | 0.51 | 2.58 | 19 | 2 |
| 1:A:51:GLU:HA | 1:A:54:ARG:HB2 | 0.51 | 1.82 | 11 | 3 |
| 1:A:47:LEU:CD2 | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.51 | 2.83 | 14 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:CB | 0.51 | 2.35 | 1 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CB | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.51 | 2.36 | 20 | 14 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:87:GLN:N | 0.51 | 2.43 | 1 | 9 |
| 1:A:35:ASN:HB2 | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.51 | 2.20 | 16 | 2 |
| 1:A:10:ALA:HA | 1:A:44:VAL:CG2 | 0.51 | 2.35 | 15 | 3 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:133:ARG:HG2 | 0.51 | 2.05 | 8 | 8 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:71:PHE:C | 0.51 | 2.26 | 10 | 3 |
| 1:A:79:ARG:CG | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.51 | 2.83 | 6 | 4 |
| 1:A:80:ALA:CB | 1:A:82:PHE:CE2 | 0.51 | 2.93 | 4 | 3 |
| 1:A:37:PHE:CD2 | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.51 | 2.79 | 8 | 3 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.51 | 2.58 | 1 | 2 |
| 1:A:138:ASP:O | 1:A:143:LEU:HD21 | 0.51 | 2.04 | 1 | 1 |
| 1:A:74:ILE:N | 1:A:89:LEU:CD2 | 0.51 | 2.74 | 11 | 1 |
| 1:A:115:HIS:HB3 | 1:A:118:VAL:CG1 | 0.51 | 2.36 | 1 | 6 |
| 1:A:14:ALA:O | 1:A:46:LYS:NZ | 0.51 | 2.42 | 13 | 2 |
| 1:A:67:ASP:OD1 | 1:A:71:PHE:HB2 | 0.51 | 2.05 | 6 | 4 |
| 1:A:66:LYS:CG | 1:A:70:GLY:C | 0.51 | 2.78 | 2 | 6 |
| 1:A:133:ARG:O | 1:A:133:ARG:CG | 0.51 | 2.58 | 5 | 1 |
| 1:A:51:GLU:OE1 | 1:A:51:GLU:CA | 0.51 | 2.57 | 4 | 1 |
| 1:A:42:LEU:C | 1:A:42:LEU:CD1 | 0.51 | 2.79 | 11 | 2 |
| 1:A:90:LEU:C | 1:A:90:LEU:CD1 | 0.51 | 2.79 | 15 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:99:GLU:OE2 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.51 | 2.43 | 20 | 1 |
| 1:A:112:LYS:HD2 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.51 | 2.39 | 18 | 4 |
| 1:A:74:ILE:CA | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.51 | 2.36 | 2 | 3 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:HG | 0.51 | 1.81 | 1 | 2 |
| 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:24:LEU:CD2 | 0.51 | 2.34 | 13 | 1 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:51:GLU:OE2 | 0.51 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:145:ARG:CD | 1:A:153:VAL:HG11 | 0.51 | 2.36 | 1 | 1 |
| 1:A:64:ASP:O | 1:A:64:ASP:OD1 | 0.51 | 2.27 | 1 | 9 |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:71:PHE:N | 0.51 | 2.21 | 5 | 8 |
| 1:A:121:PHE:CD2 | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.51 | 2.99 | 19 | 4 |
| 1:A:133:ARG:CB | 1:A:139:THR:HG22 | 0.51 | 2.35 | 5 | 3 |
| 1:A:39:ARG:NE | 1:A:67:ASP:HB2 | 0.51 | 2.21 | 10 | 1 |
| 1:A:96:VAL:O | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.51 | 2.05 | 20 | 1 |
| 1:A:79:ARG:HG3 | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.51 | 2.35 | 6 | 3 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.51 | 2.33 | 4 | 2 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:122:LEU:O | 0.51 | 2.56 | 2 | 1 |
| 1:A:119:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD12 | 0.51 | 1.82 | 6 | 1 |
| 1:A:67:ASP:N | 1:A:67:ASP:OD1 | 0.51 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:15:ARG:O | 1:A:15:ARG:NE | 0.51 | 2.43 | 17 | 1 |
| 1:A:32:ASN:O | 1:A:34:GLN:NE2 | 0.51 | 2.44 | 3 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:47:LEU:CD1 | 0.51 | 2.35 | 15 | 3 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:49:ASN:O | 0.51 | 2.29 | 18 | 3 |
| 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:56:LEU:HD23 | 0.51 | 1.77 | 12 | 1 |
| 1:A:104:ASN:CG | 1:A:134:ASN:ND2 | 0.51 | 2.64 | 7 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:106:PRO:CD | 0.51 | 2.35 | 19 | 1 |
| 1:A:132:HIS:ND1 | 1:A:132:HIS:C | 0.51 | 2.64 | 6 | 2 |
| 1:A:89:LEU:HD23 | 1:A:89:LEU:N | 0.51 | 2.20 | 3 | 3 |
| 1:A:49:ASN:CG | 1:A:52:ILE:CG1 | 0.51 | 2.79 | 21 | 17 |
| 1:A:47:LEU:CD1 | 1:A:76:ASP:C | 0.51 | 2.79 | 16 | 4 |
| 1:A:125:HIS:O | 1:A:126:THR:O | 0.51 | 2.29 | 6 | 4 |
| 1:A:151:GLU:CA | 1:A:151:GLU:OE1 | 0.51 | 2.58 | 14 | 2 |
| 1:A:150:ASN:HA | 1:A:153:VAL:HB | 0.51 | 1.82 | 8 | 20 |
| 1:A:87:GLN:HG2 | 1:A:121:PHE:CE2 | 0.51 | 2.41 | 12 | 9 |
| 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:CG1 | 0.51 | 2.36 | 9 | 2 |
| 1:A:148:GLY:O | 1:A:150:ASN:N | 0.51 | 2.43 | 8 | 5 |
| 1:A:116:LEU:HD12 | 1:A:151:GLU:O | 0.51 | 2.06 | 7 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:108:HIS:ND1 | 0.51 | 2.21 | 19 | 1 |
| 1:A:132:HIS:HB3 | 1:A:139:THR:HB | 0.51 | 1.83 | 4 | 1 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:51:GLU:OE1 | 0.51 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:46:LYS:CE | 1:A:46:LYS:HA | 0.51 | 2.36 | 14 | 12 |
| 1:A:149:ARG:HD2 | 1:A:152:VAL:CG2 | 0.51 | 2.36 | 11 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:112:LYS:HD2 | 1:A:147:TYR:CE2 | 0.51 | 2.41 | 2 | 6 |
| 1:A:14:ALA:C | 1:A:46:LYS:HG2 | 0.51 | 2.25 | 12 | 2 |
| 1:A:73:VAL:CG1 | 1:A:89:LEU:HD11 | 0.51 | 2.32 | 8 | 1 |
| 1:A:112:LYS:HA | 1:A:147:TYR:CD2 | 0.51 | 2.41 | 21 | 11 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.51 | 2.36 | 17 | 2 |
| 1:A:110:ALA:O | 1:A:114:GLY:N | 0.51 | 2.42 | 16 | 5 |
| 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LEU:HD12 | 0.51 | 1.82 | 12 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 0.51 | 1.83 | 7 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.51 | 2.20 | 19 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HG21 | 1:A:159:ASN:HB2 | 0.51 | 1.83 | 8 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CE1 | 1:A:140:ALA:N | 0.51 | 2.79 | 1 | 1 |
| 1:A:51:GLU:O | 1:A:52:ILE:C | 0.50 | 2.49 | 6 | 21 |
| 1:A:51:GLU:HA | 1:A:54:ARG:HB3 | 0.50 | 1.82 | 19 | 9 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:132:HIS:C | 0.50 | 2.48 | 11 | 5 |
| 1:A:18:LEU:HD23 | 1:A:49:ASN:ND2 | 0.50 | 2.21 | 9 | 3 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:59:ARG:CD | 0.50 | 2.36 | 12 | 1 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:73:VAL:HG13 | 0.50 | 2.06 | 8 | 2 |
| 1:A:35:ASN:OD1 | 1:A:36:GLY:N | 0.50 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:86:LEU:CD1 | 0.50 | 2.79 | 3 | 8 |
| 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:33:ALA:CB | 0.50 | 2.32 | 1 | 7 |
| 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:20:GLN:CB | 0.50 | 2.36 | 3 | 1 |
| 1:A:123:VAL:O | 1:A:128:SER:OG | 0.50 | 2.30 | 2 | 6 |
| 1:A:27:ASN:O | 1:A:28:ASN:HB2 | 0.50 | 2.06 | 19 | 7 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:129:ASN:CG | 0.50 | 2.79 | 7 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE1 | 1:A:47:LEU:HD12 | 0.50 | 1.83 | 18 | 1 |
| 1:A:37:PHE:HB3 | 1:A:39:ARG:CD | 0.50 | 2.36 | 13 | 5 |
| 1:A:127:ALA:O | 1:A:128:SER:O | 0.50 | 2.30 | 2 | 18 |
| 1:A:83:LEU:CD1 | 1:A:118:VAL:HA | 0.50 | 2.36 | 2 | 10 |
| 1:A:141:CYS:HB3 | 1:A:156:MET:HE3 | 0.50 | 1.82 | 20 | 4 |
| 1:A:138:ASP:CB | 1:A:142:ASP:HB3 | 0.50 | 2.35 | 9 | 2 |
| 1:A:121:PHE:O | 1:A:124:LYS:N | 0.50 | 2.45 | 12 | 7 |
| 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:35:ASN:OD1 | 0.50 | 2.07 | 10 | 1 |
| 1:A:43:GLN:CG | 1:A:73:VAL:HG22 | 0.50 | 2.35 | 5 | 2 |
| 1:A:80:ALA:C | 1:A:115:HIS:HE2 | 0.50 | 2.10 | 1 | 2 |
| 1:A:56:LEU:CD2 | 1:A:56:LEU:N | 0.50 | 2.67 | 19 | 1 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.50 | 2.07 | 19 | 1 |
| 1:A:129:ASN:C | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.50 | 2.64 | 8 | 1 |
| 1:A:145:ARG:HD2 | 1:A:153:VAL:HG11 | 0.50 | 1.82 | 1 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:CB | 0.50 | 2.36 | 6 | 1 |
| 1:A:43:GLN:HG3 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.50 | 2.36 | 5 | 2 |
| 1:A:121:PHE:HD1 | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.50 | 1.66 | 9 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:HG | 0.50 | 2.06 | 2 | 4 |
| 1:A:46:LYS:HB2 | 1:A:52:ILE:CD1 | 0.50 | 2.36 | 12 | 5 |
| 1:A:13:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 0.50 | 1.83 | 1 | 4 |
| 1:A:49:ASN:ND2 | 1:A:52:ILE:HG12 | 0.50 | 2.22 | 12 | 1 |
| 1:A:107:LEU:C | 1:A:107:LEU:CD2 | 0.50 | 2.80 | 8 | 2 |
| 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:122:LEU:CD2 | 0.50 | 2.37 | 18 | 2 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:127:ALA:HB3 | 0.50 | 1.83 | 1 | 1 |
| 1:A:138:ASP:HB3 | 1:A:142:ASP:HB3 | 0.50 | 1.84 | 9 | 16 |
| 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HG12 | 0.50 | 1.84 | 16 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HB2 | 1:A:82:PHE:CE2 | 0.50 | 2.42 | 5 | 8 |
| 1:A:9:LEU:CD2 | 1:A:24:LEU:CD2 | 0.50 | 2.89 | 11 | 3 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:98:ILE:HG23 | 0.50 | 2.05 | 17 | 5 |
| 1:A:97:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:CG | 0.50 | 2.64 | 8 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:CD2 | 0.50 | 2.36 | 3 | 1 |
| 1:A:10:ALA:N | 1:A:41:ALA:HB2 | 0.50 | 2.22 | 16 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:86:LEU:CB | 0.50 | 2.37 | 16 | 2 |
| 1:A:83:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD21 | 0.50 | 1.83 | 9 | 1 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:13:ALA:N | 0.50 | 2.45 | 9 | 5 |
| 1:A:114:GLY:CA | 1:A:149:ARG:HG3 | 0.50 | 2.37 | 10 | 7 |
| 1:A:116:LEU:HD12 | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.50 | 1.82 | 14 | 2 |
| 1:A:98:ILE:C | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.50 | 2.27 | 19 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:128:SER:N | 0.50 | 2.22 | 8 | 1 |
| 1:A:145:ARG:N | 1:A:153:VAL:CG2 | 0.50 | 2.75 | 6 | 1 |
| 1:A:89:LEU:C | 1:A:94:ALA:CB | 0.50 | 2.80 | 9 | 9 |
| 1:A:50:PRO:HB3 | 1:A:85:THR:OG1 | 0.50 | 2.07 | 20 | 14 |
| 1:A:30:ASN:O | 1:A:31:VAL:C | 0.50 | 2.49 | 15 | 17 |
| 1:A:14:ALA:O | 1:A:46:LYS:HE3 | 0.50 | 2.07 | 2 | 19 |
| 1:A:66:LYS:HD3 | 1:A:72:ALA:CA | 0.50 | 2.37 | 9 | 5 |
| 1:A:104:ASN:N | 1:A:104:ASN:OD1 | 0.50 | 2.44 | 5 | 1 |
| 1:A:38:GLY:O | 1:A:43:GLN:NE2 | 0.50 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:22:THR:O | 1:A:25:LEU:N | 0.50 | 2.44 | 18 | 4 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:126:THR:OG1 | 0.50 | 2.07 | 2 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HG | 1:A:126:THR:CG2 | 0.50 | 2.37 | 7 | 5 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:46:LYS:N | 0.50 | 2.40 | 16 | 4 |
| 1:A:112:LYS:HG2 | 1:A:147:TYR:CD2 | 0.50 | 2.42 | 9 | 2 |
| 1:A:46:LYS:CB | 1:A:52:ILE:CD1 | 0.50 | 2.90 | 5 | 1 |
| 1:A:66:LYS:NZ | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.50 | 2.21 | 7 | 1 |
