

Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Oct 12, 2021 – 04:26 PM EDT

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

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org A user guide is available at https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.23.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.23.2

1 Overall quality at a glance (i)

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	$egin{array}{c} { m Whole \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$	$egin{array}{c} { m NMR} \ { m archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length		Quality of chain	
1	А	731	35%	55%	• 6% •



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 10 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues								
Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid r								
1	A:3-A:153, A:157-A:299,	1.65	5					
	A:312-A:467, A:481-A:671,							
	A:687-A:723 (678)							

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

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

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

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



3 Entry composition (i)

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

• Molecule 1 is a protein called Malate synthase G.

Mol	Chain	Residues		Atoms					Trace
1	Δ	702	Total	С	Η	Ν	Ο	S	0
1	A	123	11282	3543	5627	1015	1068	29	0

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
А	1	MET	-	initiating methionine	UNP P37330
А	2	ALA	SER	engineered mutation	UNP P37330
А	724	LEU	-	cloning artifact	UNP P37330
А	725	GLU	-	cloning artifact	UNP P37330
А	726	HIS	-	expression tag	UNP P37330
А	727	HIS	-	expression tag	UNP P37330
А	728	HIS	-	expression tag	UNP P37330
А	729	HIS	-	expression tag	UNP P37330
А	730	HIS	-	expression tag	UNP P37330
A	731	HIS	-	expression tag	UNP P37330



4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Chain A: 35% 55% 6%
- Molecule 1: Malate synthase G



4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Malate synthase G



4.2.2 Score per residue for model 2





4.2.3 Score per residue for model 3



qf55 1563 qf75 A658 1557 1476 M662 1571 1479 M663 1571 1479 M661 1577 8478 M671 1577 8486 M671 1578 4487 M671 1578 4487 M672 1578 8477 M671 1578 8486 M672 1578 8487 M680 1576 9486 M680 1578 8497 M680 15694 1494 M680 15694 1694 M680 15694 1694 M680 16610 1649 M680 16610 1649 M680 16610 1649 M680 16610 1649 </t

4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Malate synthase G



4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)





4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Malate synthase G









4.2.7 Score per residue for model 7



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Malate synthase G



4.2.9 Score per residue for model 9







4.2.10 Score per residue for model 10



Ne62 E596 M613 A663 L590 M513 V666 N699 L590 V665 N699 L590 V666 N699 K530 V665 V600 N531 V666 V600 N533 V601 N631 L596 V602 V603 N534 V611 L604 N534 V612 V601 N541 V613 V611 H644 V614 N610 L543 V610 K611 H644 V611 H644 H644 V612 K613 H646 V613 K613 H646 V614 N625 H649 V626 L646 H644 V626 L643 L646 K702 L633 L646 K703 L644 L646 K704 L644 L646 K705 L646 L646



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 60 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR-NIH	refinement	2.9.3

No chemical shift data was provided.



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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	А	5310	5271	5254	388 ± 21
All	All	53100	52710	52540	3883

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 37.

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

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



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



Atom 1	Atom 2	$Clach(\lambda)$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:357:ILE:N	1:A:358:PRO:CD	0.72	2.52	1	2	
1:A:615:ILE:HG22	1:A:616:GLY:H	0.72	1.44	3	1	
1:A:361:ILE:HD13	1:A:361:ILE:H	0.72	1.45	9	1	
1:A:454:LEU:HD22	1:A:457:THR:OG1	0.72	1.85	1	1	
1:A:183:GLY:O	1:A:184:SER:CB	0.72	2.38	10	2	
1:A:268:ILE:HD11	1:A:338:ARG:CZ	0.72	2.15	7	1	
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:GLN:N	0.72	1.99	2	1	
1:A:579:ILE:O	1:A:581:VAL:N	0.72	2.22	8	4	
1:A:526:LEU:HD12	1:A:551:THR:OG1	0.71	1.84	2	1	
1:A:446:VAL:CG1	1:A:446:VAL:O	0.71	2.37	9	2	
1:A:449:ILE:HD13	1:A:449:ILE:N	0.71	2.00	2	4	
1:A:628:LEU:N	1:A:628:LEU:HD22	0.71	2.00	10	1	
1:A:446:VAL:HG22	1:A:447:ALA:N	0.71	1.99	5	2	
1:A:194:VAL:C	1:A:196:LYS:H	0.71	1.89	9	10	
1:A:422:MET:C	1:A:447:ALA:HB3	0.71	2.06	6	4	
1:A:98:VAL:HG11	1:A:439:ILE:HG22	0.70	1.61	7	1	
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:HG23	0.70	1.87	4	2	
1:A:494:LEU:C	1:A:494:LEU:HD13	0.70	2.07	2	1	
1:A:615:ILE:HG22	1:A:616:GLY:N	0.70	2.01	3	1	
1:A:334:LEU:HD12	1:A:382:ARG:NH2	0.70	2.01	10	1	
1:A:604:LEU:O	1:A:608:VAL:HG12	0.70	1.86	7	6	
1:A:617:CYS:O	1:A:618:SER:CB	0.70	2.40	4	5	
1:A:29:GLY:C	1:A:30:LEU:HD12	0.70	2.06	7	1	
1:A:269:LEU:HD12	1:A:336:PHE:O	0.70	1.87	2	1	
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:N	0.70	2.01	3	2	
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:HD12	0.70	2.06	3	2	
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:CA	0.69	2.40	2	1	
1:A:711:LEU:HD13	1:A:711:LEU:C	0.69	2.08	9	1	
1:A:201:GLN:NE2	1:A:201:GLN:H	0.69	1.85	4	1	
1:A:191:PHE:N	1:A:191:PHE:CD1	0.69	2.59	8	6	
1:A:579:ILE:HD13	1:A:579:ILE:H	0.69	1.47	10	1	
1:A:375:LEU:HD13	1:A:414:GLY:O	0.69	1.87	1	1	
1:A:533:ALA:HB2	1:A:548:TYR:OH	0.69	1.87	7	1	
1:A:389:VAL:HG23	1:A:389:VAL:O	0.69	1.87	1	1	
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:HG13	0.69	1.88	1	4	
1:A:105:ILE:HD11	1:A:421:LYS:NZ	0.69	2.02	6	1	
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:C	0.69	2.08	10	2	
1:A:265:ILE:HD12	1:A:265:ILE:N	0.69	2.03	7	1	
1:A:584:ASN:N	1:A:584:ASN:HD22	0.69	1.85	8	2	
1:A:134:ARG:CD	1:A:134:ARG:H	0.68	2.01	10	1	
1:A:576:LEU:C	1:A:576:LEU:HD13	0.68	2.09	1	1	



1:A:242:ILE:HD12

1:A:709:GLU:N

1:A:650:ILE:HD12

Continued from prev	cous page	0		Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\operatorname{\AA})$	Distance(Å)	Worst	Total
1:A:451:THR:HG23	1:A:485:TYR:OH	0.68	1.88	7	1
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:HB2	0.68	1.88	10	1
1:A:278:VAL:HG13	1:A:278:VAL:O	0.68	1.88	8	2
1:A:361:ILE:H	1:A:361:ILE:CD1	0.68	2.00	9	1
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:HD13	0.68	2.09	7	1
1:A:346:ILE:HD13	1:A:346:ILE:H	0.68	1.49	7	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:O	0.68	1.87	8	1
1:A:293:LEU:HD12	1:A:293:LEU:O	0.68	1.89	3	1
1:A:448:PHE:C	1:A:449:ILE:HD13	0.68	2.09	9	2
1:A:635:LEU:HD13	1:A:635:LEU:C	0.68	2.09	3	2
1:A:375:LEU:N	1:A:375:LEU:HD23	0.68	2.04	2	1
1:A:219:TYR:CE2	1:A:220:ARG:O	0.68	2.47	3	1
1:A:377:VAL:CG2	1:A:378:GLN:H	0.67	2.02	4	10
1:A:440:ALA:C	1:A:442:ALA:H	0.67	1.91	3	7
1:A:546:LEU:N	1:A:546:LEU:HD23	0.67	2.02	10	1
1:A:339:ASN:HB3	1:A:389:VAL:O	0.67	1.90	1	1
1:A:584:ASN:H	1:A:584:ASN:ND2	0.67	1.87	6	1
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG22	0.67	1.89	10	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:CB	0.67	2.42	3	4
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:CD	0.67	2.58	7	6
1:A:108:GLU:O	1:A:112:GLN:O	0.67	2.12	2	2
1:A:200:ILE:N	1:A:200:ILE:CD1	0.67	2.56	4	1
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:GLY:N	0.67	2.04	2	2
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:CB	0.67	2.42	2	1
1:A:420:LEU:HD12	1:A:420:LEU:N	0.67	2.04	8	1
1:A:134:ARG:NE	1:A:134:ARG:N	0.67	2.43	10	1
1:A:637:ILE:HD13	1:A:637:ILE:H	0.67	1.48	2	1
1:A:526:LEU:HD13	1:A:526:LEU:C	0.67	2.09	8	1
1:A:219:TYR:CD1	1:A:228:CYS:O	0.66	2.48	3	1
1:A:361:ILE:HD13	1:A:361:ILE:N	0.66	2.04	9	1
1:A:542:THR:O	1:A:544:HIS:N	0.66	2.28	10	1
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:CB	0.66	2.43	5	3
1:A:343:LEU:HD23	1:A:343:LEU:N	0.66	2.05	5	2
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:HD12	0.66	2.05	6	2
1:A:439:ILE:O	1:A:442:ALA:N	0.66	2.29	4	4
1:A:362:LEU:HD23	1:A:362:LEU:H	0.66	1.49	7	3
1:A:581:VAL:HG23	1:A:581:VAL:O	0.66	1.90	6	1
1:A:216:PHE:O	1:A:216:PHE:CD1	0.66	2.49	2	1

Continued on next page...

6

10

 $\mathbf{2}$

1

9

2

2.05

2.58

2.06



0.66

0.66

0.66

1:A:242:ILE:N

1:A:710:PRO:CD

1:A:650:ILE:N

Atom 1	A.4	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:346:ILE:HD13	1:A:346:ILE:N	0.66	2.06	7	1
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:HB2	0.66	1.89	5	1
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:HB3	0.66	1.91	2	2
1:A:68:HIS:CE1	1:A:81:TYR:HH	0.65	2.08	1	1
1:A:579:ILE:HD13	1:A:579:ILE:N	0.65	2.06	10	1
1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:NE	0.65	2.43	1	1
1:A:339:ASN:ND2	1:A:339:ASN:H	0.65	1.90	7	1
1:A:448:PHE:CZ	1:A:498:LEU:HD21	0.65	2.25	1	1
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:HB3	0.65	1.90	4	1
1:A:576:LEU:HD13	1:A:576:LEU:O	0.65	1.92	9	3
1:A:709:GLU:N	1:A:710:PRO:HD2	0.65	2.06	8	5
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD23	0.65	1.92	7	1
1:A:357:ILE:H	1:A:358:PRO:HD3	0.65	1.52	1	1
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:HB3	0.65	1.92	6	1
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CZ	0.65	2.49	9	2
1:A:132:ASN:OD1	1:A:298:LEU:HD23	0.65	1.91	10	1
1:A:436:ARG:NE	1:A:499:ARG:NH2	0.65	2.44	5	1
1:A:269:LEU:O	1:A:270:ASP:CB	0.65	2.44	9	6
1:A:610:TRP:O	1:A:614:GLY:N	0.65	2.30	2	4
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:NE1	0.65	2.07	10	2
1:A:442:ALA:O	1:A:444:ASN:N	0.64	2.31	9	2
1:A:169:TRP:NE1	1:A:173:PHE:CZ	0.64	2.66	10	1
1:A:441:GLN:C	1:A:443:ARG:N	0.64	2.50	8	5
1:A:388:ILE:N	1:A:388:ILE:HD12	0.64	2.08	6	2
1:A:584:ASN:ND2	1:A:645:TRP:HE1	0.64	1.90	6	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:HD12	0.64	1.92	7	1
1:A:134:ARG:H	1:A:134:ARG:NE	0.64	1.89	10	1
1:A:162:ARG:O	1:A:166:VAL:HG23	0.64	1.93	5	4
1:A:387:TYR:N	1:A:387:TYR:CD1	0.64	2.65	3	1
1:A:339:ASN:HD21	1:A:364:GLY:N	0.64	1.90	6	1
1:A:498:LEU:HD12	1:A:498:LEU:N	0.64	2.05	9	2
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:HD2	0.64	1.53	8	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:489:ASN:N	0.64	2.44	5	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:48:PRO:CD	0.64	2.23	1	4
1:A:208:THR:HG22	1:A:209:THR:N	0.64	2.07	3	2
1:A:201:GLN:H	1:A:201:GLN:HE21	0.64	1.33	4	1
1:A:587:TRP:CD1	1:A:587:TRP:N	0.64	2.62	4	2
1:A:237:HIS:CD2	1:A:237:HIS:H	0.64	2.07	7	1
1:A:600:VAL:HG23	1:A:601:GLN:N	0.64	2.06	9	1
1:A:337:ILE:N	1:A:337:ILE:HD13	0.64	2.08	4	1
1:A:481:TRP:CD1	1:A:578:THR:HG21	0.64	2.27	3	1



		(1,1)	\mathbf{D}^{*}	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:HB2	0.64	1.93	7	2
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:CB	0.64	2.46	6	1
1:A:548:TYR:CD1	1:A:549:HIS:N	0.64	2.66	9	1
1:A:488:ASN:HD21	1:A:572:LEU:HD22	0.64	1.53	10	1
1:A:637:ILE:HG22	1:A:637:ILE:O	0.63	1.92	8	1
1:A:122:MET:SD	1:A:122:MET:N	0.63	2.71	1	1
1:A:647:ARG:HE	1:A:647:ARG:N	0.63	1.92	3	1
1:A:436:ARG:HE	1:A:499:ARG:NH2	0.63	1.91	5	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:30:LEU:O	0.63	1.92	10	1
1:A:416:ALA:HB1	1:A:417:PRO:CD	0.63	2.24	3	2
1:A:453:PHE:N	1:A:453:PHE:CD1	0.63	2.64	1	2
1:A:372:LEU:HD12	1:A:372:LEU:C	0.63	2.14	2	1
1:A:237:HIS:N	1:A:237:HIS:CD2	0.63	2.67	3	1
1:A:424:ILE:H	1:A:424:ILE:HD12	0.63	1.53	5	2
1:A:134:ARG:N	1:A:134:ARG:HE	0.63	1.91	10	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:N	0.63	2.31	10	3
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:HB2	0.63	1.92	10	1
1:A:204:ASN:N	1:A:204:ASN:ND2	0.63	2.47	7	1
1:A:149:PRO:O	1:A:151:GLU:N	0.63	2.31	5	1
1:A:525:GLN:N	1:A:525:GLN:NE2	0.63	2.46	9	1
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:HD12	0.63	2.14	10	1
1:A:436:ARG:O	1:A:440:ALA:HB2	0.63	1.93	8	1
1:A:456:ARG:NH1	1:A:485:TYR:CD1	0.63	2.66	1	1
1:A:394:HIS:NE2	1:A:438:CYS:SG	0.63	2.71	4	1
1:A:632:ARG:HH21	1:A:633:ALA:HB2	0.63	1.54	5	1
1:A:584:ASN:HD22	1:A:645:TRP:HE1	0.63	1.37	6	1
1:A:191:PHE:CD1	1:A:191:PHE:N	0.63	2.65	7	1
1:A:342:HIS:N	1:A:342:HIS:CD2	0.63	2.67	8	1
1:A:355:ASN:ND2	1:A:355:ASN:N	0.62	2.46	4	1
1:A:444:ASN:C	1:A:446:VAL:N	0.62	2.51	5	5
1:A:279:ASP:O	1:A:281:GLU:N	0.62	2.31	2	3
1:A:122:MET:N	1:A:122:MET:SD	0.62	2.73	5	1
1:A:210:LEU:O	1:A:212:THR:N	0.62	2.32	1	1
1:A:563:THR:HG22	1:A:564:GLU:N	0.62	2.09	8	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CE2	0.62	2.87	9	2
1:A:278:VAL:HG12	1:A:278:VAL:O	0.62	1.94	1	1
1:A:504:ILE:O	1:A:505:GLY:C	0.62	2.38	2	2
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:CD2	0.62	2.57	10	2
1:A:342:HIS:ND1	1:A:342:HIS:N	0.62	2.47	5	1
1:A:271:CYS:SG	1:A:632:ARG:NH2	0.62	2.73	1	1
1:A:236:LEU:HD23	1:A:237:HIS:N	0.62	2.09	2	1



			\mathbf{D}^{\prime}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:319:TYR:CD1	1:A:319:TYR:N	0.62	2.67	2	1	
1:A:336:PHE:C	1:A:337:ILE:HD13	0.62	2.14	4	1	
1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:H	0.62	2.05	5	1	
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:CG2	0.62	2.47	8	1	
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:CB	0.62	2.48	8	8	
1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:ND2	0.61	2.47	4	1	
1:A:387:TYR:CD1	1:A:387:TYR:N	0.61	2.64	6	3	
1:A:557:GLN:NE2	1:A:557:GLN:N	0.61	2.47	6	1	
1:A:449:ILE:HD11	1:A:499:ARG:HH11	0.61	1.55	8	1	
1:A:414:GLY:O	1:A:416:ALA:N	0.61	2.33	7	3	
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:HB3	0.61	1.95	5	2	
1:A:442:ALA:HB1	1:A:446:VAL:HG23	0.61	1.71	5	1	
1:A:209:THR:HG22	1:A:210:LEU:N	0.61	2.08	6	2	
1:A:177:SER:O	1:A:178:LEU:HD12	0.61	1.95	8	1	
1:A:35:PHE:CE2	1:A:39:PHE:CZ	0.61	2.88	9	1	
1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:N	0.61	2.30	3	2	
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:NE2	0.61	2.48	5	1	
1:A:436:ARG:NH2	1:A:569:PHE:CZ	0.61	2.67	8	1	
1:A:90:TYR:CE1	1:A:394:HIS:NE2	0.61	2.68	5	1	
1:A:451:THR:HG22	1:A:452:GLY:N	0.61	2.09	7	1	
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:HB3	0.61	1.93	2	3	
1:A:216:PHE:CD1	1:A:217:VAL:N	0.61	2.69	3	1	
1:A:257:ASN:HD22	1:A:258:ASP:N	0.61	1.93	4	1	
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:O	0.61	2.19	9	3	
1:A:565:PHE:CD2	1:A:566:ASN:N	0.61	2.68	5	1	
1:A:362:LEU:HD23	1:A:362:LEU:N	0.61	2.10	10	2	
1:A:187:ASP:OD1	1:A:187:ASP:N	0.61	2.33	8	3	
1:A:382:ARG:N	1:A:382:ARG:NE	0.61	2.48	4	1	
1:A:531:ASN:HD22	1:A:532:THR:N	0.61	1.94	4	1	
1:A:456:ARG:HE	1:A:456:ARG:N	0.61	1.93	7	1	
1:A:216:PHE:CG	1:A:216:PHE:O	0.61	2.53	8	1	
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:HE1	0.61	1.56	3	2	
1:A:565:PHE:CG	1:A:566:ASN:N	0.61	2.68	5	1	
1:A:110:THR:O	1:A:111:SER:CB	0.61	2.48	7	1	
1:A:377:VAL:CG2	1:A:378:GLN:N	0.61	2.63	8	10	
1:A:490:VAL:O	1:A:494:LEU:CB	0.61	2.49	3	3	
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:CB	0.61	2.47	8	2	
1:A:314:ASN:N	1:A:314:ASN:HD22	0.61	1.94	4	1	
1:A:90:TYR:CZ	1:A:394:HIS:NE2	0.61	2.69	5	1	
1:A:219:TYR:CD1	1:A:219:TYR:N	0.61	2.68	10	2	
1:A:194:VAL:C	1:A:196:LYS:N	0.61	2.53	9	10	



			\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:271:CYS:SG	1:A:636:ARG:NE	0.61	2.74	1	1	
1:A:116:GLN:NE2	1:A:534:TRP:HE1	0.61	1.93	7	1	
1:A:498:LEU:HD13	1:A:498:LEU:H	0.61	1.54	8	1	
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:C	0.61	2.39	10	1	
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD2	0.60	2.64	2	1	
1:A:297:THR:O	1:A:299:GLN:N	0.60	2.34	6	2	
1:A:382:ARG:N	1:A:382:ARG:HE	0.60	1.94	4	1	
1:A:394:HIS:O	1:A:395:GLY:C	0.60	2.40	4	1	
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:HB3	0.60	1.96	5	1	
1:A:620:VAL:HG22	1:A:628:LEU:O	0.60	1.96	10	1	
1:A:298:LEU:N	1:A:298:LEU:HD12	0.60	2.11	1	2	
1:A:645:TRP:O	1:A:649:GLY:N	0.60	2.34	8	4	
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:CB	0.60	2.48	4	2	
1:A:116:GLN:NE2	1:A:116:GLN:N	0.60	2.49	5	1	
1:A:626:VAL:O	1:A:627:ALA:HB2	0.60	1.96	1	2	
1:A:334:LEU:HD21	1:A:387:TYR:CE2	0.60	2.31	3	1	
1:A:489:ASN:OD1	1:A:489:ASN:N	0.60	2.34	3	2	
1:A:242:ILE:HD12	1:A:242:ILE:H	0.60	1.57	6	1	
1:A:57:ARG:NH2	1:A:429:ARG:NH2	0.60	2.50	2	1	
1:A:552:ASN:ND2	1:A:554:GLN:H	0.60	1.95	2	2	
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:HB2	0.60	1.95	9	3	
1:A:421:LYS:CB	1:A:421:LYS:NZ	0.60	2.64	7	1	
1:A:609:ARG:NH2	1:A:610:TRP:NE1	0.60	2.50	7	1	
1:A:711:LEU:HD12	1:A:712:LEU:N	0.60	2.11	7	1	
1:A:93:PRO:O	1:A:94:GLN:NE2	0.60	2.35	4	2	
1:A:394:HIS:CD2	1:A:438:CYS:SG	0.60	2.95	4	1	
1:A:334:LEU:C	1:A:334:LEU:HD12	0.60	2.17	9	1	
1:A:518:MET:SD	1:A:518:MET:N	0.60	2.74	2	1	
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:HB2	0.60	1.96	8	3	
1:A:57:ARG:NH2	1:A:429:ARG:HH21	0.60	1.94	2	1	
1:A:228:CYS:SG	1:A:229:ILE:N	0.60	2.74	3	2	
1:A:393:MET:SD	1:A:429:ARG:NH2	0.60	2.75	10	2	
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:HH22	0.60	1.94	9	1	
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:N	0.60	2.12	1	1	
1:A:11:ARG:O	1:A:12:ILE:HG23	0.60	1.96	4	4	
1:A:650:ILE:HG22	1:A:650:ILE:O	0.60	1.96	7	2	
1:A:671:ASN:H	1:A:671:ASN:HD22	0.60	1.37	6	1	
1:A:344:MET:SD	1:A:713:HIS:CE1	0.60	2.94	7	1	
1:A:456:ARG:N	1:A:456:ARG:NE	0.60	2.50	7	1	
1:A:134:ARG:NH1	1:A:382:ARG:NH2	0.60	2.48	8	1	
1:A:334:LEU:HD23	1:A:336:PHE:CE1	0.60	2.32	1	1	



	1 1 1 2		D1 (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:422:MET:H	1:A:447:ALA:HB2	0.60	1.57	5	1	
1:A:105:ILE:HD12	1:A:105:ILE:H	0.60	1.52	6	1	
1:A:134:ARG:NH2	1:A:237:HIS:NE2	0.60	2.49	7	1	
1:A:298:LEU:H	1:A:298:LEU:CD1	0.60	2.08	7	1	
1:A:418:ASN:ND2	1:A:418:ASN:N	0.60	2.49	7	1	
1:A:124:ALA:O	1:A:298:LEU:HD23	0.60	1.97	9	1	
1:A:389:VAL:HG12	1:A:425:MET:SD	0.60	2.36	9	1	
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:VAL:N	0.60	2.12	7	10	
1:A:105:ILE:N	1:A:105:ILE:CD1	0.60	2.64	2	2	
1:A:518:MET:SD	1:A:522:LYS:NZ	0.60	2.75	7	2	
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CD2	0.60	2.54	10	2	
1:A:135:TRP:CG	1:A:135:TRP:O	0.60	2.54	9	1	
1:A:374:ASP:O	1:A:377:VAL:CG2	0.59	2.49	3	3	
1:A:119:VAL:HG21	1:A:269:LEU:HD23	0.59	1.74	2	1	
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CD1	0.59	2.56	3	1	
1:A:94:GLN:NE2	1:A:437:SER:OG	0.59	2.35	4	1	
1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:HD22	0.59	1.94	10	2	
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:CD2	0.59	2.65	4	1	
1:A:484:ALA:O	1:A:488:ASN:N	0.59	2.29	6	1	
1:A:119:VAL:HG23	1:A:269:LEU:HA	0.59	1.74	2	1	
1:A:135:TRP:O	1:A:261:VAL:O	0.59	2.19	6	2	
1:A:192:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HH21	0.59	1.95	4	1	
1:A:635:LEU:HD12	1:A:636:ARG:NH1	0.59	2.12	4	1	
1:A:450:ASN:OD1	1:A:451:THR:N	0.59	2.35	6	2	
1:A:57:ARG:NH1	1:A:429:ARG:HE	0.59	1.95	2	1	
1:A:159:ASP:N	1:A:159:ASP:OD1	0.59	2.35	7	2	
1:A:577:LEU:N	1:A:577:LEU:HD22	0.59	2.11	10	3	
1:A:339:ASN:ND2	1:A:364:GLY:N	0.59	2.50	6	1	
1:A:47:ALA:HB3	1:A:48:PRO:HD3	0.59	1.74	10	6	
1:A:57:ARG:NH1	1:A:429:ARG:NE	0.59	2.51	2	1	
1:A:330:HIS:ND1	1:A:330:HIS:N	0.59	2.47	9	2	
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:C	0.59	2.18	8	1	
1:A:653:LYS:CD	1:A:653:LYS:H	0.59	2.10	8	1	
1:A:200:ILE:O	1:A:207:GLU:O	0.59	2.21	4	1	
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CD2	0.59	2.91	3	1	
1:A:233:ASN:N	1:A:233:ASN:HD22	0.59	1.96	3	1	
1:A:345:THR:N	1:A:359:GLU:OE1	0.59	2.35	7	1	
1:A:343:LEU:H	1:A:343:LEU:HD23	0.59	1.57	9	1	
1:A:586:ASN:N	1:A:586:ASN:HD22	0.59	1.95	10	1	
1:A:390:LYS:O	1:A:392:LYS:N	0.59	2.35	4	1	
1:A:67:TRP:CH2	1:A:84:PHE:CD2	0.59	2.90	8	1	



	$A = C = L(\hat{k})$		$\mathbf{A}_{\mathbf{A}}_{\mathbf{A}_{\mathbf{A}}_{\mathbf{A}}}}}}}}}}$		dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:546:LEU:O	1:A:549:HIS:ND1	0.59	2.35	8	1
1:A:600:VAL:HG23	1:A:601:GLN:H	0.59	1.57	9	1
1:A:422:MET:SD	1:A:447:ALA:HB2	0.59	2.38	1	1
1:A:663:MET:SD	1:A:663:MET:N	0.59	2.75	1	1
1:A:411:THR:O	1:A:415:MET:N	0.59	2.36	10	3
1:A:436:ARG:NE	1:A:436:ARG:H	0.59	1.94	7	1
1:A:204:ASN:OD1	1:A:204:ASN:N	0.59	2.36	10	3
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:ARG:N	0.59	2.13	1	1
1:A:515:MET:N	1:A:515:MET:SD	0.59	2.75	6	2
1:A:180:LEU:O	1:A:181:GLU:C	0.59	2.41	3	5
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:CG	0.59	2.27	3	2
1:A:557:GLN:H	1:A:557:GLN:HE21	0.59	1.40	6	1
1:A:339:ASN:ND2	1:A:339:ASN:N	0.59	2.51	7	1
1:A:506:LYS:H	1:A:506:LYS:CD	0.59	2.11	9	1
1:A:422:MET:O	1:A:447:ALA:CB	0.59	2.51	7	5
1:A:15:ASN:HD22	1:A:16:PHE:H	0.59	1.40	3	1
1:A:335:LEU:N	1:A:335:LEU:CD2	0.59	2.66	6	2
1:A:482:ILE:CG2	1:A:483:LYS:N	0.59	2.66	10	2
1:A:332:ARG:O	1:A:382:ARG:NH2	0.59	2.36	10	1
1:A:187:ASP:O	1:A:203:LYS:N	0.58	2.36	8	8
1:A:123:ASN:ND2	1:A:124:ALA:H	0.58	1.96	3	1
1:A:135:TRP:O	1:A:135:TRP:CD2	0.58	2.56	9	2
1:A:699:LEU:O	1:A:703:GLN:N	0.58	2.36	4	1
1:A:340:VAL:HG22	1:A:341:GLY:N	0.58	2.13	5	2
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:CB	0.58	2.51	5	1
1:A:129:ASN:ND2	1:A:134:ARG:HE	0.58	1.96	9	1
1:A:635:LEU:HD23	1:A:635:LEU:O	0.58	1.97	2	2
1:A:350:TRP:CD1	1:A:350:TRP:N	0.58	2.71	3	2
1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HE	0.58	1.40	7	1
1:A:249:GLY:N	1:A:257:ASN:HD21	0.58	1.96	10	1
1:A:431:THR:OG1	1:A:432:SER:N	0.58	2.37	7	2
1:A:660:LEU:O	1:A:664:ALA:N	0.58	2.37	7	1
1:A:122:MET:SD	1:A:290:LEU:N	0.58	2.75	10	1
1:A:180:LEU:C	1:A:182:ASN:H	0.58	2.01	10	1
1:A:377:VAL:O	1:A:379:LYS:N	0.58	2.36	9	3
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CD2	0.58	2.57	7	1
1:A:204:ASN:ND2	1:A:204:ASN:H	0.58	1.97	7	1
1:A:342:HIS:N	1:A:359:GLU:CD	0.58	2.56	7	1
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:HG22	0.58	1.98	8	1
1:A:132:ASN:N	1:A:132:ASN:ND2	0.58	2.51	3	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:VAL:N	0.58	2.14	5	1



A 4 1		$C = c \left(\frac{3}{2} \right)$	$\mathbf{D}^{\mathbf{i}}_{\mathbf{i}}$	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:579:ILE:N	1:A:579:ILE:CD1	0.58	2.66	10	1	
1:A:709:GLU:OE1	1:A:709:GLU:N	0.58	2.34	2	1	
1:A:634:THR:O	1:A:638:SER:N	0.58	2.37	10	2	
1:A:25:LEU:HD22	1:A:29:GLY:HA3	0.58	1.76	7	1	
1:A:292:GLY:O	1:A:296:GLY:N	0.58	2.36	7	2	
1:A:508:MET:SD	1:A:508:MET:N	0.58	2.76	7	1	
1:A:129:ASN:O	1:A:134:ARG:N	0.58	2.37	9	1	
1:A:606:TYR:N	1:A:606:TYR:CD1	0.58	2.68	10	1	
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:ALA:N	0.58	2.13	1	7	
1:A:603:ILE:CG1	1:A:604:LEU:N	0.58	2.66	2	2	
1:A:138:LEU:HD11	1:A:546:LEU:HD21	0.58	1.75	3	1	
1:A:442:ALA:CA	1:A:446:VAL:HG11	0.58	2.29	4	3	
1:A:608:VAL:HG13	1:A:609:ARG:N	0.58	2.13	8	4	
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:HB2	0.58	1.97	10	4	
1:A:234:ASN:ND2	1:A:549:HIS:CE1	0.58	2.72	5	1	
1:A:645:TRP:O	1:A:647:ARG:N	0.58	2.37	6	1	
1:A:668:ASP:OD1	1:A:669:GLN:N	0.58	2.37	7	1	
1:A:498:LEU:CD2	1:A:499:ARG:N	0.58	2.67	8	1	
1:A:216:PHE:O	1:A:216:PHE:CG	0.58	2.57	2	1	
1:A:338:ARG:NH2	1:A:456:ARG:CZ	0.58	2.67	3	1	
1:A:424:ILE:H	1:A:448:PHE:CB	0.58	2.11	8	2	
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:CG1	0.58	2.50	8	1	
1:A:210:LEU:C	1:A:212:THR:H	0.58	2.02	1	1	
1:A:416:ALA:HB1	1:A:417:PRO:HD2	0.58	1.76	1	4	
1:A:282:ASP:O	1:A:284:ILE:N	0.58	2.37	7	5	
1:A:202:LEU:N	1:A:206:LYS:HA	0.58	2.13	4	1	
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:C	0.58	2.42	5	3	
1:A:197:GLN:NE2	1:A:198:LEU:H	0.58	1.96	5	1	
1:A:289:ASN:O	1:A:293:LEU:N	0.58	2.36	7	2	
1:A:324:GLY:O	1:A:325:SER:C	0.58	2.42	8	4	
1:A:393:MET:SD	1:A:393:MET:N	0.58	2.76	4	2	
1:A:440:ALA:O	1:A:442:ALA:N	0.58	2.36	3	3	
1:A:403:ASN:HD21	1:A:443:ARG:CB	0.58	2.12	2	1	
1:A:577:LEU:N	1:A:577:LEU:CD2	0.58	2.67	10	3	
1:A:534:TRP:CH2	1:A:633:ALA:HB2	0.58	2.34	3	1	
1:A:498:LEU:CD2	1:A:498:LEU:H	0.58	2.12	10	2	
1:A:330:HIS:H	1:A:330:HIS:CD2	0.58	2.17	6	1	
1:A:362:LEU:O	1:A:366:MET:N	0.58	2.37	7	1	
1:A:361:ILE:CD1	1:A:361:ILE:N	0.58	2.67	9	1	
1:A:439:ILE:C	1:A:441:GLN:N	0.57	2.57	8	8	
1:A:57:ARG:HH22	1:A:429:ARG:HH21	0.57	1.40	2	1	