| 1:A:40:THR:OG1 | 1:A:43:GLN:NE2 | 0.50 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:107:LEU:C | 0.50 | 2.79 | 4 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:90:LEU:C | 0.50 | 2.79 | 8 | 1 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:58:LEU:N | 0.50 | 2.45 | 6 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:51:GLU:HA | 1:A:54:ARG:CB | 0.49 | 2.37 | 8 | 14 |
| 1:A:92:PHE:O | 1:A:93:GLN:CB | 0.49 | 2.60 | 2 | 4 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:122:LEU:HB2 | 0.49 | 2.37 | 16 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:57:LEU:O | 0.49 | 2.60 | 16 | 4 |
| 1:A:149:ARG:HB3 | 1:A:152:VAL:CG2 | 0.49 | 2.37 | 18 | 8 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:119:VAL:HG23 | 0.49 | 1.82 | 2 | 3 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:128:SER:H | 0.49 | 1.67 | 8 | 1 |
| 1:A:21:LEU:O | 1:A:25:LEU:CD2 | 0.49 | 2.60 | 8 | 1 |
| 1:A:97:ASN:HA | 1:A:105:LEU:HD21 | 0.49 | 1.83 | 11 | 1 |
| 1:A:129:ASN:HB2 | 1:A:132:HIS:CB | 0.49 | 2.38 | 2 | 6 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:53:ALA:CB | 0.49 | 2.97 | 12 | 3 |
| 1:A:43:GLN:CA | 1:A:73:VAL:HG22 | 0.49 | 2.38 | 14 | 4 |
| 1:A:57:LEU:HB3 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.49 | 2.43 | 5 | 4 |
| 1:A:62:ASN:ND2 | 1:A:65:LEU:HG | 0.49 | 2.22 | 11 | 2 |
| 1:A:68:ARG:HD2 | 1:A:69:THR:HG23 | 0.49 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:8:GLU:CD | 1:A:24:LEU:HD22 | 0.49 | 2.26 | 4 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.49 | 2.75 | 18 | 2 |
| 1:A:99:GLU:HB3 | 1:A:104:ASN:N | 0.49 | 2.22 | 14 | 1 |
| 1:A:116:LEU:O | 1:A:117:ARG:C | 0.49 | 2.49 | 3 | 21 |
| 1:A:138:ASP:HB2 | 1:A:143:LEU:CD2 | 0.49 | 2.38 | 18 | 5 |
| 1:A:28:ASN:OD1 | 1:A:28:ASN:N | 0.49 | 2.45 | 15 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.49 | 2.43 | 1 | 2 |
| 1:A:39:ARG:CG | 1:A:39:ARG:O | 0.49 | 2.60 | 21 | 4 |
| 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:121:PHE:CD2 | 0.49 | 2.43 | 13 | 2 |
| 1:A:54:ARG:CA | 1:A:58:LEU:HD23 | 0.49 | 2.37 | 6 | 1 |
| 1:A:97:ASN:CG | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.49 | 2.64 | 17 | 1 |
| 1:A:132:HIS:C | 1:A:132:HIS:ND1 | 0.49 | 2.65 | 11 | 1 |
| 1:A:98:ILE:C | 1:A:98:ILE:HD13 | 0.49 | 2.26 | 11 | 1 |
| 1:A:115:HIS:HB3 | 1:A:118:VAL:CB | 0.49 | 2.37 | 1 | 20 |
| 1:A:100:ASP:CG | 1:A:101:ASN:N | 0.49 | 2.66 | 15 | 11 |
| 1:A:129:ASN:HB2 | 1:A:132:HIS:HB2 | 0.49 | 1.84 | 9 | 10 |
| 1:A:88:THR:O | 1:A:92:PHE:N | 0.49 | 2.43 | 15 | 5 |
| 1:A:133:ARG:HB2 | 1:A:137:GLY:HA2 | 0.49 | 1.84 | 5 | 1 |
| 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:121:PHE:CE1 | 0.49 | 2.42 | 4 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HB3 | 1:A:92:PHE:CD1 | 0.49 | 2.42 | 18 | 1 |
| 1:A:149:ARG:HD2 | 1:A:149:ARG:N | 0.49 | 2.22 | 7 | 4 |
| 1:A:116:LEU:O | 1:A:118:VAL:N | 0.49 | 2.45 | 8 | 19 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:HB2 | 0.49 | 2.06 | 2 | 16 |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:HB2 | 0.49 | 2.07 | 10 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.49 | 1.84 | 20 | 1 |
| 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:20:GLN:CD | 0.49 | 2.27 | 7 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:23:SER:O | 1:A:26:GLN:CG | 0.49 | 2.61 | 21 | 1 |
| 1:A:13:ALA:CA | 1:A:21:LEU:HD13 | 0.49 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HG11 | 1:A:159:ASN:OD1 | 0.49 | 2.07 | 8 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HG13 | 1:A:32:ASN:ND2 | 0.49 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:37:PHE:HB3 | 1:A:39:ARG:NE | 0.49 | 2.22 | 13 | 4 |
| 1:A:74:ILE:HB | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.49 | 1.84 | 9 | 9 |
| 1:A:113:GLU:O | 1:A:149:ARG:NE | 0.49 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD21 | 1:A:121:PHE:CD1 | 0.49 | 2.41 | 14 | 2 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:125:HIS:HB2 | 0.49 | 2.38 | 14 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:88:THR:HG23 | 0.49 | 1.83 | 6 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.49 | 2.70 | 3 | 1 |
| 1:A:142:ASP:O | 1:A:146:LEU:CD1 | 0.49 | 2.60 | 3 | 2 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.49 | 2.88 | 3 | 1 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:HD13 | 0.49 | 2.07 | 16 | 2 |
| 1:A:49:ASN:CG | 1:A:50:PRO:CD | 0.49 | 2.81 | 6 | 4 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:45:MET:CG | 0.49 | 2.61 | 7 | 2 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:CD1 | 0.49 | 2.58 | 21 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CE1 | 1:A:68:ARG:HD2 | 0.49 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:97:ASN:OD1 | 1:A:129:ASN:HB2 | 0.49 | 2.08 | 8 | 1 |
| 1:A:41:ALA:CA | 1:A:44:VAL:HG22 | 0.49 | 2.37 | 6 | 4 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:85:THR:OG1 | 0.49 | 2.08 | 10 | 5 |
| 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:52:ILE:HD12 | 0.49 | 1.85 | 9 | 3 |
| 1:A:63:PRO:CB | 1:A:89:LEU:HG | 0.49 | 2.37 | 13 | 3 |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:109:LEU:N | 0.49 | 2.75 | 19 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:42:LEU:C | 0.49 | 2.80 | 1 | 3 |
| 1:A:28:ASN:OD1 | 1:A:29:VAL:N | 0.49 | 2.46 | 4 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HB3 | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.49 | 2.23 | 3 | 1 |
| 1:A:149:ARG:O | 1:A:153:VAL:CG2 | 0.49 | 2.56 | 3 | 11 |
| 1:A:122:LEU:O | 1:A:126:THR:OG1 | 0.49 | 2.30 | 5 | 6 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:85:THR:CB | 0.49 | 2.38 | 1 | 8 |
| 1:A:133:ARG:HA | 1:A:139:THR:HG22 | 0.49 | 1.83 | 2 | 9 |
| 1:A:83:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB3 | 0.49 | 1.83 | 8 | 4 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:H | 0.49 | 1.68 | 20 | 2 |
| 1:A:35:ASN:OD1 | 1:A:37:PHE:CB | 0.49 | 2.61 | 7 | 1 |
| 1:A:8:GLU:OE1 | 1:A:24:LEU:HD13 | 0.49 | 2.07 | 13 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HD12 | 1:A:59:ARG:CG | 0.49 | 2.37 | 8 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:129:ASN:HB2 | 0.49 | 2.38 | 1 | 1 |
| 1:A:86:LEU:O | 1:A:86:LEU:HD23 | 0.49 | 2.08 | 1 | 1 |
| 1:A:39:ARG:O | 1:A:39:ARG:HD2 | 0.49 | 2.08 | 3 | 3 |
| 1:A:159:ASN:O | 1:A:160:GLY:O | 0.49 | 2.31 | 2 | 5 |
| 1:A:134:ASN:CG | 1:A:135:HIS:N | 0.49 | 2.66 | 9 | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:12:ALA:CA | 1:A:17:ASP:HB2 | 0.49 | 2.38 | 1 | 17 |
| 1:A:39:ARG:HB3 | 1:A:44:VAL:CG1 | 0.49 | 2.38 | 15 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:70:GLY:HA2 | 0.49 | 1.83 | 14 | 3 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:64:ASP:O | 0.49 | 2.30 | 14 | 6 |
| 1:A:138:ASP:OD1 | 1:A:138:ASP:N | 0.49 | 2.45 | 17 | 3 |
| 1:A:12:ALA:CB | 1:A:20:GLN:CG | 0.49 | 2.91 | 7 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:N | 0.49 | 2.22 | 2 | 1 |
| 1:A:67:ASP:CG | 1:A:68:ARG:N | 0.49 | 2.67 | 14 | 3 |
| 1:A:102:GLU:HG2 | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.49 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:96:VAL:CG1 | 1:A:127:ALA:HB3 | 0.49 | 2.38 | 1 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CD2 | 1:A:143:LEU:HG | 0.49 | 2.43 | 1 | 1 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:84:ASP:C | 0.48 | 2.50 | 13 | 18 |
| 1:A:96:VAL:HB | 1:A:128:SER:OG | 0.48 | 2.07 | 10 | 1 |
| 1:A:48:GLY:HA2 | 1:A:82:PHE:CE1 | 0.48 | 2.43 | 11 | 6 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:39:ARG:C | 0.48 | 2.29 | 19 | 4 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:129:ASN:CG | 0.48 | 2.66 | 18 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.48 | 1.85 | 6 | 2 |
| 1:A:71:PHE:CE1 | 1:A:100:ASP:HB2 | 0.48 | 2.43 | 14 | 4 |
| 1:A:54:ARG:NH2 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.48 | 2.81 | 9 | 1 |
| 1:A:10:ALA:CB | 1:A:35:ASN:OD1 | 0.48 | 2.60 | 21 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:59:ARG:HD2 | 0.48 | 2.39 | 12 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:140:ALA:CB | 0.48 | 2.38 | 17 | 2 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:65:LEU:CB | 0.48 | 2.61 | 21 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG12 | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.48 | 1.85 | 4 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HD2 | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.48 | 1.85 | 2 | 2 |
| 1:A:114:GLY:CA | 1:A:149:ARG:CG | 0.48 | 2.91 | 20 | 8 |
| 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:55:ARG:HB3 | 0.48 | 1.84 | 10 | 1 |
| 1:A:29:VAL:O | 1:A:30:ASN:C | 0.48 | 2.51 | 19 | 4 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:65:LEU:HB3 | 0.48 | 2.07 | 21 | 1 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:125:HIS:CG | 0.48 | 2.66 | 19 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:N | 0.48 | 2.24 | 14 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.48 | 2.38 | 6 | 1 |
| 1:A:100:ASP:N | 1:A:104:ASN:O | 0.48 | 2.47 | 3 | 8 |
| 1:A:115:HIS:O | 1:A:118:VAL:HB | 0.48 | 2.08 | 15 | 21 |
| 1:A:39:ARG:HB2 | 1:A:43:GLN:CG | 0.48 | 2.38 | 16 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 0.48 | 1.84 | 15 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 0.48 | 1.85 | 5 | 5 |
| 1:A:105:LEU:HG | 1:A:106:PRO:N | 0.48 | 2.24 | 19 | 1 |
| 1:A:15:ARG:CB | 1:A:17:ASP:OD1 | 0.48 | 2.60 | 1 | 1 |
| 1:A:14:ALA:C | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.48 | 2.29 | 3 | 13 |
| 1:A:138:ASP:O | 1:A:139:THR:O | 0.48 | 2.31 | 15 | 16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:12:ALA:CB | 1:A:20:GLN:HB3 | 0.48 | 2.39 | 3 | 5 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:86:LEU:HG | 0.48 | 2.09 | 9 | 1 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:CA | 0.48 | 2.61 | 10 | 2 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:HB3 | 0.48 | 2.09 | 14 | 3 |
| 1:A:40:THR:CG2 | 1:A:65:LEU:HD13 | 0.48 | 2.39 | 2 | 1 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:133:ARG:HD3 | 0.48 | 2.09 | 11 | 2 |
| 1:A:43:GLN:CG | 1:A:65:LEU:HB3 | 0.48 | 2.39 | 11 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:HG12 | 0.48 | 2.08 | 15 | 9 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:55:ARG:C | 0.48 | 2.51 | 7 | 17 |
| 1:A:70:GLY:O | 1:A:100:ASP:HB2 | 0.48 | 2.08 | 9 | 8 |
| 1:A:39:ARG:HB2 | 1:A:43:GLN:CB | 0.48 | 2.38 | 11 | 5 |
| 1:A:132:HIS:O | 1:A:139:THR:HB | 0.48 | 2.09 | 10 | 9 |
| 1:A:17:ASP:N | 1:A:17:ASP:OD1 | 0.48 | 2.45 | 7 | 4 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:11:SER:HB2 | 0.48 | 2.09 | 7 | 6 |
| 1:A:18:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HG3 | 0.48 | 1.84 | 20 | 2 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:135:HIS:N | 0.48 | 2.46 | 19 | 2 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:47:LEU:HD22 | 0.48 | 2.09 | 12 | 1 |
| 1:A:62:ASN:O | 1:A:65:LEU:CD1 | 0.48 | 2.60 | 12 | 2 |
| 1:A:54:ARG:HA | 1:A:57:LEU:HB3 | 0.48 | 1.85 | 19 | 1 |
| 1:A:71:PHE:CE1 | 1:A:100:ASP:CB | 0.48 | 2.96 | 14 | 2 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:126:THR:HB | 0.48 | 2.39 | 6 | 2 |
| 1:A:15:ARG:NE | 1:A:15:ARG:O | 0.48 | 2.46 | 6 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.48 | 2.80 | 11 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HD2 | 1:A:72:ALA:N | 0.48 | 2.23 | 15 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:67:ASP:CB | 0.48 | 2.92 | 10 | 1 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:21:LEU:C | 0.48 | 2.80 | 12 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:59:ARG:N | 0.48 | 2.46 | 19 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.48 | 1.85 | 17 | 2 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:10:ALA:C | 0.48 | 2.52 | 4 | 18 |
| 1:A:133:ARG:HA | 1:A:139:THR:CA | 0.48 | 2.38 | 20 | 16 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:41:ALA:C | 0.48 | 2.52 | 15 | 15 |
| 1:A:74:ILE:O | 1:A:75:HIS:C | 0.48 | 2.51 | 10 | 8 |
| 1:A:17:ASP:HB3 | 1:A:20:GLN:CB | 0.48 | 2.39 | 13 | 10 |
| 1:A:99:GLU:CD | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.48 | 2.67 | 20 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CD2 | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.48 | 2.44 | 20 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:55:ARG:CD | 0.48 | 2.39 | 5 | 1 |
| 1:A:121:PHE:O | 1:A:123:VAL:N | 0.48 | 2.46 | 12 | 1 |
| 1:A:83:LEU:CD1 | 1:A:121:PHE:CG | 0.48 | 2.92 | 17 | 2 |
| 1:A:105:LEU:CG | 1:A:106:PRO:HD2 | 0.48 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:96:VAL:CG1 | 1:A:122:LEU:HD23 | 0.48 | 2.39 | 6 | 1 |
| 1:A:9:LEU:CD2 | 1:A:41:ALA:HB3 | 0.48 | 2.38 | 3 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:12:ALA:CB | 1:A:20:GLN:HG2 | 0.48 | 2.39 | 3 | 15 |
| 1:A:75:HIS:O | 1:A:79:ARG:HB2 | 0.48 | 2.09 | 20 | 11 |
| 1:A:35:ASN:ND2 | 1:A:39:ARG:O | 0.48 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:144:ALA:O | 1:A:149:ARG:O | 0.48 | 2.32 | 1 | 4 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:74:ILE:HG13 | 0.48 | 2.08 | 13 | 3 |
| 1:A:40:THR:OG1 | 1:A:43:GLN:OE1 | 0.48 | 2.30 | 21 | 1 |
| 1:A:37:PHE:HB2 | 1:A:39:ARG:NH2 | 0.48 | 2.23 | 8 | 3 |
| 1:A:13:ALA:CB | 1:A:21:LEU:HD13 | 0.48 | 2.38 | 19 | 1 |
| 1:A:54:ARG:CG | 1:A:58:LEU:HD23 | 0.48 | 2.38 | 2 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:125:HIS:HB3 | 0.48 | 2.39 | 17 | 2 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:85:THR:HB | 0.48 | 2.09 | 1 | 12 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:HD13 | 0.48 | 1.85 | 21 | 2 |
| 1:A:109:LEU:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.48 | 1.67 | 19 | 2 |
| 1:A:104:ASN:ND2 | 1:A:134:ASN:HB2 | 0.48 | 2.24 | 19 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HB3 | 1:A:82:PHE:CE2 | 0.48 | 2.44 | 14 | 2 |
| 1:A:16:GLY:HA2 | 1:A:46:LYS:CB | 0.47 | 2.39 | 9 | 9 |
| 1:A:143:LEU:HD22 | 1:A:147:TYR:HE2 | 0.47 | 1.67 | 5 | 4 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:129:ASN:CG | 0.47 | 2.52 | 16 | 7 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:92:PHE:CE2 | 0.47 | 2.44 | 12 | 4 |
| 1:A:68:ARG:HG2 | 1:A:69:THR:N | 0.47 | 2.22 | 9 | 2 |
| 1:A:39:ARG:HA | 1:A:43:GLN:NE2 | 0.47 | 2.24 | 5 | 6 |
| 1:A:111:ALA:N | 1:A:119:VAL:HG21 | 0.47 | 2.24 | 4 | 1 |
| 1:A:64:ASP:CG | 1:A:98:ILE:HG12 | 0.47 | 2.30 | 13 | 3 |
| 1:A:78:ALA:HB3 | 1:A:106:PRO:CB | 0.47 | 2.34 | 14 | 1 |
| 1:A:19:GLU:CD | 1:A:20:GLN:N | 0.47 | 2.68 | 6 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HB3 | 1:A:82:PHE:CB | 0.47 | 2.39 | 13 | 5 |
| 1:A:120:GLU:O | 1:A:124:LYS:HG2 | 0.47 | 2.09 | 20 | 2 |
| 1:A:57:LEU:HB3 | 1:A:92:PHE:CE2 | 0.47 | 2.43 | 1 | 2 |
| 1:A:57:LEU:CG | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.47 | 2.97 | 19 | 1 |
| 1:A:97:ASN:CA | 1:A:132:HIS:CE1 | 0.47 | 2.97 | 19 | 1 |
| 1:A:96:VAL:CG1 | 1:A:126:THR:HB | 0.47 | 2.39 | 2 | 2 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:116:LEU:C | 0.47 | 2.83 | 11 | 1 |
| 1:A:67:ASP:C | 1:A:67:ASP:OD1 | 0.47 | 2.52 | 13 | 3 |
| 1:A:150:ASN:OD1 | 1:A:151:GLU:OE1 | 0.47 | 2.33 | 5 | 2 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:132:HIS:HB2 | 0.47 | 2.09 | 4 | 2 |
| 1:A:124:LYS:HB3 | 1:A:125:HIS:NE2 | 0.47 | 2.24 | 12 | 2 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:CD2 | 0.47 | 2.82 | 4 | 1 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:HG | 0.47 | 2.39 | 2 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:107:LEU:C | 0.47 | 2.28 | 13 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HD3 | 1:A:70:GLY:O | 0.47 | 2.09 | 13 | 6 |
| 1:A:130:VAL:HA | 1:A:161:ALA:CB | 0.47 | 2.40 | 2 | 7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:123:VAL:HA | 1:A:128:SER:OG | 0.47 | 2.09 | 11 | 11 |
| 1:A:110:ALA:HB1 | 1:A:115:HIS:CB | 0.47 | 2.39 | 12 | 3 |
| 1:A:156:MET:CA | 1:A:161:ALA:HB3 | 0.47 | 2.39 | 1 | 5 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:140:ALA:HB1 | 0.47 | 2.33 | 10 | 1 |
| 1:A:99:GLU:OE1 | 1:A:103:GLY:O | 0.47 | 2.33 | 20 | 1 |
| 1:A:45:MET:CB | 1:A:52:ILE:CG2 | 0.47 | 2.92 | 18 | 6 |
| 1:A:22:THR:O | 1:A:25:LEU:HB2 | 0.47 | 2.09 | 8 | 2 |
| 1:A:107:LEU:C | 1:A:107:LEU:HD23 | 0.47 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:106:PRO:CD | 0.47 | 2.97 | 3 | 5 |
| 1:A:90:LEU:N | 1:A:94:ALA:HB3 | 0.47 | 2.24 | 9 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HD23 | 1:A:122:LEU:HB3 | 0.47 | 1.85 | 16 | 1 |
| 1:A:148:GLY:O | 1:A:149:ARG:C | 0.47 | 2.52 | 9 | 4 |
| 1:A:66:LYS:CG | 1:A:70:GLY:HA2 | 0.47 | 2.38 | 20 | 7 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:119:VAL:HG22 | 0.47 | 2.31 | 12 | 1 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:130:VAL:C | 0.47 | 2.52 | 7 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CA | 1:A:61:ALA:CB | 0.47 | 2.90 | 19 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.47 | 2.19 | 4 | 1 |
| 1:A:99:GLU:CA | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.47 | 2.40 | 8 | 2 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:128:SER:O | 0.47 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:75:HIS:HA | 1:A:109:LEU:HD12 | 0.47 | 1.87 | 1 | 1 |
| 1:A:130:VAL:HA | 1:A:161:ALA:CA | 0.47 | 2.39 | 3 | 6 |
| 1:A:72:ALA:O | 1:A:73:VAL:C | 0.47 | 2.53 | 15 | 20 |
| 1:A:102:GLU:HA | 1:A:135:HIS:ND1 | 0.47 | 2.24 | 9 | 1 |
| 1:A:118:VAL:O | 1:A:121:PHE:N | 0.47 | 2.43 | 1 | 5 |
| 1:A:126:THR:O | 1:A:127:ALA:CB | 0.47 | 2.63 | 10 | 2 |
| 1:A:69:THR:HB | 1:A:71:PHE:CE1 | 0.47 | 2.45 | 20 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:CD | 0.47 | 2.83 | 19 | 1 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.47 | 2.10 | 2 | 1 |
| 1:A:160:GLY:O | 1:A:161:ALA:CB | 0.47 | 2.61 | 13 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:53:ALA:CA | 0.47 | 2.40 | 14 | 1 |
| 1:A:125:HIS:O | 1:A:126:THR:OG1 | 0.47 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:66:LYS:O | 0.47 | 2.32 | 19 | 3 |
| 1:A:54:ARG:HA | 1:A:57:LEU:HB2 | 0.47 | 1.86 | 11 | 7 |
| 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:98:ILE:O | 0.47 | 2.10 | 6 | 6 |
| 1:A:28:ASN:C | 1:A:29:VAL:HG13 | 0.47 | 2.30 | 15 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:108:HIS:CE1 | 0.47 | 2.45 | 8 | 2 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:67:ASP:HB2 | 0.47 | 2.39 | 10 | 1 |
| 1:A:50:PRO:O | 1:A:52:ILE:N | 0.47 | 2.48 | 5 | 4 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:122:LEU:HD13 | 0.47 | 1.85 | 12 | 1 |
| 1:A:108:HIS:ND1 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.47 | 2.62 | 4 | 1 |
| 1:A:95:ASP:CB | 1:A:98:ILE:HB | 0.47 | 2.38 | 17 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:70:GLY:HA2 | 0.47 | 1.86 | 13 | 2 |
| 1:A:25:LEU:CD1 | 1:A:59:ARG:HG3 | 0.47 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD21 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.47 | 2.18 | 11 | 1 |
| 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:52:ILE:N | 0.47 | 2.25 | 8 | 11 |
| 1:A:153:VAL:HG13 | 1:A:157:GLN:NE2 | 0.47 | 2.25 | 11 | 4 |
| 1:A:104:ASN:OD1 | 1:A:134:ASN:HB2 | 0.47 | 2.10 | 16 | 3 |
| 1:A:74:ILE:HA | 1:A:89:LEU:CD2 | 0.47 | 2.40 | 5 | 4 |
| 1:A:57:LEU:HG | 1:A:92:PHE:CB | 0.47 | 2.40 | 9 | 4 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:91:GLU:CA | 0.47 | 2.39 | 4 | 6 |
| 1:A:14:ALA:CB | 1:A:44:VAL:HB | 0.47 | 2.40 | 20 | 4 |
| 1:A:17:ASP:OD1 | 1:A:17:ASP:N | 0.47 | 2.47 | 4 | 2 |
| 1:A:31:VAL:CG1 | 1:A:32:ASN:ND2 | 0.47 | 2.78 | 18 | 1 |
| 1:A:34:GLN:HG3 | 1:A:40:THR:CG2 | 0.47 | 2.40 | 17 | 1 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.47 | 2.10 | 3 | 1 |
| 1:A:52:ILE:O | 1:A:56:LEU:HD21 | 0.47 | 2.09 | 3 | 1 |
| 1:A:69:THR:HB | 1:A:71:PHE:CD1 | 0.47 | 2.45 | 3 | 1 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:115:HIS:HB2 | 0.47 | 2.40 | 16 | 2 |
| 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:85:THR:HB | 0.47 | 1.86 | 17 | 9 |
| 1:A:106:PRO:CA | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.47 | 2.90 | 4 | 1 |
| 1:A:45:MET:HA | 1:A:52:ILE:HG21 | 0.47 | 1.87 | 4 | 1 |
| 1:A:15:ARG:N | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.47 | 2.25 | 5 | 5 |
| 1:A:10:ALA:CB | 1:A:39:ARG:NH1 | 0.47 | 2.78 | 13 | 3 |
| 1:A:43:GLN:O | 1:A:76:ASP:OD1 | 0.47 | 2.33 | 20 | 2 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 0.47 | 1.86 | 10 | 2 |
| 1:A:108:HIS:NE2 | 1:A:132:HIS:CG | 0.47 | 2.83 | 11 | 2 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:67:ASP:OD2 | 0.47 | 2.63 | 12 | 1 |
| 1:A:45:MET:C | 1:A:52:ILE:HG21 | 0.47 | 2.30 | 4 | 1 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:110:ALA:C | 0.46 | 2.53 | 5 | 21 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:52:ILE:HG13 | 0.46 | 2.09 | 2 | 16 |
| 1:A:130:VAL:O | 1:A:161:ALA:HA | 0.46 | 2.09 | 10 | 1 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:65:LEU:O | 0.46 | 2.33 | 2 | 5 |
| 1:A:130:VAL:O | 1:A:161:ALA:O | 0.46 | 2.33 | 7 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:HB | 0.46 | 2.10 | 14 | 1 |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:156:MET:SD | 0.46 | 2.73 | 3 | 4 |
| 1:A:85:THR:O | 1:A:88:THR:OG1 | 0.46 | 2.33 | 9 | 1 |
| 1:A:33:ALA:O | 1:A:34:GLN:HG3 | 0.46 | 2.10 | 10 | 1 |
| 1:A:65:LEU:HD11 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.46 | 2.40 | 20 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG21 | 1:A:126:THR:OG1 | 0.46 | 2.10 | 2 | 2 |
| 1:A:45:MET:HA | 1:A:52:ILE:CG2 | 0.46 | 2.40 | 4 | 1 |
| 1:A:146:LEU:CD1 | 1:A:146:LEU:C | 0.46 | 2.81 | 18 | 1 |