			\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:705:ASN:O	1:A:707:TYR:N	0.57	2.35	2	1	
1:A:119:VAL:HG12	1:A:130:ALA:HB1	0.57	1.73	3	1	
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:HB3	0.57	1.99	5	1	
1:A:38:ASN:ND2	1:A:412:MET:SD	0.57	2.77	7	1	
1:A:383:THR:O	1:A:385:SER:N	0.57	2.36	8	8	
1:A:394:HIS:ND1	1:A:394:HIS:N	0.57	2.48	2	1	
1:A:416:ALA:HB3	1:A:417:PRO:HD3	0.57	1.74	5	1	
1:A:552:ASN:N	1:A:552:ASN:ND2	0.57	2.51	5	1	
1:A:461:MET:O	1:A:465:MET:N	0.57	2.37	1	5	
1:A:57:ARG:HH12	1:A:429:ARG:HE	0.57	1.40	2	1	
1:A:208:THR:CG2	1:A:209:THR:N	0.57	2.67	2	2	
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:HD22	0.57	2.13	6	1	
1:A:436:ARG:NH1	1:A:499:ARG:NH1	0.57	2.52	10	1	
1:A:219:TYR:CZ	1:A:220:ARG:O	0.57	2.56	3	1	
1:A:338:ARG:CZ	1:A:456:ARG:NH2	0.57	2.67	3	1	
1:A:433:LEU:HD13	1:A:433:LEU:O	0.57	1.98	6	2	
1:A:635:LEU:HD13	1:A:635:LEU:O	0.57	1.99	4	3	
1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:HD22	0.57	1.97	4	1	
1:A:671:ASN:HD22	1:A:671:ASN:N	0.57	1.97	6	1	
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CE2	0.57	2.58	9	2	
1:A:495:PHE:CZ	1:A:561:ALA:CB	0.57	2.88	1	1	
1:A:16:PHE:CD2	1:A:284:ILE:CD1	0.57	2.87	9	1	
1:A:449:ILE:HG21	1:A:502:ALA:HB1	0.57	1.74	9	1	
1:A:342:HIS:CG	1:A:343:LEU:N	0.57	2.71	10	1	
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.57	2.38	10	4	
1:A:162:ARG:O	1:A:166:VAL:N	0.57	2.33	1	1	
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:HG23	0.57	1.99	2	2	
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:CD2	0.57	2.68	4	1	
1:A:21:ASP:OD1	1:A:22:GLU:N	0.57	2.38	5	1	
1:A:612:GLU:N	1:A:612:GLU:OE1	0.57	2.37	7	1	
1:A:420:LEU:H	1:A:420:LEU:CD1	0.57	2.09	8	1	
1:A:436:ARG:NH1	1:A:496:CYS:O	0.57	2.37	10	1	
1:A:626:VAL:HG12	1:A:627:ALA:N	0.57	2.14	3	4	
1:A:253:PRO:O	1:A:254:ALA:CB	0.57	2.53	4	2	
1:A:357:ILE:O	1:A:358:PRO:O	0.57	2.23	4	2	
1:A:449:ILE:HD12	1:A:449:ILE:N	0.57	2.14	6	2	
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:TYR:N	0.57	2.13	5	1	
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:CB	0.57	2.53	6	4	
1:A:644:ASN:N	1:A:644:ASN:HD22	0.57	1.97	9	2	
1:A:35:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CZ	0.57	2.92	8	1	
1:A:139:TYR:CD1	1:A:140:ASP:N	0.57	2.72	10	1	



	A t and D	$C \log \left(\frac{1}{2}\right)$	\mathbf{D}^{\prime}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HE	0.57	1.40	1	1	
1:A:710:PRO:O	1:A:713:HIS:ND1	0.57	2.38	9	1	
1:A:436:ARG:NH1	1:A:499:ARG:HH12	0.57	1.98	10	1	
1:A:549:HIS:C	1:A:551:THR:H	0.57	2.03	10	1	
1:A:366:MET:SD	1:A:366:MET:N	0.57	2.78	1	1	
1:A:403:ASN:OD1	1:A:445:ARG:NH2	0.57	2.37	3	1	
1:A:314:ASN:N	1:A:314:ASN:ND2	0.57	2.51	4	1	
1:A:337:ILE:HB	1:A:388:ILE:HG22	0.57	1.77	5	1	
1:A:577:LEU:C	1:A:578:THR:HG23	0.57	2.20	5	1	
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CB	0.57	2.53	10	2	
1:A:413:LEU:HD22	1:A:413:LEU:N	0.57	2.15	7	1	
1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:HE	0.57	1.97	1	1	
1:A:198:LEU:H	1:A:198:LEU:CD2	0.57	2.12	4	1	
1:A:94:GLN:NE2	1:A:94:GLN:H	0.57	1.97	5	1	
1:A:247:ARG:HH11	1:A:247:ARG:H	0.57	1.43	7	1	
1:A:713:HIS:CG	1:A:714:ALA:N	0.57	2.72	9	1	
1:A:138:LEU:O	1:A:141:ALA:N	0.56	2.38	1	1	
1:A:568:GLU:N	1:A:568:GLU:OE1	0.56	2.38	1	1	
1:A:449:ILE:CD1	1:A:449:ILE:N	0.56	2.68	7	4	
1:A:624:HIS:O	1:A:625:ASN:CB	0.56	2.53	6	5	
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:CB	0.56	2.53	7	2	
1:A:357:ILE:H	1:A:358:PRO:CD	0.56	2.10	1	1	
1:A:109:ILE:O	1:A:501:LYS:NZ	0.56	2.33	2	1	
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CZ	0.56	2.58	8	1	
1:A:342:HIS:ND1	1:A:343:LEU:N	0.56	2.53	10	1	
1:A:12:ILE:N	1:A:12:ILE:CD1	0.56	2.65	1	2	
1:A:91:LEU:O	1:A:92:VAL:HG13	0.56	2.00	1	1	
1:A:120:PRO:C	1:A:122:MET:H	0.56	2.03	9	6	
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:CD1	0.56	2.63	1	4	
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:NH1	0.56	2.39	1	1	
1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:NE1	0.56	2.54	1	1	
1:A:427:GLU:OE2	1:A:456:ARG:NH1	0.56	2.38	4	1	
1:A:498:LEU:HD23	1:A:498:LEU:H	0.56	1.58	10	2	
1:A:394:HIS:CD2	1:A:397:GLN:NE2	0.56	2.73	5	1	
1:A:560:ILE:O	1:A:563:THR:HG22	0.56	1.99	5	1	
1:A:632:ARG:CD	1:A:632:ARG:H	0.56	2.12	9	2	
1:A:209:THR:HG22	1:A:210:LEU:H	0.56	1.59	6	1	
1:A:543:LEU:O	1:A:547:HIS:CE1	0.56	2.58	7	1	
1:A:375:LEU:O	1:A:378:GLN:CG	0.56	2.53	10	1	
1:A:494:LEU:HD13	1:A:495:PHE:N	0.56	2.15	2	1	
1:A:107:SER:O	1:A:111:SER:N	0.56	2.39	9	2	



A + 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:108:GLU:OE1	1:A:109:ILE:N	0.56	2.39	6	1	
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:CB	0.56	2.52	6	1	
1:A:346:ILE:N	1:A:346:ILE:CD1	0.56	2.68	7	2	
1:A:402:ALA:O	1:A:406:PHE:N	0.56	2.38	7	5	
1:A:624:HIS:O	1:A:624:HIS:ND1	0.56	2.38	2	1	
1:A:88:LEU:O	1:A:90:TYR:N	0.56	2.38	1	2	
1:A:241:GLN:O	1:A:257:ASN:ND2	0.56	2.39	4	1	
1:A:577:LEU:O	1:A:578:THR:OG1	0.56	2.22	5	1	
1:A:584:ASN:N	1:A:584:ASN:ND2	0.56	2.54	5	2	
1:A:313:LEU:HD12	1:A:313:LEU:H	0.56	1.61	6	1	
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CE1	0.56	2.99	8	1	
1:A:444:ASN:N	1:A:444:ASN:ND2	0.56	2.52	10	1	
1:A:542:THR:C	1:A:544:HIS:H	0.56	2.03	10	1	
1:A:597:ASP:OD1	1:A:597:ASP:N	0.56	2.38	1	1	
1:A:339:ASN:OD1	1:A:339:ASN:N	0.56	2.39	9	2	
1:A:552:ASN:HD22	1:A:553:VAL:N	0.56	1.98	2	2	
1:A:77:ASP:O	1:A:81:TYR:CD2	0.56	2.58	3	1	
1:A:313:LEU:O	1:A:314:ASN:O	0.56	2.24	4	3	
1:A:282:ASP:O	1:A:285:LEU:N	0.56	2.39	10	3	
1:A:506:LYS:CG	1:A:507:GLY:N	0.56	2.69	6	1	
1:A:125:ARG:HE	1:A:299:GLN:NE2	0.56	1.98	9	1	
1:A:355:ASN:N	1:A:355:ASN:ND2	0.56	2.51	10	1	
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:H	0.56	1.61	1	1	
1:A:134:ARG:NH2	1:A:237:HIS:CE1	0.56	2.74	7	1	
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:NH2	0.56	2.53	9	1	
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:HB3	0.56	2.01	1	3	
1:A:413:LEU:N	1:A:413:LEU:CD2	0.56	2.68	7	1	
1:A:334:LEU:HD12	1:A:335:LEU:N	0.56	2.15	9	1	
1:A:215:GLN:NE2	1:A:232:LYS:O	0.56	2.39	10	1	
1:A:248:ILE:O	1:A:250:LYS:N	0.56	2.39	7	6	
1:A:410:GLU:O	1:A:414:GLY:N	0.56	2.39	5	3	
1:A:637:ILE:HD13	1:A:637:ILE:N	0.56	2.14	2	1	
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:CG	0.56	2.53	5	1	
1:A:58:ASP:OD1	1:A:59:ARG:N	0.56	2.39	7	1	
1:A:339:ASN:C	1:A:339:ASN:ND2	0.55	2.58	1	1	
1:A:371:ALA:O	1:A:373:TYR:N	0.55	2.38	5	4	
1:A:290:LEU:O	1:A:292:GLY:N	0.55	2.39	10	2	
1:A:543:LEU:O	1:A:547:HIS:ND1	0.55	2.39	8	1	
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:ND2	0.55	2.39	9	1	
1:A:485:TYR:CZ	1:A:489:ASN:OD1	0.55	2.59	9	1	
1:A:406:PHE:CZ	1:A:422:MET:SD	0.55	2.99	2	1	



	A h o			Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:637:ILE:N	1:A:637:ILE:CD1	0.55	2.69	2	1	
1:A:709:GLU:N	1:A:709:GLU:OE1	0.55	2.39	5	2	
1:A:125:ARG:CD	1:A:125:ARG:H	0.55	2.14	6	1	
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:HB2	0.55	2.01	9	2	
1:A:27:GLY:O	1:A:376:LYS:NZ	0.55	2.39	10	1	
1:A:549:HIS:ND1	1:A:550:GLN:N	0.55	2.55	10	1	
1:A:440:ALA:C	1:A:442:ALA:N	0.55	2.59	3	7	
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ILE:N	0.55	2.40	4	1	
1:A:192:LYS:HZ2	1:A:199:ARG:HH21	0.55	1.44	4	1	
1:A:446:VAL:HG22	1:A:447:ALA:O	0.55	2.01	10	3	
1:A:267:THR:N	1:A:334:LEU:O	0.55	2.39	5	1	
1:A:390:LYS:O	1:A:391:PRO:O	0.55	2.25	6	3	
1:A:424:ILE:N	1:A:449:ILE:HG21	0.55	2.17	7	1	
1:A:59:ARG:O	1:A:59:ARG:NE	0.55	2.39	8	1	
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:CD1	0.55	2.60	9	1	
1:A:492:SER:O	1:A:496:CYS:SG	0.55	2.64	9	1	
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:N	0.55	2.54	10	1	
1:A:411:THR:HG23	1:A:412:MET:N	0.55	2.16	10	1	
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:HD3	0.55	2.16	1	2	
1:A:92:VAL:O	1:A:94:GLN:NE2	0.55	2.39	4	1	
1:A:234:ASN:HD21	1:A:552:ASN:ND2	0.55	1.99	4	1	
1:A:644:ASN:OD1	1:A:645:TRP:N	0.55	2.40	6	1	
1:A:116:GLN:NE2	1:A:534:TRP:NE1	0.55	2.54	7	1	
1:A:563:THR:HG22	1:A:564:GLU:H	0.55	1.60	8	2	
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:HD12	0.55	2.17	10	1	
1:A:108:GLU:OE2	1:A:387:TYR:CZ	0.55	2.59	2	1	
1:A:340:VAL:HG12	1:A:341:GLY:N	0.55	2.16	8	2	
1:A:67:TRP:NE1	1:A:81:TYR:CZ	0.55	2.75	5	1	
1:A:552:ASN:N	1:A:552:ASN:HD22	0.55	1.99	5	2	
1:A:124:ALA:HB1	1:A:614:GLY:O	0.55	2.02	8	1	
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CD1	0.55	2.60	8	1	
1:A:373:TYR:O	1:A:377:VAL:HG13	0.55	2.01	8	1	
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:HB3	0.55	2.01	9	1	
1:A:495:PHE:O	1:A:495:PHE:CD2	0.55	2.60	10	1	
1:A:452:GLY:O	1:A:454:LEU:N	0.55	2.40	1	1	
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:HD12	0.55	2.16	2	1	
1:A:699:LEU:O	1:A:701:VAL:N	0.55	2.39	3	2	
1:A:508:MET:SD	1:A:525:GLN:NE2	0.55	2.79	5	1	
1:A:436:ARG:HH21	1:A:437:SER:CB	0.55	2.15	9	1	
1:A:357:ILE:O	1:A:359:GLU:N	0.55	2.40	2	1	
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CE1	0.55	2.60	3	3	



	A h	(1,1)		Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:430:ARG:C	1:A:432:SER:H	0.55	2.05	5	1
1:A:267:THR:HG23	1:A:333:SER:OG	0.55	2.02	6	1
1:A:216:PHE:O	1:A:216:PHE:CD2	0.55	2.60	8	1
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:HB3	0.55	2.02	8	1
1:A:519:TYR:CE2	1:A:547:HIS:NE2	0.55	2.75	8	1
1:A:454:LEU:HD23	1:A:454:LEU:H	0.55	1.60	4	1
1:A:582:ALA:O	1:A:584:ASN:ND2	0.55	2.39	7	1
1:A:489:ASN:ND2	1:A:490:VAL:H	0.55	1.99	8	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:113:ALA:N	0.55	2.60	10	1
1:A:709:GLU:O	1:A:713:HIS:CD2	0.55	2.60	1	1
1:A:109:ILE:HD12	1:A:447:ALA:HB1	0.55	1.77	8	2
1:A:121:ALA:O	1:A:289:ASN:ND2	0.55	2.40	4	1
1:A:342:HIS:NE2	1:A:393:MET:SD	0.55	2.80	4	1
1:A:343:LEU:H	1:A:343:LEU:CD2	0.55	2.14	9	1
1:A:236:LEU:HD23	1:A:262:GLU:OE2	0.55	2.02	1	1
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:NH2	0.55	2.40	1	1
1:A:95:PRO:O	1:A:96:GLU:HB2	0.55	2.03	3	1
1:A:268:ILE:N	1:A:268:ILE:HD13	0.55	2.16	6	2
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:C	0.55	2.46	4	1
1:A:254:ALA:O	1:A:255:HIS:CB	0.55	2.54	9	3
1:A:108:GLU:CD	1:A:108:GLU:H	0.55	2.05	10	2
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:ND2	0.55	2.40	7	1
1:A:458:GLY:O	1:A:462:HIS:CD2	0.55	2.60	7	1
1:A:545:ALA:O	1:A:549:HIS:ND1	0.55	2.40	7	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CD1	0.55	3.00	8	1
1:A:133:ALA:N	1:A:333:SER:OG	0.55	2.40	9	1
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:OE1	0.54	2.40	1	1
1:A:439:ILE:C	1:A:441:GLN:H	0.54	2.06	1	8
1:A:454:LEU:O	1:A:456:ARG:N	0.54	2.40	8	4
1:A:329:LEU:O	1:A:331:GLY:N	0.54	2.40	2	3
1:A:372:LEU:HD12	1:A:372:LEU:O	0.54	2.01	2	1
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:OG1	0.54	2.40	2	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:66:GLU:N	0.54	2.40	3	1
1:A:180:LEU:O	1:A:182:ASN:N	0.54	2.40	10	2
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:ND2	0.54	2.40	3	1
1:A:248:ILE:HG23	1:A:249:GLY:N	0.54	2.17	8	2
1:A:539:THR:O	1:A:543:LEU:HD12	0.54	2.02	8	1
1:A:579:ILE:HD12	1:A:579:ILE:O	0.54	2.02	4	2
1:A:531:ASN:O	1:A:532:THR:HG23	0.54	2.02	2	1
1:A:355:ASN:O	1:A:357:ILE:N	0.54	2.40	9	2
1:A:632:ARG:O	1:A:635:LEU:N	0.54	2.40	6	1



Atom 1	Atom-2	${\rm Clash}({\rm \AA})$	Distance(Å)	Models		
Atom-1				Worst	Total	
1:A:247:ARG:HH11	1:A:247:ARG:N	0.54	2.00	7	1	
1:A:133:ALA:O	1:A:134:ARG:CB	0.54	2.55	9	1	
1:A:262:GLU:O	1:A:544:HIS:CE1	0.54	2.60	10	1	
1:A:269:LEU:CD1	1:A:336:PHE:O	0.54	2.56	1	1	
1:A:491:LEU:N	1:A:491:LEU:CD2	0.54	2.70	1	2	
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:N	0.54	2.40	2	2	
1:A:290:LEU:O	1:A:294:MET:SD	0.54	2.65	2	1	
1:A:522:LYS:O	1:A:547:HIS:CE1	0.54	2.60	3	1	
1:A:430:ARG:CG	1:A:431:THR:H	0.54	2.15	4	1	
1:A:405:LEU:N	1:A:405:LEU:CD1	0.54	2.71	5	1	
1:A:265:ILE:N	1:A:265:ILE:CD1	0.54	2.70	7	1	
1:A:105:ILE:C	1:A:107:SER:H	0.54	2.06	9	1	
1:A:439:ILE:O	1:A:446:VAL:HG21	0.54	2.03	9	1	
1:A:575:ASP:O	1:A:578:THR:HG22	0.54	2.03	9	1	
1:A:550:GLN:O	1:A:550:GLN:NE2	0.54	2.38	10	1	
1:A:265:ILE:HD13	1:A:265:ILE:H	0.54	1.62	3	2	
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG23	0.54	2.02	4	2	
1:A:421:LYS:O	1:A:422:MET:SD	0.54	2.65	6	1	
1:A:553:VAL:O	1:A:557:GLN:N	0.54	2.38	10	2	
1:A:424:ILE:N	1:A:448:PHE:HB2	0.54	2.15	8	1	
1:A:132:ASN:O	1:A:133:ALA:CB	0.54	2.51	10	2	
1:A:113:ALA:HB1	1:A:531:ASN:OD1	0.54	2.02	10	1	
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:N	0.54	2.40	1	2	
1:A:548:TYR:CD1	1:A:548:TYR:C	0.54	2.80	4	4	
1:A:705:ASN:C	1:A:707:TYR:H	0.54	2.06	2	2	
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.54	2.40	3	1	
1:A:65:ASP:CG	1:A:66:GLU:N	0.54	2.61	3	1	
1:A:530:ALA:O	1:A:557:GLN:NE2	0.54	2.41	4	1	
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CE1	0.54	2.60	8	2	
1:A:341:GLY:O	1:A:342:HIS:CD2	0.54	2.61	6	2	
1:A:403:ASN:CA	1:A:445:ARG:HH12	0.54	2.16	7	1	
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:CG	0.54	2.61	9	3	
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:N	0.54	2.41	3	3	
1:A:128:LEU:HD23	1:A:132:ASN:OD1	0.54	2.02	3	1	
1:A:257:ASN:ND2	1:A:258:ASP:N	0.54	2.55	4	1	
1:A:427:GLU:O	1:A:429:ARG:N	0.54	2.41	4	1	
1:A:444:ASN:ND2	1:A:445:ARG:H	0.54	2.00	6	2	
1:A:77:ASP:O	1:A:79:ALA:N	0.54	2.41	10	1	
1:A:517:ASP:OD1	1:A:518:MET:N	0.54	2.41	10	1	
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CE2	0.54	2.61	1	1	
1:A:351:ASP:OD1	1:A:355:ASN:N	0.54	2.41	1	1	



Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models		
				Worst	Total	
1:A:389:VAL:O	1:A:389:VAL:CG2	0.54	2.55	1	1	
1:A:138:LEU:N	1:A:259:VAL:O	0.54	2.35	2	2	
1:A:359:GLU:N	1:A:359:GLU:OE1	0.54	2.41	3	1	
1:A:513:ASP:O	1:A:515:MET:SD	0.54	2.66	7	2	
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:OE2	0.54	2.40	6	1	
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:CD2	0.54	2.61	6	1	
1:A:464:VAL:O	1:A:466:GLU:N	0.54	2.41	6	2	
1:A:648:HIS:CG	1:A:648:HIS:O	0.54	2.59	10	3	
1:A:151:GLU:CD	1:A:619:LYS:HZ1	0.54	2.06	8	1	
1:A:509:TRP:CZ3	1:A:534:TRP:O	0.54	2.60	8	1	
1:A:270:ASP:O	1:A:338:ARG:NH2	0.54	2.41	9	1	
1:A:4:THR:OG1	1:A:11:ARG:NE	0.54	2.41	3	1	
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:HG13	0.54	2.03	9	4	
1:A:637:ILE:O	1:A:638:SER:CB	0.54	2.56	9	2	
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLN:NE2	0.54	2.40	6	1	
1:A:341:GLY:C	1:A:342:HIS:CG	0.54	2.81	8	2	
1:A:140:ASP:N	1:A:140:ASP:OD1	0.54	2.41	9	1	
1:A:143:TYR:O	1:A:162:ARG:NH1	0.54	2.40	10	1	
1:A:605:GLY:O	1:A:609:ARG:NE	0.54	2.40	10	1	
1:A:68:HIS:CE1	1:A:81:TYR:OH	0.54	2.61	1	1	
1:A:403:ASN:HD21	1:A:443:ARG:CD	0.54	2.15	2	1	
1:A:431:THR:O	1:A:433:LEU:N	0.54	2.41	8	2	
1:A:615:ILE:CG2	1:A:616:GLY:N	0.54	2.71	3	1	
1:A:344:MET:O	1:A:345:THR:CB	0.54	2.56	9	3	
1:A:720:LYS:O	1:A:722:SER:N	0.54	2.41	4	1	
1:A:704:PRO:O	1:A:706:GLY:N	0.54	2.40	5	1	
1:A:136:GLY:O	1:A:138:LEU:N	0.54	2.41	6	1	
1:A:361:ILE:HG23	1:A:362:LEU:N	0.54	2.18	8	2	
1:A:173:PHE:O	1:A:549:HIS:CD2	0.54	2.61	8	1	
1:A:565:PHE:O	1:A:569:PHE:N	0.54	2.33	8	1	
1:A:606:TYR:CE2	1:A:610:TRP:CG	0.54	2.96	8	1	
1:A:105:ILE:CD1	1:A:106:ASP:H	0.54	2.16	9	1	
1:A:233:ASN:O	1:A:235:GLY:N	0.54	2.41	9	1	
1:A:419:THR:O	1:A:420:LEU:O	0.53	2.26	2	2	
1:A:436:ARG:HH21	1:A:492:SER:CB	0.53	2.16	2	1	
1:A:47:ALA:N	1:A:48:PRO:HD2	0.53	2.18	7	6	
1:A:584:ASN:ND2	1:A:587:TRP:CZ3	0.53	2.76	4	1	
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CD1	0.53	2.62	5	1	
1:A:408:ARG:O	1:A:408:ARG:NE	0.53	2.42	5	1	
1:A:116:GLN:HE22	1:A:450:ASN:HD21	0.53	1.45	7	1	
1:A:597:ASP:O	1:A:601:GLN:N	0.53	2.39	10	2	



Atom 1	Atom 2	$Clash(\hat{\lambda})$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$		Worst	Total	
1:A:121:ALA:C	1:A:123:ASN:H	0.53	2.05	8	1	
1:A:35:PHE:CE2	1:A:39:PHE:CE2	0.53	2.96	9	1	
1:A:362:LEU:H	1:A:362:LEU:CD2	0.53	2.16	10	1	
1:A:39:PHE:O	1:A:43:VAL:HG23	0.53	2.02	1	6	
1:A:44:HIS:NE2	1:A:351:ASP:OD2	0.53	2.41	1	1	
1:A:136:GLY:O	1:A:260:ILE:HG23	0.53	2.03	1	1	
1:A:150:GLN:O	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.40	1	1	
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:HD12	0.53	2.18	1	1	
1:A:318:HIS:O	1:A:319:TYR:CD1	0.53	2.62	1	1	
1:A:427:GLU:N	1:A:427:GLU:OE1	0.53	2.41	1	2	
1:A:123:ASN:O	1:A:125:ARG:N	0.53	2.41	2	1	
1:A:126:TYR:OH	1:A:632:ARG:N	0.53	2.41	2	1	
1:A:143:TYR:O	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.41	2	1	
1:A:273:ASP:OD1	1:A:636:ARG:NE	0.53	2.41	2	1	
1:A:486:GLU:O	1:A:489:ASN:ND2	0.53	2.41	8	2	
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:N	0.53	2.18	2	4	
1:A:94:GLN:O	1:A:96:GLU:N	0.53	2.41	3	1	
1:A:586:ASN:ND2	1:A:649:GLY:O	0.53	2.41	4	1	
1:A:18:ARG:NH2	1:A:19:PHE:CE1	0.53	2.76	5	1	
1:A:51:ARG:HH11	1:A:355:ASN:ND2	0.53	2.01	5	1	
1:A:90:TYR:OH	1:A:394:HIS:NE2	0.53	2.40	5	1	
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CD2	0.53	2.71	6	2	
1:A:430:ARG:O	1:A:432:SER:N	0.53	2.41	5	1	
1:A:553:VAL:O	1:A:557:GLN:NE2	0.53	2.41	5	2	
1:A:35:PHE:CZ	1:A:39:PHE:CZ	0.53	2.96	8	1	
1:A:128:LEU:CD2	1:A:132:ASN:HD21	0.53	2.17	8	1	
1:A:120:PRO:C	1:A:122:MET:N	0.53	2.62	10	6	
1:A:139:TYR:CE2	1:A:140:ASP:OD1	0.53	2.61	1	1	
1:A:296:GLY:O	1:A:313:LEU:HD21	0.53	2.04	1	1	
1:A:355:ASN:OD1	1:A:356:GLU:N	0.53	2.41	1	1	
1:A:145:SER:N	1:A:150:GLN:NE2	0.53	2.57	2	1	
1:A:222:ASP:OD1	1:A:225:ALA:N	0.53	2.41	2	1	
1:A:253:PRO:O	1:A:255:HIS:CE1	0.53	2.61	2	1	
1:A:337:ILE:HD12	1:A:337:ILE:N	0.53	2.18	3	1	
1:A:434:ASN:O	1:A:438:CYS:SG	0.53	2.66	3	1	
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:VAL:H	0.53	1.63	5	2	
1:A:297:THR:HG22	1:A:332:ARG:NH2	0.53	2.19	5	1	
1:A:491:LEU:O	1:A:493:GLY:N	0.53	2.41	10	1	
1:A:586:ASN:N	1:A:586:ASN:ND2	0.53	2.52	10	1	
1:A:450:ASN:OD1	1:A:503:GLN:NE2	0.53	2.41	1	1	
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:O	0.53	2.03	2	1	



Atom 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:406:PHE:CD2	1:A:410:GLU:OE1	0.53	2.62	3	1	
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:GLU:OE1	0.53	2.42	4	1	
1:A:293:LEU:HD13	1:A:335:LEU:HD22	0.53	1.80	4	1	
1:A:424:ILE:HD13	1:A:446:VAL:HG23	0.53	1.79	4	1	
1:A:297:THR:HG22	1:A:332:ARG:HH22	0.53	1.63	5	1	
1:A:385:SER:OG	1:A:420:LEU:N	0.53	2.42	9	2	
1:A:164:GLU:N	1:A:164:GLU:OE1	0.53	2.41	6	1	
1:A:68:HIS:CD2	1:A:464:VAL:HG12	0.53	2.38	10	1	
1:A:134:ARG:CD	1:A:134:ARG:N	0.53	2.71	10	1	
1:A:237:HIS:ND1	1:A:262:GLU:OE2	0.53	2.41	10	1	
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:N	0.53	2.42	6	2	
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:O	0.53	2.27	3	3	
1:A:148:ILE:HD11	1:A:166:VAL:HG22	0.53	1.81	2	1	
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CD2	0.53	2.62	2	1	
1:A:234:ASN:OD1	1:A:552:ASN:ND2	0.53	2.41	2	1	
1:A:330:HIS:O	1:A:330:HIS:ND1	0.53	2.42	2	1	
1:A:359:GLU:O	1:A:361:ILE:N	0.53	2.36	6	2	
1:A:450:ASN:ND2	1:A:534:TRP:HE1	0.53	2.01	2	1	
1:A:262:GLU:N	1:A:262:GLU:CD	0.53	2.62	7	2	
1:A:279:ASP:OD1	1:A:280:ALA:N	0.53	2.41	5	2	
1:A:68:HIS:NE2	1:A:81:TYR:OH	0.53	2.42	6	1	
1:A:147:ILE:HA	1:A:516:ALA:HB2	0.53	1.80	7	1	
1:A:622:ASP:OD1	1:A:626:VAL:N	0.53	2.41	8	1	
1:A:564:GLU:CD	1:A:564:GLU:H	0.53	2.07	9	1	
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CG	0.53	2.62	10	1	
1:A:653:LYS:O	1:A:657:GLN:NE2	0.53	2.41	10	1	
1:A:112:GLN:O	1:A:113:ALA:HB2	0.53	2.04	3	2	
1:A:213:PRO:O	1:A:215:GLN:N	0.53	2.42	4	4	
1:A:350:TRP:CZ3	1:A:356:GLU:OE2	0.53	2.62	3	1	
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:CG	0.53	2.47	7	3	
1:A:591:GLU:OE1	1:A:591:GLU:N	0.53	2.42	4	1	
1:A:123:ASN:OD1	1:A:610:TRP:CH2	0.53	2.61	5	1	
1:A:121:ALA:CB	1:A:270:ASP:O	0.53	2.57	6	1	
1:A:450:ASN:ND2	1:A:532:THR:OG1	0.53	2.41	6	1	
1:A:638:SER:OG	1:A:639:SER:N	0.53	2.41	8	1	
1:A:105:ILE:O	1:A:107:SER:N	0.53	2.41	9	1	
1:A:118:VAL:O	1:A:632:ARG:NH2	0.53	2.42	9	1	
1:A:158:TYR:CD1	1:A:158:TYR:N	0.53	2.76	1	1	
1:A:324:GLY:O	1:A:327:ILE:HG23	0.53	2.04	8	2	
1:A:410:GLU:OE2	1:A:445:ARG:NH2	0.53	2.41	2	1	
1:A:687:SER:OG	1:A:690:PHE:CE2	0.53	2.62	5	1	