| 1:A:101:ASN:O | 1:A:101:ASN:OD1 | 0.46 | 2.33 | 17 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:43:GLN:CD | 1:A:65:LEU:O | 0.46 | 2.54 | 16 | 9 |
| 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:CE | 0.46 | 2.40 | 16 | 5 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.46 | 2.40 | 4 | 5 |
| 1:A:14:ALA:CB | 1:A:44:VAL:CG2 | 0.46 | 2.79 | 15 | 1 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:73:VAL:HB | 0.46 | 2.11 | 11 | 5 |
| 1:A:67:ASP:OD1 | 1:A:67:ASP:C | 0.46 | 2.53 | 8 | 7 |
| 1:A:39:ARG:NH1 | 1:A:67:ASP:OD2 | 0.46 | 2.48 | 10 | 1 |
| 1:A:133:ARG:O | 1:A:133:ARG:HG2 | 0.46 | 2.09 | 5 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HG | 1:A:22:THR:N | 0.46 | 2.25 | 12 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HB | 1:A:126:THR:CB | 0.46 | 2.41 | 19 | 3 |
| 1:A:97:ASN:C | 1:A:105:LEU:CD1 | 0.46 | 2.84 | 19 | 1 |
| 1:A:131:GLY:C | 1:A:133:ARG:N | 0.46 | 2.68 | 4 | 1 |
| 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.46 | 1.87 | 2 | 1 |
| 1:A:98:ILE:C | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.46 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:15:ARG:CG | 1:A:17:ASP:OD1 | 0.46 | 2.63 | 17 | 2 |
| 1:A:47:LEU:HG | 1:A:76:ASP:O | 0.46 | 2.10 | 8 | 6 |
| 1:A:39:ARG:CA | 1:A:67:ASP:OD1 | 0.46 | 2.63 | 20 | 1 |
| 1:A:141:CYS:CB | 1:A:162:GLY:HA2 | 0.46 | 2.40 | 7 | 6 |
| 1:A:122:LEU:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 0.46 | 1.70 | 2 | 1 |
| 1:A:74:ILE:CD1 | 1:A:95:ASP:N | 0.46 | 2.75 | 2 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:117:ARG:CD | 0.46 | 2.37 | 18 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.46 | 1.86 | 3 | 1 |
| 1:A:80:ALA:O | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.46 | 2.69 | 16 | 3 |
| 1:A:99:GLU:HA | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.46 | 1.87 | 13 | 3 |
| 1:A:149:ARG:N | 1:A:149:ARG:HD2 | 0.46 | 2.25 | 13 | 3 |
| 1:A:141:CYS:HB3 | 1:A:156:MET:CE | 0.46 | 2.41 | 14 | 3 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:85:THR:N | 0.46 | 2.49 | 13 | 4 |
| 1:A:22:THR:OG1 | 1:A:55:ARG:CG | 0.46 | 2.63 | 5 | 1 |
| 1:A:161:ALA:O | 1:A:162:GLY:O | 0.46 | 2.32 | 21 | 3 |
| 1:A:30:ASN:O | 1:A:33:ALA:HB2 | 0.46 | 2.11 | 13 | 3 |
| 1:A:95:ASP:HB3 | 1:A:98:ILE:HB | 0.46 | 1.87 | 8 | 3 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:45:MET:HG3 | 0.46 | 2.11 | 8 | 1 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:94:ALA:CB | 0.46 | 2.63 | 1 | 1 |
| 1:A:139:THR:OG1 | 1:A:141:CYS:SG | 0.46 | 2.74 | 13 | 5 |
| 1:A:75:HIS:O | 1:A:76:ASP:C | 0.46 | 2.53 | 9 | 12 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:45:MET:SD | 0.46 | 2.73 | 11 | 5 |
| 1:A:150:ASN:O | 1:A:154:SER:N | 0.46 | 2.49 | 20 | 9 |
| 1:A:97:ASN:CG | 1:A:132:HIS:ND1 | 0.46 | 2.69 | 12 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HG | 1:A:19:GLU:N | 0.46 | 2.25 | 18 | 3 |
| 1:A:66:LYS:CE | 1:A:72:ALA:HB2 | 0.46 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HG | 1:A:155:LEU:HD23 | 0.46 | 1.87 | 19 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:33:ALA:O | 1:A:34:GLN:CG | 0.46 | 2.63 | 4 | 1 |
| 1:A:45:MET:CA | 1:A:52:ILE:CG2 | 0.46 | 2.94 | 4 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HG12 | 1:A:32:ASN:ND2 | 0.46 | 2.25 | 18 | 1 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:85:THR:N | 0.46 | 2.47 | 1 | 1 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:86:LEU:N | 0.46 | 2.48 | 6 | 2 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:122:LEU:CB | 0.46 | 2.41 | 6 | 1 |
| 1:A:39:ARG:C | 1:A:39:ARG:HD2 | 0.46 | 2.30 | 17 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:107:LEU:O | 0.46 | 2.61 | 11 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HD21 | 0.46 | 1.70 | 3 | 1 |
| 1:A:118:VAL:O | 1:A:121:PHE:HB3 | 0.46 | 2.10 | 10 | 12 |
| 1:A:87:GLN:O | 1:A:91:GLU:HB2 | 0.46 | 2.11 | 13 | 13 |
| 1:A:31:VAL:HG13 | 1:A:32:ASN:HD22 | 0.46 | 1.68 | 16 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:57:LEU:CD1 | 0.46 | 2.61 | 15 | 1 |
| 1:A:10:ALA:O | 1:A:14:ALA:N | 0.46 | 2.47 | 21 | 4 |
| 1:A:63:PRO:CA | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.46 | 2.39 | 10 | 1 |
| 1:A:96:VAL:CG1 | 1:A:128:SER:HB2 | 0.46 | 2.41 | 10 | 1 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:68:ARG:CD | 0.46 | 2.63 | 5 | 1 |
| 1:A:83:LEU:O | 1:A:83:LEU:HD12 | 0.46 | 2.10 | 17 | 2 |
| 1:A:144:ALA:C | 1:A:153:VAL:CG2 | 0.46 | 2.83 | 4 | 1 |
| 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:20:GLN:CG | 0.46 | 2.40 | 2 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:151:GLU:HB2 | 0.46 | 1.88 | 13 | 1 |
| 1:A:67:ASP:OD1 | 1:A:71:PHE:O | 0.46 | 2.33 | 6 | 1 |
| 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:39:ARG:NE | 0.46 | 2.26 | 17 | 2 |
| 1:A:84:ASP:O | 1:A:87:GLN:HB2 | 0.46 | 2.11 | 18 | 16 |
| 1:A:17:ASP:OD2 | 1:A:20:GLN:OE1 | 0.46 | 2.34 | 10 | 2 |
| 1:A:19:GLU:O | 1:A:20:GLN:C | 0.46 | 2.54 | 20 | 18 |
| 1:A:39:ARG:HB2 | 1:A:43:GLN:NE2 | 0.46 | 2.24 | 16 | 1 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:71:PHE:O | 0.46 | 2.34 | 16 | 2 |
| 1:A:92:PHE:O | 1:A:93:GLN:HG3 | 0.46 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:25:LEU:CD2 | 1:A:59:ARG:HD3 | 0.46 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:43:GLN:HG2 | 1:A:65:LEU:O | 0.46 | 2.11 | 19 | 2 |
| 1:A:114:GLY:HA3 | 1:A:149:ARG:CD | 0.46 | 2.41 | 10 | 1 |
| 1:A:124:LYS:HB2 | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.46 | 2.46 | 20 | 2 |
| 1:A:50:PRO:C | 1:A:52:ILE:N | 0.46 | 2.69 | 6 | 5 |
| 1:A:83:LEU:HG | 1:A:118:VAL:HA | 0.46 | 1.87 | 21 | 4 |
| 1:A:138:ASP:C | 1:A:139:THR:O | 0.46 | 2.54 | 15 | 15 |
| 1:A:110:ALA:CA | 1:A:115:HIS:HB2 | 0.46 | 2.39 | 1 | 3 |
| 1:A:75:HIS:O | 1:A:77:ALA:N | 0.46 | 2.49 | 9 | 1 |
| 1:A:57:LEU:O | 1:A:58:LEU:C | 0.46 | 2.54 | 19 | 5 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:52:ILE:HG22 | 0.46 | 2.51 | 12 | 1 |
| 1:A:34:GLN:HG2 | 1:A:39:ARG:N | 0.46 | 2.26 | 7 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.46 | 2.34 | 4 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CE1 | 1:A:99:GLU:C | 0.46 | 2.89 | 2 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HG21 | 1:A:159:ASN:CB | 0.46 | 2.40 | 11 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:53:ALA:HA | 0.46 | 1.88 | 14 | 1 |
| 1:A:88:THR:HG22 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.46 | 2.46 | 8 | 2 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:HB2 | 0.46 | 2.11 | 2 | 2 |
| 1:A:39:ARG:O | 1:A:40:THR:C | 0.46 | 2.54 | 18 | 4 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:53:ALA:HB2 | 0.46 | 2.41 | 11 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.46 | 2.11 | 10 | 1 |
| 1:A:31:VAL:CG1 | 1:A:56:LEU:HB3 | 0.46 | 2.41 | 7 | 1 |
| 1:A:89:LEU:N | 1:A:89:LEU:HD23 | 0.46 | 2.26 | 21 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CD | 1:A:44:VAL:HG12 | 0.46 | 2.41 | 19 | 1 |
| 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:CG | 0.46 | 2.41 | 2 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HA | 1:A:85:THR:HG21 | 0.46 | 1.88 | 1 | 1 |
| 1:A:95:ASP:C | 1:A:97:ASN:N | 0.45 | 2.69 | 1 | 18 |
| 1:A:85:THR:HA | 1:A:88:THR:OG1 | 0.45 | 2.11 | 6 | 7 |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:70:GLY:CA | 0.45 | 2.41 | 11 | 3 |
| 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.45 | 2.45 | 9 | 2 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:64:ASP:C | 0.45 | 2.53 | 20 | 3 |
| 1:A:129:ASN:CG | 1:A:129:ASN:O | 0.45 | 2.54 | 14 | 3 |
| 1:A:104:ASN:CG | 1:A:134:ASN:HB2 | 0.45 | 2.32 | 4 | 1 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:CG | 0.45 | 2.41 | 1 | 1 |
| 1:A:129:ASN:O | 1:A:130:VAL:O | 0.45 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:63:PRO:CG | 1:A:94:ALA:CA | 0.45 | 2.94 | 2 | 16 |
| 1:A:41:ALA:O | 1:A:45:MET:CB | 0.45 | 2.64 | 15 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CG | 1:A:140:ALA:CA | 0.45 | 3.00 | 11 | 7 |
| 1:A:123:VAL:CG1 | 1:A:124:LYS:HG2 | 0.45 | 2.40 | 13 | 2 |
| 1:A:18:LEU:HD11 | 1:A:55:ARG:HD3 | 0.45 | 1.88 | 5 | 1 |
| 1:A:71:PHE:CD1 | 1:A:100:ASP:HB2 | 0.45 | 2.46 | 14 | 2 |
| 1:A:129:ASN:CA | 1:A:132:HIS:HB2 | 0.45 | 2.41 | 1 | 1 |
| 1:A:39:ARG:C | 1:A:39:ARG:HD3 | 0.45 | 2.31 | 3 | 1 |
| 1:A:111:ALA:CA | 1:A:144:ALA:HB2 | 0.45 | 2.41 | 10 | 2 |
| 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.45 | 2.26 | 15 | 2 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:HB3 | 0.45 | 2.41 | 9 | 2 |
| 1:A:102:GLU:CB | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.45 | 2.99 | 10 | 2 |
| 1:A:114:GLY:CA | 1:A:149:ARG:HD2 | 0.45 | 2.42 | 10 | 3 |
| 1:A:99:GLU:CG | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.45 | 2.41 | 20 | 1 |
| 1:A:37:PHE:C | 1:A:39:ARG:N | 0.45 | 2.69 | 6 | 2 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:CB | 0.45 | 2.79 | 5 | 2 |
| 1:A:25:LEU:HD23 | 1:A:59:ARG:HD3 | 0.45 | 1.89 | 12 | 2 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.45 | 2.60 | 2 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:18:LEU:CD2 | 1:A:51:GLU:HG3 | 0.45 | 2.38 | 2 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:98:ILE:HD12 | 0.45 | 2.11 | 14 | 1 |
| 1:A:114:GLY:HA3 | 1:A:149:ARG:CG | 0.45 | 2.41 | 16 | 6 |
| 1:A:117:ARG:CD | 1:A:118:VAL:N | 0.45 | 2.80 | 17 | 2 |
| 1:A:124:LYS:HG2 | 1:A:125:HIS:NE2 | 0.45 | 2.27 | 1 | 3 |
| 1:A:83:LEU:HD13 | 1:A:87:GLN:CG | 0.45 | 2.40 | 9 | 1 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:125:HIS:HB2 | 0.45 | 2.11 | 7 | 11 |
| 1:A:141:CYS:O | 1:A:145:ARG:HB3 | 0.45 | 2.11 | 17 | 4 |
| 1:A:107:LEU:HB3 | 1:A:140:ALA:CB | 0.45 | 2.42 | 10 | 1 |
| 1:A:62:ASN:CB | 1:A:65:LEU:HG | 0.45 | 2.42 | 2 | 2 |
| 1:A:107:LEU:CD2 | 1:A:140:ALA:HB1 | 0.45 | 2.42 | 12 | 1 |
| 1:A:132:HIS:HE1 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.45 | 1.65 | 4 | 1 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:95:ASP:OD1 | 0.45 | 2.34 | 2 | 3 |
| 1:A:116:LEU:HG | 1:A:117:ARG:N | 0.45 | 2.27 | 14 | 2 |
| 1:A:15:ARG:CD | 1:A:15:ARG:O | 0.45 | 2.64 | 14 | 1 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:132:HIS:O | 0.45 | 2.34 | 11 | 1 |
| 1:A:35:ASN:O | 1:A:38:GLY:N | 0.45 | 2.43 | 3 | 4 |
| 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:65:LEU:CD2 | 0.45 | 2.41 | 4 | 2 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:38:GLY:C | 0.45 | 2.55 | 7 | 4 |
| 1:A:130:VAL:CA | 1:A:161:ALA:HA | 0.45 | 2.41 | 17 | 3 |
| 1:A:39:ARG:NH1 | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.45 | 2.25 | 1 | 1 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:HB2 | 0.45 | 2.40 | 17 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 0.45 | 1.89 | 16 | 5 |
| 1:A:54:ARG:HB2 | 1:A:88:THR:CG2 | 0.45 | 2.41 | 14 | 4 |
| 1:A:14:ALA:CA | 1:A:46:LYS:HG2 | 0.45 | 2.41 | 12 | 6 |
| 1:A:121:PHE:O | 1:A:122:LEU:C | 0.45 | 2.55 | 12 | 3 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:67:ASP:OD2 | 0.45 | 2.12 | 12 | 1 |
| 1:A:21:LEU:O | 1:A:25:LEU:N | 0.45 | 2.50 | 7 | 1 |
| 1:A:35:ASN:OD1 | 1:A:37:PHE:HB3 | 0.45 | 2.11 | 7 | 1 |
| 1:A:28:ASN:C | 1:A:29:VAL:HG22 | 0.45 | 2.32 | 19 | 2 |
| 1:A:79:ARG:HD2 | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.45 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:13:ALA:O | 1:A:46:LYS:HG2 | 0.45 | 2.12 | 18 | 2 |
| 1:A:98:ILE:CG2 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.45 | 2.42 | 2 | 1 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:86:LEU:HD12 | 0.45 | 2.40 | 8 | 2 |
| 1:A:46:LYS:N | 1:A:52:ILE:HG21 | 0.45 | 2.27 | 16 | 2 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:129:ASN:CB | 0.45 | 2.80 | 7 | 1 |
| 1:A:100:ASP:C | 1:A:100:ASP:OD1 | 0.45 | 2.55 | 4 | 1 |
| 1:A:84:ASP:OD1 | 1:A:84:ASP:N | 0.45 | 2.48 | 18 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:HB2 | 0.45 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.45 | 2.42 | 17 | 1 |
| 1:A:159:ASN:O | 1:A:160:GLY:C | 0.45 | 2.56 | 21 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:130:VAL:HA | 1:A:161:ALA:HA | 0.45 | 1.89 | 4 | 10 |
| 1:A:141:CYS:O | 1:A:145:ARG:HB2 | 0.45 | 2.12 | 13 | 7 |
| 1:A:50:PRO:O | 1:A:51:GLU:C | 0.45 | 2.55 | 5 | 5 |
| 1:A:104:ASN:ND2 | 1:A:134:ASN:ND2 | 0.45 | 2.64 | 7 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CB | 1:A:39:ARG:NE | 0.45 | 2.80 | 13 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HG | 1:A:61:ALA:CB | 0.45 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:86:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CD1 | 0.45 | 2.99 | 18 | 1 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:94:ALA:HB2 | 0.45 | 2.12 | 1 | 1 |
| 1:A:64:ASP:C | 1:A:64:ASP:OD1 | 0.45 | 2.55 | 8 | 3 |
| 1:A:63:PRO:CG | 1:A:94:ALA:CB | 0.45 | 2.94 | 6 | 6 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:90:LEU:C | 0.45 | 2.55 | 15 | 10 |
| 1:A:77:ALA:CB | 1:A:86:LEU:HB3 | 0.45 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:N | 0.45 | 2.27 | 9 | 1 |
| 1:A:65:LEU:CD1 | 1:A:73:VAL:HG23 | 0.45 | 2.42 | 20 | 1 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:96:VAL:C | 0.45 | 2.53 | 8 | 9 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:50:PRO:HD2 | 0.45 | 2.11 | 5 | 1 |
| 1:A:46:LYS:C | 1:A:47:LEU:HG | 0.45 | 2.33 | 19 | 1 |
| 1:A:139:THR:HG23 | 1:A:142:ASP:OD2 | 0.45 | 2.12 | 4 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:41:ALA:CB | 0.45 | 2.42 | 4 | 2 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:O | 0.45 | 2.65 | 14 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CE1 | 1:A:68:ARG:NE | 0.45 | 2.84 | 1 | 1 |
| 1:A:62:ASN:OD1 | 1:A:64:ASP:CG | 0.45 | 2.56 | 11 | 1 |
| 1:A:89:LEU:C | 1:A:94:ALA:HB2 | 0.45 | 2.32 | 3 | 6 |
| 1:A:110:ALA:CB | 1:A:118:VAL:CG1 | 0.45 | 2.95 | 16 | 2 |
| 1:A:112:LYS:HE2 | 1:A:147:TYR:CE1 | 0.45 | 2.47 | 15 | 2 |
| 1:A:43:GLN:CG | 1:A:65:LEU:O | 0.45 | 2.65 | 10 | 3 |
| 1:A:25:LEU:CD1 | 1:A:56:LEU:HD23 | 0.45 | 2.41 | 12 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.45 | 2.47 | 12 | 1 |
| 1:A:17:ASP:O | 1:A:21:LEU:CD2 | 0.45 | 2.64 | 21 | 1 |
| 1:A:17:ASP:OD2 | 1:A:20:GLN:CD | 0.45 | 2.56 | 21 | 1 |
| 1:A:64:ASP:CG | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.45 | 2.33 | 6 | 2 |
| 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:ASP:OD1 | 0.45 | 2.12 | 6 | 3 |
| 1:A:37:PHE:HB3 | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.45 | 1.89 | 6 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HG2 | 1:A:70:GLY:C | 0.44 | 2.33 | 4 | 3 |
| 1:A:30:ASN:O | 1:A:33:ALA:CB | 0.44 | 2.65 | 13 | 3 |
| 1:A:25:LEU:HD13 | 1:A:56:LEU:HD22 | 0.44 | 1.89 | 19 | 1 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:139:THR:HB | 0.44 | 2.12 | 4 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.44 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:73:VAL:HG11 | 0.44 | 2.11 | 14 | 1 |
| 1:A:65:LEU:HB2 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.44 | 2.42 | 11 | 3 |
| 1:A:12:ALA:CB | 1:A:17:ASP:CB | 0.44 | 2.93 | 9 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:43:GLN:O | 1:A:76:ASP:CG | 0.44 | 2.55 | 9 | 3 |
| 1:A:57:LEU:CG | 1:A:92:PHE:HB3 | 0.44 | 2.42 | 9 | 2 |
| 1:A:21:LEU:CG | 1:A:22:THR:N | 0.44 | 2.80 | 12 | 2 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:105:LEU:HA | 0.44 | 2.48 | 10 | 1 |
| 1:A:97:ASN:ND2 | 1:A:128:SER:HB3 | 0.44 | 2.28 | 10 | 1 |
| 1:A:67:ASP:OD2 | 1:A:69:THR:OG1 | 0.44 | 2.36 | 7 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HB3 | 1:A:89:LEU:HG | 0.44 | 1.89 | 6 | 5 |
| 1:A:93:GLN:O | 1:A:94:ALA:C | 0.44 | 2.55 | 2 | 1 |
| 1:A:112:LYS:HD3 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.44 | 2.47 | 16 | 1 |
| 1:A:150:ASN:O | 1:A:151:GLU:C | 0.44 | 2.56 | 15 | 15 |
| 1:A:69:THR:O | 1:A:70:GLY:C | 0.44 | 2.55 | 6 | 5 |
| 1:A:18:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:CG | 0.44 | 2.43 | 21 | 2 |
| 1:A:61:ALA:O | 1:A:63:PRO:HD3 | 0.44 | 2.13 | 6 | 2 |
| 1:A:57:LEU:CD2 | 1:A:92:PHE:CG | 0.44 | 3.00 | 19 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG22 | 1:A:75:HIS:N | 0.44 | 2.26 | 14 | 1 |
| 1:A:102:GLU:CG | 1:A:135:HIS:CE1 | 0.44 | 3.01 | 11 | 1 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:52:ILE:CG1 | 0.44 | 2.64 | 19 | 10 |
| 1:A:125:HIS:O | 1:A:126:THR:C | 0.44 | 2.56 | 16 | 3 |
| 1:A:41:ALA:O | 1:A:45:MET:HB3 | 0.44 | 2.12 | 15 | 1 |
| 1:A:139:THR:O | 1:A:143:LEU:HG | 0.44 | 2.13 | 2 | 2 |
| 1:A:143:LEU:HD22 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.44 | 2.47 | 5 | 2 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:11:SER:N | 0.44 | 2.50 | 1 | 5 |
| 1:A:28:ASN:C | 1:A:28:ASN:OD1 | 0.44 | 2.55 | 7 | 3 |
| 1:A:8:GLU:OE1 | 1:A:24:LEU:CD2 | 0.44 | 2.57 | 4 | 1 |
| 1:A:101:ASN:O | 1:A:101:ASN:CG | 0.44 | 2.56 | 4 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.44 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:109:LEU:C | 1:A:111:ALA:N | 0.44 | 2.69 | 3 | 14 |
| 1:A:142:ASP:O | 1:A:146:LEU:HD23 | 0.44 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:54:ARG:O | 1:A:58:LEU:HB2 | 0.44 | 2.12 | 12 | 5 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:134:ASN:HA | 0.44 | 2.13 | 10 | 2 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:55:ARG:HB3 | 0.44 | 2.43 | 10 | 1 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:HD12 | 0.44 | 2.42 | 12 | 1 |
| 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:115:HIS:CD2 | 0.44 | 2.47 | 7 | 2 |
| 1:A:25:LEU:CD1 | 1:A:56:LEU:HD22 | 0.44 | 2.43 | 19 | 1 |
| 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:H | 0.44 | 1.67 | 19 | 1 |
| 1:A:98:ILE:CD1 | 1:A:99:GLU:N | 0.44 | 2.73 | 2 | 1 |
| 1:A:95:ASP:HB3 | 1:A:98:ILE:CB | 0.44 | 2.43 | 8 | 1 |
| 1:A:106:PRO:HA | 1:A:109:LEU:HB2 | 0.44 | 1.88 | 18 | 3 |
| 1:A:132:HIS:HE1 | 1:A:134:ASN:HA | 0.44 | 1.72 | 11 | 3 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:111:ALA:N | 0.44 | 2.51 | 3 | 5 |
| 1:A:145:ARG:HA | 1:A:153:VAL:CG2 | 0.44 | 2.42 | 9 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:22:THR:O | 1:A:23:SER:C | 0.44 | 2.56 | 11 | 9 |
| 1:A:157:GLN:CG | 1:A:162:GLY:HA3 | 0.44 | 2.43 | 12 | 5 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:134:ASN:CA | 0.44 | 2.66 | 10 | 1 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:52:ILE:HG21 | 0.44 | 2.12 | 4 | 2 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:68:ARG:NE | 0.44 | 2.51 | 4 | 1 |
| 1:A:8:GLU:CD | 1:A:24:LEU:CD2 | 0.44 | 2.86 | 4 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HG | 1:A:76:ASP:C | 0.44 | 2.33 | 18 | 1 |
| 1:A:138:ASP:CB | 1:A:143:LEU:CD2 | 0.44 | 2.96 | 1 | 1 |
| 1:A:138:ASP:O | 1:A:143:LEU:CD2 | 0.44 | 2.66 | 1 | 1 |
| 1:A:133:ARG:HG2 | 1:A:139:THR:CG2 | 0.44 | 2.42 | 7 | 10 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:C | 0.44 | 2.55 | 12 | 5 |
| 1:A:67:ASP:OD2 | 1:A:71:PHE:HB2 | 0.44 | 2.12 | 15 | 3 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:87:GLN:HE21 | 0.44 | 1.72 | 9 | 1 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:9:LEU:C | 0.44 | 2.55 | 9 | 5 |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:132:HIS:CB | 0.44 | 2.66 | 10 | 1 |
| 1:A:18:LEU:HD22 | 1:A:51:GLU:HB3 | 0.44 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:49:ASN:OD1 | 1:A:50:PRO:CD | 0.44 | 2.65 | 5 | 1 |
| 1:A:44:VAL:O | 1:A:45:MET:HG3 | 0.44 | 2.13 | 4 | 2 |
| 1:A:54:ARG:HA | 1:A:57:LEU:CB | 0.44 | 2.42 | 19 | 1 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:68:ARG:CG | 0.44 | 2.66 | 4 | 1 |
| 1:A:132:HIS:ND1 | 1:A:133:ARG:C | 0.44 | 2.70 | 11 | 2 |
| 1:A:42:LEU:CG | 1:A:65:LEU:HD12 | 0.44 | 2.43 | 11 | 1 |
| 1:A:130:VAL:CG1 | 1:A:161:ALA:HA | 0.44 | 2.42 | 1 | 3 |
| 1:A:83:LEU:C | 1:A:85:THR:N | 0.44 | 2.70 | 18 | 17 |
| 1:A:46:LYS:C | 1:A:48:GLY:N | 0.44 | 2.70 | 18 | 5 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:98:ILE:HD12 | 0.44 | 1.88 | 7 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HA | 1:A:128:SER:CB | 0.44 | 2.42 | 4 | 3 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:21:LEU:N | 0.44 | 2.81 | 8 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD1 | 1:A:90:LEU:C | 0.44 | 2.80 | 6 | 2 |
| 1:A:40:THR:HG21 | 1:A:65:LEU:HD22 | 0.44 | 1.90 | 3 | 2 |
| 1:A:75:HIS:CG | 1:A:109:LEU:HD21 | 0.44 | 2.48 | 5 | 2 |
| 1:A:145:ARG:HD2 | 1:A:153:VAL:HG21 | 0.44 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:25:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HG21 | 0.44 | 1.89 | 2 | 2 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:95:ASP:C | 0.44 | 2.55 | 4 | 4 |
| 1:A:103:GLY:C | 1:A:104:ASN:OD1 | 0.44 | 2.57 | 10 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:72:ALA:CA | 0.44 | 2.42 | 10 | 1 |
| 1:A:79:ARG:HB2 | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.44 | 2.42 | 10 | 1 |
| 1:A:79:ARG:O | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.44 | 2.50 | 10 | 1 |
| 1:A:43:GLN:CG | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.44 | 2.95 | 5 | 1 |
| 1:A:89:LEU:O | 1:A:92:PHE:C | 0.44 | 2.56 | 12 | 1 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:46:LYS:HB2 | 0.44 | 2.13 | 4 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:63:PRO:HG2 | 1:A:94:ALA:N | 0.44 | 2.27 | 13 | 2 |
| 1:A:146:LEU:HG | 1:A:147:TYR:N | 0.44 | 2.27 | 18 | 1 |
| 1:A:79:ARG:HB2 | 1:A:109:LEU:CD2 | 0.44 | 2.40 | 14 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CZ | 1:A:68:ARG:NE | 0.44 | 2.86 | 1 | 1 |