A t am 1			Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:41:GLU:OE1	1:A:41:GLU:N	0.53	2.41	9	1	
1:A:717:LEU:O	1:A:721:GLU:N	0.53	2.41	10	1	
1:A:427:GLU:CD	1:A:427:GLU:H	0.53	2.07	1	3	
1:A:321:ALA:O	1:A:323:ASP:N	0.53	2.42	3	1	
1:A:575:ASP:O	1:A:577:LEU:N	0.53	2.41	3	2	
1:A:242:ILE:HG23	1:A:255:HIS:O	0.53	2.04	4	1	
1:A:584:ASN:CB	1:A:587:TRP:CE3	0.53	2.92	4	1	
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CZ	0.53	3.02	8	1	
1:A:316:ASP:OD1	1:A:332:ARG:NH1	0.53	2.42	10	1	
1:A:544:HIS:O	1:A:547:HIS:N	0.53	2.36	10	1	
1:A:650:ILE:N	1:A:650:ILE:CD1	0.53	2.71	7	2	
1:A:410:GLU:O	1:A:415:MET:N	0.53	2.37	3	1	
1:A:715:TRP:O	1:A:719:GLU:N	0.53	2.41	3	1	
1:A:361:ILE:O	1:A:364:GLY:N	0.53	2.42	4	1	
1:A:637:ILE:CG1	1:A:638:SER:H	0.53	2.17	5	1	
1:A:251:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.53	2.42	7	1	
1:A:455:ASP:OD2	1:A:636:ARG:NH2	0.53	2.41	7	1	
1:A:498:LEU:HD22	1:A:499:ARG:N	0.53	2.19	8	1	
1:A:393:MET:SD	1:A:394:HIS:N	0.53	2.82	9	1	
1:A:584:ASN:ND2	1:A:586:ASN:OD1	0.53	2.42	9	1	
1:A:626:VAL:HG12	1:A:627:ALA:H	0.53	1.63	10	1	
1:A:405:LEU:O	1:A:408:ARG:N	0.53	2.42	4	3	
1:A:139:TYR:CG	1:A:140:ASP:N	0.53	2.77	2	2	
1:A:262:GLU:N	1:A:262:GLU:OE1	0.53	2.39	7	2	
1:A:317:ARG:O	1:A:319:TYR:CE1	0.53	2.62	2	1	
1:A:234:ASN:N	1:A:234:ASN:OD1	0.53	2.41	3	1	
1:A:575:ASP:N	1:A:575:ASP:OD1	0.53	2.40	3	1	
1:A:695:ASP:OD2	1:A:715:TRP:CZ2	0.53	2.62	3	1	
1:A:514:LEU:N	1:A:514:LEU:HD22	0.53	2.19	7	2	
1:A:116:GLN:OE1	1:A:534:TRP:CZ2	0.53	2.62	7	1	
1:A:346:ILE:N	1:A:346:ILE:HD12	0.53	2.18	8	1	
1:A:649:GLY:O	1:A:651:LEU:N	0.53	2.41	8	1	
1:A:363:ASP:OD1	1:A:363:ASP:N	0.53	2.42	9	1	
1:A:119:VAL:HG22	1:A:269:LEU:HD23	0.52	1.81	1	2	
1:A:278:VAL:O	1:A:278:VAL:CG1	0.52	2.56	8	2	
1:A:537:SER:OG	1:A:629:MET:SD	0.52	2.68	9	2	
1:A:121:ALA:CB	1:A:270:ASP:OD1	0.52	2.57	2	2	
1:A:175:ASP:O	1:A:179:PRO:N	0.52	2.42	3	1	
1:A:416:ALA:O	1:A:418:ASN:N	0.52	2.42	3	2	
1:A:25:LEU:N	1:A:26:PRO:CD	0.52	2.72	9	6	
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:VAL:N	0.52	2.18	4	1	



	A h O	(1, 1, (3))	$\operatorname{Distance}(\operatorname{\AA})$	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:343:LEU:C	1:A:345:THR:H	0.52	2.07	6	1	
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:N	0.52	2.42	9	2	
1:A:237:HIS:CD2	1:A:237:HIS:N	0.52	2.77	7	1	
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:O	0.52	2.04	8	1	
1:A:632:ARG:CD	1:A:632:ARG:N	0.52	2.72	9	1	
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:ND2	0.52	2.42	10	1	
1:A:200:ILE:CD1	1:A:210:LEU:HD21	0.52	2.35	1	1	
1:A:298:LEU:N	1:A:298:LEU:CD1	0.52	2.73	1	3	
1:A:600:VAL:HG11	1:A:660:LEU:CD2	0.52	2.34	1	1	
1:A:7:GLN:OE1	1:A:8:SER:N	0.52	2.42	2	1	
1:A:415:MET:O	1:A:416:ALA:CB	0.52	2.58	2	2	
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:CD2	0.52	2.73	3	1	
1:A:51:ARG:HH11	1:A:355:ASN:HD21	0.52	1.47	5	1	
1:A:128:LEU:HD23	1:A:128:LEU:O	0.52	2.04	5	2	
1:A:422:MET:N	1:A:447:ALA:HB2	0.52	2.20	5	1	
1:A:35:PHE:O	1:A:37:ARG:N	0.52	2.42	7	1	
1:A:123:ASN:OD1	1:A:124:ALA:N	0.52	2.42	10	2	
1:A:393:MET:O	1:A:429:ARG:NH2	0.52	2.40	10	1	
1:A:531:ASN:O	1:A:550:GLN:NE2	0.52	2.42	10	1	
1:A:549:HIS:O	1:A:551:THR:N	0.52	2.42	10	1	
1:A:291:LEU:HD23	1:A:291:LEU:O	0.52	2.03	1	1	
1:A:108:GLU:OE2	1:A:387:TYR:CE1	0.52	2.62	2	1	
1:A:643:ALA:O	1:A:646:LEU:N	0.52	2.41	3	1	
1:A:38:ASN:ND2	1:A:39:PHE:N	0.52	2.57	4	1	
1:A:243:ASP:OD1	1:A:244:ALA:N	0.52	2.42	10	2	
1:A:488:ASN:ND2	1:A:576:LEU:HD21	0.52	2.19	5	1	
1:A:37:ARG:NH2	1:A:41:GLU:OE1	0.52	2.41	6	1	
1:A:373:TYR:CD2	1:A:377:VAL:HG11	0.52	2.40	8	1	
1:A:494:LEU:O	1:A:497:GLY:N	0.52	2.40	8	1	
1:A:522:LYS:NZ	1:A:522:LYS:CB	0.52	2.72	8	1	
1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:CD	0.52	2.16	9	1	
1:A:263:ALA:HB1	1:A:541:ALA:CB	0.52	2.35	10	1	
1:A:285:LEU:N	1:A:285:LEU:CD1	0.52	2.73	10	1	
1:A:44:HIS:CE1	1:A:351:ASP:OD2	0.52	2.63	1	1	
1:A:451:THR:OG1	1:A:534:TRP:NE1	0.52	2.42	2	1	
1:A:456:ARG:O	1:A:460:GLU:N	0.52	2.41	6	2	
1:A:177:SER:O	1:A:549:HIS:CE1	0.52	2.61	5	1	
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CE1	0.52	2.62	5	1	
1:A:182:ASN:N	1:A:182:ASN:OD1	0.52	2.41	7	1	
1:A:436:ARG:NH2	1:A:437:SER:OG	0.52	2.42	9	1	
1:A:278:VAL:HG23	1:A:717:LEU:CD2	0.52	2.35	10	1	


Atom 1	Atom 2	$Clack(\lambda)$	Distance(Å)	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:57:ARG:NE	1:A:57:ARG:H	0.52	2.01	1	1
1:A:534:TRP:CD1	1:A:534:TRP:N	0.52	2.77	2	1
1:A:691:LYS:NZ	1:A:691:LYS:CB	0.52	2.73	2	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:107:SER:N	0.52	2.42	10	2
1:A:271:CYS:O	1:A:273:ASP:N	0.52	2.43	9	3
1:A:704:PRO:C	1:A:706:GLY:H	0.52	2.07	5	1
1:A:70:SER:O	1:A:71:ASN:ND2	0.52	2.42	6	1
1:A:583:GLU:OE2	1:A:644:ASN:ND2	0.52	2.43	6	1
1:A:635:LEU:O	1:A:637:ILE:N	0.52	2.43	7	1
1:A:239:GLU:N	1:A:239:GLU:OE1	0.52	2.43	9	1
1:A:433:LEU:N	1:A:433:LEU:CD1	0.52	2.72	9	1
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:NZ	0.52	2.73	9	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:GLN:OE1	0.52	2.27	1	1
1:A:254:ALA:C	1:A:256:ILE:H	0.52	2.07	2	5
1:A:410:GLU:CD	1:A:445:ARG:NH2	0.52	2.63	2	1
1:A:505:GLY:O	1:A:532:THR:N	0.52	2.42	2	1
1:A:276:ALA:O	1:A:713:HIS:NE2	0.52	2.43	4	1
1:A:606:TYR:CE2	1:A:631:ASP:O	0.52	2.63	4	1
1:A:706:GLY:O	1:A:708:THR:N	0.52	2.41	4	1
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:CD2	0.52	2.62	5	1
1:A:449:ILE:O	1:A:503:GLN:O	0.52	2.28	5	1
1:A:640:GLN:O	1:A:644:ASN:ND2	0.52	2.43	5	2
1:A:450:ASN:O	1:A:452:GLY:N	0.52	2.42	7	1
1:A:570:GLU:N	1:A:570:GLU:OE1	0.52	2.42	8	1
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:N	0.52	2.42	9	1
1:A:227:THR:O	1:A:228:CYS:SG	0.52	2.67	10	1
1:A:541:ALA:O	1:A:543:LEU:N	0.52	2.43	10	1
1:A:188:VAL:CG1	1:A:189:VAL:N	0.52	2.72	7	7
1:A:279:ASP:OD1	1:A:279:ASP:N	0.52	2.42	1	1
1:A:547:HIS:ND1	1:A:547:HIS:N	0.52	2.57	1	2
1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:CE2	0.52	2.77	1	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:534:TRP:CE2	0.52	2.54	2	1
1:A:150:GLN:NE2	1:A:162:ARG:CZ	0.52	2.72	3	1
1:A:204:ASN:O	1:A:204:ASN:ND2	0.52	2.39	3	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:TYR:H	0.52	1.64	5	1
1:A:632:ARG:NH2	1:A:709:GLU:OE2	0.52	2.43	6	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:OG	0.52	2.42	7	1
1:A:601:GLN:NE2	1:A:622:ASP:OD2	0.52	2.42	7	1
1:A:496:CYS:C	1:A:498:LEU:HD13	0.52	2.25	8	1
1:A:583:GLU:CD	1:A:583:GLU:H	0.52	2.08	9	1
1:A:95:PRO:O	1:A:96:GLU:CB	0.52	2.56	3	2



A 4 1		$C = a \cdot (\hat{\lambda})$	$\mathbf{D}^{\mathbf{i}}_{\mathbf{i}}$	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:426:ASP:O	1:A:427:GLU:O	0.52	2.28	1	1	
1:A:511:MET:O	1:A:511:MET:SD	0.52	2.67	1	1	
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:CG1	0.52	2.57	1	2	
1:A:44:HIS:CD2	1:A:44:HIS:O	0.52	2.62	2	2	
1:A:253:PRO:O	1:A:255:HIS:CD2	0.52	2.61	2	1	
1:A:254:ALA:O	1:A:256:ILE:N	0.52	2.42	7	3	
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ALA:N	0.52	2.20	2	1	
1:A:161:GLN:CD	1:A:161:GLN:H	0.52	2.08	4	1	
1:A:650:ILE:O	1:A:650:ILE:CG2	0.52	2.58	7	2	
1:A:557:GLN:NE2	1:A:557:GLN:H	0.52	2.01	6	1	
1:A:115:PRO:CG	1:A:545:ALA:HB2	0.52	2.35	8	1	
1:A:355:ASN:ND2	1:A:355:ASN:O	0.52	2.43	10	1	
1:A:273:ASP:OD1	1:A:273:ASP:N	0.52	2.42	4	2	
1:A:450:ASN:HD22	1:A:534:TRP:HE1	0.52	1.46	2	1	
1:A:233:ASN:HD22	1:A:233:ASN:H	0.52	1.48	3	1	
1:A:486:GLU:O	1:A:489:ASN:OD1	0.52	2.28	3	1	
1:A:564:GLU:CD	1:A:565:PHE:N	0.52	2.63	4	1	
1:A:96:GLU:CD	1:A:96:GLU:H	0.52	2.09	5	1	
1:A:609:ARG:NE	1:A:613:GLN:HE21	0.52	2.02	5	1	
1:A:485:TYR:CE2	1:A:489:ASN:OD1	0.52	2.63	9	1	
1:A:85:LEU:O	1:A:89:GLY:CA	0.52	2.58	9	4	
1:A:296:GLY:O	1:A:313:LEU:CD2	0.52	2.58	1	1	
1:A:518:MET:O	1:A:521:GLN:N	0.52	2.42	8	3	
1:A:88:LEU:HD23	1:A:88:LEU:O	0.52	2.04	5	4	
1:A:93:PRO:C	1:A:94:GLN:NE2	0.52	2.63	4	1	
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:N	0.52	2.42	6	1	
1:A:465:MET:SD	1:A:465:MET:O	0.52	2.68	6	1	
1:A:711:LEU:HD12	1:A:711:LEU:C	0.52	2.25	7	1	
1:A:485:TYR:CE2	1:A:489:ASN:ND2	0.52	2.78	9	1	
1:A:436:ARG:CZ	1:A:499:ARG:HH12	0.52	2.17	10	1	
1:A:628:LEU:N	1:A:628:LEU:CD2	0.52	2.73	10	1	
1:A:11:ARG:C	1:A:12:ILE:HD13	0.51	2.26	1	1	
1:A:125:ARG:HE	1:A:125:ARG:N	0.51	2.03	1	1	
1:A:207:GLU:CD	1:A:207:GLU:H	0.51	2.08	1	2	
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:C	0.51	2.83	2	2	
1:A:259:VAL:C	1:A:260:ILE:HD12	0.51	2.25	9	4	
1:A:181:GLU:N	1:A:210:LEU:O	0.51	2.41	3	2	
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:O	0.51	2.28	9	2	
1:A:697:ILE:HD12	1:A:697:ILE:N	0.51	2.20	3	1	
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:VAL:N	0.51	2.41	4	1	
1:A:512:PRO:O	1:A:514:LEU:N	0.51	2.43	9	2	



Atom 1	Atom 2	$Clach(\lambda)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:294:MET:SD	1:A:370:ILE:O	0.51	2.68	6	1	
1:A:104:GLY:O	1:A:106:ASP:N	0.51	2.42	7	1	
1:A:485:TYR:CD1	1:A:485:TYR:C	0.51	2.83	7	1	
1:A:257:ASN:C	1:A:257:ASN:ND2	0.51	2.64	9	1	
1:A:445:ARG:O	1:A:446:VAL:O	0.51	2.28	2	2	
1:A:191:PHE:CD1	1:A:229:ILE:CD1	0.51	2.93	2	1	
1:A:565:PHE:O	1:A:567:ALA:N	0.51	2.43	6	4	
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:N	0.51	2.74	2	2	
1:A:132:ASN:O	1:A:132:ASN:ND2	0.51	2.42	6	2	
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:GLY:N	0.51	2.02	4	1	
1:A:267:THR:O	1:A:336:PHE:N	0.51	2.39	5	1	
1:A:56:GLU:OE1	1:A:56:GLU:N	0.51	2.43	6	1	
1:A:244:ALA:O	1:A:246:GLY:N	0.51	2.43	8	2	
1:A:534:TRP:CD1	1:A:535:VAL:N	0.51	2.77	6	1	
1:A:434:ASN:CG	1:A:436:ARG:NH2	0.51	2.64	9	1	
1:A:218:GLY:C	1:A:219:TYR:CG	0.51	2.83	10	1	
1:A:108:GLU:OE1	1:A:108:GLU:N	0.51	2.43	1	1	
1:A:276:ALA:HB1	1:A:713:HIS:CD2	0.51	2.40	1	1	
1:A:339:ASN:CB	1:A:389:VAL:O	0.51	2.58	1	1	
1:A:456:ARG:NH1	1:A:485:TYR:CE1	0.51	2.77	1	1	
1:A:600:VAL:O	1:A:603:ILE:N	0.51	2.43	10	2	
1:A:281:GLU:N	1:A:281:GLU:OE1	0.51	2.43	2	1	
1:A:337:ILE:N	1:A:337:ILE:CD1	0.51	2.73	3	1	
1:A:626:VAL:CG1	1:A:627:ALA:N	0.51	2.73	3	2	
1:A:609:ARG:CZ	1:A:613:GLN:OE1	0.51	2.59	4	1	
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:HD22	0.51	2.20	6	2	
1:A:418:ASN:N	1:A:418:ASN:HD22	0.51	2.04	7	1	
1:A:108:GLU:O	1:A:112:GLN:N	0.51	2.40	9	1	
1:A:225:ALA:N	1:A:226:PRO:CD	0.51	2.73	9	2	
1:A:68:HIS:CD2	1:A:464:VAL:CG1	0.51	2.94	10	1	
1:A:119:VAL:HG21	1:A:269:LEU:CD2	0.51	2.35	2	1	
1:A:351:ASP:OD1	1:A:352:SER:N	0.51	2.44	3	2	
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:OG1	0.51	2.24	4	2	
1:A:525:GLN:NE2	1:A:530:ALA:CB	0.51	2.74	4	1	
1:A:538:PRO:O	1:A:541:ALA:N	0.51	2.42	4	2	
1:A:294:MET:O	1:A:294:MET:SD	0.51	2.68	5	1	
1:A:488:ASN:O	1:A:492:SER:N	0.51	2.44	10	2	
1:A:669:GLN:O	1:A:669:GLN:NE2	0.51	2.43	7	2	
1:A:690:PHE:O	1:A:694:SER:N	0.51	2.42	5	1	
1:A:489:ASN:O	1:A:493:GLY:N	0.51	2.42	6	1	
1:A:89:GLY:O	1:A:90:TYR:CG	0.51	2.63	7	1	



A 4 amo 1	Atom 2	$C = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:57:ARG:NH2	1:A:427:GLU:O	0.51	2.43	8	1
1:A:121:ALA:C	1:A:123:ASN:N	0.51	2.63	8	1
1:A:654:GLU:N	1:A:654:GLU:OE1	0.51	2.44	8	1
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:HH12	0.51	2.03	9	1
1:A:671:ASN:ND2	1:A:671:ASN:O	0.51	2.43	9	1
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:HG3	0.51	1.82	9	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:113:ALA:N	0.51	2.74	10	1
1:A:321:ALA:N	1:A:325:SER:O	0.51	2.41	10	1
1:A:427:GLU:OE1	1:A:427:GLU:N	0.51	2.43	10	1
1:A:557:GLN:O	1:A:557:GLN:NE2	0.51	2.43	1	1
1:A:126:TYR:O	1:A:130:ALA:HB3	0.51	2.05	2	1
1:A:215:GLN:O	1:A:232:LYS:N	0.51	2.38	3	1
1:A:439:ILE:HD12	1:A:498:LEU:HD21	0.51	1.83	3	1
1:A:237:HIS:ND1	1:A:262:GLU:OE1	0.51	2.44	4	1
1:A:406:PHE:CE2	1:A:410:GLU:OE1	0.51	2.64	5	1
1:A:511:MET:N	1:A:512:PRO:HD2	0.51	2.21	5	1
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:544:HIS:CG	0.51	2.24	5	1
1:A:416:ALA:O	1:A:417:PRO:O	0.51	2.28	8	1
1:A:604:LEU:HD13	1:A:667:VAL:CG2	0.51	2.36	8	1
1:A:291:LEU:O	1:A:294:MET:N	0.51	2.42	10	1
1:A:239:GLU:OE2	1:A:239:GLU:N	0.51	2.43	1	1
1:A:15:ASN:ND2	1:A:284:ILE:HD13	0.51	2.21	3	1
1:A:290:LEU:HD12	1:A:290:LEU:N	0.51	2.21	4	1
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:CD2	0.51	2.64	4	1
1:A:123:ASN:OD1	1:A:610:TRP:CZ2	0.51	2.64	5	1
1:A:481:TRP:CD1	1:A:481:TRP:N	0.51	2.76	5	1
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:CD2	0.51	2.73	6	2
1:A:338:ARG:HH22	1:A:454:LEU:HD13	0.51	1.65	6	1
1:A:410:GLU:CG	1:A:420:LEU:HD13	0.51	2.35	6	1
1:A:715:TRP:CZ3	1:A:719:GLU:OE2	0.51	2.63	6	1
1:A:340:VAL:CG1	1:A:341:GLY:N	0.51	2.73	8	1
1:A:263:ALA:HB1	1:A:541:ALA:HB3	0.51	1.83	10	1
1:A:271:CYS:SG	1:A:636:ARG:CD	0.51	2.99	1	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:CG2	0.51	2.58	2	2
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:O	0.51	2.28	9	2
1:A:399:VAL:CG1	1:A:403:ASN:ND2	0.51	2.74	3	1
1:A:410:GLU:CG	1:A:411:THR:N	0.51	2.74	3	2
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:HG23	0.51	2.03	3	1
1:A:192:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HE	0.51	2.04	4	1
1:A:509:TRP:CD1	1:A:509:TRP:N	0.51	2.72	4	2
1:A:603:ILE:CG2	1:A:604:LEU:N	0.51	2.73	9	1



	A + 0	(1,1)	\mathbf{D}^{\prime}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:312:LYS:CB	1:A:312:LYS:NZ	0.51	2.74	1	2	
1:A:403:ASN:HD22	1:A:441:GLN:HE22	0.51	1.49	1	1	
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:C	0.51	2.49	7	2	
1:A:415:MET:O	1:A:415:MET:SD	0.51	2.68	2	1	
1:A:436:ARG:NE	1:A:492:SER:OG	0.51	2.43	2	1	
1:A:356:GLU:O	1:A:357:ILE:C	0.51	2.48	6	2	
1:A:498:LEU:HD13	1:A:502:ALA:HB2	0.51	1.83	5	1	
1:A:593:GLN:NE2	1:A:655:GLN:OE1	0.51	2.43	5	1	
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:NH1	0.51	2.43	6	1	
1:A:343:LEU:O	1:A:345:THR:N	0.51	2.43	6	1	
1:A:504:ILE:O	1:A:504:ILE:HG22	0.51	2.05	8	3	
1:A:429:ARG:NH2	1:A:460:GLU:OE2	0.51	2.44	8	1	
1:A:356:GLU:CD	1:A:356:GLU:H	0.51	2.09	9	1	
1:A:600:VAL:CG2	1:A:601:GLN:N	0.51	2.74	9	1	
1:A:176:GLU:O	1:A:548:TYR:CD1	0.51	2.63	10	1	
1:A:592:ILE:HG23	1:A:593:GLN:N	0.51	2.20	10	1	
1:A:487:ARG:O	1:A:490:VAL:N	0.51	2.44	1	1	
1:A:540:ALA:O	1:A:544:HIS:CD2	0.51	2.64	2	1	
1:A:132:ASN:O	1:A:134:ARG:N	0.51	2.44	3	1	
1:A:242:ILE:O	1:A:243:ASP:C	0.51	2.47	4	2	
1:A:394:HIS:NE2	1:A:438:CYS:CB	0.51	2.73	4	1	
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:OE1	0.51	2.39	5	1	
1:A:148:ILE:HG22	1:A:162:ARG:HH22	0.51	1.66	6	1	
1:A:325:SER:O	1:A:326:GLU:HB2	0.51	2.06	8	1	
1:A:183:GLY:O	1:A:184:SER:HB2	0.51	2.05	10	1	
1:A:637:ILE:CG2	1:A:641:HIS:NE2	0.51	2.73	10	1	
1:A:189:VAL:CG2	1:A:190:ALA:N	0.51	2.74	9	8	
1:A:28:THR:O	1:A:30:LEU:N	0.51	2.43	3	2	
1:A:233:ASN:O	1:A:233:ASN:ND2	0.51	2.44	3	1	
1:A:524:ASP:OD1	1:A:524:ASP:N	0.51	2.44	3	2	
1:A:134:ARG:N	1:A:333:SER:OG	0.51	2.44	4	1	
1:A:494:LEU:HD12	1:A:495:PHE:N	0.51	2.21	4	1	
1:A:459:ASP:OD1	1:A:459:ASP:N	0.51	2.43	5	1	
1:A:488:ASN:CG	1:A:489:ASN:N	0.51	2.65	5	1	
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:CG2	0.51	2.59	6	1	
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:SD	0.51	2.69	7	1	
1:A:144:GLY:O	1:A:619:LYS:NZ	0.51	2.42	7	2	
1:A:118:VAL:C	1:A:632:ARG:NH2	0.51	2.63	9	1	
1:A:147:ILE:HG22	1:A:147:ILE:O	0.51	2.06	10	1	
1:A:564:GLU:O	1:A:566:ASN:N	0.51	2.44	10	1	
1:A:47:ALA:HB1	1:A:355:ASN:HD21	0.50	1.67	1	1	



Atom 1	A + 0	$Clash(\lambda)$	Distance (&)	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Ulash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:119:VAL:CG2	1:A:269:LEU:HD23	0.50	2.35	1	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:GLY:N	0.50	2.74	2	2
1:A:137:SER:OG	1:A:139:TYR:CD2	0.50	2.60	2	1
1:A:379:LYS:O	1:A:380:ASN:ND2	0.50	2.45	2	2
1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:N	0.50	2.40	4	3
1:A:574:ASP:OD1	1:A:574:ASP:N	0.50	2.43	3	3
1:A:200:ILE:HD13	1:A:200:ILE:H	0.50	1.65	4	1
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:C	0.50	2.49	10	2
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CG	0.50	2.64	5	1
1:A:134:ARG:NE	1:A:332:ARG:O	0.50	2.42	6	1
1:A:336:PHE:CE1	1:A:389:VAL:HG13	0.50	2.41	6	1
1:A:65:ASP:N	1:A:65:ASP:OD1	0.50	2.44	7	2
1:A:487:ARG:O	1:A:489:ASN:ND2	0.50	2.44	8	1
1:A:131:ALA:O	1:A:333:SER:OG	0.50	2.29	9	1
1:A:32:ALA:O	1:A:35:PHE:N	0.50	2.44	10	1
1:A:121:ALA:O	1:A:286:LEU:HD21	0.50	2.06	1	1
1:A:202:LEU:O	1:A:204:ASN:N	0.50	2.43	6	6
1:A:175:ASP:OD1	1:A:176:GLU:N	0.50	2.43	3	1
1:A:316:ASP:OD1	1:A:317:ARG:N	0.50	2.41	3	1
1:A:601:GLN:NE2	1:A:622:ASP:OD1	0.50	2.44	3	1
1:A:378:GLN:O	1:A:378:GLN:CG	0.50	2.58	4	1
1:A:514:LEU:N	1:A:514:LEU:CD2	0.50	2.74	7	2
1:A:323:ASP:OD1	1:A:324:GLY:N	0.50	2.44	5	1
1:A:257:ASN:OD1	1:A:258:ASP:N	0.50	2.44	7	1
1:A:530:ALA:O	1:A:553:VAL:HG11	0.50	2.06	8	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:235:GLY:O	0.50	2.44	1	1
1:A:716:ARG:O	1:A:719:GLU:N	0.50	2.43	1	1
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:GLY:N	0.50	2.43	4	1
1:A:457:THR:O	1:A:459:ASP:N	0.50	2.44	4	2
1:A:465:MET:SD	1:A:640:GLN:OE1	0.50	2.69	4	1
1:A:123:ASN:HD21	1:A:716:ARG:HH22	0.50	1.49	5	1
1:A:389:VAL:HG12	1:A:423:GLY:H	0.50	1.67	5	1
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HG3	0.50	1.84	8	2
1:A:242:ILE:H	1:A:242:ILE:CD1	0.50	2.20	6	1
1:A:21:ASP:O	1:A:26:PRO:CG	0.50	2.59	7	1
1:A:242:ILE:N	1:A:242:ILE:HD13	0.50	2.21	7	2
1:A:345:THR:O	1:A:346:ILE:HG23	0.50	2.07	9	1
1:A:549:HIS:CG	1:A:550:GLN:N	0.50	2.78	9	1
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:CD2	0.50	2.74	10	1
1:A:455:ASP:OD1	1:A:455:ASP:N	0.50	2.45	10	1

Contin

1:A:337:ILE:HG22

Continued on next page...