| 1:A:43:GLN:HG2 | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.43 | 2.41 | 3 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD1 | 1:A:53:ALA:HB1 | 0.43 | 2.43 | 16 | 2 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:125:HIS:CD2 | 0.43 | 2.70 | 9 | 2 |
| 1:A:85:THR:O | 1:A:88:THR:N | 0.43 | 2.50 | 9 | 1 |
| 1:A:69:THR:O | 1:A:101:ASN:ND2 | 0.43 | 2.43 | 10 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HA | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.43 | 1.90 | 4 | 2 |
| 1:A:51:GLU:O | 1:A:54:ARG:HB3 | 0.43 | 2.11 | 19 | 3 |
| 1:A:74:ILE:HA | 1:A:89:LEU:CD1 | 0.43 | 2.42 | 7 | 2 |
| 1:A:57:LEU:C | 1:A:59:ARG:N | 0.43 | 2.70 | 19 | 2 |
| 1:A:108:HIS:O | 1:A:109:LEU:C | 0.43 | 2.56 | 4 | 2 |
| 1:A:89:LEU:N | 1:A:89:LEU:CD1 | 0.43 | 2.81 | 4 | 1 |
| 1:A:27:ASN:O | 1:A:28:ASN:CG | 0.43 | 2.57 | 13 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.43 | 2.12 | 1 | 1 |
| 1:A:82:PHE:O | 1:A:85:THR:CB | 0.43 | 2.66 | 1 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HG3 | 1:A:39:ARG:O | 0.43 | 2.12 | 6 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:91:GLU:C | 0.43 | 2.56 | 20 | 9 |
| 1:A:127:ALA:O | 1:A:128:SER:C | 0.43 | 2.56 | 16 | 1 |
| 1:A:37:PHE:O | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.43 | 2.13 | 5 | 2 |
| 1:A:83:LEU:HA | 1:A:86:LEU:CD2 | 0.43 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:61:ALA:O | 1:A:62:ASN:C | 0.43 | 2.56 | 19 | 3 |
| 1:A:129:ASN:OD1 | 1:A:129:ASN:C | 0.43 | 2.56 | 5 | 1 |
| 1:A:145:ARG:CD | 1:A:145:ARG:C | 0.43 | 2.86 | 5 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:107:LEU:HB2 | 0.43 | 1.90 | 19 | 1 |
| 1:A:134:ASN:OD1 | 1:A:134:ASN:C | 0.43 | 2.57 | 19 | 1 |
| 1:A:154:SER:O | 1:A:158:ALA:N | 0.43 | 2.49 | 4 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HE2 | 1:A:46:LYS:HA | 0.43 | 1.90 | 6 | 3 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:95:ASP:HB2 | 0.43 | 2.13 | 8 | 2 |
| 1:A:30:ASN:C | 1:A:32:ASN:N | 0.43 | 2.71 | 15 | 5 |
| 1:A:154:SER:O | 1:A:155:LEU:C | 0.43 | 2.55 | 15 | 13 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:108:HIS:HE1 | 0.43 | 1.74 | 16 | 2 |
| 1:A:134:ASN:C | 1:A:134:ASN:OD1 | 0.43 | 2.57 | 20 | 2 |
| 1:A:133:ARG:HA | 1:A:139:THR:HA | 0.43 | 1.90 | 8 | 6 |
| 1:A:107:LEU:HB3 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.43 | 1.90 | 10 | 1 |
| 1:A:78:ALA:O | 1:A:115:HIS:CD2 | 0.43 | 2.71 | 10 | 1 |
| 1:A:124:LYS:O | 1:A:125:HIS:ND1 | 0.43 | 2.51 | 5 | 1 |
| 1:A:121:PHE:CD2 | 1:A:122:LEU:N | 0.43 | 2.86 | 21 | 1 |
| 1:A:46:LYS:O | 1:A:47:LEU:CG | 0.43 | 2.67 | 21 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:151:GLU:C | 0.43 | 2.34 | 14 | 1 |
| 1:A:117:ARG:HD2 | 1:A:118:VAL:N | 0.43 | 2.27 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CD1 | 0.43 | 2.80 | 11 | 1 |
| 1:A:112:LYS:HE2 | 1:A:147:TYR:CZ | 0.43 | 2.48 | 11 | 1 |
| 1:A:117:ARG:CD | 1:A:118:VAL:HG23 | 0.43 | 2.42 | 16 | 1 |
| 1:A:43:GLN:OE1 | 1:A:66:LYS:C | 0.43 | 2.56 | 16 | 2 |
| 1:A:45:MET:HG3 | 1:A:45:MET:O | 0.43 | 2.13 | 16 | 4 |
| 1:A:99:GLU:CA | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.43 | 2.44 | 20 | 1 |
| 1:A:32:ASN:OD1 | 1:A:62:ASN:ND2 | 0.43 | 2.52 | 7 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD12 | 1:A:117:ARG:HD3 | 0.43 | 1.91 | 2 | 1 |
| 1:A:63:PRO:O | 1:A:89:LEU:CD1 | 0.43 | 2.67 | 8 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CB | 1:A:61:ALA:HB3 | 0.43 | 2.44 | 6 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG2 | 1:A:88:THR:CG2 | 0.43 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CZ | 0.43 | 3.00 | 17 | 1 |
| 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:119:VAL:H | 0.43 | 1.71 | 6 | 7 |
| 1:A:50:PRO:HB3 | 1:A:85:THR:CB | 0.43 | 2.42 | 10 | 2 |
| 1:A:100:ASP:OD2 | 1:A:102:GLU:HB2 | 0.43 | 2.14 | 19 | 2 |
| 1:A:133:ARG:HB2 | 1:A:137:GLY:O | 0.43 | 2.13 | 5 | 1 |
| 1:A:39:ARG:O | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.43 | 2.13 | 21 | 1 |
| 1:A:86:LEU:CD2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.43 | 2.44 | 21 | 1 |
| 1:A:120:GLU:HA | 1:A:155:LEU:CD1 | 0.43 | 2.43 | 19 | 1 |
| 1:A:106:PRO:CA | 1:A:109:LEU:HG | 0.43 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:142:ASP:O | 1:A:146:LEU:HD13 | 0.43 | 2.13 | 14 | 1 |
| 1:A:64:ASP:CG | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.43 | 2.33 | 14 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:98:ILE:HD11 | 0.43 | 1.91 | 11 | 2 |
| 1:A:62:ASN:OD1 | 1:A:64:ASP:OD2 | 0.43 | 2.36 | 11 | 1 |
| 1:A:107:LEU:O | 1:A:108:HIS:C | 0.43 | 2.57 | 16 | 6 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:ASN:HB2 | 0.43 | 2.14 | 15 | 9 |
| 1:A:142:ASP:C | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.43 | 2.34 | 9 | 1 |
| 1:A:155:LEU:O | 1:A:159:ASN:CG | 0.43 | 2.57 | 9 | 3 |
| 1:A:133:ARG:HA | 1:A:137:GLY:HA2 | 0.43 | 1.91 | 17 | 3 |
| 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:62:ASN:O | 0.43 | 2.12 | 5 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:122:LEU:HD13 | 0.43 | 2.43 | 12 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD13 | 1:A:151:GLU:CB | 0.43 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:121:PHE:CD2 | 0.43 | 2.48 | 7 | 2 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:132:HIS:HB3 | 0.43 | 2.27 | 21 | 1 |
| 1:A:37:PHE:HB3 | 1:A:39:ARG:NH2 | 0.43 | 2.28 | 21 | 1 |
| 1:A:15:ARG:C | 1:A:46:LYS:CD | 0.43 | 2.87 | 2 | 1 |
| 1:A:99:GLU:CG | 1:A:105:LEU:HD12 | 0.43 | 2.44 | 11 | 1 |
| 1:A:116:LEU:C | 1:A:118:VAL:N | 0.43 | 2.72 | 4 | 15 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:134:ASN:HB2 | 0.43 | 2.14 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:151:GLU:O | 1:A:155:LEU:HB2 | 0.43 | 2.13 | 7 | 10 |
| 1:A:116:LEU:CG | 1:A:117:ARG:N | 0.43 | 2.79 | 7 | 1 |
| 1:A:141:CYS:SG | 1:A:162:GLY:C | 0.43 | 2.97 | 7 | 1 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:HD23 | 0.43 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:15:ARG:O | 0.43 | 2.13 | 11 | 2 |
| 1:A:129:ASN:C | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.43 | 2.57 | 21 | 1 |
| 1:A:44:VAL:C | 1:A:45:MET:CG | 0.43 | 2.87 | 21 | 1 |
| 1:A:98:ILE:N | 1:A:105:LEU:HD22 | 0.43 | 2.29 | 8 | 1 |
| 1:A:156:MET:O | 1:A:157:GLN:C | 0.43 | 2.57 | 14 | 6 |
| 1:A:119:VAL:O | 1:A:120:GLU:C | 0.43 | 2.57 | 9 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:76:ASP:C | 0.43 | 2.34 | 5 | 1 |
| 1:A:18:LEU:O | 1:A:21:LEU:HG | 0.43 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HG | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.43 | 2.43 | 19 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CD2 | 1:A:63:PRO:HD3 | 0.43 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:65:LEU:CD1 | 0.43 | 2.43 | 13 | 1 |
| 1:A:145:ARG:CA | 1:A:153:VAL:CG2 | 0.43 | 2.97 | 1 | 5 |
| 1:A:73:VAL:CB | 1:A:89:LEU:HD21 | 0.43 | 2.43 | 10 | 2 |
| 1:A:68:ARG:HG3 | 1:A:69:THR:N | 0.43 | 2.29 | 17 | 2 |
| 1:A:138:ASP:HB3 | 1:A:142:ASP:CB | 0.43 | 2.44 | 4 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HG23 | 1:A:32:ASN:HD22 | 0.43 | 1.73 | 8 | 1 |
| 1:A:108:HIS:NE2 | 1:A:139:THR:C | 0.43 | 2.72 | 1 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD22 | 1:A:117:ARG:O | 0.43 | 2.13 | 17 | 1 |
| 1:A:132:HIS:C | 1:A:139:THR:HB | 0.43 | 2.34 | 3 | 3 |
| 1:A:111:ALA:O | 1:A:112:LYS:C | 0.43 | 2.57 | 20 | 4 |
| 1:A:9:LEU:C | 1:A:11:SER:N | 0.43 | 2.72 | 6 | 5 |
| 1:A:93:GLN:HG3 | 1:A:93:GLN:O | 0.43 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:104:ASN:ND2 | 1:A:143:LEU:HD11 | 0.43 | 2.29 | 15 | 2 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:100:ASP:C | 0.43 | 2.57 | 7 | 3 |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:107:LEU:HB3 | 0.43 | 1.91 | 7 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.43 | 1.89 | 21 | 1 |
| 1:A:16:GLY:O | 1:A:18:LEU:N | 0.43 | 2.52 | 19 | 1 |
| 1:A:31:VAL:O | 1:A:40:THR:HB | 0.43 | 2.13 | 19 | 2 |
| 1:A:47:LEU:N | 1:A:47:LEU:HD23 | 0.43 | 2.29 | 19 | 1 |
| 1:A:89:LEU:CD1 | 1:A:89:LEU:N | 0.43 | 2.82 | 2 | 2 |
| 1:A:45:MET:C | 1:A:47:LEU:N | 0.43 | 2.72 | 14 | 2 |
| 1:A:149:ARG:HB3 | 1:A:152:VAL:HG21 | 0.43 | 1.90 | 18 | 3 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:HG2 | 0.43 | 2.13 | 8 | 1 |
| 1:A:70:GLY:C | 1:A:100:ASP:HA | 0.43 | 2.35 | 14 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD12 | 1:A:83:LEU:C | 0.43 | 2.35 | 17 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:127:ALA:N | 0.42 | 2.25 | 1 | 2 |
| 1:A:46:LYS:NZ | 1:A:46:LYS:HA | 0.42 | 2.29 | 21 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:99:GLU:HB3 | 1:A:104:ASN:O | 0.42 | 2.14 | 19 | 2 |
| 1:A:102:GLU:O | 1:A:135:HIS:ND1 | 0.42 | 2.51 | 19 | 1 |
| 1:A:18:LEU:CD2 | 1:A:51:GLU:CG | 0.42 | 2.81 | 2 | 1 |
| 1:A:17:ASP:CG | 1:A:20:GLN:OE1 | 0.42 | 2.57 | 3 | 1 |
| 1:A:150:ASN:C | 1:A:152:VAL:N | 0.42 | 2.73 | 4 | 12 |
| 1:A:128:SER:HB3 | 1:A:130:VAL:CG1 | 0.42 | 2.43 | 12 | 1 |
| 1:A:64:ASP:CG | 1:A:64:ASP:O | 0.42 | 2.57 | 7 | 2 |
| 1:A:103:GLY:O | 1:A:104:ASN:C | 0.42 | 2.57 | 2 | 1 |
| 1:A:18:LEU:CD1 | 1:A:51:GLU:HG3 | 0.42 | 2.41 | 2 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.42 | 2.15 | 8 | 1 |
| 1:A:83:LEU:CD1 | 1:A:121:PHE:HB2 | 0.42 | 2.44 | 11 | 1 |
| 1:A:112:LYS:CE | 1:A:147:TYR:OH | 0.42 | 2.67 | 16 | 1 |
| 1:A:23:SER:O | 1:A:26:GLN:HG2 | 0.42 | 2.14 | 16 | 3 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:11:SER:HB3 | 0.42 | 2.14 | 18 | 3 |
| 1:A:75:HIS:NE2 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.42 | 2.30 | 8 | 2 |
| 1:A:156:MET:HA | 1:A:161:ALA:HB3 | 0.42 | 1.91 | 7 | 1 |
| 1:A:104:ASN:OD1 | 1:A:104:ASN:C | 0.42 | 2.56 | 21 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:HG3 | 0.42 | 2.44 | 21 | 1 |
| 1:A:130:VAL:HA | 1:A:161:ALA:O | 0.42 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:122:LEU:HG | 0.42 | 2.44 | 8 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HB3 | 1:A:89:LEU:HA | 0.42 | 1.91 | 14 | 1 |
| 1:A:116:LEU:HD12 | 1:A:151:GLU:C | 0.42 | 2.35 | 1 | 1 |
| 1:A:43:GLN:O | 1:A:76:ASP:OD2 | 0.42 | 2.38 | 6 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HG | 1:A:73:VAL:CG2 | 0.42 | 2.44 | 3 | 1 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:67:ASP:HB3 | 0.42 | 2.29 | 17 | 3 |
| 1:A:56:LEU:O | 1:A:57:LEU:C | 0.42 | 2.56 | 9 | 2 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:140:ALA:CB | 0.42 | 2.98 | 10 | 1 |
| 1:A:64:ASP:CB | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.42 | 2.45 | 5 | 2 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:42:LEU:O | 0.42 | 2.13 | 19 | 1 |
| 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.42 | 1.91 | 2 | 1 |
| 1:A:15:ARG:C | 1:A:46:LYS:HD3 | 0.42 | 2.35 | 14 | 2 |