1

1

1.65



0.50

1:A:338:ARG:H

	Atom 2	$Clack(\hat{\lambda})$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:503:GLN:C	1:A:504:ILE:HD12	0.50	2.27	3	2
1:A:234:ASN:ND2	1:A:548:TYR:CE2	0.50	2.79	6	1
1:A:696:LEU:O	1:A:696:LEU:HD23	0.50	2.06	6	1
1:A:9:ARG:NH1	1:A:44:HIS:CG	0.50	2.79	9	1
1:A:61:GLN:NE2	1:A:430:ARG:NH2	0.50	2.58	10	1
1:A:345:THR:HG22	1:A:346:ILE:N	0.50	2.19	10	1
1:A:668:ASP:O	1:A:671:ASN:N	0.50	2.36	10	1
1:A:441:GLN:O	1:A:441:GLN:NE2	0.50	2.45	1	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:GLN:N	0.50	2.44	2	1
1:A:494:LEU:C	1:A:494:LEU:CD1	0.50	2.80	2	1
1:A:512:PRO:O	1:A:515:MET:SD	0.50	2.69	4	2
1:A:290:LEU:HD13	1:A:290:LEU:O	0.50	2.06	3	2
1:A:646:LEU:HD13	1:A:646:LEU:O	0.50	2.07	3	2
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:OG	0.50	2.29	4	2
1:A:444:ASN:ND2	1:A:444:ASN:N	0.50	2.56	6	1
1:A:339:ASN:N	1:A:339:ASN:HD22	0.50	2.04	7	1
1:A:713:HIS:C	1:A:713:HIS:CD2	0.50	2.85	9	1
1:A:336:PHE:CE2	1:A:387:TYR:CD2	0.50	2.99	10	1
1:A:526:LEU:HD11	1:A:551:THR:O	0.50	2.06	10	1
1:A:377:VAL:C	1:A:379:LYS:N	0.50	2.65	9	4
1:A:349:ILE:HD11	1:A:359:GLU:OE1	0.50	2.06	2	1
1:A:630:GLU:N	1:A:630:GLU:OE1	0.50	2.45	2	1
1:A:448:PHE:C	1:A:448:PHE:CD1	0.50	2.83	3	1
1:A:137:SER:O	1:A:141:ALA:CB	0.50	2.60	9	2
1:A:237:HIS:ND1	1:A:237:HIS:N	0.50	2.58	4	2
1:A:361:ILE:O	1:A:363:ASP:N	0.50	2.45	9	2
1:A:557:GLN:N	1:A:557:GLN:OE1	0.50	2.45	4	1
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:544:HIS:CB	0.50	2.19	5	1
1:A:489:ASN:OD1	1:A:490:VAL:N	0.50	2.43	6	1
1:A:500:GLY:O	1:A:501:LYS:CG	0.50	2.60	6	1
1:A:553:VAL:HG23	1:A:554:GLN:N	0.50	2.22	8	1
1:A:434:ASN:ND2	1:A:436:ARG:NH1	0.50	2.60	9	1
1:A:388:ILE:HD13	1:A:388:ILE:N	0.50	2.22	1	1
1:A:21:ASP:HA	1:A:25:LEU:HD12	0.50	1.83	2	1
1:A:503:GLN:N	1:A:503:GLN:CD	0.50	2.65	6	4
1:A:198:LEU:CD1	1:A:198:LEU:N	0.50	2.75	9	4
1:A:442:ALA:HA	1:A:446:VAL:HG11	0.50	1.82	10	3
1:A:513:ASP:OD1	1:A:513:ASP:N	0.50	2.44	4	1
1:A:704:PRO:O	1:A:708:THR:OG1	0.50	2.29	4	1
1:A:340:VAL:CG2	1:A:341:GLY:N	0.50	2.75	5	1
1:A:581:VAL:HG22	1:A:582:ALA:N	0.50	2.22	5	1



	A + 2	$C_{1} = c_{1} \left(\begin{pmatrix} \lambda \\ \lambda \end{pmatrix} \right)$	\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:9:ARG:HH11	1:A:44:HIS:CG	0.50	2.25	9	1	
1:A:450:ASN:O	1:A:451:THR:CB	0.50	2.60	10	2	
1:A:455:ASP:O	1:A:457:THR:N	0.50	2.45	8	3	
1:A:405:LEU:N	1:A:405:LEU:HD12	0.50	2.22	5	1	
1:A:663:MET:O	1:A:666:VAL:N	0.50	2.42	6	2	
1:A:67:TRP:CH2	1:A:84:PHE:CE2	0.50	3.00	8	1	
1:A:134:ARG:CZ	1:A:330:HIS:O	0.50	2.60	8	1	
1:A:38:ASN:O	1:A:42:ILE:HG22	0.50	2.07	10	1	
1:A:88:LEU:C	1:A:90:TYR:H	0.50	2.10	1	2	
1:A:159:ASP:O	1:A:161:GLN:N	0.50	2.45	9	4	
1:A:452:GLY:C	1:A:453:PHE:CG	0.50	2.84	1	1	
1:A:420:LEU:O	1:A:445:ARG:CB	0.50	2.60	2	1	
1:A:547:HIS:N	1:A:547:HIS:CD2	0.50	2.77	4	1	
1:A:45:ASP:OD1	1:A:45:ASP:N	0.50	2.45	5	1	
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:N	0.50	2.45	5	1	
1:A:518:MET:O	1:A:520:SER:N	0.50	2.44	8	2	
1:A:119:VAL:HG13	1:A:267:THR:OG1	0.50	2.06	7	1	
1:A:444:ASN:CG	1:A:445:ARG:N	0.50	2.65	8	1	
1:A:595:GLU:O	1:A:599:ASN:ND2	0.49	2.45	1	1	
1:A:116:GLN:NE2	1:A:266:SER:OG	0.49	2.45	2	1	
1:A:439:ILE:HD11	1:A:449:ILE:HD11	0.49	1.84	2	1	
1:A:505:GLY:O	1:A:506:LYS:HB2	0.49	2.05	2	2	
1:A:637:ILE:HG23	1:A:638:SER:N	0.49	2.22	4	1	
1:A:197:GLN:NE2	1:A:198:LEU:O	0.49	2.45	6	1	
1:A:365:VAL:O	1:A:367:THR:N	0.49	2.45	6	1	
1:A:429:ARG:O	1:A:430:ARG:CB	0.49	2.60	7	1	
1:A:299:GLN:NE2	1:A:299:GLN:O	0.49	2.44	9	1	
1:A:542:THR:C	1:A:544:HIS:N	0.49	2.65	10	1	
1:A:661:GLU:CD	1:A:662:ASN:N	0.49	2.65	10	1	
1:A:142:LEU:HD12	1:A:142:LEU:H	0.49	1.68	1	1	
1:A:444:ASN:N	1:A:444:ASN:OD1	0.49	2.43	1	3	
1:A:316:ASP:OD2	1:A:382:ARG:NH1	0.49	2.45	2	1	
1:A:108:GLU:CD	1:A:109:ILE:N	0.49	2.66	6	1	
1:A:584:ASN:ND2	1:A:645:TRP:NE1	0.49	2.60	6	1	
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD23	0.49	2.07	7	1	
1:A:35:PHE:O	1:A:39:PHE:CD1	0.49	2.65	8	2	
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CE2	0.49	2.64	8	1	
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CG	0.49	3.05	8	1	
1:A:506:LYS:NZ	1:A:534:TRP:CZ3	0.49	2.80	8	1	
1:A:359:GLU:CD	1:A:360:GLY:N	0.49	2.65	9	1	
1:A:169:TRP:CE2	1:A:173:PHE:CE1	0.49	3.00	10	1	



			D : (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:336:PHE:CZ	1:A:387:TYR:CD2	0.49	3.00	10	1	
1:A:486:GLU:CD	1:A:487:ARG:NH1	0.49	2.66	10	1	
1:A:695:ASP:N	1:A:695:ASP:OD1	0.49	2.42	10	1	
1:A:719:GLU:CD	1:A:720:LYS:N	0.49	2.66	10	1	
1:A:176:GLU:N	1:A:176:GLU:OE1	0.49	2.45	1	2	
1:A:397:GLN:CD	1:A:397:GLN:H	0.49	2.11	6	2	
1:A:47:ALA:N	1:A:48:PRO:CD	0.49	2.75	2	2	
1:A:202:LEU:H	1:A:207:GLU:H	0.49	1.49	4	1	
1:A:290:LEU:C	1:A:290:LEU:CD1	0.49	2.81	10	2	
1:A:367:THR:CG2	1:A:368:GLY:N	0.49	2.76	5	1	
1:A:376:LYS:CG	1:A:377:VAL:N	0.49	2.75	5	1	
1:A:416:ALA:H	1:A:417:PRO:HD2	0.49	1.66	5	1	
1:A:637:ILE:CG1	1:A:638:SER:N	0.49	2.76	5	1	
1:A:635:LEU:HD22	1:A:636:ARG:NH2	0.49	2.23	6	1	
1:A:565:PHE:CD1	1:A:565:PHE:N	0.49	2.80	7	1	
1:A:509:TRP:O	1:A:509:TRP:CD1	0.49	2.65	8	1	
1:A:640:GLN:NE2	1:A:705:ASN:O	0.49	2.45	8	1	
1:A:233:ASN:ND2	1:A:234:ASN:H	0.49	2.06	9	1	
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CG	0.49	2.64	9	1	
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:C	0.49	2.66	10	1	
1:A:30:LEU:HD23	1:A:31:ASP:H	0.49	1.67	1	1	
1:A:292:GLY:O	1:A:295:GLN:N	0.49	2.41	9	3	
1:A:383:THR:C	1:A:385:SER:N	0.49	2.66	10	6	
1:A:428:GLU:O	1:A:429:ARG:CB	0.49	2.58	1	1	
1:A:600:VAL:HG11	1:A:663:MET:SD	0.49	2.47	2	2	
1:A:94:GLN:C	1:A:96:GLU:H	0.49	2.09	3	1	
1:A:128:LEU:HD21	1:A:298:LEU:O	0.49	2.07	3	1	
1:A:372:LEU:HA	1:A:375:LEU:HD12	0.49	1.84	3	2	
1:A:257:ASN:ND2	1:A:257:ASN:C	0.49	2.65	4	1	
1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:N	0.49	2.39	6	2	
1:A:244:ALA:C	1:A:246:GLY:H	0.49	2.11	6	3	
1:A:290:LEU:HD22	1:A:370:ILE:HD13	0.49	1.83	7	1	
1:A:446:VAL:HG23	1:A:447:ALA:N	0.49	2.22	7	1	
1:A:498:LEU:HD22	1:A:502:ALA:CB	0.49	2.37	7	1	
1:A:57:ARG:NE	1:A:427:GLU:OE1	0.49	2.45	8	1	
1:A:377:VAL:C	1:A:379:LYS:H	0.49	2.11	9	1	
1:A:177:SER:OG	1:A:178:LEU:N	0.49	2.46	10	1	
1:A:276:ALA:HB2	1:A:610:TRP:CZ2	0.49	2.43	10	1	
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:HD22	0.49	2.21	10	1	
1:A:121:ALA:O	1:A:286:LEU:CD2	0.49	2.59	1	2	
1:A:448:PHE:CE2	1:A:498:LEU:HD21	0.49	2.42	1	1	



	Atom 2	$Clash(\hat{\lambda})$	$\mathbf{D}^{\mathbf{i}}_{\mathbf{i}}$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:43:VAL:CG1	1:A:359:GLU:OE2	0.49	2.61	2	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:105:ILE:H	0.49	1.68	2	1
1:A:237:HIS:O	1:A:262:GLU:OE1	0.49	2.29	7	3
1:A:449:ILE:N	1:A:449:ILE:CD1	0.49	2.68	2	2
1:A:637:ILE:H	1:A:637:ILE:CD1	0.49	2.16	2	1
1:A:288:ARG:O	1:A:292:GLY:N	0.49	2.46	4	1
1:A:148:ILE:N	1:A:149:PRO:HD2	0.49	2.19	5	2
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:CD	0.49	2.18	5	2
1:A:56:GLU:OE1	1:A:56:GLU:CA	0.49	2.61	6	1
1:A:242:ILE:N	1:A:242:ILE:CD1	0.49	2.75	6	2
1:A:267:THR:HG22	1:A:334:LEU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:482:ILE:HG23	1:A:483:LYS:N	0.49	2.21	10	2
1:A:664:ALA:O	1:A:668:ASP:OD1	0.49	2.30	7	1
1:A:134:ARG:H	1:A:134:ARG:HD3	0.49	1.68	10	1
1:A:207:GLU:CD	1:A:207:GLU:N	0.49	2.66	5	2
1:A:342:HIS:O	1:A:345:THR:HG23	0.49	2.07	1	1
1:A:132:ASN:C	1:A:134:ARG:N	0.49	2.65	3	1
1:A:143:TYR:OH	1:A:159:ASP:N	0.49	2.40	3	1
1:A:299:GLN:NE2	1:A:312:LYS:NZ	0.49	2.61	4	1
1:A:604:LEU:O	1:A:608:VAL:CG1	0.49	2.61	4	5
1:A:198:LEU:HD13	1:A:216:PHE:CE1	0.49	2.42	5	1
1:A:329:LEU:N	1:A:329:LEU:HD12	0.49	2.23	5	1
1:A:356:GLU:O	1:A:357:ILE:O	0.49	2.30	10	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:299:GLN:CB	0.49	2.38	7	1
1:A:339:ASN:O	1:A:391:PRO:CD	0.49	2.61	7	1
1:A:628:LEU:HD22	1:A:628:LEU:H	0.49	1.65	10	1
1:A:241:GLN:HB2	1:A:260:ILE:HD11	0.49	1.83	1	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:GLY:H	0.49	2.17	2	1
1:A:604:LEU:O	1:A:604:LEU:HD23	0.49	2.07	7	2
1:A:76:LYS:NZ	1:A:76:LYS:CB	0.49	2.76	4	1
1:A:632:ARG:N	1:A:632:ARG:NE	0.49	2.61	5	1
1:A:533:ALA:HB3	1:A:544:HIS:CE1	0.49	2.43	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.49	2.28	9	1
1:A:231:LEU:N	1:A:238:ILE:O	0.49	2.44	10	1
1:A:345:THR:HG21	1:A:360:GLY:CA	0.49	2.38	10	1
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:HD23	0.49	2.28	10	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:CB	0.49	2.61	2	2
1:A:535:VAL:HG21	1:A:541:ALA:HB2	0.49	1.84	1	1
1:A:17:LYS:CB	1:A:17:LYS:NZ	0.49	2.75	2	1
1:A:239:GLU:CD	1:A:317:ARG:NH1	0.49	2.66	3	1
1:A:271:CYS:O	1:A:271:CYS:SG	0.49	2.71	3	1



		D : (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Tota
1:A:342:HIS:CE1	1:A:343:LEU:CD1	0.49	2.96	4	1
1:A:7:GLN:O	1:A:9:ARG:N	0.49	2.46	6	1
1:A:68:HIS:CD2	1:A:81:TYR:OH	0.49	2.65	6	1
1:A:454:LEU:CD2	1:A:455:ASP:H	0.49	2.21	6	1
1:A:625:ASN:N	1:A:625:ASN:ND2	0.49	2.60	9	1
1:A:666:VAL:O	1:A:669:GLN:N	0.49	2.42	10	1
1:A:282:ASP:N	1:A:282:ASP:OD1	0.49	2.45	6	3
1:A:450:ASN:N	1:A:450:ASN:HD22	0.49	2.05	1	1
1:A:640:GLN:NE2	1:A:707:TYR:CE1	0.49	2.81	2	1
1:A:318:HIS:CD2	1:A:318:HIS:N	0.49	2.81	8	3
1:A:382:ARG:NE	1:A:382:ARG:CA	0.49	2.76	4	1
1:A:529:GLY:O	1:A:530:ALA:O	0.49	2.31	4	1
1:A:592:ILE:O	1:A:596:LEU:N	0.49	2.41	4	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD13	0.49	2.20	7	1
1:A:298:LEU:HD12	1:A:298:LEU:N	0.49	2.13	9	2
1:A:424:ILE:O	1:A:449:ILE:HG21	0.49	2.07	7	1
1:A:709:GLU:H	1:A:709:GLU:CD	0.49	2.11	8	1
1:A:114:GLY:N	1:A:265:ILE:HD11	0.49	2.22	1	1
1:A:190:ALA:C	1:A:191:PHE:CD1	0.49	2.87	1	3
1:A:612:GLU:CG	1:A:613:GLN:N	0.49	2.75	1	1
1:A:564:GLU:CD	1:A:564:GLU:N	0.49	2.66	2	2
1:A:275:VAL:HG22	1:A:276:ALA:N	0.49	2.22	4	1
1:A:57:ARG:O	1:A:60:ILE:HG22	0.49	2.07	5	1
1:A:687:SER:O	1:A:688:CYS:C	0.49	2.51	6	1
1:A:631:ASP:C	1:A:633:ALA:N	0.49	2.67	8	3
1:A:527:ARG:CZ	1:A:551:THR:OG1	0.49	2.60	8	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:TRP:CD1	0.49	2.65	9	1
1:A:362:LEU:N	1:A:362:LEU:CD2	0.49	2.76	10	1
1:A:366:MET:O	1:A:368:GLY:N	0.48	2.46	1	2
1:A:626:VAL:O	1:A:627:ALA:CB	0.48	2.61	1	2
1:A:124:ALA:O	1:A:127:ALA:N	0.48	2.41	2	1
1:A:298:LEU:CD1	1:A:299:GLN:N	0.48	2.75	2	1
1:A:315:ASP:O	1:A:316:ASP:CB	0.48	2.61	9	2
1:A:208:THR:HG22	1:A:209:THR:H	0.48	1.68	3	1
1:A:449:ILE:CG2	1:A:503:GLN:O	0.48	2.61	3	1
1:A:717:LEU:N	1:A:717:LEU:HD12	0.48	2.23	5	1

1:A:313:LEU:H

1:A:454:LEU:O

1:A:114:GLY:O

1:A:421:LYS:HB2

1:A:108:GLU:HG2

Continued on next page...

6

7

9

9

1

1

1

1

1

1

2.19

2.41

2.61

1.69

1.84



0.48

0.48

0.48

0.48

0.48

1:A:313:LEU:CD1

1:A:458:GLY:N

1:A:532:THR:CG2

1:A:421:LYS:HZ3

1:A:334:LEU:HD22

	A + 2	(1 - 1)	\mathbf{D} : $(\hat{\mathbf{x}})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:119:VAL:CG2	1:A:119:VAL:O	0.48	2.60	1	1
1:A:150:GLN:NE2	1:A:150:GLN:C	0.48	2.67	1	1
1:A:226:PRO:C	1:A:228:CYS:N	0.48	2.66	2	3
1:A:147:ILE:HG23	1:A:148:ILE:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:199:ARG:NH2	1:A:201:GLN:CD	0.48	2.66	2	1
1:A:43:VAL:O	1:A:47:ALA:CB	0.48	2.61	6	3
1:A:370:ILE:CD1	1:A:370:ILE:N	0.48	2.76	5	1
1:A:422:MET:C	1:A:447:ALA:CB	0.48	2.81	5	4
1:A:577:LEU:O	1:A:578:THR:CB	0.48	2.61	7	2
1:A:252:ASP:OD2	1:A:255:HIS:N	0.48	2.46	6	1
1:A:237:HIS:CG	1:A:262:GLU:OE2	0.48	2.66	10	1
1:A:344:MET:SD	1:A:709:GLU:OE2	0.48	2.71	10	1
1:A:585:ALA:HB2	1:A:645:TRP:CZ3	0.48	2.43	10	1
1:A:139:TYR:CD2	1:A:140:ASP:OD1	0.48	2.66	1	1
1:A:315:ASP:CG	1:A:332:ARG:HH12	0.48	2.11	2	1
1:A:132:ASN:C	1:A:134:ARG:H	0.48	2.12	3	1
1:A:338:ARG:NH1	1:A:456:ARG:NH2	0.48	2.60	3	1
1:A:575:ASP:C	1:A:577:LEU:N	0.48	2.66	10	2
1:A:615:ILE:CG2	1:A:616:GLY:H	0.48	2.15	3	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:38:ASN:C	0.48	2.66	4	1
1:A:323:ASP:OD1	1:A:323:ASP:N	0.48	2.44	4	1
1:A:637:ILE:O	1:A:640:GLN:N	0.48	2.45	10	2
1:A:720:LYS:C	1:A:722:SER:N	0.48	2.66	4	1
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:CB	0.48	2.61	5	1
1:A:444:ASN:HD22	1:A:445:ARG:N	0.48	2.05	6	2
1:A:500:GLY:O	1:A:501:LYS:CB	0.48	2.61	6	1
1:A:56:GLU:OE2	1:A:59:ARG:NH1	0.48	2.46	7	1
1:A:281:GLU:O	1:A:284:ILE:HG22	0.48	2.07	7	1
1:A:629:MET:SD	1:A:629:MET:C	0.48	2.92	7	1
1:A:526:LEU:C	1:A:526:LEU:CD1	0.48	2.82	8	1
1:A:433:LEU:HD12	1:A:434:ASN:H	0.48	1.68	10	1
1:A:53:LEU:O	1:A:56:GLU:N	0.48	2.42	1	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:53:LEU:H	0.48	1.68	4	1
1:A:107:SER:O	1:A:110:THR:OG1	0.48	2.32	4	1
1:A:435:LEU:O	1:A:439:ILE:N	0.48	2.35	6	1
1:A:560:ILE:HG22	1:A:565:PHE:CE2	0.48	2.44	6	1
1:A:234:ASN:OD1	1:A:551:THR:O	0.48	2.31	7	1
1:A:449:ILE:CG2	1:A:502:ALA:HB1	0.48	2.38	9	1
1:A:508:MET:O	1:A:509:TRP:CG	0.48	2.66	9	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE1	0.48	2.31	1	1
1:A:659:SER:O	1:A:663:MET:SD	0.48	2.71	1	1



Continued from prev	ious page	[Modela	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\operatorname{\AA})$	Distance(Å)	Worst	Total
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:N	0.48	2.40	2	3
1:A:258:ASP:OD1	1:A:258:ASP:N	0.48	2.46	10	2
1:A:459:ASP:OD2	1:A:707:TYR:CZ	0.48	2.67	3	1
1:A:570:GLU:CB	1:A:571:PRO:CD	0.48	2.90	3	5
1:A:278:VAL:CG2	1:A:347:PRO:O	0.48	2.62	4	1
1:A:518:MET:C	1:A:520:SER:N	0.48	2.66	8	2
1:A:66:GLU:O	1:A:69:ARG:N	0.48	2.47	7	1
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CE2	0.48	3.07	8	1
1:A:509:TRP:O	1:A:509:TRP:CG	0.48	2.66	8	1
1:A:343:LEU:O	1:A:357:ILE:O	0.48	2.32	1	1
1:A:383:THR:C	1:A:385:SER:H	0.48	2.11	6	6
1:A:299:GLN:HE21	1:A:299:GLN:C	0.48	2.12	2	1
1:A:351:ASP:OD2	1:A:357:ILE:HG21	0.48	2.08	2	1
1:A:366:MET:O	1:A:366:MET:SD	0.48	2.71	2	1
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:C	0.48	2.51	2	4
1:A:565:PHE:C	1:A:567:ALA:N	0.48	2.66	6	5
1:A:380:ASN:ND2	1:A:382:ARG:NH2	0.48	2.61	4	1
1:A:542:THR:O	1:A:545:ALA:N	0.48	2.46	4	1
1:A:717:LEU:N	1:A:717:LEU:CD1	0.48	2.76	5	1
1:A:209:THR:CG2	1:A:210:LEU:N	0.48	2.77	6	2
1:A:128:LEU:CD2	1:A:132:ASN:ND2	0.48	2.77	8	1
1:A:151:GLU:CD	1:A:619:LYS:NZ	0.48	2.67	8	1
1:A:439:ILE:HG12	1:A:498:LEU:HD11	0.48	1.86	8	1
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG23	0.48	2.07	1	1
1:A:202:LEU:C	1:A:204:ASN:N	0.48	2.67	6	6
1:A:248:ILE:C	1:A:250:LYS:N	0.48	2.66	7	6
1:A:519:TYR:CD1	1:A:519:TYR:C	0.48	2.86	1	1
1:A:538:PRO:O	1:A:541:ALA:HB3	0.48	2.09	1	1
1:A:539:THR:O	1:A:541:ALA:N	0.48	2.47	1	1
1:A:423:GLY:C	1:A:425:MET:SD	0.48	2.92	2	1
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ASN:N	0.48	2.76	5	1
1:A:632:ARG:HE	1:A:633:ALA:N	0.48	2.07	5	1
1:A:544:HIS:CD2	1:A:544:HIS:C	0.48	2.87	6	1
1:A:361:ILE:HD13	1:A:361:ILE:O	0.48	2.08	7	1
1:A:632:ARG:HH22	1:A:712:LEU:HD13	0.48	1.67	7	1

1:A:273:ASP:OD2

1:A:498:LEU:HD22

1:A:293:LEU:O

1:A:181:GLU:C

1:A:78:LYS:O

1:A:184:SER:OG

Continued on next page...

8

8

9

10

1

1

2.32

2.23

2.09

2.67

2.62

2.46

1

1

1

1

2

1



0.48

0.48

0.48

0.48

0.48

0.48

1:A:338:ARG:O

1:A:498:LEU:N

1:A:293:LEU:HD13

1:A:182:ASN:ND2

1:A:82:LYS:CB

1:A:185:TYR:N

		(1,1)	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:376:LYS:O	1:A:377:VAL:C	0.48	2.51	3	5	
1:A:227:THR:HG22	1:A:227:THR:O	0.48	2.08	7	2	
1:A:385:SER:OG	1:A:386:VAL:N	0.48	2.46	2	1	
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:CG	0.48	2.62	3	1	
1:A:321:ALA:C	1:A:323:ASP:N	0.48	2.67	3	1	
1:A:389:VAL:HG13	1:A:389:VAL:O	0.48	2.09	3	2	
1:A:512:PRO:C	1:A:514:LEU:H	0.48	2.11	5	2	
1:A:448:PHE:CE2	1:A:503:GLN:OE1	0.48	2.67	6	1	
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:CG	0.48	2.61	7	1	
1:A:531:ASN:O	1:A:548:TYR:CZ	0.48	2.67	7	1	
1:A:244:ALA:C	1:A:246:GLY:N	0.48	2.66	8	1	
1:A:578:THR:HG23	1:A:578:THR:O	0.48	2.08	9	1	
1:A:414:GLY:C	1:A:416:ALA:N	0.48	2.66	7	2	
1:A:418:ASN:O	1:A:419:THR:OG1	0.48	2.31	6	2	
1:A:579:ILE:CD1	1:A:581:VAL:HG12	0.48	2.38	1	1	
1:A:97:ARG:CG	1:A:98:VAL:N	0.48	2.77	2	1	
1:A:226:PRO:O	1:A:228:CYS:N	0.48	2.46	2	1	
1:A:584:ASN:OD1	1:A:585:ALA:N	0.48	2.46	2	1	
1:A:608:VAL:O	1:A:612:GLU:CG	0.48	2.62	4	2	
1:A:234:ASN:CG	1:A:549:HIS:CE1	0.48	2.87	5	1	
1:A:442:ALA:CB	1:A:446:VAL:HG23	0.48	2.38	5	1	
1:A:164:GLU:OE1	1:A:164:GLU:CA	0.48	2.62	6	1	
1:A:586:ASN:O	1:A:586:ASN:CG	0.48	2.53	6	1	
1:A:656:VAL:O	1:A:660:LEU:HD12	0.48	2.08	6	1	
1:A:512:PRO:O	1:A:513:ASP:CB	0.48	2.62	10	2	
1:A:418:ASN:O	1:A:419:THR:CB	0.48	2.59	8	1	
1:A:531:ASN:CG	1:A:548:TYR:HH	0.48	2.12	8	1	
1:A:260:ILE:HD12	1:A:260:ILE:N	0.48	2.24	9	1	
1:A:640:GLN:CD	1:A:640:GLN:N	0.48	2.67	9	1	
1:A:77:ASP:C	1:A:79:ALA:N	0.48	2.67	10	1	
1:A:554:GLN:OE1	1:A:554:GLN:O	0.48	2.32	10	1	
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:HB3	0.48	2.09	1	1	
1:A:213:PRO:C	1:A:215:GLN:N	0.48	2.67	6	5	
1:A:62:ALA:O	1:A:65:ASP:OD2	0.48	2.32	3	1	
1:A:215:GLN:OE1	1:A:233:ASN:ND2	0.48	2.47	5	1	
1:A:386:VAL:HG12	1:A:388:ILE:HD11	0.48	1.85	6	2	
1:A:414:GLY:C	1:A:415:MET:SD	0.48	2.93	6	1	
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:CD1	0.48	2.71	9	2	
1:A:715:TRP:CE3	1:A:719:GLU:OE1	0.48	2.66	6	1	
1:A:570:GLU:N	1:A:570:GLU:CD	0.48	2.67	8	1	
1:A:506:LYS:CD	1:A:506:LYS:N	0.48	2.76	9	1	



A + 1	A + 2	(1 - 1)	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:180:LEU:C	1:A:182:ASN:N	0.48	2.67	10	1	
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:O	0.48	2.31	10	1	
1:A:425:MET:CG	1:A:450:ASN:OD1	0.47	2.61	2	1	
1:A:430:ARG:N	1:A:460:GLU:OE1	0.47	2.47	3	1	
1:A:557:GLN:CG	1:A:558:ALA:N	0.47	2.77	3	2	
1:A:228:CYS:SG	1:A:241:GLN:OE1	0.47	2.72	4	1	
1:A:430:ARG:CG	1:A:431:THR:N	0.47	2.76	4	1	
1:A:584:ASN:CG	1:A:587:TRP:CZ3	0.47	2.87	4	1	
1:A:148:ILE:H	1:A:149:PRO:HD3	0.47	1.69	5	1	
1:A:458:GLY:O	1:A:460:GLU:N	0.47	2.47	9	1	
1:A:546:LEU:O	1:A:548:TYR:N	0.47	2.46	10	1	
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CD2	0.47	2.67	1	1	
1:A:324:GLY:O	1:A:325:SER:O	0.47	2.32	1	1	
1:A:578:THR:HG22	1:A:579:ILE:N	0.47	2.24	10	3	
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:522:LYS:CB	0.47	2.22	3	1	
1:A:608:VAL:CG1	1:A:609:ARG:N	0.47	2.78	4	5	
1:A:601:GLN:HE21	1:A:667:VAL:CG2	0.47	2.22	5	1	
1:A:67:TRP:NE1	1:A:84:PHE:CD2	0.47	2.82	7	1	
1:A:643:ALA:O	1:A:647:ARG:CG	0.47	2.62	7	1	
1:A:248:ILE:CG2	1:A:249:GLY:N	0.47	2.76	8	1	
1:A:361:ILE:CG2	1:A:362:LEU:N	0.47	2.77	8	1	
1:A:609:ARG:CZ	1:A:670:GLN:OE1	0.47	2.61	9	1	
1:A:531:ASN:ND2	1:A:552:ASN:CG	0.47	2.68	10	1	
1:A:576:LEU:C	1:A:576:LEU:CD1	0.47	2.81	1	1	
1:A:465:MET:C	1:A:467:ALA:H	0.47	2.12	7	4	
1:A:606:TYR:O	1:A:610:TRP:CB	0.47	2.62	10	4	
1:A:704:PRO:C	1:A:706:GLY:N	0.47	2.67	5	2	
1:A:40:ASP:OD1	1:A:44:HIS:CE1	0.47	2.67	4	1	
1:A:378:GLN:O	1:A:378:GLN:CD	0.47	2.52	4	1	
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:CB	0.47	2.61	5	1	
1:A:290:LEU:C	1:A:292:GLY:N	0.47	2.66	10	2	
1:A:293:LEU:HD23	1:A:293:LEU:N	0.47	2.25	5	1	
1:A:343:LEU:HD23	1:A:343:LEU:H	0.47	1.69	5	1	
1:A:713:HIS:O	1:A:716:ARG:N	0.47	2.41	5	1	
1:A:341:GLY:O	1:A:342:HIS:CG	0.47	2.68	6	1	
1:A:645:TRP:O	1:A:648:HIS:N	0.47	2.42	6	1	
1:A:671:ASN:N	1:A:671:ASN:ND2	0.47	2.62	6	1	
1:A:600:VAL:O	1:A:602:GLY:N	0.47	2.47	7	1	
1:A:430:ARG:NH2	1:A:459:ASP:CB	0.47	2.77	8	1	
1:A:271:CYS:C	1:A:273:ASP:N	0.47	2.66	9	1	
1:A:433:LEU:N	1:A:433:LEU:HD12	0.47	2.21	9	1	



		(1,1,(3))	\mathbf{D} (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:454:LEU:O	1:A:457:THR:N	0.47	2.43	9	1	
1:A:640:GLN:N	1:A:640:GLN:OE1	0.47	2.44	9	1	
1:A:121:ALA:N	1:A:122:MET:SD	0.47	2.87	1	1	
1:A:429:ARG:CZ	1:A:460:GLU:OE2	0.47	2.63	1	1	
1:A:596:LEU:O	1:A:600:VAL:HG23	0.47	2.09	1	1	
1:A:78:LYS:CE	1:A:574:ASP:OD2	0.47	2.62	2	1	
1:A:335:LEU:HD22	1:A:335:LEU:H	0.47	1.68	2	1	
1:A:634:THR:O	1:A:637:ILE:CD1	0.47	2.62	2	1	
1:A:653:LYS:CB	1:A:653:LYS:NZ	0.47	2.77	2	1	
1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:CB	0.47	2.63	3	3	
1:A:433:LEU:C	1:A:433:LEU:HD13	0.47	2.29	3	1	
1:A:609:ARG:HH12	1:A:671:ASN:HD21	0.47	1.52	3	1	
1:A:635:LEU:C	1:A:635:LEU:CD1	0.47	2.81	3	2	
1:A:92:VAL:HG23	1:A:94:GLN:HE22	0.47	1.69	4	1	
1:A:106:ASP:O	1:A:110:THR:OG1	0.47	2.33	7	2	
1:A:282:ASP:C	1:A:284:ILE:H	0.47	2.13	5	1	
1:A:450:ASN:OD1	1:A:532:THR:OG1	0.47	2.31	6	1	
1:A:557:GLN:N	1:A:557:GLN:HE21	0.47	2.04	6	1	
1:A:631:ASP:O	1:A:633:ALA:N	0.47	2.47	8	4	
1:A:635:LEU:C	1:A:637:ILE:N	0.47	2.68	7	1	
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:CG	0.47	2.62	8	1	
1:A:455:ASP:CG	1:A:637:ILE:HG23	0.47	2.30	8	1	
1:A:197:GLN:HE22	1:A:213:PRO:CB	0.47	2.22	9	1	
1:A:711:LEU:C	1:A:711:LEU:CD1	0.47	2.80	9	1	
1:A:132:ASN:OD1	1:A:298:LEU:CD2	0.47	2.61	10	1	
1:A:39:PHE:CZ	1:A:43:VAL:HG21	0.47	2.45	1	2	
1:A:509:TRP:CD1	1:A:510:ALA:N	0.47	2.81	2	1	
1:A:631:ASP:C	1:A:633:ALA:H	0.47	2.12	9	3	
1:A:344:MET:SD	1:A:707:TYR:CD2	0.47	3.08	8	1	
1:A:489:ASN:CG	1:A:490:VAL:N	0.47	2.68	8	1	
1:A:147:ILE:CG2	1:A:147:ILE:O	0.47	2.63	9	1	
1:A:485:TYR:CD1	1:A:486:GLU:N	0.47	2.82	9	1	
1:A:592:ILE:CG2	1:A:593:GLN:N	0.47	2.77	10	1	
1:A:210:LEU:C	1:A:212:THR:N	0.47	2.67	1	1	
1:A:269:LEU:O	1:A:270:ASP:OD2	0.47	2.32	2	2	
1:A:373:TYR:CD1	1:A:373:TYR:C	0.47	2.88	2	1	
1:A:421:LYS:CG	1:A:446:VAL:O	0.47	2.62	2	1	
1:A:587:TRP:CZ3	1:A:645:TRP:CH2	0.47	3.02	2	1	
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:O	0.47	2.10	8	2	
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:522:LYS:HB2	0.47	1.68	3	1	
1:A:699:LEU:C	1:A:701:VAL:N	0.47	2.68	3	2	



A 4 a 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$		Worst	Total	
1:A:161:GLN:CD	1:A:161:GLN:N	0.47	2.68	4	1	
1:A:355:ASN:C	1:A:357:ILE:N	0.47	2.66	4	1	
1:A:383:THR:O	1:A:383:THR:HG22	0.47	2.09	4	1	
1:A:510:ALA:H	1:A:631:ASP:CG	0.47	2.11	4	1	
1:A:529:GLY:O	1:A:557:GLN:NE2	0.47	2.47	4	1	
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:HB2	0.47	2.09	6	1	
1:A:643:ALA:O	1:A:701:VAL:CG1	0.47	2.62	6	1	
1:A:715:TRP:CE3	1:A:719:GLU:CD	0.47	2.88	6	1	
1:A:233:ASN:C	1:A:235:GLY:N	0.47	2.66	9	2	
1:A:334:LEU:HD12	1:A:334:LEU:N	0.47	2.25	7	1	
1:A:137:SER:CB	1:A:140:ASP:OD1	0.47	2.62	8	1	
1:A:595:GLU:N	1:A:595:GLU:CD	0.47	2.68	10	1	
1:A:47:ALA:CB	1:A:48:PRO:CD	0.47	2.91	1	2	
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HB2	0.47	1.87	1	1	
1:A:226:PRO:C	1:A:228:CYS:H	0.47	2.12	1	2	
1:A:371:ALA:C	1:A:373:TYR:N	0.47	2.67	5	4	
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:HE22	0.47	2.07	1	1	
1:A:419:THR:O	1:A:419:THR:OG1	0.47	2.32	1	1	
1:A:422:MET:HB3	1:A:447:ALA:HB2	0.47	1.85	1	1	
1:A:62:ALA:O	1:A:65:ASP:OD1	0.47	2.32	2	1	
1:A:254:ALA:C	1:A:256:ILE:N	0.47	2.68	8	4	
1:A:269:LEU:HD11	1:A:335:LEU:HB3	0.47	1.86	2	1	
1:A:11:ARG:O	1:A:12:ILE:CG2	0.47	2.61	4	3	
1:A:117:LEU:HD21	1:A:537:SER:O	0.47	2.10	5	1	
1:A:364:GLY:O	1:A:367:THR:HG22	0.47	2.08	5	1	
1:A:371:ALA:O	1:A:374:ASP:OD2	0.47	2.32	8	2	
1:A:645:TRP:C	1:A:647:ARG:N	0.47	2.68	6	1	
1:A:654:GLU:CG	1:A:655:GLN:N	0.47	2.77	6	1	
1:A:287:TYR:OH	1:A:370:ILE:HD11	0.47	2.10	7	1	
1:A:591:GLU:O	1:A:594:GLN:N	0.47	2.47	7	2	
1:A:436:ARG:NH2	1:A:569:PHE:CE1	0.47	2.83	8	1	
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:HB2	0.47	2.10	8	1	
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:CG2	0.47	2.63	8	1	
1:A:436:ARG:N	1:A:436:ARG:NE	0.47	2.62	9	1	
1:A:490:VAL:HG21	1:A:529:GLY:O	0.47	2.09	9	1	
1:A:657:GLN:CD	1:A:658:ALA:N	0.47	2.68	9	1	
1:A:697:ILE:N	1:A:697:ILE:CD1	0.47	2.64	9	1	
1:A:118:VAL:CG2	1:A:534:TRP:NE1	0.47	2.76	10	1	
1:A:231:LEU:O	1:A:238:ILE:N	0.47	2.37	10	1	
1:A:439:ILE:CG2	1:A:440:ALA:N	0.47	2.78	10	1	
1:A:482:ILE:HD13	1:A:482:ILE:O	0.47	2.09	10	1	



Atom 1	Atom_9	$Clack(\lambda)$	$Distance(\lambda)$		lels
Atom-1	Atom-2		Distance(A)	Worst	Total
1:A:450:ASN:N	1:A:450:ASN:ND2	0.47	2.63	1	1
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:N	0.47	2.62	2	1
1:A:652:THR:O	1:A:655:GLN:N	0.47	2.42	2	1
1:A:487:ARG:O	1:A:491:LEU:HD12	0.47	2.10	3	1
1:A:586:ASN:O	1:A:587:TRP:O	0.47	2.32	4	1
1:A:90:TYR:CZ	1:A:394:HIS:CD2	0.47	3.03	5	1
1:A:485:TYR:O	1:A:488:ASN:OD1	0.47	2.33	5	1
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:CG1	0.47	2.63	9	2
1:A:278:VAL:HG23	1:A:278:VAL:O	0.47	2.09	6	2
1:A:326:GLU:CD	1:A:326:GLU:N	0.47	2.69	6	1
1:A:454:LEU:C	1:A:456:ARG:N	0.47	2.68	8	3
1:A:132:ASN:O	1:A:132:ASN:CG	0.47	2.53	7	1
1:A:526:LEU:HD12	1:A:530:ALA:O	0.47	2.09	10	2
1:A:515:MET:C	1:A:515:MET:SD	0.47	2.93	8	1
1:A:526:LEU:CD2	1:A:530:ALA:O	0.47	2.63	8	1
1:A:193:VAL:HG13	1:A:219:TYR:CZ	0.47	2.43	10	1
1:A:547:HIS:O	1:A:551:THR:N	0.47	2.48	10	1
1:A:91:LEU:O	1:A:92:VAL:CG1	0.47	2.62	1	1
1:A:117:LEU:O	1:A:267:THR:HA	0.47	2.10	2	1
1:A:273:ASP:OD1	1:A:636:ARG:CZ	0.47	2.63	2	1
1:A:642:ILE:CG2	1:A:643:ALA:N	0.47	2.78	2	1
1:A:524:ASP:O	1:A:527:ARG:N	0.47	2.46	7	3
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:O	0.47	2.10	4	1
1:A:406:PHE:CE2	1:A:410:GLU:CD	0.47	2.88	5	1
1:A:694:SER:OG	1:A:695:ASP:N	0.47	2.48	6	1
1:A:184:SER:O	1:A:187:ASP:OD1	0.47	2.33	7	3
1:A:419:THR:CG2	1:A:444:ASN:OD1	0.47	2.63	8	1
1:A:578:THR:HG22	1:A:579:ILE:H	0.47	1.70	10	1
1:A:286:LEU:O	1:A:286:LEU:HD23	0.47	2.10	1	1
1:A:395:GLY:O	1:A:398:GLU:N	0.47	2.48	2	2
1:A:436:ARG:CB	1:A:496:CYS:O	0.47	2.63	4	1
1:A:622:ASP:C	1:A:624:HIS:H	0.47	2.12	4	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:442:ALA:HB1	0.47	1.85	6	1
1:A:252:ASP:N	1:A:252:ASP:OD1	0.47	2.48	7	1
1:A:604:LEU:HD11	1:A:660:LEU:CD1	0.47	2.40	8	1
1:A:134:ARG:C	1:A:135:TRP:CD1	0.47	2.88	9	1
1:A:435:LEU:O	1:A:437:SER:N	0.47	2.48	9	1
1:A:95:PRO:O	1:A:436:ARG:NE	0.47	2.43	10	1
1:A:363:ASP:O	1:A:367:THR:OG1	0.47	2.30	10	1
1:A:393:MET:O	1:A:394:HIS:ND1	0.46	2.48	1	1
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:OD2	0.46	2.33	2	1



port			110
(&)	Mod	dels	
(A)	Worst	Total	
	5	4	
	3	1	
	3	1	
	4	1	
	4	1	
	4	2	
	4	1	

Continued from previous page...

Atom 1		$Clack(\lambda)$	Distance(Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:282:ASP:C	1:A:284:ILE:N	0.46	2.68	5	4
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:O	0.46	2.09	3	1
1:A:123:ASN:ND2	1:A:124:ALA:N	0.46	2.63	3	1
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:ND1	0.46	2.47	4	1
1:A:377:VAL:O	1:A:378:GLN:HG3	0.46	2.10	4	1
1:A:595:GLU:N	1:A:595:GLU:OE1	0.46	2.48	4	2
1:A:636:ARG:HH12	1:A:712:LEU:CD1	0.46	2.23	4	1
1:A:669:GLN:C	1:A:671:ASN:N	0.46	2.69	10	2
1:A:342:HIS:O	1:A:345:THR:N	0.46	2.41	10	2
1:A:587:TRP:CE3	1:A:591:GLU:CD	0.46	2.89	5	1
1:A:703:GLN:O	1:A:704:PRO:O	0.46	2.33	6	2
1:A:80:ALA:O	1:A:84:PHE:CD1	0.46	2.68	7	1
1:A:406:PHE:CD1	1:A:406:PHE:C	0.46	2.87	7	1
1:A:455:ASP:C	1:A:456:ARG:HE	0.46	2.14	7	1
1:A:340:VAL:O	1:A:341:GLY:O	0.46	2.33	9	1
1:A:599:ASN:N	1:A:599:ASN:HD22	0.46	2.07	9	1
1:A:563:THR:O	1:A:564:GLU:CB	0.46	2.63	10	1
1:A:343:LEU:H	1:A:343:LEU:CD1	0.46	2.23	1	1
1:A:277:ALA:O	1:A:278:VAL:CG2	0.46	2.64	2	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:294:MET:SD	0.46	3.03	2	1
1:A:359:GLU:C	1:A:361:ILE:H	0.46	2.14	2	1
1:A:213:PRO:C	1:A:215:GLN:H	0.46	2.14	3	3
1:A:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.46	2.48	3	1
1:A:375:LEU:CD1	1:A:415:MET:SD	0.46	3.03	4	1
1:A:583:GLU:OE1	1:A:645:TRP:CZ3	0.46	2.68	4	1
1:A:67:TRP:CD1	1:A:81:TYR:CZ	0.46	3.02	5	1
1:A:329:LEU:O	1:A:330:HIS:O	0.46	2.33	5	3
1:A:370:ILE:N	1:A:370:ILE:HD12	0.46	2.25	5	1
1:A:512:PRO:C	1:A:514:LEU:N	0.46	2.66	9	2
1:A:169:TRP:CE3	1:A:172:ARG:NH2	0.46	2.84	6	1
1:A:169:TRP:CZ3	1:A:172:ARG:NH2	0.46	2.83	6	1
1:A:134:ARG:O	1:A:135:TRP:C	0.46	2.53	9	1
1:A:609:ARG:NE	1:A:670:GLN:OE1	0.46	2.48	9	1
1:A:120:PRO:O	1:A:121:ALA:C	0.46	2.53	10	1
1:A:202:LEU:C	1:A:204:ASN:H	0.46	2.14	6	5
1:A:132:ASN:ND2	1:A:315:ASP:OD1	0.46	2.49	2	1
1:A:265:ILE:O	1:A:265:ILE:HG22	0.46	2.10	2	1
1:A:622:ASP:O	1:A:670:GLN:NE2	0.46	2.48	3	1
1:A:431:THR:O	1:A:432:SER:CB	0.46	2.62	4	2
1:A:406:PHE:CZ	1:A:410:GLU:CD	0.46	2.89	5	1
1:A:634:THR:O	1:A:637:ILE:O	0.46	2.34	5	1



Atom 1	Atom 2	$Clack(\lambda)$	$\hat{\mathbf{A}}$ Distance $(\hat{\mathbf{A}})$	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:690:PHE:CD1	1:A:690:PHE:N	0.46	2.79	5	1
1:A:243:ASP:OD1	1:A:243:ASP:O	0.46	2.33	8	2
1:A:249:GLY:C	1:A:251:ASP:N	0.46	2.68	7	1
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:O	0.46	2.33	8	1
1:A:116:GLN:C	1:A:116:GLN:OE1	0.46	2.53	1	1
1:A:284:ILE:CG2	1:A:285:LEU:N	0.46	2.78	1	1
1:A:233:ASN:OD1	1:A:234:ASN:ND2	0.46	2.49	2	1
1:A:294:MET:C	1:A:296:GLY:H	0.46	2.14	3	1
1:A:78:LYS:NZ	1:A:82:LYS:CB	0.46	2.78	4	1
1:A:434:ASN:O	1:A:436:ARG:N	0.46	2.49	5	1
1:A:465:MET:SD	1:A:465:MET:C	0.46	2.94	5	1
1:A:587:TRP:CZ3	1:A:591:GLU:OE2	0.46	2.69	5	1
1:A:406:PHE:O	1:A:408:ARG:N	0.46	2.48	10	2
1:A:487:ARG:C	1:A:489:ASN:HD22	0.46	2.14	8	1
1:A:515:MET:O	1:A:518:MET:N	0.46	2.46	8	1
1:A:82:LYS:NZ	1:A:577:LEU:HD21	0.46	2.25	10	1
1:A:123:ASN:HB3	1:A:127:ALA:HB2	0.46	1.88	10	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:O	0.46	2.33	10	1
1:A:512:PRO:O	1:A:513:ASP:OD1	0.46	2.32	10	1
1:A:16:PHE:O	1:A:20:VAL:HG23	0.46	2.10	1	1
1:A:425:MET:O	1:A:426:ASP:O	0.46	2.33	1	2
1:A:484:ALA:HB1	1:A:572:LEU:HD23	0.46	1.87	2	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:249:GLY:N	0.46	2.26	6	2
1:A:424:ILE:O	1:A:448:PHE:CG	0.46	2.68	3	1
1:A:548:TYR:O	1:A:551:THR:O	0.46	2.34	7	2
1:A:372:LEU:O	1:A:372:LEU:HD23	0.46	2.10	4	1
1:A:451:THR:H	1:A:505:GLY:N	0.46	2.09	4	1
1:A:526:LEU:HA	1:A:530:ALA:HB3	0.46	1.86	4	1
1:A:8:SER:OG	1:A:9:ARG:N	0.46	2.47	5	2
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CB	0.46	2.64	5	1
1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:N	0.46	2.68	5	1
1:A:493:GLY:O	1:A:495:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:618:SER:OG	1:A:630:GLU:N	0.46	2.42	6	1
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:N	0.46	2.44	7	1
1:A:375:LEU:CD2	1:A:418:ASN:OD1	0.46	2.63	9	1
1:A:123:ASN:CG	1:A:124:ALA:N	0.46	2.69	10	1
1:A:201:GLN:OE1	1:A:202:LEU:O	0.46	2.33	10	1
1:A:418:ASN:CG	1:A:419:THR:N	0.46	2.68	2	2
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:CG2	0.46	2.63	2	1
1:A:242:ILE:HD13	1:A:242:ILE:H	0.46	1.71	2	1
1:A:105:ILE:CG2	1:A:110:THR:OG1	0.46	2.64	3	1

Continued from previous page...



Atom 1	Atom 2	$Clack(\hat{\lambda})$	$\hat{\mathbf{A}}$) Distance($\hat{\mathbf{A}}$)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:194:VAL:HG21	1:A:199:ARG:HG2	0.46	1.88	3	1	
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:CD1	0.46	2.74	3	3	
1:A:313:LEU:O	1:A:314:ASN:C	0.46	2.53	7	2	
1:A:490:VAL:HG13	1:A:494:LEU:HD12	0.46	1.85	3	2	
1:A:44:HIS:O	1:A:48:PRO:CD	0.46	2.63	4	2	
1:A:564:GLU:C	1:A:566:ASN:N	0.46	2.67	10	2	
1:A:25:LEU:N	1:A:26:PRO:HD2	0.46	2.25	5	1	
1:A:125:ARG:O	1:A:127:ALA:N	0.46	2.49	5	1	
1:A:135:TRP:CE3	1:A:314:ASN:OD1	0.46	2.69	5	1	
1:A:153:ALA:HB3	1:A:161:GLN:HE22	0.46	1.70	5	1	
1:A:644:ASN:HD22	1:A:644:ASN:H	0.46	1.54	5	1	
1:A:276:ALA:CB	1:A:611:VAL:O	0.46	2.63	7	1	
1:A:40:ASP:OD1	1:A:40:ASP:N	0.46	2.46	8	1	
1:A:347:PRO:O	1:A:348:VAL:HG23	0.46	2.10	10	2	
1:A:582:ALA:C	1:A:584:ASN:H	0.46	2.14	9	1	
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:NZ	0.46	2.26	9	1	
1:A:549:HIS:C	1:A:551:THR:N	0.46	2.69	10	1	
1:A:550:GLN:C	1:A:550:GLN:NE2	0.46	2.69	1	1	
1:A:375:LEU:N	1:A:375:LEU:CD2	0.46	2.68	2	1	
1:A:416:ALA:CB	1:A:417:PRO:CD	0.46	2.92	3	1	
1:A:449:ILE:HG21	1:A:503:GLN:N	0.46	2.25	3	1	
1:A:205:GLY:O	1:A:206:LYS:C	0.46	2.54	4	1	
1:A:356:GLU:OE2	1:A:356:GLU:O	0.46	2.34	4	1	
1:A:526:LEU:O	1:A:529:GLY:N	0.46	2.37	6	2	
1:A:653:LYS:CD	1:A:653:LYS:N	0.46	2.79	4	2	
1:A:669:GLN:O	1:A:671:ASN:N	0.46	2.48	4	2	
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:CG	0.46	2.64	5	1	
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:N	0.46	2.49	5	1	
1:A:649:GLY:C	1:A:651:LEU:N	0.46	2.68	8	2	
1:A:330:HIS:C	1:A:332:ARG:N	0.46	2.69	8	1	
1:A:498:LEU:HD22	1:A:499:ARG:H	0.46	1.70	8	1	
1:A:279:ASP:C	1:A:281:GLU:N	0.46	2.69	2	2	
1:A:357:ILE:N	1:A:358:PRO:HD3	0.46	2.18	1	2	
1:A:132:ASN:HD22	1:A:132:ASN:N	0.46	2.08	2	2	
1:A:119:VAL:O	1:A:120:PRO:O	0.46	2.32	3	1	
1:A:435:LEU:O	1:A:438:CYS:SG	0.46	2.70	3	1	
1:A:552:ASN:HD22	1:A:554:GLN:H	0.46	1.53	3	1	
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD22	0.46	2.26	3	1	
1:A:278:VAL:O	1:A:717:LEU:HD21	0.46	2.11	4	2	
1:A:363:ASP:O	1:A:367:THR:N	0.46	2.39	10	2	
1:A:28:THR:OG1	1:A:372:LEU:HD23	0.46	2.10	5	1	



A + 1	At any 9	$C = c \left(\frac{\lambda}{\lambda} \right)$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:234:ASN:CG	1:A:548:TYR:CE2	0.46	2.89	6	1	
1:A:365:VAL:C	1:A:367:THR:N	0.46	2.66	6	1	
1:A:506:LYS:NZ	1:A:533:ALA:HB1	0.46	2.25	6	1	
1:A:695:ASP:O	1:A:698:PHE:N	0.46	2.49	10	2	
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:317:ARG:NH2	0.46	2.84	7	1	
1:A:249:GLY:C	1:A:251:ASP:H	0.46	2.14	7	1	
1:A:711:LEU:CD1	1:A:712:LEU:N	0.46	2.79	7	1	
1:A:416:ALA:O	1:A:418:ASN:OD1	0.46	2.34	9	1	
1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:C	0.46	2.53	9	1	
1:A:148:ILE:CD1	1:A:166:VAL:HG22	0.46	2.40	10	1	
1:A:274:SER:O	1:A:610:TRP:CZ2	0.46	2.69	10	1	
1:A:425:MET:O	1:A:427:GLU:N	0.46	2.49	2	1	
1:A:7:GLN:HB2	1:A:12:ILE:HD11	0.46	1.88	3	1	
1:A:119:VAL:O	1:A:120:PRO:C	0.46	2.54	3	1	
1:A:239:GLU:OE2	1:A:317:ARG:NH1	0.46	2.49	3	1	
1:A:265:ILE:HD13	1:A:265:ILE:N	0.46	2.25	3	1	
1:A:451:THR:O	1:A:451:THR:HG22	0.46	2.10	4	1	
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:CB	0.46	2.79	4	1	
1:A:96:GLU:O	1:A:436:ARG:NH2	0.46	2.42	5	1	
1:A:402:ALA:O	1:A:406:PHE:CB	0.46	2.64	5	1	
1:A:7:GLN:O	1:A:8:SER:C	0.46	2.52	6	2	
1:A:426:ASP:OD2	1:A:428:GLU:O	0.46	2.34	7	1	
1:A:365:VAL:O	1:A:368:GLY:N	0.46	2.45	8	1	
1:A:94:GLN:OE1	1:A:95:PRO:O	0.46	2.34	9	1	
1:A:337:ILE:O	1:A:389:VAL:HG23	0.46	2.11	9	1	
1:A:403:ASN:ND2	1:A:441:GLN:NE2	0.46	2.64	1	1	
1:A:116:GLN:O	1:A:535:VAL:HG22	0.46	2.11	2	1	
1:A:175:ASP:CG	1:A:184:SER:HG	0.46	2.13	2	1	
1:A:272:GLU:N	1:A:272:GLU:CD	0.46	2.69	3	1	
1:A:439:ILE:HD12	1:A:498:LEU:CD2	0.46	2.40	3	1	
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:OD1	0.46	2.35	4	3	
1:A:275:VAL:CG2	1:A:276:ALA:N	0.46	2.78	4	1	
1:A:367:THR:HG23	1:A:368:GLY:N	0.46	2.25	5	1	
1:A:430:ARG:C	1:A:432:SER:N	0.46	2.68	5	1	
1:A:383:THR:OG1	1:A:387:TYR:CE2	0.46	2.61	6	1	
1:A:464:VAL:C	1:A:466:GLU:N	0.46	2.69	6	1	
1:A:147:ILE:O	1:A:147:ILE:HG22	0.46	2.11	9	1	
1:A:462:HIS:CD2	1:A:705:ASN:ND2	0.46	2.84	9	1	
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:ILE:CD1	0.46	2.64	10	1	
1:A:131:ALA:C	1:A:133:ALA:H	0.45	2.15	1	1	
1:A:366:MET:C	1:A:368:GLY:N	0.45	2.68	1	2	



		(1,1,(3))	D1 (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:198:LEU:N	1:A:198:LEU:HD12	0.45	2.26	9	4	
1:A:394:HIS:NE2	1:A:441:GLN:NE2	0.45	2.64	3	1	
1:A:423:GLY:HA2	1:A:448:PHE:HB2	0.45	1.87	3	1	
1:A:445:ARG:H	1:A:445:ARG:HD3	0.45	1.71	3	1	
1:A:129:ASN:O	1:A:129:ASN:ND2	0.45	2.46	6	1	
1:A:688:CYS:O	1:A:690:PHE:N	0.45	2.49	6	1	
1:A:691:LYS:O	1:A:693:ALA:N	0.45	2.49	7	1	
1:A:108:GLU:OE2	1:A:112:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1	
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CD1	0.45	2.69	8	1	
1:A:570:GLU:OE1	1:A:570:GLU:CA	0.45	2.63	8	1	
1:A:714:ALA:O	1:A:716:ARG:N	0.45	2.49	10	1	
1:A:106:ASP:O	1:A:107:SER:C	0.45	2.54	5	3	
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:O	0.45	2.34	2	2	
1:A:698:PHE:C	1:A:700:GLY:H	0.45	2.14	2	2	
1:A:269:LEU:N	1:A:269:LEU:HD23	0.45	2.26	3	1	
1:A:412:MET:SD	1:A:412:MET:C	0.45	2.94	3	1	
1:A:630:GLU:CG	1:A:634:THR:OG1	0.45	2.64	4	1	
1:A:637:ILE:CG2	1:A:638:SER:N	0.45	2.79	4	1	
1:A:99:THR:O	1:A:101:GLU:OE1	0.45	2.34	6	1	
1:A:338:ARG:HH22	1:A:454:LEU:CD1	0.45	2.24	6	1	
1:A:655:GLN:NE2	1:A:656:VAL:N	0.45	2.64	6	1	
1:A:16:PHE:CG	1:A:284:ILE:CD1	0.45	2.99	9	1	
1:A:191:PHE:CE2	1:A:256:ILE:HD11	0.45	2.46	9	1	
1:A:220:ARG:NH2	1:A:318:HIS:O	0.45	2.49	9	1	
1:A:701:VAL:HG23	1:A:702:LYS:HZ2	0.45	1.72	9	1	
1:A:397:GLN:NE2	1:A:401:PHE:CZ	0.45	2.84	10	1	
1:A:583:GLU:C	1:A:585:ALA:N	0.45	2.70	10	1	
1:A:459:ASP:O	1:A:460:GLU:C	0.45	2.55	10	2	
1:A:178:LEU:HD22	1:A:215:GLN:NE2	0.45	2.26	2	1	
1:A:425:MET:SD	1:A:450:ASN:OD1	0.45	2.74	2	1	
1:A:228:CYS:SG	1:A:240:LEU:O	0.45	2.70	3	1	
1:A:457:THR:C	1:A:459:ASP:N	0.45	2.70	4	2	
1:A:234:ASN:CB	1:A:549:HIS:CD2	0.45	2.99	6	1	
1:A:270:ASP:HB3	1:A:274:SER:H	0.45	1.71	6	1	
1:A:343:LEU:C	1:A:345:THR:N	0.45	2.69	6	1	
1:A:493:GLY:C	1:A:495:PHE:N	0.45	2.69	6	1	
1:A:35:PHE:C	1:A:37:ARG:N	0.45	2.69	7	1	
1:A:134:ARG:NE	1:A:330:HIS:O	0.45	2.47	7	1	
1:A:341:GLY:O	1:A:343:LEU:N	0.45	2.49	7	1	
1:A:341:GLY:C	1:A:343:LEU:N	0.45	2.70	7	1	
1:A:67:TRP:O	1:A:68:HIS:C	0.45	2.53	8	1	



Atom 1	A + 2	$Clash(\hat{\lambda})$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:C	0.45	2.54	10	1	
1:A:411:THR:CG2	1:A:412:MET:N	0.45	2.80	10	1	
1:A:427:GLU:OE2	1:A:493:GLY:CA	0.45	2.64	10	1	
1:A:550:GLN:O	1:A:550:GLN:CG	0.45	2.65	10	1	
1:A:583:GLU:O	1:A:585:ALA:N	0.45	2.49	10	1	
1:A:455:ASP:C	1:A:457:THR:N	0.45	2.68	8	3	
1:A:279:ASP:CG	1:A:280:ALA:N	0.45	2.70	5	1	
1:A:448:PHE:O	1:A:448:PHE:CD1	0.45	2.70	5	1	
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:O	0.45	2.11	6	1	
1:A:563:THR:CG2	1:A:564:GLU:N	0.45	2.77	8	2	
1:A:612:GLU:OE1	1:A:612:GLU:CA	0.45	2.64	7	1	
1:A:151:GLU:OE1	1:A:619:LYS:NZ	0.45	2.48	8	1	
1:A:428:GLU:O	1:A:428:GLU:OE1	0.45	2.35	8	1	
1:A:149:PRO:O	1:A:150:GLN:O	0.45	2.35	9	1	
1:A:582:ALA:O	1:A:584:ASN:N	0.45	2.49	9	1	
1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:NE	0.45	2.08	1	1	
1:A:393:MET:CB	1:A:438:CYS:SG	0.45	3.05	1	1	
1:A:150:GLN:OE1	1:A:627:ALA:CB	0.45	2.65	2	1	
1:A:179:PRO:O	1:A:180:LEU:O	0.45	2.34	8	2	
1:A:496:CYS:O	1:A:497:GLY:C	0.45	2.55	2	2	
1:A:498:LEU:CB	1:A:502:ALA:HB2	0.45	2.41	2	1	
1:A:421:LYS:HB3	1:A:447:ALA:HB3	0.45	1.89	3	1	
1:A:504:ILE:HD12	1:A:504:ILE:N	0.45	2.25	3	1	
1:A:636:ARG:NE	1:A:708:THR:OG1	0.45	2.50	3	1	
1:A:270:ASP:O	1:A:338:ARG:O	0.45	2.34	4	1	
1:A:431:THR:O	1:A:432:SER:O	0.45	2.35	5	1	
1:A:485:TYR:CE1	1:A:489:ASN:ND2	0.45	2.85	5	1	
1:A:166:VAL:O	1:A:170:VAL:HG23	0.45	2.12	6	1	
1:A:517:ASP:O	1:A:520:SER:N	0.45	2.48	6	1	
1:A:687:SER:O	1:A:689:ALA:N	0.45	2.50	6	1	
1:A:57:ARG:HH11	1:A:392:LYS:NZ	0.45	2.10	7	1	
1:A:456:ARG:N	1:A:456:ARG:CD	0.45	2.79	7	1	
1:A:397:GLN:CD	1:A:397:GLN:N	0.45	2.69	8	1	
1:A:496:CYS:O	1:A:498:LEU:HD13	0.45	2.12	8	1	
1:A:539:THR:O	1:A:543:LEU:CD1	0.45	2.65	8	1	
1:A:637:ILE:O	1:A:637:ILE:CG2	0.45	2.63	8	1	
1:A:659:SER:O	1:A:663:MET:CE	0.45	2.64	8	1	
1:A:449:ILE:HG21	1:A:502:ALA:CB	0.45	2.40	9	1	
1:A:527:ARG:CD	1:A:527:ARG:N	0.45	2.79	9	1	
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:CA	0.45	2.65	9	1	
1:A:282:ASP:O	1:A:283:LYS:C	0.45	2.54	4	7	

Continued from previous page...

 $\begin{array}{c|cccc} 2.54 & 4 & 7 \\ \hline Continued \ on \ next \ page... \end{array}$



				Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:425:MET:O	1:A:427:GLU:OE2	0.45	2.33	2	1
1:A:177:SER:OG	1:A:549:HIS:ND1	0.45	2.41	3	1
1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:CB	0.45	2.65	3	1
1:A:601:GLN:OE1	1:A:601:GLN:O	0.45	2.34	3	1
1:A:147:ILE:HD12	1:A:543:LEU:HD11	0.45	1.88	4	1
1:A:297:THR:O	1:A:297:THR:HG22	0.45	2.12	6	1
1:A:451:THR:OG1	1:A:452:GLY:N	0.45	2.50	6	1
1:A:498:LEU:CD1	1:A:498:LEU:H	0.45	2.21	6	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:O	0.45	2.11	7	1
1:A:632:ARG:HH11	1:A:632:ARG:CG	0.45	2.23	7	1
1:A:249:GLY:O	1:A:252:ASP:O	0.45	2.35	10	2
1:A:330:HIS:C	1:A:332:ARG:H	0.45	2.14	8	1
1:A:520:SER:O	1:A:524:ASP:OD2	0.45	2.35	8	1
1:A:37:ARG:O	1:A:41:GLU:OE1	0.45	2.35	9	1
1:A:393:MET:SD	1:A:393:MET:C	0.45	2.95	9	2
1:A:283:LYS:NZ	1:A:348:VAL:HG22	0.45	2.27	10	1
1:A:491:LEU:C	1:A:493:GLY:N	0.45	2.68	10	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:144:GLY:N	0.45	2.85	2	2
1:A:539:THR:C	1:A:541:ALA:N	0.45	2.70	1	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:OD1	0.45	2.34	2	2
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:CB	0.45	2.64	3	3
1:A:721:GLU:O	1:A:723:HIS:N	0.45	2.49	2	1
1:A:441:GLN:C	1:A:441:GLN:NE2	0.45	2.70	4	1
1:A:622:ASP:O	1:A:624:HIS:N	0.45	2.44	4	1
1:A:421:LYS:O	1:A:422:MET:CG	0.45	2.64	5	2
1:A:500:GLY:O	1:A:557:GLN:OE1	0.45	2.34	5	1
1:A:719:GLU:O	1:A:723:HIS:N	0.45	2.50	6	1
1:A:38:ASN:HD21	1:A:412:MET:CB	0.45	2.24	7	1
1:A:344:MET:SD	1:A:713:HIS:ND1	0.45	2.89	7	1
1:A:518:MET:SD	1:A:522:LYS:CE	0.45	3.05	7	1
1:A:276:ALA:HB2	1:A:709:GLU:OE2	0.45	2.10	9	1
1:A:600:VAL:CG2	1:A:601:GLN:H	0.45	2.24	9	1
1:A:695:ASP:O	1:A:699:LEU:N	0.45	2.36	9	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:ALA:CA	0.45	2.79	10	1
1:A:219:TYR:CD2	1:A:220:ARG:N	0.45	2.85	3	1
1:A:379:LYS:O	1:A:380:ASN:OD1	0.45	2.35	3	1
1:A:133:ALA:O	1:A:135:TRP:N	0.45	2.50	4	1
1:A:465:MET:O	1:A:467:ALA:N	0.45	2.50	7	2
1:A:297:THR:CG2	1:A:332:ARG:NH2	0.45	2.80	5	1
1:A:699:LEU:CD2	1:A:699:LEU:N	0.45	2.79	5	1
1:A:456:ARG:O	1:A:458:GLY:N	0.45	2.50	8	1



		(1,1)	D : (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:65:ASP:OD2	1:A:69:ARG:NE	0.45	2.49	10	1	
1:A:44:HIS:O	1:A:48:PRO:CG	0.45	2.65	1	1	
1:A:176:GLU:N	1:A:176:GLU:CD	0.45	2.71	1	2	
1:A:273:ASP:O	1:A:274:SER:OG	0.45	2.34	1	1	
1:A:624:HIS:O	1:A:626:VAL:N	0.45	2.50	1	2	
1:A:624:HIS:C	1:A:626:VAL:N	0.45	2.70	1	2	
1:A:524:ASP:OD2	1:A:527:ARG:NH1	0.45	2.42	2	1	
1:A:385:SER:O	1:A:387:TYR:CE1	0.45	2.70	3	1	
1:A:130:ALA:O	1:A:133:ALA:N	0.45	2.42	9	3	
1:A:234:ASN:OD1	1:A:549:HIS:O	0.45	2.35	5	1	
1:A:357:ILE:O	1:A:357:ILE:CG1	0.45	2.64	6	1	
1:A:110:THR:O	1:A:111:SER:OG	0.45	2.35	7	1	
1:A:270:ASP:OD1	1:A:271:CYS:N	0.45	2.50	7	1	
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:NE	0.45	2.49	7	1	
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:CD1	0.45	2.81	10	1	
1:A:340:VAL:HG21	1:A:345:THR:OG1	0.45	2.11	10	1	
1:A:434:ASN:C	1:A:436:ARG:N	0.45	2.70	5	2	
1:A:587:TRP:CH2	1:A:645:TRP:CH2	0.45	3.05	2	1	
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:VAL:O	0.45	2.12	3	1	
1:A:498:LEU:O	1:A:499:ARG:HB2	0.45	2.10	3	1	
1:A:591:GLU:O	1:A:595:GLU:OE1	0.45	2.34	4	3	
1:A:40:ASP:O	1:A:44:HIS:CD2	0.45	2.70	4	1	
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:HD12	0.45	2.32	4	1	
1:A:367:THR:O	1:A:369:ALA:N	0.45	2.50	6	1	
1:A:508:MET:SD	1:A:534:TRP:CE3	0.45	3.10	6	1	
1:A:19:PHE:HB2	1:A:284:ILE:HD11	0.45	1.88	7	1	
1:A:641:HIS:O	1:A:642:ILE:C	0.45	2.55	7	1	
1:A:212:THR:O	1:A:212:THR:OG1	0.45	2.31	8	1	
1:A:336:PHE:CE1	1:A:389:VAL:HG22	0.45	2.47	9	1	
1:A:129:ASN:N	1:A:129:ASN:HD22	0.45	2.09	10	1	
1:A:459:ASP:O	1:A:461:MET:N	0.45	2.50	10	1	
1:A:285:LEU:HD23	1:A:285:LEU:O	0.44	2.12	1	1	
1:A:532:THR:HG22	1:A:533:ALA:N	0.44	2.27	1	1	
1:A:600:VAL:O	1:A:601:GLN:C	0.44	2.55	1	4	
1:A:238:ILE:HG23	1:A:261:VAL:HG12	0.44	1.88	7	2	
1:A:150:GLN:NE2	1:A:162:ARG:NE	0.44	2.65	3	1	
1:A:439:ILE:O	1:A:440:ALA:C	0.44	2.55	8	5	
1:A:451:THR:HG21	1:A:534:TRP:HB3	0.44	1.88	4	1	
1:A:531:ASN:ND2	1:A:532:THR:HG23	0.44	2.27	4	1	
1:A:546:LEU:HD12	1:A:546:LEU:N	0.44	2.27	5	1	
1:A:134:ARG:HE	1:A:332:ARG:C	0.44	2.15	6	1	



Atom-1Atom-2Crash(A)Distance(A)WorstTotaI:A:162:ARG:HH211:A:165:GLN:NE20.442.10611:A:705:ASN:ND21:A:706:GLY:N0.442.65611:A:19:PHE:O1:A:23:GLU:CB0.442.65821:A:54:LEU:CD21:A:342:HIS:CE10.443.00811:A:54:LEU:HD121:A:32:GRE/H210.441.701011:A:54:LEU:HD121:A:32:ARCH1210.441.701011:A:36:TRP:O1:A:36:TRP:OD10.442.71211:A:36:TRP:O1:A:36:TRP:OD20.442.35821:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:CB0.442.64211:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:CB0.442.64211:A:47:PRO:O1:A:453:PHE:CB0.442.64411:A:47:PRO:O1:A:457:HIS:OD20.442.71311:A:47:PRO:O1:A:467:ALA:N0.442.35421:A:41:A:AD1:A:457:ADS:OD10.442.35421:A:41:CA:MA:HB21:A:425:ASN:O1:A:425:ASN:O1:A:425:ASN:O11:A:42:CEU:HD111:A:208:THR:HG210.442.35511:A:42:CU:HD111:A:208:THR:HG210.442.351021:A:42:CU:HD111:A:208:THR:HG210.442.49111:A:42:CU:HD111:A:208:THR:HG210.442.4911<	At area 1	Atom 2	$Clash(\hat{\lambda})$	\mathbf{D}	Models	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:705:ASN:ND2 1:A:706:GLY:N 0.44 2.65 6 1 1:A:19:PHE:O 1:A:323:GLUCB 0.44 2.65 8 2 1:A:54:LEU:CD2 1:A:324:HIS:CE1 0.44 3.00 8 1 1:A:54:LEU:CD2 1:A:325:GLN:N 0.44 2.50 8 1 1:A:34:LEU:HD12 1:A:382:ARG:HH21 0.44 1.70 10 1 1:A:351:EU:N 1:A:36:TRP:CD1 0.44 2.71 2 1 1:A:65:LEU:N 1:A:453:PECD2 0.44 2.71 2 1 1:A:452:GLY:O 1:A:453:PECB 0.44 2.64 2 1 1:A:452:GLY:O 1:A:453:PECB 0.44 1.72 4 1 1:A:452:GLY:O 1:A:453:PECB 0.44 1.72 4 1 1:A:452:GLY:O 1:A:467:ALA:N 0.44 2.36 4 1 1:A:465:MET:C 1:A:467:ALA:N 0.44 2.35 5 1 1:A:465:MET:C 1:A:467:ALA:N 0.44 2.35 1 1 1:A:465:MET:C 1:A:467:ALA:N <td>1:A:162:ARG:HH21</td> <td>1:A:165:GLN:NE2</td> <td>0.44</td> <td>2.10</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:162:ARG:HH21	1:A:165:GLN:NE2	0.44	2.10	6	1
1:A:19:PHE:O $1:A:23:GLU:CB$ 0.44 2.65 8 2 $1:A:54:LEU:CD2$ $1:A:23:GLU:CB$ 0.44 3.00 8 1 $1:A:52:LA:SP:OD1$ $1:A:52:GLN:N$ 0.44 2.50 8 1 $1:A:34:LEU:HD12$ $1:A:52:GLN:N$ 0.44 1.70 10 1 $1:A:34:LEU:HD12$ $1:A:38:CRG:HH21$ 0.44 1.72 1 1 $1:A:36:TRP:O$ $1:A:36:TRP:CD1$ 0.44 2.71 2 1 $1:A:36:TRP:O$ $1:A:45:PRO:HD3$ 0.44 2.35 8 2 $1:A:45:SE:CG$ $1:A:46:SP:OD2$ 0.44 2.35 8 2 $1:A:45:THS:O$ $1:A:45:PRO:D2$ 0.44 2.64 2 1 $1:A:54:THS:O$ $1:A:45:PHE:CB$ 0.44 2.64 2 1 $1:A:45:THS:O$ $1:A:45:PHE:CB$ 0.44 2.64 2 1 $1:A:45:THS:O$ $1:A:45:PHE:CB$ 0.44 2.64 2 1 $1:A:45:THS:O$ $1:A:45:PHE:CB$ 0.44 2.64 2 1 $1:A:45:CHC:O$ $1:A:45:PHE:CB$ 0.44 2.35 4 2 $1:A:17:LYS:O$ $1:A:45:PHE:O$ 0.44 2.35 5 1 $1:A:16:SE:CD1$ 0.44 2.35 10 2 $1:A:62:ASN:O$ 0.44 2.35 10 2 $1:A:62:ASN:O$ 0.44 2.35 10 2 $1:A:20:LEU:HD1$ $1:A:20:THR:HC1$ 0.44 2.80 9 1 <td>1:A:705:ASN:ND2</td> <td>1:A:706:GLY:N</td> <td>0.44</td> <td>2.65</td> <td>6</td> <td>1</td>	1:A:705:ASN:ND2	1:A:706:GLY:N	0.44	2.65	6	1
1:A:54:LEU:CD21:A:342:HIS:CE10.443.00811:A:524:ASP:OD11:A:325:GLN:N0.442.50811:A:334:LEU:HD121:A:382:ARG:HH210.441.701011:A:351:HD121:A:382:ARG:HH210.441.72111:A:36:TRP:O1:A:512:PRO:HD30.441.72111:A:53:LEU:N1:A:53:LEU:CD10.442.71211:A:36:TRP:O1:A:40:ASP:OD20.442.35821:A:452:GLY:O1:A:43:PHE:CB0.442.64211:A:547:HIS:O1:A:547:HIS:CD20.442.64211:A:47:PRO:O1:A:48:SN:OD10.442.36411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.36411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:47:OASP:OD0.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:47:OASP:OD0.442.35121:A:42:CU:HD111:A:20:ASP:OD20.442.49911:A:43:ASR:OG1:A:43:ASP:OD20.442.49911:A:43:CHR:N0.442.809111:A:44:ASN:OD1:A:43:ASP:OD20.442.49111:A:45:ASP:NO1:A:43:ASP:ND20.442.49111:A:43:ASP:NO1:A:43:ASP:ND20.442.65111:A:43:ASP:NO1:A:43:ASP:N	1:A:19:PHE:O	1:A:23:GLU:CB	0.44	2.65	8	2
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	1:A:54:LEU:CD2	1:A:342:HIS:CE1	0.44	3.00	8	1
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1:A:524:ASP:OD1	1:A:525:GLN:N	0.44	2.50	8	1
1:A:511:MET:H1:A:512:PRO:HD30.441.72111:A:36:TRP:O1:A:36:TRP:CD10.442.71211:A:36:TRP:O1:A:36:TRP:CD10.442.71211:A:137:SER:OG1:A:140:ASP:OD20.442.35821:A:452:GLY:O1:A:452:PHE:CB0.442.64211:A:547:HIS:O1:A:452:PHE:CB0.442.64211:A:547:HIS:O1:A:457:HIS:CD20.442.71311:A:477:PRO:O1:A:48:ASN:OD10.442.36411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.36411:A:65:ASN:O1:A:662:VAL:O0.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD10.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD10.442.351021:A:202:LEU:HD111:A:208:THR:HG210.442.351021:A:463:ARG:CD1:A:436:ARG:N0.442.49911:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O0.442.49911:A:35:PHE:O1:A:564:GLU:HB30.442.65111:A:30:HIS:NE21:A:30:LEU:ND10.442.69321:A:31:ASP:N1:A:30:LEU:N0.442.69311:A:33:HIS:NE21:A:33:AEU:HD120.442.69311:A:32:GLN:O1:A:456:GLU:HD120.442.69311:A:33:ASN:O	1:A:334:LEU:HD12	1:A:382:ARG:HH21	0.44	1.70	10	1
1:A:36:TRP:O1:A:36:TRP:CD10.442.71211:A:53:LEU:N1:A:53:LEU:CD10.442.79211:A:137:SER:OG1:A:140:ASP:OD20.442.35821:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:CB0.442.64211:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:CB0.442.71311:A:78:LYS:HZ31:A:82:LYS:HB20.441.72411:A:467:HIS:O1:A:467:ALA:N0.442.36411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.35421:A:17:LYS:O1:A:4270:ASP:OD10.442.35511:A:17:LYS:O1:A:4270:ASP:OD10.442.351021:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD20.442.12611:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD20.442.49911:A:462:GLY:N1:A:46:ARG:N0.442.49911:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O0.442.49911:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O0.442.49111:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND20.442.65111:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND20.442.60111:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:N0.442.60321:A:428:THR:C1:A:36:CLU:OE10.442.35521:A:429:ASN:O1:A:36:CRP:N0.442.60311:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:	1:A:511:MET:H	1:A:512:PRO:HD3	0.44	1.72	1	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:36:TRP:O	1:A:36:TRP:CD1	0.44	2.71	2	1
1:A:137:SER:OG1:A:140:ASP:OD20.442.35821:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:CB0.442.64211:A:547:HIS:O1:A:453:PHE:CB0.442.71311:A:78:LVS:HZ31:A:82:LYS:HB20.441.72411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.36411:A:465:MET:C1:A:467:ALA:N0.442.35421:A:625:ASN:O1:A:626:VAL:O0.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD0.442.35121:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD0.442.351021:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:OD0.442.351021:A:20:CLU:HD111:A:208:THR:HG210.441.88711:A:452:GLY:N1:A:456:ARG:N0.442.49911:A:452:GLY:N1:A:36:ARG:N0.442.49911:A:452:GLY:N1:A:36:AG:N0.442.49911:A:456:ARG:CD1:A:36:AG:ND20.442.49111:A:35:PHE:O1:A:36:AG:ND20.442.65111:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:ND20.442.65111:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:ND10.442.60321:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:N0.442.50211:A:32:ALA:O1:A:36:CEU:ND10.442.35521:A:23:ASN:O1:A:36:CEU	1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:CD1	0.44	2.79	2	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:137:SER:OG	1:A:140:ASP:OD2	0.44	2.35	8	2
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:CB	0.44	2.64	2	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:547:HIS:O	1:A:547:HIS:CD2	0.44	2.71	3	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:78:LYS:HZ3	1:A:82:LYS:HB2	0.44	1.72	4	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:417:PRO:O	1:A:418:ASN:OD1	0.44	2.36	4	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:465:MET:C	1:A:467:ALA:N	0.44	2.70	7	2
1:A:17:LYS:O1:A:21:ASP:OD10.442.35511:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:O0.442.12611:A:184:SER:OG1:A:187:ASP:OD20.442.351021:A:202:LEU:HD111:A:208:THR:HG210.441.88711:A:436:ARG:CD1:A:436:ARG:N0.442.80911:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O0.442.49911:A:456:THR:O1:A:564:GLU:HB30.442.121011:A:35:PHE:O1:A:39:PHE:CB0.442.65111:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND20.442.27111:A:30:HIS:NE21:A:34:ASN:ND20.442.69321:A:32:ALA:O1:A:31:ASP:OD10.442.69321:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:N0.442.69321:A:23:ALA:O1:A:36:TRP:N0.442.35521:A:21:HR:C1:A:30:LEU:N0.442.35521:A:23:ALA:O1:A:36:TRP:N0.442.35521:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:OE10.442.35611:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:OE10.442.35611:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:OE10.442.35611:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:242:HET:C1:A:428:GLU:O<	1:A:625:ASN:O	1:A:626:VAL:O	0.44	2.35	4	2
1:A:121:ALA:HB21:A:270:ASP:O 0.44 2.12 6 1 1:A:184:SER:OG1:A:187:ASP:OD2 0.44 2.35 10 2 1:A:202:LEU:HD111:A:208:THR:HG21 0.44 1.88 7 1 1:A:436:ARG:CD1:A:436:ARG:N 0.44 2.80 9 1 1:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O 0.44 2.49 9 1 1:A:563:THR:O1:A:504:GLU:HB3 0.44 2.12 10 1 1:A:563:THR:O1:A:39:PHE:CB 0.44 2.65 1 1 1:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND2 0.44 2.49 1 1 1:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND2 0.44 2.27 1 1 1:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:OD1 0.44 2.50 2 1 1:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:N 0.44 2.50 3 1 1:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE2 0.44 2.71 3 1 1:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE1 0.44 2.35 5 2 1:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.36 6 1 1:A:23:ASN:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.42 10 1 1:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.42 10 1 1:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.42 10 1 1:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.42 10 1 1:A:429:MET:CG1:A:370:LE:HD12 0.44 2.42 10 </td <td>1:A:17:LYS:O</td> <td>1:A:21:ASP:OD1</td> <td>0.44</td> <td>2.35</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:17:LYS:O	1:A:21:ASP:OD1	0.44	2.35	5	1
1:A:184:SER:OG1:A:187:ASP:OD2 0.44 2.35 10 2 1:A:202:LEU:HD111:A:208:THR:HG21 0.44 1.88 7 1 1:A:436:ARG:CD1:A:436:ARG:N 0.44 2.80 9 1 1:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O 0.44 2.49 9 1 1:A:563:THR:O1:A:564:GLU:HB3 0.44 2.12 10 1 1:A:35:PHE:O1:A:39:PHE:CB 0.44 2.65 1 1 1:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND2 0.44 2.49 1 1 1:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND2 0.44 2.27 1 1 1:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:OD1 0.44 2.50 2 1 1:A:32:ALA:O1:A:30:LEU:N 0.44 2.50 3 2 1:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE2 0.44 2.71 3 1 1:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE1 0.44 2.35 5 2 1:A:21:TYR:O1:A:320:THR:OG1 0.44 2.35 6 1 1:A:23:ASN:O1:A:56:GLU:OE1 0.44 2.35 6 1 1:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O 0.44 2.89 8 1 1:A:66:ASN:H1:A:662:ASN:ND2 0.44 2.42 10 1 1:A:33:SER:C1:A:370:ILE:HD12 0.44 2.42 10 1 1:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H 0.44 1.72 10 1 1:A:56:ASN:HD2 $1:A:428:GLH22$ 0.44 1.54	1:A:121:ALA:HB2	1:A:270:ASP:O	0.44	2.12	6	1
I:A:202:LEU:HD11 $I:A:208:THR:HG21$ 0.44 1.88 7 1 $I:A:436:ARG:CD$ $I:A:436:ARG:N$ 0.44 2.80 9 1 $I:A:452:GLY:N$ $I:A:505:GLY:O$ 0.44 2.49 9 1 $I:A:563:THR:O$ $I:A:564:GLU:HB3$ 0.44 2.12 10 1 $I:A:35:PHE:O$ $I:A:39:PHE:CB$ 0.44 2.65 1 1 $I:A:31:ASN:O$ $I:A:31:ASN:ND2$ 0.44 2.49 1 1 $I:A:30:HIS:NE2$ $I:A:334:LEU:HD12$ 0.44 2.27 1 1 $I:A:31:ASP:N$ $I:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $I:A:32:ALA:O$ $I:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $I:A:32:ALA:O$ $I:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $I:A:695:ASP:OD2$ $I:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $I:A:52:GLN:O$ $I:A:75:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $I:A:23:ASN:O$ $I:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $I:A:23:ASN:O$ $I:A:428:GLU:O$ 0.44 2.35 6 1 $I:A:26:FPHE:C$ $I:A:30:LEHD12$ 0.44 2.49 8 1 $I:A:62:ASN:H$ $I:A:62:ASN:ND2$ 0.44 2.42 10 1 $I:A:427:GLU:O$ $I:A:370:ILE:HD12$ 0.44 2.42 10 1 $I:A:33:SER:C$ $I:A:38:ARG:HH22$ 0.44 2.16 10 1 $I:A:340:VA$	1:A:184:SER:OG	1:A:187:ASP:OD2	0.44	2.35	10	2
1:A:436:ARG:CD1:A:436:ARG:N0.442.80911:A:452:GLY:N1:A:505:GLY:O0.442.49911:A:563:THR:O1:A:564:GLU:HB30.442.121011:A:35:PHE:O1:A:39:PHE:CB0.442.65111:A:31:ASN:O1:A:314:ASN:ND20.442.49111:A:30:HIS:NE21:A:34:LEU:HD120.442.27111:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:OD10.442.50211:A:28:THR:C1:A:30:LEU:N0.442.69321:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:N0.442.50311:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE20.442.71311:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE10.442.35521:A:23:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.35611:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:55:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.35611:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:33:SER:C1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.72101	1:A:202:LEU:HD11	1:A:208:THR:HG21	0.44	1.88	7	1
1:A:452:GLY:N $1:A:505:GLY:O$ 0.44 2.49 9 1 $1:A:563:THR:O$ $1:A:564:GLU:HB3$ 0.44 2.12 10 1 $1:A:35:PHE:O$ $1:A:39:PHE:CB$ 0.44 2.65 1 1 $1:A:31:ASN:O$ $1:A:31:ASN:ND2$ 0.44 2.49 1 1 $1:A:31:ASN:O$ $1:A:31:ASN:ND2$ 0.44 2.27 1 1 $1:A:30:HIS:NE2$ $1:A:334:LEU:HD12$ 0.44 2.27 1 1 $1:A:31:ASP:N$ $1:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:52:GLN:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:320:THR:OG1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:242:GLU:O$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:62:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.89 8 1 $1:A:62:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.16 0 1 $1:A:33:SER:C$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 2.16 10 1 $1:A:340:VAL:HG22$ <	1:A:436:ARG:CD	1:A:436:ARG:N	0.44	2.80	9	1
1:A:563:THR:O1:A:564:GLU:HB30.442.121011:A:35:PHE:O1:A:39:PHE:CB0.442.65111:A:31:ASN:O1:A:31:ASN:ND20.442.49111:A:30:HIS:NE21:A:334:LEU:HD120.442.27111:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:OD10.442.50211:A:32:THR:C1:A:30:LEU:N0.442.69321:A:28:THR:C1:A:30:LEU:N0.442.69311:A:28:THR:C1:A:30:LEU:N0.442.50311:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE20.442.71311:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE10.442.35521:A:219:TYR:O1:A:320:THR:OG10.442.35611:A:23:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.35611:A:23:ASN:O1:A:567:ALA:H0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:191:PHE:CG0.442.49811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.421011:A:33:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.421011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:452:GLY:N	1:A:505:GLY:O	0.44	2.49	9	1
1:A:35:PHE:O $1:A:39:PHE:CB$ 0.44 2.65 1 1 $1:A:314:ASN:O$ $1:A:314:ASN:ND2$ 0.44 2.49 1 1 $1:A:330:HIS:NE2$ $1:A:334:LEU:HD12$ 0.44 2.27 1 1 $1:A:330:HIS:NE2$ $1:A:334:LEU:HD12$ 0.44 2.27 1 1 $1:A:31:ASP:N$ $1:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $1:A:31:ASP:N$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:28:THR:C$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:52:GLN:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:320:THR:OG1$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.70 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:427:GLU:O$ $1:A:428:GLU:O$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:427:GLU:O$ $1:A:428:GLU:O$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:662:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.16 6 2 $1:A:662:ASN:H$ $1:A:36:ASN:ND2$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:333:SER:C$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 1.72 10 1 $1:A:340:VAL$	1:A:563:THR:O	1:A:564:GLU:HB3	0.44	2.12	10	1
1:A:314:ASN:O1:A:314:ASN:ND2 0.44 2.49 111:A:330:HIS:NE21:A:334:LEU:HD12 0.44 2.27 111:A:31:ASP:N1:A:31:ASP:OD1 0.44 2.50 211:A:31:ASP:N1:A:30:LEU:N 0.44 2.69 321:A:32:ALA:O1:A:36:TRP:N 0.44 2.69 311:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE2 0.44 2.71 311:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE2 0.44 2.71 311:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE1 0.44 2.35 521:A:219:TYR:O1:A:320:THR:OG1 0.44 2.36 611:A:23:ASN:O1:A:549:HIS:CE1 0.44 2.70 611:A:427:GLU:O1:A:549:HIS:CE1 0.44 2.35 611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H 0.44 2.35 611:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG 0.44 2.89 811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND2 0.44 2.10 911:A:33:SER:C1:A:382:ARG:HH22 0.44 2.16 1011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H 0.44 1.72 1011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H 0.44 1.54 101	1:A:35:PHE:O	1:A:39:PHE:CB	0.44	2.65	1	1
1:A:330:HIS:NE2 $1:A:334:LEU:HD12$ 0.44 2.27 1 1 $1:A:31:ASP:N$ $1:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $1:A:31:ASP:N$ $1:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $1:A:28:THR:C$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:427:GLU:O$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:565:PHE:C$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.16 6 2 $1:A:190:ALA:C$ $1:A:191:PHE:CG$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:294:MET:CG$ $1:A:370:ILE:HD12$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:340:VAL:HG22$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 1.72 10 1 $1:A:586:ASN:HD22$ $1:A:586:ASN:H$ 0.44 1.54 10 1	1:A:314:ASN:O	1:A:314:ASN:ND2	0.44	2.49	1	1
1:A:31:ASP:N $1:A:31:ASP:OD1$ 0.44 2.50 2 1 $1:A:28:THR:C$ $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:52:GLN:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:320:THR:OG1$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:427:GLU:O$ $1:A:428:GLU:O$ 0.44 2.89 8 1 $1:A:565:PHE:C$ $1:A:366:ASN:ND2$ 0.44 2.89 8 1 $1:A:62:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:33:SER:C$ $1:A:382:ARG:HH22$ 0.44 2.16 10 1 $1:A:340:VAL:HG22$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 1.72 10 1 $1:A:586:ASN:HD22$ $1:A:586:ASN:H$ 0.44 1.54 10 1	1:A:330:HIS:NE2	1:A:334:LEU:HD12	0.44	2.27	1	1
1:A:28:THR:C $1:A:30:LEU:N$ 0.44 2.69 3 2 $1:A:32:ALA:O$ $1:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:52:GLN:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:320:THR:OG1$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.70 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.70 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:242:GLU:O$ $1:A:428:GLU:O$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:36:PHE:C$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.89 8 1 $1:A:662:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.16 6 2 $1:A:333:SER:C$ $1:A:370:ILE:HD12$ 0.44 2.16 10 1 $1:A:340:VAL:HG22$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 1.72 10 1 $1:A:586:ASN:HD22$ $1:A:586:ASN:H$ 0.44 1.54 10 1 <td>1:A:31:ASP:N</td> <td>1:A:31:ASP:OD1</td> <td>0.44</td> <td>2.50</td> <td>2</td> <td>1</td>	1:A:31:ASP:N	1:A:31:ASP:OD1	0.44	2.50	2	1
1:A:32:ALA:O $1:A:36:TRP:N$ 0.44 2.50 3 1 $1:A:695:ASP:OD2$ $1:A:715:TRP:CE2$ 0.44 2.71 3 1 $1:A:52:GLN:O$ $1:A:56:GLU:OE1$ 0.44 2.35 5 2 $1:A:219:TYR:O$ $1:A:320:THR:OG1$ 0.44 2.36 6 1 $1:A:233:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.70 6 1 $1:A:233:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:23:ASN:O$ $1:A:549:HIS:CE1$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:65:PHE:C$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.35 6 1 $1:A:565:PHE:C$ $1:A:567:ALA:H$ 0.44 2.89 8 1 $1:A:662:ASN:H$ $1:A:662:ASN:ND2$ 0.44 2.42 10 1 $1:A:294:MET:CG$ $1:A:370:ILE:HD12$ 0.44 2.16 10 1 $1:A:333:SER:C$ $1:A:382:ARG:HH22$ 0.44 2.16 10 1 $1:A:340:VAL:HG22$ $1:A:341:GLY:H$ 0.44 1.72 10 1 $1:A:586:ASN:HD22$ $1:A:586:ASN:H$ 0.44 1.54 10 1	1:A:28:THR:C	1:A:30:LEU:N	0.44	2.69	3	2
1:A:695:ASP:OD21:A:715:TRP:CE20.442.71311:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE10.442.35521:A:219:TYR:O1:A:320:THR:OG10.442.36611:A:233:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.70611:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.35611:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:32:ALA:O	1:A:36:TRP:N	0.44	2.50	3	1
1:A:52:GLN:O1:A:56:GLU:OE10.442.35521:A:219:TYR:O1:A:320:THR:OG10.442.36611:A:233:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.70611:A:27:GLU:O1:A:549:HIS:CE10.442.35611:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.16621:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:695:ASP:OD2	1:A:715:TRP:CE2	0.44	2.71	3	1
1:A:219:TYR:O1:A:320:THR:OG10.442.36611:A:233:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.70611:A:233:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.70611:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.16621:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:52:GLN:O	1:A:56:GLU:OE1	0.44	2.35	5	2
1:A:233:ASN:O1:A:549:HIS:CE10.442.70611:A:27:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.16621:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:219:TYR:O	1:A:320:THR:OG1	0.44	2.36	6	1
1:A:427:GLU:O1:A:428:GLU:O0.442.35611:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.16621:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:233:ASN:O	1:A:549:HIS:CE1	0.44	2.70	6	1
1:A:565:PHE:C1:A:567:ALA:H0.442.16621:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:427:GLU:O	1:A:428:GLU:O	0.44	2.35	6	1
1:A:190:ALA:C1:A:191:PHE:CG0.442.89811:A:662:ASN:H1:A:662:ASN:ND20.442.10911:A:294:MET:CG1:A:370:ILE:HD120.442.421011:A:333:SER:C1:A:382:ARG:HH220.442.161011:A:340:VAL:HG221:A:341:GLY:H0.441.721011:A:586:ASN:HD221:A:586:ASN:H0.441.54101	1:A:565:PHE:C	1:A:567:ALA:H	0.44	2.16	6	2
1:A:662:ASN:H 1:A:662:ASN:ND2 0.44 2.10 9 1 1:A:294:MET:CG 1:A:370:ILE:HD12 0.44 2.42 10 1 1:A:333:SER:C 1:A:382:ARG:HH22 0.44 2.16 10 1 1:A:340:VAL:HG22 1:A:341:GLY:H 0.44 1.72 10 1 1:A:586:ASN:HD22 1:A:586:ASN:H 0.44 1.54 10 1	1:A:190:ALA:C	1:A:191:PHE:CG	0.44	2.89	8	1
1:A:294:MET:CG 1:A:370:ILE:HD12 0.44 2.42 10 1 1:A:333:SER:C 1:A:382:ARG:HH22 0.44 2.16 10 1 1:A:340:VAL:HG22 1:A:341:GLY:H 0.44 1.72 10 1 1:A:586:ASN:HD22 1:A:586:ASN:H 0.44 1.54 10 1	1:A:662:ASN:H	1:A:662:ASN:ND2	0.44	2.10	9	1
1:A:333:SER:C 1:A:382:ARG:HH22 0.44 2.16 10 1 1:A:340:VAL:HG22 1:A:341:GLY:H 0.44 1.72 10 1 1:A:586:ASN:HD22 1:A:586:ASN:H 0.44 1.54 10 1	1:A:294:MET:CG	1:A:370:ILE:HD12	0.44	2.42	10	1
1:A:340:VAL:HG22 1:A:341:GLY:H 0.44 1.72 10 1 1:A:586:ASN:HD22 1:A:586:ASN:H 0.44 1.54 10 1	1:A:333:SER:C	1:A:382:ARG:HH22	0.44	2.16	10	1
1:A:586:ASN:HD22 1:A:586:ASN:H 0.44 1.54 10 1	1:A:340:VAL:HG22	1:A:341:GLY:H	0.44	1.72	10	1
	1:A:586:ASN:HD22	1:A:586:ASN:H	0.44	1.54	10	1



Atom 1	Atom-2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Models	
Atom-1		Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:644:ASN:OD1	1:A:644:ASN:N	0.44	2.49	10	1
1:A:658:ALA:O	1:A:661:GLU:OE2	0.44	2.34	10	1
1:A:57:ARG:HE	1:A:57:ARG:H	0.44	1.53	1	1
1:A:319:TYR:O	1:A:326:GLU:OE2	0.44	2.35	1	1
1:A:337:ILE:CG2	1:A:338:ARG:N	0.44	2.80	1	1
1:A:343:LEU:N	1:A:343:LEU:CD1	0.44	2.80	1	1
1:A:426:ASP:OD1	1:A:426:ASP:N	0.44	2.50	2	1
1:A:584:ASN:CG	1:A:585:ALA:H	0.44	2.16	2	1
1:A:67:TRP:O	1:A:71:ASN:OD1	0.44	2.36	3	1
1:A:297:THR:O	1:A:297:THR:OG1	0.44	2.36	4	2
1:A:542:THR:HG23	1:A:543:LEU:N	0.44	2.26	4	2
1:A:663:MET:O	1:A:664:ALA:C	0.44	2.56	9	4
1:A:623:ILE:HD13	1:A:623:ILE:H	0.44	1.73	5	1
1:A:665:LYS:O	1:A:669:GLN:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:250:LYS:NZ	1:A:250:LYS:CB	0.44	2.80	7	1
1:A:533:ALA:CB	1:A:544:HIS:CE1	0.44	2.99	7	1
1:A:430:ARG:NH2	1:A:463:SER:OG	0.44	2.50	10	1
1:A:655:GLN:O	1:A:655:GLN:NE2	0.44	2.50	10	1
1:A:245:ASN:O	1:A:245:ASN:ND2	0.44	2.50	1	2
1:A:286:LEU:HD23	1:A:286:LEU:C	0.44	2.33	1	1
1:A:315:ASP:O	1:A:316:ASP:C	0.44	2.56	1	1
1:A:429:ARG:NH1	1:A:460:GLU:OE2	0.44	2.51	1	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:65:ASP:N	0.44	2.50	2	1
1:A:481:TRP:CG	1:A:578:THR:HG21	0.44	2.48	2	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:534:TRP:HE1	0.44	2.25	10	2
1:A:108:GLU:CG	1:A:109:ILE:N	0.44	2.81	6	2
1:A:622:ASP:OD1	1:A:622:ASP:N	0.44	2.48	8	2
1:A:198:LEU:HD21	1:A:229:ILE:HD11	0.44	1.89	6	1
1:A:584:ASN:ND2	1:A:584:ASN:N	0.44	2.64	6	1
1:A:115:PRO:HG2	1:A:545:ALA:HB2	0.44	1.89	8	1
1:A:132:ASN:OD1	1:A:332:ARG:NE	0.44	2.50	8	1
1:A:215:GLN:OE1	1:A:232:LYS:O	0.44	2.36	8	1
1:A:94:GLN:O	1:A:95:PRO:O	0.44	2.35	9	1
1:A:105:ILE:C	1:A:107:SER:N	0.44	2.71	9	1
1:A:713:HIS:CD2	1:A:714:ALA:N	0.44	2.85	9	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:C	0.44	2.56	10	1
1:A:189:VAL:O	1:A:255:HIS:ND1	0.44	2.50	1	1
1:A:391:PRO:C	1:A:393:MET:N	0.44	2.70	1	1
1:A:424:ILE:HG22	1:A:424:ILE:O	0.44	2.12	1	1
1:A:427:GLU:N	1:A:427:GLU:CD	0.44	2.70	1	2
1:A:71:ASN:OD1	1:A:71:ASN:O	0.44	2.35	3	1

Conti d fa

Continued on next page...