| 1:A:156:MET:CB | 1:A:161:ALA:HB3 | 0.42 | 2.44 | 2 | 1 |
| 1:A:40:THR:HG23 | 1:A:43:GLN:OE1 | 0.42 | 2.14 | 8 | 1 |
| 1:A:95:ASP:O | 1:A:97:ASN:N | 0.42 | 2.52 | 14 | 2 |
| 1:A:79:ARG:O | 1:A:113:GLU:HG3 | 0.42 | 2.14 | 14 | 1 |
| 1:A:104:ASN:OD1 | 1:A:134:ASN:HB3 | 0.42 | 2.14 | 9 | 2 |
| 1:A:21:LEU:CD1 | 1:A:55:ARG:CB | 0.42 | 2.97 | 10 | 1 |
| 1:A:19:GLU:O | 1:A:22:THR:HB | 0.42 | 2.14 | 5 | 5 |
| 1:A:41:ALA:O | 1:A:44:VAL:HG22 | 0.42 | 2.13 | 5 | 1 |
| 1:A:143:LEU:C | 1:A:147:TYR:CD2 | 0.42 | 2.93 | 12 | 2 |
| 1:A:14:ALA:C | 1:A:46:LYS:HG3 | 0.42 | 2.34 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:109:LEU:CD1 | 1:A:109:LEU:H | 0.42 | 2.28 | 19 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HG11 | 1:A:126:THR:CB | 0.42 | 2.45 | 2 | 1 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:12:ALA:N | 0.42 | 2.53 | 13 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HG3 | 1:A:92:PHE:O | 0.42 | 2.13 | 8 | 1 |
| 1:A:23:SER:O | 1:A:26:GLN:HG3 | 0.42 | 2.14 | 6 | 1 |
| 1:A:112:LYS:HE2 | 1:A:147:TYR:OH | 0.42 | 2.14 | 3 | 1 |
| 1:A:40:THR:O | 1:A:42:LEU:N | 0.42 | 2.53 | 21 | 4 |
| 1:A:123:VAL:CG1 | 1:A:124:LYS:HD3 | 0.42 | 2.44 | 9 | 3 |
| 1:A:73:VAL:HB | 1:A:89:LEU:CD2 | 0.42 | 2.44 | 10 | 1 |
| 1:A:40:THR:C | 1:A:42:LEU:N | 0.42 | 2.73 | 20 | 1 |
| 1:A:49:ASN:CG | 1:A:52:ILE:HD11 | 0.42 | 2.35 | 4 | 3 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:HB2 | 0.42 | 2.14 | 7 | 2 |
| 1:A:75:HIS:CE1 | 1:A:100:ASP:HB3 | 0.42 | 2.49 | 21 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:82:PHE:HB2 | 0.42 | 1.90 | 2 | 1 |
| 1:A:114:GLY:HA3 | 1:A:149:ARG:HG3 | 0.42 | 1.91 | 20 | 2 |
| 1:A:75:HIS:HE1 | 1:A:100:ASP:CB | 0.42 | 2.28 | 10 | 1 |
| 1:A:72:ALA:C | 1:A:74:ILE:N | 0.42 | 2.73 | 19 | 3 |
| 1:A:112:LYS:CG | 1:A:147:TYR:CE2 | 0.42 | 3.02 | 4 | 1 |
| 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.42 | 1.91 | 2 | 1 |
| 1:A:107:LEU:O | 1:A:107:LEU:HD13 | 0.42 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:51:GLU:O | 1:A:54:ARG:N | 0.42 | 2.53 | 18 | 2 |
| 1:A:37:PHE:CD1 | 1:A:39:ARG:HB3 | 0.42 | 2.48 | 1 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HG3 | 1:A:94:ALA:HA | 0.42 | 1.92 | 1 | 1 |
| 1:A:98:ILE:O | 1:A:105:LEU:HB2 | 0.42 | 2.14 | 1 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HG3 | 1:A:88:THR:CG2 | 0.42 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:104:ASN:C | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.42 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:8:GLU:O | 1:A:11:SER:N | 0.42 | 2.53 | 13 | 2 |
| 1:A:83:LEU:CD2 | 1:A:121:PHE:CD2 | 0.42 | 3.02 | 21 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HB2 | 1:A:43:GLN:HB3 | 0.42 | 1.90 | 21 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD11 | 1:A:92:PHE:CB | 0.42 | 2.45 | 2 | 2 |
| 1:A:104:ASN:N | 1:A:134:ASN:HB2 | 0.42 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:47:LEU:CD2 | 1:A:77:ALA:HA | 0.42 | 2.43 | 2 | 1 |
| 1:A:39:ARG:CZ | 1:A:76:ASP:OD2 | 0.42 | 2.67 | 18 | 1 |
| 1:A:73:VAL:O | 1:A:74:ILE:C | 0.42 | 2.58 | 11 | 1 |
| 1:A:96:VAL:HB | 1:A:126:THR:HB | 0.42 | 1.91 | 15 | 1 |
| 1:A:27:ASN:O | 1:A:28:ASN:HB3 | 0.42 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:58:LEU:CG | 1:A:92:PHE:CZ | 0.42 | 3.03 | 9 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HD2 | 1:A:99:GLU:O | 0.42 | 2.15 | 20 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:N | 0.42 | 2.30 | 5 | 1 |
| 1:A:45:MET:SD | 1:A:52:ILE:HB | 0.42 | 2.54 | 12 | 1 |
| 1:A:80:ALA:C | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.42 | 2.73 | 21 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:74:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 0.42 | 1.85 | 8 | 1 |
| 1:A:153:VAL:O | 1:A:154:SER:C | 0.42 | 2.57 | 18 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HD2 | 1:A:67:ASP:CB | 0.42 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:126:THR:HG23 | 0.42 | 1.89 | 14 | 1 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:100:ASP:N | 0.42 | 2.47 | 1 | 2 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:105:LEU:CG | 0.42 | 2.45 | 17 | 1 |
| 1:A:67:ASP:OD1 | 1:A:69:THR:N | 0.42 | 2.51 | 17 | 1 |
| 1:A:69:THR:C | 1:A:71:PHE:N | 0.42 | 2.72 | 15 | 1 |
| 1:A:130:VAL:O | 1:A:161:ALA:C | 0.42 | 2.58 | 10 | 1 |
| 1:A:106:PRO:O | 1:A:109:LEU:HB2 | 0.42 | 2.15 | 8 | 2 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.42 | 2.45 | 12 | 1 |
| 1:A:131:GLY:O | 1:A:133:ARG:HG3 | 0.42 | 2.13 | 13 | 3 |
| 1:A:111:ALA:N | 1:A:119:VAL:CG2 | 0.42 | 2.82 | 4 | 1 |
| 1:A:107:LEU:CB | 1:A:122:LEU:HG | 0.42 | 2.45 | 8 | 1 |
| 1:A:22:THR:O | 1:A:25:LEU:CB | 0.42 | 2.68 | 8 | 1 |
| 1:A:118:VAL:O | 1:A:119:VAL:C | 0.42 | 2.58 | 1 | 1 |
| 1:A:141:CYS:N | 1:A:156:MET:HE1 | 0.42 | 2.30 | 11 | 1 |
| 1:A:125:HIS:C | 1:A:126:THR:OG1 | 0.41 | 2.58 | 15 | 2 |
| 1:A:156:MET:SD | 1:A:161:ALA:HB1 | 0.41 | 2.55 | 15 | 1 |
| 1:A:57:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:HB3 | 0.41 | 2.45 | 15 | 1 |
| 1:A:141:CYS:SG | 1:A:162:GLY:HA2 | 0.41 | 2.55 | 10 | 4 |
| 1:A:85:THR:C | 1:A:87:GLN:N | 0.41 | 2.72 | 9 | 1 |
| 1:A:98:ILE:C | 1:A:105:LEU:HB3 | 0.41 | 2.34 | 10 | 1 |
| 1:A:23:SER:HA | 1:A:26:GLN:NE2 | 0.41 | 2.30 | 20 | 2 |
| 1:A:45:MET:O | 1:A:45:MET:HE2 | 0.41 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:115:HIS:HB3 | 1:A:118:VAL:HG11 | 0.41 | 1.92 | 17 | 2 |
| 1:A:106:PRO:O | 1:A:109:LEU:HD13 | 0.41 | 2.14 | 4 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:NZ | 0.41 | 2.30 | 4 | 1 |
| 1:A:105:LEU:O | 1:A:109:LEU:CG | 0.41 | 2.68 | 2 | 1 |
| 1:A:78:ALA:O | 1:A:110:ALA:CA | 0.41 | 2.68 | 14 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:118:VAL:HA | 0.41 | 1.89 | 16 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HD2 | 1:A:67:ASP:CG | 0.41 | 2.35 | 12 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:CB | 0.41 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HG | 1:A:56:LEU:CD2 | 0.41 | 2.41 | 19 | 1 |
| 1:A:23:SER:O | 1:A:24:LEU:C | 0.41 | 2.59 | 14 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HA | 1:A:56:LEU:HD12 | 0.41 | 1.92 | 14 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:85:THR:HG21 | 0.41 | 1.92 | 17 | 1 |
| 1:A:89:LEU:HB3 | 1:A:94:ALA:HB3 | 0.41 | 1.92 | 16 | 1 |
| 1:A:87:GLN:O | 1:A:88:THR:C | 0.41 | 2.57 | 15 | 3 |
| 1:A:18:LEU:CD2 | 1:A:52:ILE:HG12 | 0.41 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:89:LEU:C | 1:A:94:ALA:HB3 | 0.41 | 2.36 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:130:VAL:CB | 1:A:161:ALA:HA | 0.41 | 2.45 | 21 | 3 |
| 1:A:72:ALA:CB | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.41 | 2.98 | 12 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG22 | 1:A:106:PRO:HB2 | 0.41 | 1.88 | 19 | 5 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:HG | 0.41 | 2.16 | 4 | 1 |
| 1:A:108:HIS:CG | 1:A:143:LEU:HD12 | 0.41 | 2.47 | 8 | 1 |
| 1:A:66:LYS:NZ | 1:A:70:GLY:O | 0.41 | 2.41 | 14 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE3 | 1:A:53:ALA:HB2 | 0.41 | 1.91 | 11 | 1 |
| 1:A:15:ARG:O | 1:A:15:ARG:HG3 | 0.41 | 2.15 | 3 | 2 |
| 1:A:130:VAL:HA | 1:A:161:ALA:HB1 | 0.41 | 1.91 | 3 | 2 |
| 1:A:39:ARG:N | 1:A:39:ARG:HD3 | 0.41 | 2.31 | 16 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD23 | 1:A:118:VAL:CA | 0.41 | 2.46 | 9 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HG3 | 1:A:93:GLN:O | 0.41 | 2.15 | 10 | 1 |
| 1:A:75:HIS:NE2 | 1:A:99:GLU:C | 0.41 | 2.73 | 10 | 1 |
| 1:A:41:ALA:C | 1:A:44:VAL:HG23 | 0.41 | 2.34 | 7 | 1 |
| 1:A:143:LEU:HA | 1:A:143:LEU:HD23 | 0.41 | 1.73 | 21 | 1 |
| 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:65:LEU:HG | 0.41 | 1.92 | 2 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:122:LEU:HD12 | 0.41 | 1.91 | 8 | 1 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:ARG:HG3 | 0.41 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HG3 | 1:A:94:ALA:CA | 0.41 | 2.45 | 1 | 1 |
| 1:A:97:ASN:O | 1:A:99:GLU:HG3 | 0.41 | 2.15 | 1 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CG | 1:A:39:ARG:HB3 | 0.41 | 2.51 | 6 | 2 |
| 1:A:141:CYS:SG | 1:A:142:ASP:OD1 | 0.41 | 2.78 | 17 | 1 |
| 1:A:63:PRO:CG | 1:A:94:ALA:HB2 | 0.41 | 2.46 | 3 | 1 |
| 1:A:37:PHE:CD2 | 1:A:39:ARG:NE | 0.41 | 2.88 | 16 | 1 |
| 1:A:115:HIS:O | 1:A:119:VAL:N | 0.41 | 2.48 | 15 | 1 |
| 1:A:42:LEU:C | 1:A:45:MET:HG2 | 0.41 | 2.35 | 15 | 1 |
| 1:A:71:PHE:CZ | 1:A:109:LEU:HD21 | 0.41 | 2.50 | 15 | 1 |
| 1:A:64:ASP:HA | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.41 | 1.92 | 15 | 1 |
| 1:A:63:PRO:HB3 | 1:A:89:LEU:CG | 0.41 | 2.45 | 9 | 2 |
| 1:A:99:GLU:C | 1:A:104:ASN:O | 0.41 | 2.58 | 10 | 1 |
| 1:A:139:THR:C | 1:A:141:CYS:N | 0.41 | 2.73 | 10 | 1 |
| 1:A:77:ALA:O | 1:A:82:PHE:HB2 | 0.41 | 2.14 | 10 | 2 |
| 1:A:134:ASN:ND2 | 1:A:138:ASP:O | 0.41 | 2.54 | 20 | 1 |
| 1:A:92:PHE:O | 1:A:93:GLN:C | 0.41 | 2.59 | 20 | 1 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:N | 0.41 | 2.51 | 7 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HG11 | 1:A:56:LEU:HB3 | 0.41 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:98:ILE:C | 1:A:105:LEU:CD2 | 0.41 | 2.88 | 8 | 1 |
| 1:A:153:VAL:HG12 | 1:A:157:GLN:HE21 | 0.41 | 1.74 | 8 | 1 |
| 1:A:129:ASN:HB3 | 1:A:132:HIS:CG | 0.41 | 2.50 | 1 | 1 |
| 1:A:83:LEU:CD1 | 1:A:117:ARG:O | 0.41 | 2.68 | 6 | 1 |
| 1:A:62:ASN:HA | 1:A:63:PRO:HD2 | 0.41 | 1.79 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:144:ALA:O | 1:A:149:ARG:HB2 | 0.41 | 2.16 | 16 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:140:ALA:CB | 0.41 | 2.38 | 10 | 1 |
| 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:132:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 20 | 1 |
| 1:A:100:ASP:OD2 | 1:A:104:ASN:OD1 | 0.41 | 2.39 | 12 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD1 | 1:A:151:GLU:OE2 | 0.41 | 2.68 | 19 | 1 |
| 1:A:53:ALA:O | 1:A:57:LEU:HB2 | 0.41 | 2.15 | 19 | 2 |
| 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HD22 | 0.41 | 1.76 | 4 | 1 |
| 1:A:15:ARG:CG | 1:A:15:ARG:O | 0.41 | 2.68 | 14 | 2 |
| 1:A:67:ASP:CG | 1:A:71:PHE:HB2 | 0.41 | 2.36 | 14 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:64:ASP:N | 0.41 | 2.52 | 17 | 1 |
| 1:A:23:SER:O | 1:A:26:GLN:N | 0.41 | 2.48 | 15 | 1 |
| 1:A:45:MET:HE2 | 1:A:45:MET:O | 0.41 | 2.16 | 13 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:42:LEU:CD1 | 0.41 | 2.59 | 18 | 1 |
| 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:O | 0.41 | 2.15 | 14 | 1 |
| 1:A:22:THR:CG2 | 1:A:55:ARG:NH2 | 0.41 | 2.83 | 6 | 1 |
| 1:A:150:ASN:O | 1:A:153:VAL:HB | 0.41 | 2.16 | 3 | 1 |
| 1:A:85:THR:O | 1:A:86:LEU:C | 0.41 | 2.59 | 9 | 1 |