	Atom 2	$Cleah(\lambda)$	\mathbf{D} : \mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:451:THR:OG1	1:A:532:THR:O	0.44	2.36	4	1	
1:A:609:ARG:NH1	1:A:617:CYS:O	0.44	2.51	4	1	
1:A:103:THR:O	1:A:104:GLY:C	0.44	2.56	5	1	
1:A:277:ALA:C	1:A:278:VAL:CG2	0.44	2.86	5	1	
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ALA:O	0.44	2.36	8	2	
1:A:197:GLN:OE1	1:A:198:LEU:O	0.44	2.35	6	1	
1:A:358:PRO:O	1:A:361:ILE:CG2	0.44	2.66	6	1	
1:A:464:VAL:O	1:A:465:MET:C	0.44	2.54	6	2	
1:A:366:MET:O	1:A:369:ALA:N	0.44	2.50	7	1	
1:A:517:ASP:OD2	1:A:521:GLN:NE2	0.44	2.51	7	1	
1:A:101:GLU:O	1:A:101:GLU:OE1	0.44	2.35	9	1	
1:A:560:ILE:O	1:A:563:THR:OG1	0.44	2.31	9	1	
1:A:276:ALA:HB1	1:A:713:HIS:NE2	0.44	2.27	1	1	
1:A:554:GLN:O	1:A:558:ALA:CB	0.44	2.65	7	2	
1:A:703:GLN:OE1	1:A:707:TYR:O	0.44	2.36	8	2	
1:A:126:TYR:CD1	1:A:632:ARG:NH2	0.44	2.86	2	1	
1:A:394:HIS:CE1	1:A:441:GLN:NE2	0.44	2.86	3	1	
1:A:290:LEU:N	1:A:290:LEU:CD1	0.44	2.80	4	1	
1:A:361:ILE:O	1:A:362:LEU:C	0.44	2.56	7	3	
1:A:375:LEU:HD21	1:A:419:THR:HG21	0.44	1.89	4	1	
1:A:272:GLU:OE2	1:A:277:ALA:O	0.44	2.36	6	1	
1:A:367:THR:O	1:A:368:GLY:C	0.44	2.56	6	1	
1:A:249:GLY:O	1:A:251:ASP:N	0.44	2.50	7	1	
1:A:241:GLN:HE22	1:A:243:ASP:CB	0.44	2.25	8	1	
1:A:282:ASP:OD1	1:A:283:LYS:N	0.44	2.51	8	1	
1:A:291:LEU:HD23	1:A:370:ILE:HG12	0.44	1.90	9	1	
1:A:118:VAL:HG23	1:A:534:TRP:CD1	0.44	2.47	10	1	
1:A:439:ILE:HG23	1:A:440:ALA:N	0.44	2.27	10	1	
1:A:498:LEU:HD22	1:A:502:ALA:HB2	0.44	1.88	1	1	
1:A:594:GLN:O	1:A:597:ASP:OD1	0.44	2.36	1	2	
1:A:278:VAL:O	1:A:279:ASP:O	0.44	2.35	2	1	
1:A:430:ARG:O	1:A:460:GLU:OE1	0.44	2.36	3	1	
1:A:433:LEU:C	1:A:433:LEU:CD1	0.44	2.86	3	1	
1:A:695:ASP:CG	1:A:715:TRP:CZ2	0.44	2.91	3	1	
1:A:461:MET:O	1:A:463:SER:N	0.44	2.50	7	2	
1:A:585:ALA:C	1:A:586:ASN:HD22	0.44	2.16	4	1	
1:A:114:GLY:O	1:A:116:GLN:OE1	0.44	2.35	5	1	
1:A:687:SER:C	1:A:689:ALA:N	0.44	2.72	5	1	
1:A:421:LYS:C	1:A:422:MET:SD	0.44	2.96	6	1	
1:A:504:ILE:H	1:A:531:ASN:HD22	0.44	1.56	6	1	
1:A:711:LEU:HG	1:A:712:LEU:N	0.44	2.28	6	1	



			D1 (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:669:GLN:NE2	1:A:669:GLN:C	0.44	2.71	7	1	
1:A:213:PRO:O	1:A:216:PHE:CE1	0.44	2.71	8	1	
1:A:604:LEU:HD22	1:A:667:VAL:HG21	0.44	1.89	8	1	
1:A:337:ILE:O	1:A:389:VAL:N	0.44	2.41	9	1	
1:A:96:GLU:C	1:A:436:ARG:HH21	0.44	2.17	10	1	
1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CD	0.44	2.72	10	1	
1:A:572:LEU:O	1:A:576:LEU:CB	0.44	2.66	1	1	
1:A:711:LEU:O	1:A:714:ALA:HB3	0.44	2.13	1	1	
1:A:123:ASN:C	1:A:125:ARG:N	0.44	2.69	2	1	
1:A:494:LEU:HD12	1:A:494:LEU:C	0.44	2.32	4	1	
1:A:208:THR:OG1	1:A:209:THR:N	0.44	2.50	5	1	
1:A:278:VAL:HG13	1:A:717:LEU:HD21	0.44	1.89	5	1	
1:A:442:ALA:C	1:A:444:ASN:N	0.44	2.71	9	2	
1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:CA	0.44	2.66	5	1	
1:A:444:ASN:HD22	1:A:445:ARG:H	0.44	1.55	6	1	
1:A:488:ASN:ND2	1:A:575:ASP:OD2	0.44	2.48	6	1	
1:A:38:ASN:OD1	1:A:412:MET:SD	0.44	2.76	7	1	
1:A:204:ASN:N	1:A:204:ASN:HD22	0.44	2.11	7	1	
1:A:339:ASN:H	1:A:339:ASN:HD22	0.44	1.53	7	1	
1:A:506:LYS:O	1:A:530:ALA:HB1	0.44	2.13	7	1	
1:A:709:GLU:O	1:A:711:LEU:N	0.44	2.51	8	2	
1:A:170:VAL:O	1:A:173:PHE:N	0.44	2.50	8	1	
1:A:184:SER:CA	1:A:187:ASP:OD1	0.44	2.66	8	1	
1:A:289:ASN:ND2	1:A:297:THR:HG21	0.44	2.28	9	1	
1:A:112:GLN:NE2	1:A:114:GLY:N	0.44	2.66	10	1	
1:A:428:GLU:O	1:A:460:GLU:OE1	0.44	2.36	10	1	
1:A:514:LEU:O	1:A:517:ASP:OD1	0.44	2.36	10	1	
1:A:669:GLN:C	1:A:671:ASN:H	0.44	2.16	10	1	
1:A:631:ASP:OD1	1:A:631:ASP:N	0.43	2.51	1	1	
1:A:111:SER:O	1:A:112:GLN:OE1	0.43	2.36	2	1	
1:A:273:ASP:OD1	1:A:274:SER:N	0.43	2.51	2	2	
1:A:706:GLY:O	1:A:707:TYR:C	0.43	2.55	3	1	
1:A:75:VAL:HG11	1:A:81:TYR:CG	0.43	2.48	4	1	
1:A:192:LYS:HZ3	1:A:199:ARG:HE	0.43	1.56	4	1	
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:O	0.43	2.36	5	1	
1:A:296:GLY:O	1:A:297:THR:OG1	0.43	2.35	5	1	
1:A:460:GLU:OE1	1:A:460:GLU:O	0.43	2.36	5	1	
1:A:544:HIS:O	1:A:544:HIS:ND1	0.43	2.51	5	1	
1:A:699:LEU:N	1:A:699:LEU:HD22	0.43	2.28	5	1	
1:A:112:GLN:OE1	1:A:237:HIS:CE1	0.43	2.71	6	1	
1:A:645:TRP:O	1:A:646:LEU:C	0.43	2.56	8	2	



A 4 amo 1	A + amo 9	$C = a \cdot (\hat{\lambda})$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:351:ASP:N	1:A:351:ASP:OD1	0.43	2.50	7	1
1:A:442:ALA:O	1:A:443:ARG:C	0.43	2.55	7	1
1:A:613:GLN:C	1:A:615:ILE:N	0.43	2.70	7	1
1:A:376:LYS:C	1:A:376:LYS:CD	0.43	2.86	8	1
1:A:452:GLY:O	1:A:485:TYR:OH	0.43	2.36	8	1
1:A:606:TYR:O	1:A:606:TYR:CD1	0.43	2.70	8	1
1:A:698:PHE:O	1:A:701:VAL:HG22	0.43	2.12	9	1
1:A:130:ALA:O	1:A:133:ALA:HB3	0.43	2.13	1	1
1:A:313:LEU:N	1:A:313:LEU:CD1	0.43	2.81	1	1
1:A:371:ALA:O	1:A:372:LEU:C	0.43	2.55	5	2
1:A:614:GLY:O	1:A:615:ILE:HG23	0.43	2.13	8	2
1:A:531:ASN:O	1:A:532:THR:CG2	0.43	2.65	2	1
1:A:705:ASN:C	1:A:707:TYR:N	0.43	2.71	2	1
1:A:721:GLU:C	1:A:723:HIS:N	0.43	2.70	2	1
1:A:28:THR:C	1:A:30:LEU:H	0.43	2.16	10	2
1:A:606:TYR:CZ	1:A:631:ASP:O	0.43	2.71	4	1
1:A:698:PHE:C	1:A:700:GLY:N	0.43	2.71	5	2
1:A:174:LEU:HD21	1:A:259:VAL:HG11	0.43	1.89	5	1
1:A:557:GLN:O	1:A:561:ALA:CB	0.43	2.66	5	1
1:A:606:TYR:CE1	1:A:620:VAL:HG21	0.43	2.47	5	1
1:A:634:THR:HG23	1:A:635:LEU:N	0.43	2.29	5	1
1:A:358:PRO:O	1:A:361:ILE:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:576:LEU:C	1:A:578:THR:H	0.43	2.14	6	2
1:A:625:ASN:O	1:A:626:VAL:C	0.43	2.55	7	1
1:A:711:LEU:O	1:A:715:TRP:N	0.43	2.42	7	1
1:A:519:TYR:O	1:A:519:TYR:CD1	0.43	2.71	8	1
1:A:9:ARG:HE	1:A:9:ARG:C	0.43	2.17	9	1
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ALA:HB2	0.43	2.13	9	1
1:A:334:LEU:C	1:A:334:LEU:CD1	0.43	2.84	9	1
1:A:53:LEU:O	1:A:394:HIS:CE1	0.43	2.71	10	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:453:PHE:O	1:A:507:GLY:O	0.43	2.37	1	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:550:GLN:OE1	0.43	2.36	2	1
1:A:279:ASP:OD1	1:A:347:PRO:O	0.43	2.36	2	1
1:A:38:ASN:C	1:A:38:ASN:HD22	0.43	2.17	4	1
1:A:143:TYR:OH	1:A:159:ASP:O	0.43	2.36	4	1
1:A:597:ASP:OD2	1:A:663:MET:SD	0.43	2.77	4	1
1:A:197:GLN:CD	1:A:198:LEU:H	0.43	2.15	5	1
1:A:641:HIS:O	1:A:645:TRP:CD1	0.43	2.71	5	2
1:A:142:LEU:CD2	1:A:147:ILE:HG21	0.43	2.43	6	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:54:LEU:N	0.43	2.27	7	1



	Atom 2	(1,1)	\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:380:ASN:ND2	1:A:382:ARG:HH21	0.43	2.11	7	1	
1:A:450:ASN:O	1:A:451:THR:C	0.43	2.55	7	1	
1:A:601:GLN:OE1	1:A:663:MET:SD	0.43	2.76	7	1	
1:A:624:HIS:ND1	1:A:624:HIS:N	0.43	2.64	7	1	
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:C	0.43	2.91	9	1	
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:CD1	0.43	2.66	9	1	
1:A:524:ASP:O	1:A:526:LEU:N	0.43	2.51	9	1	
1:A:622:ASP:OD2	1:A:628:LEU:HD23	0.43	2.12	10	1	
1:A:211:ARG:C	1:A:212:THR:OG1	0.43	2.55	1	1	
1:A:422:MET:N	1:A:446:VAL:O	0.43	2.37	1	1	
1:A:129:ASN:C	1:A:129:ASN:ND2	0.43	2.72	2	1	
1:A:140:ASP:C	1:A:140:ASP:OD1	0.43	2.56	2	1	
1:A:431:THR:C	1:A:433:LEU:H	0.43	2.17	2	1	
1:A:94:GLN:C	1:A:96:GLU:N	0.43	2.72	3	1	
1:A:374:ASP:CG	1:A:384:GLY:O	0.43	2.56	3	1	
1:A:386:VAL:O	1:A:421:LYS:N	0.43	2.50	3	1	
1:A:410:GLU:C	1:A:410:GLU:OE1	0.43	2.57	4	1	
1:A:534:TRP:CD1	1:A:534:TRP:C	0.43	2.88	4	1	
1:A:587:TRP:CD1	1:A:588:SER:N	0.43	2.86	4	1	
1:A:104:GLY:O	1:A:105:ILE:CD1	0.43	2.66	5	1	
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:314:ASN:OD1	0.43	2.72	5	1	
1:A:212:THR:OG1	1:A:215:GLN:NE2	0.43	2.51	6	1	
1:A:268:ILE:N	1:A:268:ILE:CD1	0.43	2.78	6	1	
1:A:630:GLU:OE1	1:A:634:THR:HG22	0.43	2.13	6	1	
1:A:298:LEU:CD1	1:A:298:LEU:N	0.43	2.81	7	1	
1:A:402:ALA:CB	1:A:445:ARG:NH2	0.43	2.81	7	1	
1:A:632:ARG:CG	1:A:632:ARG:NH1	0.43	2.77	7	1	
1:A:169:TRP:O	1:A:173:PHE:CD1	0.43	2.72	8	1	
1:A:184:SER:OG	1:A:187:ASP:OD1	0.43	2.35	8	1	
1:A:129:ASN:ND2	1:A:134:ARG:NE	0.43	2.67	9	1	
1:A:129:ASN:CG	1:A:134:ARG:HE	0.43	2.17	9	1	
1:A:436:ARG:CA	1:A:436:ARG:HE	0.43	2.26	9	1	
1:A:695:ASP:O	1:A:696:LEU:C	0.43	2.56	9	1	
1:A:61:GLN:HE22	1:A:430:ARG:NH2	0.43	2.12	10	1	
1:A:199:ARG:NH2	1:A:207:GLU:OE2	0.43	2.43	10	1	
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:C	0.43	2.92	10	1	
1:A:351:ASP:OD2	1:A:355:ASN:OD1	0.43	2.36	10	1	
1:A:330:HIS:HD1	1:A:331:GLY:N	0.43	2.11	1	1	
1:A:336:PHE:CD2	1:A:387:TYR:CB	0.43	3.01	1	1	
1:A:53:LEU:CD1	1:A:53:LEU:H	0.43	2.27	2	1	
1:A:269:LEU:C	1:A:270:ASP:OD2	0.43	2.57	2	1	



Atom 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	\mathbf{D} :stance($\hat{\mathbf{A}}$)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:321:ALA:HB2	1:A:327:ILE:CD1	0.43	2.43	2	1	
1:A:456:ARG:C	1:A:458:GLY:N	0.43	2.72	8	2	
1:A:565:PHE:O	1:A:568:GLU:OE1	0.43	2.37	2	1	
1:A:175:ASP:CG	1:A:176:GLU:N	0.43	2.71	3	1	
1:A:192:LYS:O	1:A:198:LEU:HA	0.43	2.13	3	3	
1:A:298:LEU:CD1	1:A:298:LEU:H	0.43	2.27	3	1	
1:A:148:ILE:HG23	1:A:148:ILE:O	0.43	2.12	4	1	
1:A:294:MET:CE	1:A:374:ASP:OD2	0.43	2.67	4	1	
1:A:358:PRO:O	1:A:359:GLU:OE1	0.43	2.36	4	1	
1:A:451:THR:OG1	1:A:505:GLY:O	0.43	2.33	5	1	
1:A:557:GLN:O	1:A:561:ALA:N	0.43	2.49	5	1	
1:A:108:GLU:OE1	1:A:112:GLN:OE1	0.43	2.36	9	1	
1:A:458:GLY:C	1:A:460:GLU:N	0.43	2.71	9	1	
1:A:609:ARG:O	1:A:613:GLN:CB	0.43	2.66	9	1	
1:A:717:LEU:O	1:A:721:GLU:CB	0.43	2.65	10	1	
1:A:170:VAL:O	1:A:172:ARG:N	0.43	2.51	1	1	
1:A:330:HIS:CD2	1:A:332:ARG:O	0.43	2.72	1	1	
1:A:586:ASN:OD1	1:A:586:ASN:O	0.43	2.37	2	1	
1:A:632:ARG:O	1:A:634:THR:N	0.43	2.51	2	1	
1:A:374:ASP:O	1:A:377:VAL:HG22	0.43	2.12	3	1	
1:A:513:ASP:OD1	1:A:514:LEU:N	0.43	2.51	4	1	
1:A:562:GLN:O	1:A:563:THR:CB	0.43	2.65	4	1	
1:A:703:GLN:CD	1:A:703:GLN:O	0.43	2.56	5	1	
1:A:108:GLU:CG	1:A:109:ILE:H	0.43	2.25	6	1	
1:A:267:THR:C	1:A:268:ILE:HD13	0.43	2.34	6	1	
1:A:488:ASN:O	1:A:489:ASN:C	0.43	2.55	6	2	
1:A:494:LEU:C	1:A:496:CYS:N	0.43	2.69	8	2	
1:A:641:HIS:O	1:A:644:ASN:N	0.43	2.52	7	1	
1:A:110:THR:O	1:A:501:LYS:NZ	0.43	2.51	8	1	
1:A:321:ALA:O	1:A:324:GLY:N	0.43	2.51	9	1	
1:A:404:LYS:O	1:A:407:THR:OG1	0.43	2.37	9	1	
1:A:530:ALA:C	1:A:553:VAL:CG1	0.43	2.87	10	1	
1:A:541:ALA:C	1:A:543:LEU:N	0.43	2.71	10	1	
1:A:714:ALA:C	1:A:716:ARG:N	0.43	2.72	10	1	
1:A:47:ALA:HB1	1:A:355:ASN:ND2	0.43	2.27	1	1	
1:A:182:ASN:ND2	1:A:207:GLU:O	0.43	2.51	1	1	
1:A:403:ASN:ND2	1:A:443:ARG:CD	0.43	2.81	2	1	
1:A:172:ARG:O	1:A:175:ASP:OD2	0.43	2.36	3	1	
1:A:24:VAL:O	1:A:28:THR:CB	0.43	2.66	4	2	
1:A:488:ASN:ND2	1:A:492:SER:H	0.43	2.12	4	1	
1:A:501:LYS:O	1:A:502:ALA:HB2	0.43	2.13	10	2	



		(1,1)	\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:571:PRO:O	1:A:575:ASP:OD2	0.43	2.37	5	1	
1:A:703:GLN:OE1	1:A:708:THR:HG22	0.43	2.14	5	1	
1:A:394:HIS:O	1:A:395:GLY:O	0.43	2.37	6	1	
1:A:55:ALA:O	1:A:58:ASP:OD1	0.43	2.36	7	1	
1:A:600:VAL:C	1:A:602:GLY:N	0.43	2.70	7	1	
1:A:613:GLN:C	1:A:615:ILE:H	0.43	2.17	7	1	
1:A:171:ARG:O	1:A:175:ASP:OD1	0.43	2.35	8	1	
1:A:19:PHE:O	1:A:23:GLU:N	0.43	2.52	9	1	
1:A:340:VAL:O	1:A:340:VAL:HG13	0.43	2.12	9	1	
1:A:622:ASP:CG	1:A:623:ILE:H	0.43	2.16	9	1	
1:A:557:GLN:HE21	1:A:560:ILE:HD11	0.43	1.74	10	1	
1:A:691:LYS:O	1:A:695:ASP:OD1	0.43	2.37	10	1	
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CB	0.43	2.67	5	2	
1:A:182:ASN:OD1	1:A:208:THR:OG1	0.43	2.35	1	1	
1:A:513:ASP:C	1:A:514:LEU:HD22	0.43	2.34	1	1	
1:A:315:ASP:CG	1:A:332:ARG:NH1	0.43	2.72	2	1	
1:A:568:GLU:N	1:A:568:GLU:CD	0.43	2.72	2	1	
1:A:710:PRO:O	1:A:714:ALA:HB2	0.43	2.14	5	2	
1:A:247:ARG:O	1:A:249:GLY:N	0.43	2.52	4	1	
1:A:153:ALA:HB3	1:A:161:GLN:NE2	0.43	2.28	5	1	
1:A:161:GLN:HE21	1:A:161:GLN:C	0.43	2.17	6	1	
1:A:271:CYS:SG	1:A:338:ARG:O	0.43	2.70	6	1	
1:A:464:VAL:O	1:A:467:ALA:N	0.43	2.52	6	1	
1:A:262:GLU:OE2	1:A:262:GLU:O	0.43	2.36	7	1	
1:A:641:HIS:O	1:A:643:ALA:N	0.43	2.52	7	1	
1:A:273:ASP:O	1:A:632:ARG:CD	0.43	2.66	10	1	
1:A:583:GLU:C	1:A:585:ALA:H	0.43	2.17	10	1	
1:A:143:TYR:CD1	1:A:143:TYR:C	0.43	2.91	10	3	
1:A:239:GLU:N	1:A:239:GLU:CD	0.43	2.72	1	1	
1:A:391:PRO:C	1:A:393:MET:H	0.43	2.17	1	1	
1:A:656:VAL:O	1:A:657:GLN:C	0.43	2.56	1	1	
1:A:671:ASN:OD1	1:A:671:ASN:O	0.43	2.36	1	1	
1:A:26:PRO:C	1:A:28:THR:N	0.43	2.72	2	1	
1:A:133:ALA:C	1:A:135:TRP:N	0.43	2.71	4	1	
1:A:511:MET:O	1:A:515:MET:SD	0.43	2.77	4	1	
1:A:108:GLU:CD	1:A:109:ILE:H	0.43	2.16	6	1	
1:A:294:MET:SD	1:A:373:TYR:CB	0.43	3.06	6	1	
1:A:362:LEU:O	1:A:363:ASP:C	0.43	2.56	7	1	
1:A:330:HIS:O	1:A:332:ARG:N	0.43	2.51	8	1	
1:A:554:GLN:NE2	1:A:557:GLN:NE2	0.43	2.66	8	1	
1:A:606:TYR:CD1	1:A:606:TYR:C	0.43	2.92	9	2	



A t a rea 1		$C \log \left(\frac{\lambda}{\lambda}\right)$	\mathbf{D}^{*}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:189:VAL:O	1:A:254:ALA:O	0.43	2.37	9	1	
1:A:359:GLU:OE2	1:A:360:GLY:O	0.43	2.37	9	1	
1:A:451:THR:O	1:A:452:GLY:O	0.43	2.36	9	1	
1:A:102:THR:HG22	1:A:103:THR:N	0.43	2.28	1	1	
1:A:109:ILE:HD11	1:A:448:PHE:CE2	0.43	2.49	1	1	
1:A:450:ASN:ND2	1:A:450:ASN:O	0.43	2.52	1	1	
1:A:584:ASN:O	1:A:585:ALA:C	0.43	2.56	3	1	
1:A:709:GLU:OE1	1:A:713:HIS:ND1	0.43	2.52	3	1	
1:A:313:LEU:H	1:A:313:LEU:HD23	0.43	1.73	5	2	
1:A:408:ARG:O	1:A:411:THR:HG22	0.43	2.14	5	1	
1:A:522:LYS:NZ	1:A:544:HIS:CG	0.43	2.87	5	1	
1:A:654:GLU:O	1:A:658:ALA:N	0.43	2.37	5	1	
1:A:314:ASN:OD1	1:A:314:ASN:N	0.43	2.51	9	1	
1:A:510:ALA:O	1:A:513:ASP:OD1	0.43	2.37	9	1	
1:A:129:ASN:O	1:A:133:ALA:O	0.43	2.36	10	1	
1:A:407:THR:O	1:A:411:THR:HG22	0.43	2.14	10	1	
1:A:548:TYR:O	1:A:551:THR:OG1	0.43	2.28	10	1	
1:A:39:PHE:O	1:A:43:VAL:CG2	0.42	2.67	1	3	
1:A:358:PRO:O	1:A:359:GLU:C	0.42	2.56	1	1	
1:A:703:GLN:NE2	1:A:706:GLY:C	0.42	2.71	1	1	
1:A:126:TYR:OH	1:A:617:CYS:SG	0.42	2.77	3	1	
1:A:594:GLN:O	1:A:594:GLN:NE2	0.42	2.51	3	1	
1:A:647:ARG:N	1:A:647:ARG:NE	0.42	2.64	3	1	
1:A:96:GLU:O	1:A:97:ARG:CG	0.42	2.67	4	2	
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:CD1	0.42	2.87	4	1	
1:A:287:TYR:CZ	1:A:370:ILE:HD11	0.42	2.49	4	1	
1:A:586:ASN:O	1:A:587:TRP:C	0.42	2.56	4	1	
1:A:588:SER:OG	1:A:591:GLU:OE2	0.42	2.36	4	1	
1:A:454:LEU:O	1:A:455:ASP:C	0.42	2.58	6	3	
1:A:526:LEU:C	1:A:528:ALA:N	0.42	2.72	5	1	
1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:OE2	0.42	2.36	6	1	
1:A:163:GLY:O	1:A:167:ILE:CD1	0.42	2.67	6	1	
1:A:212:THR:O	1:A:214:ALA:N	0.42	2.52	6	1	
1:A:338:ARG:NH2	1:A:454:LEU:HD13	0.42	2.29	6	1	
1:A:446:VAL:HG22	1:A:446:VAL:O	0.42	2.13	6	1	
1:A:449:ILE:HD13	1:A:496:CYS:SG	0.42	2.54	6	1	
1:A:28:THR:O	1:A:369:ALA:O	0.42	2.37	7	1	
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1	
1:A:57:ARG:CD	1:A:61:GLN:NE2	0.42	2.82	9	1	
1:A:578:THR:O	1:A:578:THR:CG2	0.42	2.67	9	1	
1:A:640:GLN:O	1:A:643:ALA:HB3	0.42	2.14	10	1	



Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:PHE:CE1	1:A:43:VAL:HG21	0.42	2.49	1	1
1:A:170:VAL:C	1:A:172:ARG:N	0.42	2.72	1	1
1:A:257:ASN:O	1:A:258:ASP:CG	0.42	2.58	5	2
1:A:654:GLU:O	1:A:658:ALA:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:GLY:N	0.42	2.67	3	1
1:A:658:ALA:O	1:A:662:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:199:ARG:C	1:A:200:ILE:HD13	0.42	2.33	4	1
1:A:405:LEU:O	1:A:406:PHE:C	0.42	2.57	4	1
1:A:485:TYR:OH	1:A:576:LEU:O	0.42	2.32	4	1
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CD	0.42	2.72	5	1
1:A:485:TYR:O	1:A:487:ARG:N	0.42	2.51	5	1
1:A:628:LEU:HD23	1:A:628:LEU:N	0.42	2.30	5	1
1:A:632:ARG:N	1:A:632:ARG:CD	0.42	2.82	5	1
1:A:492:SER:O	1:A:493:GLY:C	0.42	2.56	6	1
1:A:608:VAL:O	1:A:612:GLU:OE1	0.42	2.35	6	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:29:GLY:O	0.42	2.14	7	1
1:A:272:GLU:O	1:A:272:GLU:OE2	0.42	2.37	8	1
1:A:435:LEU:HD21	1:A:496:CYS:SG	0.42	2.54	8	1
1:A:642:ILE:O	1:A:646:LEU:N	0.42	2.45	2	2
1:A:137:SER:O	1:A:140:ASP:CG	0.42	2.57	2	1
1:A:318:HIS:ND1	1:A:318:HIS:N	0.42	2.67	2	1
1:A:283:LYS:O	1:A:287:TYR:CD1	0.42	2.72	3	1
1:A:297:THR:O	1:A:298:LEU:C	0.42	2.57	3	1
1:A:67:TRP:CZ3	1:A:84:PHE:CZ	0.42	3.08	4	1
1:A:242:ILE:O	1:A:243:ASP:O	0.42	2.37	4	1
1:A:114:GLY:O	1:A:532:THR:OG1	0.42	2.37	5	1
1:A:241:GLN:O	1:A:243:ASP:OD2	0.42	2.37	6	1
1:A:688:CYS:C	1:A:690:PHE:N	0.42	2.72	6	1
1:A:567:ALA:O	1:A:571:PRO:CD	0.42	2.67	7	1
1:A:92:VAL:O	1:A:94:GLN:OE1	0.42	2.37	8	1
1:A:634:THR:O	1:A:638:SER:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:401:PHE:CD1	1:A:401:PHE:C	0.42	2.92	9	1
1:A:438:CYS:SG	1:A:439:ILE:N	0.42	2.91	9	1
1:A:710:PRO:O	1:A:711:LEU:C	0.42	2.57	9	1
1:A:116:GLN:NE2	1:A:451:THR:HG21	0.42	2.30	1	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:175:ASP:OD2	1:A:184:SER:OG	0.42	2.36	2	1
1:A:312:LYS:C	1:A:313:LEU:HD22	0.42	2.35	2	1
1:A:571:PRO:O	1:A:575:ASP:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:247:ARG:C	1:A:249:GLY:N	0.42	2.73	4	1
1:A:94:GLN:OE1	1:A:94:GLN:O	0.42	2.37	5	1


A t a ma 1	A.t.a.m. D	$C \ln c \ln (\hat{\lambda})$	\mathbf{D} : \mathbf{D}	Moo	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:448:PHE:CD1	1:A:448:PHE:C	0.42	2.93	5	1
1:A:406:PHE:C	1:A:408:ARG:N	0.42	2.73	10	2
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ARG:C	0.42	2.58	9	2
1:A:105:ILE:O	1:A:106:ASP:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:233:ASN:C	1:A:235:GLY:H	0.42	2.17	7	2
1:A:341:GLY:C	1:A:343:LEU:H	0.42	2.17	7	1
1:A:451:THR:CG2	1:A:452:GLY:N	0.42	2.77	7	1
1:A:488:ASN:ND2	1:A:572:LEU:HD13	0.42	2.29	8	1
1:A:461:MET:SD	1:A:462:HIS:ND1	0.42	2.89	9	1
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ALA:C	0.42	2.57	10	1
1:A:150:GLN:C	1:A:152:GLY:N	0.42	2.72	10	1
1:A:355:ASN:O	1:A:356:GLU:CG	0.42	2.67	1	1
1:A:524:ASP:O	1:A:525:GLN:C	0.42	2.58	7	6
1:A:138:LEU:HD23	1:A:138:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:146:ASP:CG	1:A:146:ASP:O	0.42	2.58	2	1
1:A:175:ASP:OD2	1:A:184:SER:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:243:ASP:C	1:A:245:ASN:H	0.42	2.18	2	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:C	0.42	2.58	3	2
1:A:47:ALA:O	1:A:359:GLU:OE2	0.42	2.38	4	1
1:A:89:GLY:C	1:A:91:LEU:HD12	0.42	2.34	4	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:293:LEU:H	0.42	2.27	5	1
1:A:599:ASN:O	1:A:602:GLY:N	0.42	2.53	6	1
1:A:715:TRP:CZ3	1:A:719:GLU:CD	0.42	2.93	6	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:299:GLN:HB2	0.42	1.92	7	1
1:A:635:LEU:C	1:A:637:ILE:H	0.42	2.18	7	1
1:A:437:SER:O	1:A:441:GLN:OE1	0.42	2.37	8	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:PRO:O	0.42	2.36	10	1
1:A:243:ASP:O	1:A:257:ASN:OD1	0.42	2.37	1	1
1:A:339:ASN:C	1:A:339:ASN:HD22	0.42	2.15	1	1
1:A:290:LEU:O	1:A:291:LEU:C	0.42	2.58	10	2
1:A:465:MET:CE	1:A:705:ASN:ND2	0.42	2.82	5	1
1:A:75:VAL:O	1:A:76:LYS:O	0.42	2.38	6	1
1:A:494:LEU:C	1:A:496:CYS:H	0.42	2.17	6	1
1:A:93:PRO:O	1:A:94:GLN:CD	0.42	2.57	7	1
1:A:405:LEU:CD1	1:A:409:ILE:HG23	0.42	2.45	7	1
1:A:286:LEU:C	1:A:286:LEU:HD23	0.42	2.35	8	1
1:A:323:ASP:OD1	1:A:323:ASP:O	0.42	2.37	8	1
1:A:547:HIS:O	1:A:549:HIS:N	0.42	2.53	8	1
1:A:622:ASP:OD1	1:A:626:VAL:O	0.42	2.38	8	1
1:A:630:GLU:O	1:A:631:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
1:A:385:SER:OG	1:A:420:LEU:CA	0.42	2.68	9	1



A + a 1	A + amp 0	$C = a \cdot (\hat{\lambda})$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:598:ASN:N	1:A:598:ASN:HD22	0.42	2.12	10	1
1:A:374:ASP:OD2	1:A:383:THR:OG1	0.42	2.38	1	1
1:A:641:HIS:CD2	1:A:645:TRP:CE2	0.42	3.07	1	1
1:A:641:HIS:CD2	1:A:645:TRP:CZ2	0.42	3.08	1	1
1:A:159:ASP:OD1	1:A:159:ASP:O	0.42	2.38	2	1
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:THR:N	0.42	2.29	3	1
1:A:332:ARG:NH1	1:A:332:ARG:CB	0.42	2.83	3	1
1:A:399:VAL:HG12	1:A:403:ASN:ND2	0.42	2.28	3	1
1:A:450:ASN:HD22	1:A:451:THR:N	0.42	2.12	4	1
1:A:557:GLN:OE1	1:A:557:GLN:CA	0.42	2.68	4	1
1:A:699:LEU:O	1:A:700:GLY:C	0.42	2.58	4	1
1:A:197:GLN:OE1	1:A:216:PHE:CD2	0.42	2.73	5	1
1:A:228:CYS:SG	1:A:319:TYR:OH	0.42	2.77	5	1
1:A:99:THR:OG1	1:A:101:GLU:OE1	0.42	2.33	6	1
1:A:116:GLN:OE1	1:A:450:ASN:ND2	0.42	2.52	6	1
1:A:265:ILE:CD1	1:A:265:ILE:H	0.42	2.28	7	1
1:A:424:ILE:N	1:A:449:ILE:CG2	0.42	2.82	7	1
1:A:456:ARG:NE	1:A:456:ARG:CA	0.42	2.83	7	1
1:A:491:LEU:C	1:A:491:LEU:HD13	0.42	2.34	8	1
1:A:719:GLU:OE1	1:A:720:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:92:VAL:O	1:A:434:ASN:OD1	0.42	2.37	2	1
1:A:129:ASN:C	1:A:129:ASN:HD22	0.42	2.14	2	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:385:SER:OG	0.42	2.38	3	1
1:A:150:GLN:HE22	1:A:162:ARG:CZ	0.42	2.28	3	1
1:A:425:MET:O	1:A:426:ASP:OD1	0.42	2.38	3	1
1:A:552:ASN:HD22	1:A:552:ASN:C	0.42	2.18	3	1
1:A:427:GLU:O	1:A:428:GLU:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:442:ALA:C	1:A:444:ASN:H	0.42	2.18	5	2
1:A:654:GLU:OE2	1:A:654:GLU:O	0.42	2.37	7	1
1:A:691:LYS:C	1:A:693:ALA:N	0.42	2.73	7	1
1:A:563:THR:CG2	1:A:564:GLU:H	0.42	2.28	8	1
1:A:130:ALA:O	1:A:333:SER:OG	0.42	2.37	9	1
1:A:181:GLU:OE1	1:A:209:THR:OG1	0.42	2.38	9	1
1:A:525:GLN:NE2	1:A:525:GLN:CA	0.42	2.82	9	1
1:A:424:ILE:O	1:A:425:MET:C	0.42	2.57	10	1
1:A:343:LEU:O	1:A:358:PRO:O	0.42	2.37	1	1
1:A:564:GLU:O	1:A:568:GLU:OE2	0.42	2.38	1	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:GLN:C	0.42	2.58	2	2
1:A:517:ASP:O	1:A:520:SER:OG	0.42	2.37	2	1
1:A:660:LEU:HD13	1:A:660:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:30:LEU:C	1:A:30:LEU:HD23	0.42	2.35	3	1



A 4 amo 1	A + ama 9	$C = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:395:GLY:O	1:A:399:VAL:HG23	0.42	2.15	3	1
1:A:445:ARG:O	1:A:445:ARG:HG2	0.42	2.15	3	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:LEU:O	0.42	2.38	4	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:463:SER:O	0.42	2.38	4	1
1:A:133:ALA:O	1:A:134:ARG:C	0.42	2.57	4	1
1:A:170:VAL:O	1:A:174:LEU:N	0.42	2.39	4	1
1:A:83:SER:O	1:A:86:ARG:N	0.42	2.52	9	2
1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CG	0.42	2.73	5	1
1:A:280:ALA:O	1:A:281:GLU:C	0.42	2.57	5	1
1:A:602:GLY:O	1:A:606:TYR:CD1	0.42	2.73	5	1
1:A:660:LEU:O	1:A:664:ALA:CB	0.42	2.68	5	1
1:A:108:GLU:C	1:A:110:THR:N	0.42	2.73	6	1
1:A:410:GLU:HG2	1:A:420:LEU:HD13	0.42	1.89	6	1
1:A:414:GLY:O	1:A:415:MET:HB2	0.42	2.13	6	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:C	0.42	2.55	7	1
1:A:421:LYS:CB	1:A:421:LYS:HZ2	0.42	2.26	7	1
1:A:340:VAL:O	1:A:341:GLY:C	0.42	2.58	8	1
1:A:712:LEU:C	1:A:712:LEU:CD2	0.42	2.88	8	1
1:A:494:LEU:HD23	1:A:494:LEU:O	0.42	2.14	9	1
1:A:349:ILE:CG2	1:A:350:TRP:N	0.42	2.82	1	1
1:A:486:GLU:OE2	1:A:506:LYS:CG	0.42	2.68	1	1
1:A:609:ARG:HH22	1:A:630:GLU:CB	0.42	2.27	1	1
1:A:552:ASN:ND2	1:A:552:ASN:C	0.42	2.73	2	1
1:A:552:ASN:ND2	1:A:554:GLN:N	0.42	2.66	2	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG2	0.42	2.68	4	1
1:A:179:PRO:O	1:A:180:LEU:C	0.42	2.56	10	3
1:A:342:HIS:CE1	1:A:343:LEU:HD13	0.42	2.50	4	1
1:A:637:ILE:O	1:A:638:SER:C	0.42	2.57	4	2
1:A:243:ASP:OD2	1:A:245:ASN:N	0.42	2.42	5	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:421:LYS:HZ3	0.42	1.70	6	1
1:A:433:LEU:O	1:A:434:ASN:OD1	0.42	2.37	6	1
1:A:658:ALA:O	1:A:659:SER:C	0.42	2.59	6	1
1:A:120:PRO:O	1:A:121:ALA:HB3	0.42	2.15	8	1
1:A:151:GLU:OE2	1:A:619:LYS:NZ	0.42	2.48	8	1
1:A:430:ARG:HH22	1:A:459:ASP:CG	0.42	2.17	8	1
1:A:436:ARG:N	1:A:436:ARG:HE	0.42	2.12	9	1
1:A:484:ALA:O	1:A:485:TYR:C	0.42	2.57	10	2
1:A:710:PRO:O	1:A:713:HIS:N	0.42	2.52	9	1
1:A:147:ILE:O	1:A:147:ILE:CG2	0.42	2.68	10	1
1:A:85:LEU:HG	1:A:577:LEU:HD21	0.41	1.91	1	1
1:A:424:ILE:HD12	1:A:447:ALA:HB3	0.41	1.92	1	1



A + 1	A.4.0	$Clash(\lambda)$	\mathbf{D} : \mathbf{D}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:62:ALA:C	1:A:65:ASP:OD1	0.41	2.58	2	1
1:A:426:ASP:C	1:A:428:GLU:N	0.41	2.73	2	1
1:A:667:VAL:O	1:A:671:ASN:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:294:MET:C	1:A:296:GLY:N	0.41	2.74	3	1
1:A:448:PHE:CD1	1:A:449:ILE:N	0.41	2.88	3	1
1:A:583:GLU:O	1:A:584:ASN:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:180:LEU:CD2	1:A:209:THR:O	0.41	2.68	4	1
1:A:531:ASN:OD1	1:A:531:ASN:N	0.41	2.53	5	1
1:A:386:VAL:CG1	1:A:388:ILE:HD11	0.41	2.45	6	1
1:A:504:ILE:H	1:A:531:ASN:ND2	0.41	2.13	6	1
1:A:547:HIS:O	1:A:550:GLN:N	0.41	2.50	6	1
1:A:549:HIS:CD2	1:A:549:HIS:N	0.41	2.88	6	1
1:A:576:LEU:C	1:A:578:THR:N	0.41	2.72	6	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:29:GLY:O	0.41	2.68	7	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:81:TYR:OH	0.41	2.53	7	1
1:A:178:LEU:HD11	1:A:233:ASN:ND2	0.41	2.29	7	1
1:A:591:GLU:O	1:A:592:ILE:C	0.41	2.58	7	2
1:A:49:GLU:OE2	1:A:49:GLU:O	0.41	2.38	9	1
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLN:OE1	0.41	2.37	9	1
1:A:292:GLY:O	1:A:293:LEU:C	0.41	2.58	9	1
1:A:389:VAL:HG13	1:A:423:GLY:HA3	0.41	1.91	9	1
1:A:488:ASN:O	1:A:491:LEU:N	0.41	2.53	9	1
1:A:498:LEU:H	1:A:498:LEU:CD1	0.41	2.04	9	1
1:A:53:LEU:O	1:A:394:HIS:NE2	0.41	2.53	10	1
1:A:88:LEU:C	1:A:90:TYR:N	0.41	2.74	1	1
1:A:289:ASN:O	1:A:292:GLY:N	0.41	2.53	2	1
1:A:399:VAL:O	1:A:403:ASN:CB	0.41	2.68	2	1
1:A:504:ILE:N	1:A:504:ILE:CD1	0.41	2.83	2	1
1:A:605:GLY:O	1:A:609:ARG:NH1	0.41	2.54	2	1
1:A:16:PHE:CD1	1:A:16:PHE:C	0.41	2.94	4	1
1:A:584:ASN:CG	1:A:587:TRP:CE3	0.41	2.94	4	1
1:A:619:LYS:O	1:A:670:GLN:OE1	0.41	2.37	4	1
1:A:431:THR:O	1:A:431:THR:HG22	0.41	2.15	5	1
1:A:453:PHE:C	1:A:455:ASP:H	0.41	2.18	5	1
1:A:129:ASN:O	1:A:132:ASN:OD1	0.41	2.37	7	1
1:A:610:TRP:O	1:A:612:GLU:N	0.41	2.53	7	1
1:A:722:SER:O	1:A:723:HIS:CD2	0.41	2.73	7	1
1:A:147:ILE:HG22	1:A:148:ILE:HG12	0.41	1.91	8	1
1:A:335:LEU:O	1:A:387:TYR:CD2	0.41	2.74	8	1
1:A:721:GLU:OE2	1:A:721:GLU:O	0.41	2.38	9	1
1:A:482:ILE:HD13	1:A:482:ILE:C	0.41	2.36	10	1



	A + 9	$C = c \left(\frac{\lambda}{\lambda} \right)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mod	lels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:484:ALA:O	1:A:487:ARG:N	0.41	2.53	10	1
1:A:138:LEU:O	1:A:139:TYR:C	0.41	2.58	1	1
1:A:441:GLN:O	1:A:441:GLN:CG	0.41	2.68	1	1
1:A:563:THR:OG1	1:A:564:GLU:N	0.41	2.51	1	1
1:A:600:VAL:HG13	1:A:601:GLN:N	0.41	2.29	2	1
1:A:108:GLU:OE1	1:A:266:SER:OG	0.41	2.38	3	1
1:A:233:ASN:N	1:A:233:ASN:ND2	0.41	2.66	3	1
1:A:418:ASN:C	1:A:419:THR:HG22	0.41	2.36	3	1
1:A:85:LEU:O	1:A:86:ARG:C	0.41	2.57	4	1
1:A:378:GLN:O	1:A:378:GLN:OE1	0.41	2.37	4	1
1:A:591:GLU:OE1	1:A:591:GLU:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:121:ALA:CB	1:A:274:SER:OG	0.41	2.67	5	1
1:A:524:ASP:O	1:A:527:ARG:CB	0.41	2.67	5	1
1:A:609:ARG:NE	1:A:613:GLN:NE2	0.41	2.68	5	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:235:GLY:O	0.41	2.38	6	1
1:A:630:GLU:OE1	1:A:634:THR:CG2	0.41	2.68	6	1
1:A:241:GLN:NE2	1:A:241:GLN:C	0.41	2.74	8	1
1:A:290:LEU:CD1	1:A:290:LEU:C	0.41	2.88	8	1
1:A:298:LEU:CD1	1:A:298:LEU:O	0.41	2.68	8	1
1:A:449:ILE:O	1:A:450:ASN:CG	0.41	2.58	8	1
1:A:615:ILE:HD12	1:A:615:ILE:C	0.41	2.35	8	1
1:A:176:GLU:O	1:A:177:SER:C	0.41	2.56	10	1
1:A:385:SER:OG	1:A:387:TYR:CZ	0.41	2.72	1	1
1:A:406:PHE:O	1:A:445:ARG:CZ	0.41	2.68	1	1
1:A:498:LEU:HD23	1:A:499:ARG:HG3	0.41	1.92	1	1
1:A:663:MET:O	1:A:667:VAL:N	0.41	2.48	1	1
1:A:132:ASN:HD21	1:A:332:ARG:NH2	0.41	2.14	2	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:175:ASP:C	0.41	2.58	2	1
1:A:292:GLY:C	1:A:294:MET:N	0.41	2.74	2	1
1:A:424:ILE:HD13	1:A:438:CYS:SG	0.41	2.56	2	1
1:A:485:TYR:O	1:A:486:GLU:C	0.41	2.59	5	2
1:A:494:LEU:O	1:A:494:LEU:HD22	0.41	2.16	2	1
1:A:127:ALA:O	1:A:128:LEU:C	0.41	2.58	9	3
1:A:208:THR:CG2	1:A:209:THR:H	0.41	2.28	3	1
1:A:538:PRO:O	1:A:539:THR:C	0.41	2.58	4	1
1:A:694:SER:O	1:A:698:PHE:CD1	0.41	2.74	7	1
1:A:137:SER:OG	1:A:140:ASP:CG	0.41	2.59	8	1
1:A:184:SER:OG	1:A:184:SER:O	0.41	2.27	8	1
1:A:508:MET:O	1:A:509:TRP:CD2	0.41	2.73	9	1
1:A:701:VAL:CG2	1:A:702:LYS:HZ3	0.41	2.29	9	1
1:A:400:ALA:O	1:A:404:LYS:CD	0.41	2.68	10	1



1Y8B

	to us page		\mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:572:LEU:O	1:A:576:LEU:N	0.41	2.41	10	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:C	0.41	2.58	1	2
1:A:131:ALA:C	1:A:133:ALA:N	0.41	2.73	1	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:225:ALA:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:603:ILE:HG13	1:A:604:LEU:N	0.41	2.30	2	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.41	2.54	3	1
1:A:161:GLN:N	1:A:161:GLN:OE1	0.41	2.54	4	1
1:A:381:SER:N	1:A:382:ARG:HH21	0.41	2.12	4	1
1:A:51:ARG:NH1	1:A:355:ASN:ND2	0.41	2.68	5	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:12:ILE:HG21	0.41	2.15	6	1
1:A:111:SER:O	1:A:111:SER:OG	0.41	2.31	6	1
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:CD1	0.41	2.89	8	1
1:A:699:LEU:C	1:A:701:VAL:H	0.41	2.18	8	1
1:A:257:ASN:C	1:A:257:ASN:HD22	0.41	2.18	9	1
1:A:392:LYS:CB	1:A:392:LYS:NZ	0.41	2.84	9	1
1:A:442:ALA:O	1:A:446:VAL:HB	0.41	2.14	9	1
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CD	0.41	2.59	10	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:113:ALA:H	0.41	1.75	10	1
1:A:398:GLU:CD	1:A:399:VAL:HG23	0.41	2.36	10	1
1:A:491:LEU:HG	1:A:492:SER:H	0.41	1.76	10	1
1:A:597:ASP:O	1:A:598:ASN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:324:GLY:O	1:A:326:GLU:N	0.41	2.54	2	1
1:A:316:ASP:OD2	1:A:331:GLY:N	0.41	2.43	3	1
1:A:416:ALA:C	1:A:418:ASN:H	0.41	2.18	3	1
1:A:697:ILE:O	1:A:701:VAL:HG13	0.41	2.15	3	1
1:A:61:GLN:O	1:A:65:ASP:OD2	0.41	2.37	4	1
1:A:699:LEU:O	1:A:702:LYS:N	0.41	2.54	4	1
1:A:623:ILE:HD13	1:A:623:ILE:N	0.41	2.29	5	1
1:A:4:THR:HG21	1:A:11:ARG:HE	0.41	1.75	6	1
1:A:359:GLU:CG	1:A:360:GLY:H	0.41	2.28	6	1
1:A:142:LEU:O	1:A:143:TYR:C	0.41	2.56	7	1
1:A:161:GLN:CG	1:A:162:ARG:N	0.41	2.83	7	1
1:A:248:ILE:C	1:A:250:LYS:H	0.41	2.17	7	1
1:A:253:PRO:C	1:A:255:HIS:H	0.41	2.18	7	1
1:A:328:SER:C	1:A:329:LEU:HD12	0.41	2.36	7	1
1:A:359:GLU:CG	1:A:360:GLY:N	0.41	2.81	7	1
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:HB2	0.41	2.15	7	1
1:A:289:ASN:O	1:A:290:LEU:C	0.41	2.59	8	1
1:A:267:THR:HG21	1:A:333:SER:OG	0.41	2.16	10	1
1:A:159:ASP:C	1:A:161:GLN:N	0.41	2.74	1	1
1:A:495:PHE:CE1	1:A:561:ALA:HB2	0.41	2.50	1	1



		(1, 1, 1)	\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:532:THR:CG2	1:A:533:ALA:N	0.41	2.84	1	1	
1:A:555:SER:O	1:A:559:ASN:CG	0.41	2.59	1	1	
1:A:578:THR:CG2	1:A:579:ILE:N	0.41	2.83	1	1	
1:A:112:GLN:O	1:A:113:ALA:CB	0.41	2.68	3	1	
1:A:43:VAL:O	1:A:44:HIS:C	0.41	2.58	4	1	
1:A:292:GLY:O	1:A:295:GLN:OE1	0.41	2.39	4	1	
1:A:329:LEU:C	1:A:330:HIS:CG	0.41	2.93	4	1	
1:A:513:ASP:CG	1:A:514:LEU:H	0.41	2.19	4	1	
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ASN:N	0.41	2.31	5	1	
1:A:368:GLY:O	1:A:369:ALA:C	0.41	2.58	5	1	
1:A:713:HIS:O	1:A:714:ALA:C	0.41	2.59	5	2	
1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:CB	0.41	2.68	6	1	
1:A:233:ASN:O	1:A:234:ASN:CB	0.41	2.67	10	2	
1:A:143:TYR:C	1:A:143:TYR:CD1	0.41	2.93	7	1	
1:A:185:TYR:OH	1:A:256:ILE:HD13	0.41	2.16	7	1	
1:A:482:ILE:O	1:A:486:GLU:CB	0.41	2.69	7	1	
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:CB	0.41	2.69	8	1	
1:A:61:GLN:OE1	1:A:462:HIS:CE1	0.41	2.73	8	1	
1:A:430:ARG:HH12	1:A:459:ASP:CG	0.41	2.19	8	1	
1:A:439:ILE:HD13	1:A:496:CYS:SG	0.41	2.56	8	1	
1:A:526:LEU:HD13	1:A:526:LEU:O	0.41	2.16	8	1	
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD1	0.41	2.89	9	1	
1:A:13:ASP:CG	1:A:280:ALA:HB1	0.41	2.36	9	1	
1:A:290:LEU:HD11	1:A:370:ILE:HD13	0.41	1.92	10	1	
1:A:695:ASP:O	1:A:697:ILE:N	0.41	2.53	10	1	
1:A:714:ALA:O	1:A:717:LEU:N	0.41	2.41	10	1	
1:A:23:GLU:OE1	1:A:24:VAL:N	0.41	2.54	2	1	
1:A:271:CYS:O	1:A:272:GLU:C	0.41	2.58	2	1	
1:A:373:TYR:O	1:A:377:VAL:CG2	0.41	2.67	2	1	
1:A:449:ILE:HG13	1:A:503:GLN:H	0.41	1.74	3	1	
1:A:575:ASP:C	1:A:577:LEU:H	0.41	2.18	3	1	
1:A:121:ALA:O	1:A:122:MET:C	0.41	2.59	4	1	
1:A:290:LEU:CD1	1:A:290:LEU:H	0.41	2.29	4	1	
1:A:443:ARG:O	1:A:444:ASN:OD1	0.41	2.38	4	1	
1:A:57:ARG:NE	1:A:429:ARG:O	0.41	2.54	5	1	
1:A:125:ARG:C	1:A:127:ALA:N	0.41	2.71	5	1	
1:A:170:VAL:O	1:A:174:LEU:HD23	0.41	2.16	5	1	
1:A:453:PHE:C	1:A:455:ASP:N	0.41	2.74	5	1	
1:A:570:GLU:CB	1:A:571:PRO:HD3	0.41	2.45	5	1	
1:A:623:ILE:H	1:A:623:ILE:CD1	0.41	2.27	5	1	
1:A:632:ARG:H	1:A:632:ARG:HD3	0.41	1.75	5	1	

Continued from previous page.



A 4 amo 1	Atom 9	$C = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:643:ALA:O	1:A:647:ARG:N	0.41	2.52	5	1
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CD2	0.41	2.84	6	1
1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:CD	0.41	2.59	6	1
1:A:169:TRP:CH2	1:A:172:ARG:NH2	0.41	2.89	6	1
1:A:660:LEU:N	1:A:660:LEU:HD12	0.41	2.29	7	1
1:A:67:TRP:O	1:A:71:ASN:N	0.41	2.34	8	1
1:A:70:SER:O	1:A:71:ASN:O	0.41	2.39	8	1
1:A:491:LEU:C	1:A:491:LEU:CD1	0.41	2.89	8	1
1:A:118:VAL:HG22	1:A:268:ILE:HD11	0.41	1.92	9	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ARG:C	0.41	2.59	9	1
1:A:421:LYS:HB2	1:A:421:LYS:NZ	0.41	2.31	9	1
1:A:345:THR:HG21	1:A:360:GLY:HA3	0.41	1.93	10	1
1:A:444:ASN:ND2	1:A:445:ARG:N	0.41	2.68	10	1
1:A:14:ALA:O	1:A:15:ASN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:186:GLN:OE1	1:A:186:GLN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:388:ILE:O	1:A:422:MET:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:391:PRO:O	1:A:393:MET:N	0.41	2.54	1	1
1:A:26:PRO:C	1:A:28:THR:H	0.41	2.19	2	1
1:A:366:MET:SD	1:A:366:MET:C	0.41	2.99	2	1
1:A:424:ILE:CD1	1:A:438:CYS:SG	0.41	3.09	2	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD12	0.41	2.36	3	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CG	0.41	3.09	3	1
1:A:175:ASP:O	1:A:179:PRO:CD	0.41	2.69	3	1
1:A:334:LEU:HD21	1:A:387:TYR:CZ	0.41	2.51	3	1
1:A:388:ILE:O	1:A:423:GLY:N	0.41	2.44	3	1
1:A:3:GLN:CD	1:A:3:GLN:O	0.41	2.58	4	1
1:A:542:THR:O	1:A:543:LEU:C	0.41	2.57	4	1
1:A:691:LYS:O	1:A:695:ASP:OD2	0.41	2.38	4	1
1:A:720:LYS:C	1:A:722:SER:H	0.41	2.19	4	1
1:A:466:GLU:OE2	1:A:466:GLU:O	0.41	2.39	5	1
1:A:585:ALA:O	1:A:586:ASN:CG	0.41	2.59	5	1
1:A:134:ARG:NH1	1:A:262:GLU:CD	0.41	2.74	6	1
1:A:610:TRP:CE3	1:A:610:TRP:O	0.41	2.74	6	1
1:A:690:PHE:CD1	1:A:690:PHE:C	0.41	2.92	6	1
1:A:171:ARG:NH2	1:A:186:GLN:O	0.41	2.54	7	1
1:A:147:ILE:C	1:A:148:ILE:CG1	0.41	2.89	8	1
1:A:238:ILE:CG2	1:A:239:GLU:N	0.41	2.82	8	1
1:A:146:ASP:C	1:A:148:ILE:N	0.41	2.74	9	1
1:A:220:ARG:NH1	1:A:319:TYR:CE1	0.41	2.88	9	1
1:A:273:ASP:OD2	1:A:455:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:391:PRO:O	1:A:392:LYS:HB2	0.41	2.16	9	1



Atom-1 Atom-2 $Clash(Å)$ $Distance(Å)$ $Models$ Worst $Total$ 1:A:84:PHE:O 1:A:87:GU:N 0.41 2.53 10 1 1:A:114:GLY:O 1:A:532:THR:HG22 0.41 2.16 10 1 1:A:160:PRO:O 1:A:164:GLU:N 0.41 2.48 10 1 1:A:50:THR:HR:C 0.41 2.48 10 1 1:A:54:THR:C 0.41 2.58 10 1 1:A:54:THR:C 0.41 2.31 1 1 1:A:64:HIS:NE2 1:A:645:TRP:CZ 0.41 2.75 3 1 1:A:35:GU:N 1:A:135:TRP:C 0.41 2.73 4 1 1:A:273:ASP:O 1:A:4:53:TRP:CZ 0.41 2.73 4 1 1:A:273:ASP:O 1:A:4:45:FRP:CZ 0.41 2.73 4 1 1:A:427:ASP:O 1:A:4:45:FRP:CZ 0.41 2.73 4 1 1:A:427:ASP:O 1:A:4:45:FRP:CZ 0.41 2.76 1	Continued from prev	ious page				
Action 1Action 2Chan(A)Distance(A)WorstTotal1:A:84:PHE:O1:A:87:GLUN0.412.531011:A:114:GLY:O1:A:532:THR:HG220.412.161011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.481011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.581011:A:511:PHE:CG1:A:522:HE:CD10.413.04111:A:560:HE:HD121:A:561:ALA:N0.412.31111:A:560:HE:HD121:A:645:TRP:CZ20.412.89111:A:538:GLU:OE1:A:645:TRP:CZ20.412.73311:A:535:TRP:O1:A:645:TRP:CE30.412.73411:A:535:GLU:OE21:A:645:TRP:CE30.412.73411:A:537:ASP:OD1:A:707:TYR:CZ0.412.74511:A:52:GLY:O1:A:645:TRP:CE30.412.58511:A:542:THR:O1:A:645:PHE:O0.412.38511:A:542:THR:O1:A:645:PHE:O0.412.69511:A:542:THR:O1:A:645:HEU:CD10.412.69511:A:542:THR:O1:A:645:LEU:C10.412.69511:A:649:GLY:C1:A:645:LEU:H0.412.69511:A:649:GLY:C1:A:645:LEU:H0.412.69511:A:649:GLY:C1:A:645:CC0.412.69911:A:649:G	Atom-1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Models	
1:A:84:PHE:O1:A:87:GLU:N0.412.531011:A:114:GLY:O1:A:532:THR:HG220.412.161011:A:160:PRO:O1:A:532:THR:HG220.412.481011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.481011:A:511:FHE:CG1:A:522:ASN:HD210.412.581011:A:511:EHD121:A:542:THR:C0.412.31111:A:560:LE:HD121:A:645:TRP:CZ20.412.31111:A:560:LE:HD121:A:645:TRP:CZ20.412.75311:A:533:GLU:OE21:A:641:HIS:CD20.412.74311:A:533:GLU:OE21:A:641:HIS:CD20.412.73411:A:53:TRP:O1:A:135:TRP:CC30.412.73411:A:435:TRP:O1:A:453:PHE:O0.412.58511:A:50:CUY:OH1:A:453:PHE:O0.412.38511:A:542:THR:O1:A:546:LEU:CD10.412.69511:A:642:ARG:HE1:A:632:ARG:C0.412.19511:A:649:GLY:C1:A:477:ALA:O0.412.68611:A:46:VAL:CG21:A:477:ALA:O0.412.69911:A:649:GLY:C1:A:477:ALA:O0.412.69911:A:640:VAL:CG21:A:477:ALA:O0.412.69911:A:454:GLU:HD121:A:632:ARG:C0.412.69911:A:45	7100III-1	1100111-2		Distance(11)	Worst	Total
1:A:114:GLY:O1:A:532:THR:HG220.412.161011:A:160:PRO:O1:A:164:GLU:N0.412.481011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.271011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.281011:A:501:LE:HD121:A:561:ALA:N0.412.31111:A:601:LE:HD121:A:651:RP:CZ20.412.39111:A:641:HIS:NE21:A:645:TRP:CZ20.412.75311:A:583:GLU:OE1:A:464:CD20.412.74311:A:583:GLU:OE1:A:641:HIS:CD20.412.73411:A:273:ASP:OD1:A:635:TRP:CE30.412.78511:A:273:ASP:O1:A:707:TYR:CZ0.412.78511:A:501:LYS:HB31:A:707:TYR:CZ0.412.78511:A:501:LYS:HB31:A:501:LYS:HZ20.411.76511:A:542:THR:O1:A:453:PHE:O0.412.69511:A:632:ARG:HE1:A:632:ARG:C0.412.19511:A:649:GLY:C1:A:461:LEU:H0.412.69511:A:464:EU:HD121:A:463:LEU:H0.412.69911:A:464:GLV:C0.412.695111:A:64:GLY:C1:A:463:LEU:H0.412.69911:A:462:CHY:C1:A:463:LEU:H0.412.69911:A:462:CHY:C	1:A:84:PHE:O	1:A:87:GLU:N	0.41	2.53	10	1
1:A:160:PRO:O1:A:164:GLU:N0.412.481011:A:503:GLN:CG1:A:552:ASN:HD210.412.271011:A:541:ALA:O1:A:542:THR:C0.412.581011:A:511:PHE:CG1:A:292:LE:CD10.413.04111:A:560:LE:HD121:A:645:TRP:CZ20.412.31111:A:580:GLU:N1:A:398:GLU:CD0.412.75311:A:583:GU:OE21:A:645:TRP:CZ20.412.74311:A:583:GU:OE21:A:135:TRP:O1:A:135:TRP:CE30.412.74511:A:273:ASP:OD11:A:707:TYR:CZ0.412.73411:A:425:GLY:O1:A:427:SER:C0.412.58511:A:452:CLY:O1:A:459:APHE:O0.412.58511:A:452:THR:O1:A:454:EU:CD10.412.69511:A:464:VAL:CC21:A:47:ALA:O0.412.69511:A:464:VAL:CC21:A:464:LEU:CD10.412.09711:A:464:VAL:CC21:A:47:ALA:O0.412.69511:A:464:VAL:CC21:A:47:ALA:O0.412.69911:A:464:VAL:CC21:A:444:ALA:O0.412.20711:A:454:LEU:HD121:A:507:GIY:O0.412.69911:A:454:CU:OD21:A:446:VAL:CC21:A:454:AS111:A:464:GAL:CC11:A:464:GAL:CC21:A:464:GAL:CC211	1:A:114:GLY:O	1:A:532:THR:HG22	0.41	2.16	10	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:160:PRO:O	1:A:164:GLU:N	0.41	2.48	10	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:503:GLN:CG	1:A:552:ASN:HD21	0.41	2.27	10	1
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	1:A:541:ALA:O	1:A:542:THR:C	0.41	2.58	10	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:191:