| 1:A:69:THR:C | 1:A:101:ASN:HB2 | 0.41 | 2.36 | 12 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HB | 1:A:98:ILE:HG21 | 0.41 | 1.92 | 12 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:NZ | 0.41 | 2.30 | 7 | 1 |
| 1:A:100:ASP:OD1 | 1:A:103:GLY:C | 0.41 | 2.59 | 2 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HE | 1:A:44:VAL:HG11 | 0.41 | 1.74 | 8 | 1 |
| 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HD12 | 0.41 | 1.92 | 18 | 1 |
| 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CD1 | 0.41 | 2.83 | 14 | 1 |
| 1:A:52:ILE:HG22 | 1:A:53:ALA:N | 0.41 | 2.30 | 14 | 1 |
| 1:A:51:GLU:HA | 1:A:54:ARG:NE | 0.41 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:103:GLY:O | 0.41 | 2.15 | 3 | 1 |
| 1:A:58:LEU:O | 1:A:59:ARG:C | 0.41 | 2.59 | 16 | 1 |
| 1:A:47:LEU:N | 1:A:47:LEU:HD22 | 0.41 | 2.29 | 15 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HE2 | 0.41 | 1.93 | 9 | 1 |
| 1:A:28:ASN:OD1 | 1:A:28:ASN:C | 0.41 | 2.57 | 5 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CG | 1:A:109:LEU:HD22 | 0.41 | 2.50 | 5 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:N | 0.41 | 2.31 | 12 | 1 |
| 1:A:18:LEU:CD2 | 1:A:51:GLU:CD | 0.41 | 2.84 | 12 | 1 |
| 1:A:12:ALA:O | 1:A:13:ALA:C | 0.41 | 2.59 | 7 | 1 |
| 1:A:104:ASN:HA | 1:A:134:ASN:OD1 | 0.41 | 2.16 | 7 | 1 |
| 1:A:131:GLY:HA2 | 1:A:133:ARG:NH1 | 0.41 | 2.31 | 19 | 1 |
| 1:A:15:ARG:C | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.41 | 2.36 | 19 | 3 |
| 1:A:24:LEU:O | 1:A:27:ASN:HB2 | 0.41 | 2.16 | 19 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:42:LEU:HA | 0.41 | 1.73 | 13 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HG | 1:A:122:LEU:HG | 0.41 | 1.93 | 8 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:35:ASN:HB2 | 1:A:39:ARG:O | 0.41 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:75:HIS:HD2 | 1:A:106:PRO:HD3 | 0.41 | 1.76 | 14 | 1 |
| 1:A:45:MET:CE | 1:A:47:LEU:HA | 0.41 | 2.46 | 14 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD2 | 1:A:98:ILE:CG2 | 0.41 | 2.69 | 14 | 1 |
| 1:A:75:HIS:CD2 | 1:A:106:PRO:HB3 | 0.41 | 2.51 | 15 | 1 |
| 1:A:129:ASN:ND2 | 1:A:140:ALA:HB2 | 0.41 | 2.31 | 2 | 1 |
| 1:A:54:ARG:HD2 | 1:A:88:THR:CG2 | 0.41 | 2.42 | 2 | 1 |
| 1:A:8:GLU:CA | 1:A:11:SER:HB2 | 0.41 | 2.45 | 13 | 1 |
| 1:A:8:GLU:HA | 1:A:11:SER:HB2 | 0.41 | 1.91 | 13 | 1 |
| 1:A:78:ALA:CB | 1:A:106:PRO:HB2 | 0.41 | 2.40 | 14 | 1 |
| 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:82:PHE:CD2 | 0.41 | 2.51 | 14 | 1 |
| 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:115:HIS:NE2 | 0.41 | 2.31 | 17 | 1 |
| 1:A:108:HIS:ND1 | 1:A:108:HIS:N | 0.41 | 2.68 | 11 | 1 |
| 1:A:109:LEU:O | 1:A:112:LYS:HB2 | 0.40 | 2.16 | 3 | 2 |
| 1:A:90:LEU:CD2 | 1:A:91:GLU:N | 0.40 | 2.81 | 16 | 1 |
| 1:A:9:LEU:CD1 | 1:A:29:VAL:CG1 | 0.40 | 2.96 | 16 | 1 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:119:VAL:CG2 | 0.40 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:42:LEU:CD2 | 1:A:61:ALA:C | 0.40 | 2.89 | 5 | 1 |
| 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:105:LEU:HB2 | 0.40 | 1.92 | 19 | 1 |
| 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:N | 0.40 | 2.31 | 8 | 1 |
| 1:A:132:HIS:CE1 | 1:A:134:ASN:N | 0.40 | 2.89 | 6 | 1 |
| 1:A:123:VAL:HG13 | 1:A:159:ASN:OD1 | 0.40 | 2.16 | 6 | 1 |
| 1:A:137:GLY:O | 1:A:138:ASP:C | 0.40 | 2.58 | 17 | 1 |
| 1:A:109:LEU:HA | 1:A:112:LYS:HB2 | 0.40 | 1.93 | 9 | 1 |
| 1:A:43:GLN:HG2 | 1:A:67:ASP:OD2 | 0.40 | 2.16 | 20 | 1 |
| 1:A:12:ALA:HA | 1:A:17:ASP:CG | 0.40 | 2.36 | 4 | 1 |
| 1:A:96:VAL:CG2 | 1:A:129:ASN:OD1 | 0.40 | 2.64 | 18 | 1 |
| 1:A:113:GLU:OE1 | 1:A:113:GLU:CA | 0.40 | 2.69 | 14 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:67:ASP:CB | 0.40 | 2.46 | 10 | 1 |
| 1:A:74:ILE:HG21 | 1:A:106:PRO:HG3 | 0.40 | 1.88 | 12 | 2 |
| 1:A:32:ASN:ND2 | 1:A:32:ASN:N | 0.40 | 2.67 | 12 | 1 |
| 1:A:14:ALA:O | 1:A:46:LYS:CG | 0.40 | 2.69 | 12 | 1 |
| 1:A:43:GLN:NE2 | 1:A:65:LEU:HB3 | 0.40 | 2.30 | 19 | 1 |
| 1:A:57:LEU:HD23 | 1:A:92:PHE:CD2 | 0.40 | 2.50 | 19 | 1 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:CD1 | 0.40 | 2.69 | 4 | 1 |
| 1:A:99:GLU:N | 1:A:105:LEU:HD23 | 0.40 | 2.32 | 8 | 1 |
| 1:A:22:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB2 | 0.40 | 1.92 | 8 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.40 | 2.46 | 14 | 1 |
| 1:A:40:THR:CG2 | 1:A:65:LEU:HD22 | 0.40 | 2.47 | 1 | 1 |
| 1:A:75:HIS:C | 1:A:77:ALA:N | 0.40 | 2.75 | 9 | 1 |
| 1:A:78:ALA:O | 1:A:81:GLY:N | 0.40 | 2.55 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:99:GLU:O | 0.40 | 2.17 | 20 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HB | 1:A:60:GLY:O | 0.40 | 2.17 | 7 | 1 |
| 1:A:20:GLN:O | 1:A:24:LEU:HD12 | 0.40 | 2.17 | 4 | 1 |
| 1:A:44:VAL:CG2 | 1:A:45:MET:H | 0.40 | 2.26 | 4 | 1 |
| 1:A:147:TYR:CB | 1:A:149:ARG:HD3 | 0.40 | 2.46 | 8 | 1 |
| 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:98:ILE:HD13 | 0.40 | 1.92 | 8 | 1 |
| 1:A:58:LEU:CD1 | 1:A:92:PHE:CZ | 0.40 | 2.90 | 8 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:42:LEU:HD22 | 0.40 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:71:PHE:CD1 | 1:A:100:ASP:CB | 0.40 | 3.04 | 14 | 1 |
| 1:A:64:ASP:OD1 | 1:A:98:ILE:HG13 | 0.40 | 2.16 | 14 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD11 | 1:A:117:ARG:O | 0.40 | 2.17 | 6 | 1 |
| 1:A:81:GLY:CA | 1:A:115:HIS:CE1 | 0.40 | 3.05 | 17 | 1 |
| 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:OD1 | 0.40 | 2.55 | 16 | 1 |
| 1:A:83:LEU:HD12 | 1:A:83:LEU:HA | 0.40 | 1.73 | 15 | 1 |
| 1:A:22:THR:OG1 | 1:A:55:ARG:HG2 | 0.40 | 2.17 | 10 | 1 |
| 1:A:32:ASN:O | 1:A:33:ALA:C | 0.40 | 2.59 | 20 | 1 |
| 1:A:121:PHE:C | 1:A:123:VAL:N | 0.40 | 2.75 | 12 | 1 |
| 1:A:40:THR:N | 1:A:43:GLN:HB2 | 0.40 | 2.31 | 12 | 1 |
| 1:A:55:ARG:C | 1:A:56:LEU:HD23 | 0.40 | 2.37 | 19 | 1 |
| 1:A:31:VAL:HG13 | 1:A:61:ALA:HA | 0.40 | 1.93 | 2 | 1 |
| 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:122:LEU:CD1 | 0.40 | 2.47 | 2 | 1 |
| 1:A:157:GLN:HA | 1:A:162:GLY:CA | 0.40 | 2.46 | 6 | 1 |
| 1:A:116:LEU:CD2 | 1:A:155:LEU:CD2 | 0.40 | 2.92 | 11 | 1 |
| 1:A:132:HIS:CE1 | 1:A:134:ASN:HA | 0.40 | 2.52 | 11 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HB2 | 1:A:43:GLN:HB2 | 0.40 | 1.94 | 11 | 1 |
| 1:A:67:ASP:O | 1:A:68:ARG:C | 0.40 | 2.58 | 11 | 1 |

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|--------------|-------------|---|
| 1 | A | 155/168 (92%) | 95±4 (61±2%) | 42±4 (27±3%) | 18±3 (12±2%) | 1 | 7 |
| All | All | 3255/3528 (92%) | 1995 (61%) | 874 (27%) | 386 (12%) | 1 | 7 |

All 43 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 | 115 | HIS | 21 |
| 1 | A | 134 | ASN | 21 |
| 1 | A | 33 | ALA | 21 |
| 1 | A | 116 | LEU | 21 |
| 1 | A | 65 | LEU | 20 |
| 1 | A | 46 | LYS | 19 |
| 1 | A | 128 | SER | 19 |
| 1 | A | 45 | MET | 18 |
| 1 | A | 139 | THR | 18 |
| 1 | A | 130 | VAL | 17 |
| 1 | A | 95 | ASP | 17 |
| 1 | A | 132 | HIS | 17 |
| 1 | A | 31 | VAL | 14 |
| 1 | A | 81 | GLY | 14 |
| 1 | A | 149 | ARG | 11 |
| 1 | A | 160 | GLY | 9 |
| 1 | A | 161 | ALA | 9 |
| 1 | A | 60 | GLY | 9 |
| 1 | A | 11 | SER | 9 |
| 1 | A | 99 | GLU | 8 |
| 1 | A | 28 | ASN | 7 |
| 1 | A | 138 | ASP | 7 |
| 1 | A | 52 | ILE | 6 |
| 1 | A | 126 | THR | 6 |
| 1 | A | 9 | LEU | 6 |
| 1 | A | 50 | PRO | 5 |
| 1 | A | 30 | ASN | 5 |
| 1 | A | 162 | GLY | 5 |
| 1 | A | 17 | ASP | 4 |
| 1 | A | 29 | VAL | 4 |
| 1 | A | 102 | GLU | 3 |
| 1 | A | 103 | GLY | 3 |
| 1 | A | 22 | THR | 2 |
| 1 | A | 47 | LEU | 2 |
| 1 | A | 122 | LEU | 1 |
| 1 | A | 35 | ASN | 1 |
| 1 | A | 66 | LYS | 1 |
| 1 | A | 118 | VAL | 1 |
| 1 | A | 93 | GLN | 1 |
| 1 | A | 127 | ALA | 1 |
| 1 | A | 109 | LEU | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 57 | LEU | 1 |
| 1 | A | 108 | HIS | 1 |

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|-------------|---|
| 1 | A | 121/130 (93%) | 78±4 (64±3%) | 43±4 (36±3%) | 1 | 9 |
| All | All | 2541/2730 (93%) | 1628 (64%) | 913 (36%) | 1 | 9 |

All 97 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 | 136 | LYS | 21 |
| 1 | A | 88 | THR | 21 |
| 1 | A | 138 | ASP | 21 |
| 1 | A | 139 | THR | 21 |
| 1 | A | 59 | ARG | 21 |
| 1 | A | 98 | ILE | 21 |
| 1 | A | 155 | LEU | 21 |
| 1 | A | 69 | THR | 21 |
| 1 | A | 123 | VAL | 20 |
| 1 | A | 135 | HIS | 20 |
| 1 | A | 112 | LYS | 19 |
| 1 | A | 46 | LYS | 19 |
| 1 | A | 25 | LEU | 18 |
| 1 | A | 95 | ASP | 18 |
| 1 | A | 124 | LYS | 18 |
| 1 | A | 9 | LEU | 17 |
| 1 | A | 29 | VAL | 17 |
| 1 | A | 11 | SER | 17 |
| 1 | A | 49 | ASN | 17 |
| 1 | A | 52 | ILE | 17 |
| 1 | A | 90 | LEU | 16 |
| 1 | A | 68 | ARG | 15 |
| 1 | A | 20 | GLN | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 39 | ARG | 15 |
| 1 | A | 86 | LEU | 15 |
| 1 | A | 79 | ARG | 15 |
| 1 | A | 105 | LEU | 15 |
| 1 | A | 116 | LEU | 14 |
| 1 | A | 55 | ARG | 13 |
| 1 | A | 66 | LYS | 13 |
| 1 | A | 118 | VAL | 13 |
| 1 | A | 18 | LEU | 13 |
| 1 | A | 121 | PHE | 12 |
| 1 | A | 57 | LEU | 12 |
| 1 | A | 151 | GLU | 12 |
| 1 | A | 122 | LEU | 11 |
| 1 | A | 133 | ARG | 11 |
| 1 | A | 117 | ARG | 11 |
| 1 | A | 24 | LEU | 11 |
| 1 | A | 15 | ARG | 10 |
| 1 | A | 8 | GLU | 10 |
| 1 | A | 102 | GLU | 10 |
| 1 | A | 83 | LEU | 10 |
| 1 | A | 97 | ASN | 10 |
| 1 | A | 19 | GLU | 10 |
| 1 | A | 89 | LEU | 10 |
| 1 | A | 37 | PHE | 9 |
| 1 | A | 58 | LEU | 9 |
| 1 | A | 120 | GLU | 9 |
| 1 | A | 64 | ASP | 9 |
| 1 | A | 142 | ASP | 7 |
| 1 | A | 34 | GLN | 7 |
| 1 | A | 107 | LEU | 7 |
| 1 | A | 154 | SER | 6 |
| 1 | A | 149 | ARG | 6 |
| 1 | A | 76 | ASP | 6 |
| 1 | A | 27 | ASN | 6 |
| 1 | A | 51 | GLU | 5 |
| 1 | A | 93 | GLN | 5 |
| 1 | A | 30 | ASN | 5 |
| 1 | A | 132 | HIS | 5 |
| 1 | A | 156 | MET | 5 |
| 1 | A | 43 | GLN | 5 |
| 1 | A | 17 | ASP | 5 |
| 1 | A | 31 | VAL | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 145 | ARG | 5 |
| 1 | A | 44 | VAL | 4 |
| 1 | A | 126 | THR | 4 |
| 1 | A | 129 | ASN | 4 |
| 1 | A | 35 | ASN | 4 |
| 1 | A | 101 | ASN | 4 |
| 1 | A | 157 | GLN | 4 |
| 1 | A | 23 | SER | 4 |
| 1 | A | 40 | THR | 4 |
| 1 | A | 42 | LEU | 4 |
| 1 | A | 109 | LEU | 4 |
| 1 | A | 134 | ASN | 4 |
| 1 | A | 56 | LEU | 3 |
| 1 | A | 146 | LEU | 3 |
| 1 | A | 47 | LEU | 3 |
| 1 | A | 143 | LEU | 3 |
| 1 | A | 45 | MET | 2 |
| 1 | A | 65 | LEU | 2 |
| 1 | A | 84 | ASP | 2 |
| 1 | A | 159 | ASN | 2 |
| 1 | A | 85 | THR | 2 |
| 1 | A | 141 | CYS | 2 |
| 1 | A | 91 | GLU | 2 |
| 1 | A | 21 | LEU | 2 |
| 1 | A | 62 | ASN | 1 |
| 1 | A | 100 | ASP | 1 |
| 1 | A | 32 | ASN | 1 |
| 1 | A | 108 | HIS | 1 |
| 1 | A | 104 | ASN | 1 |
| 1 | A | 128 | SER | 1 |
| 1 | A | 54 | ARG | 1 |
| 1 | A | 152 | VAL | 1 |

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided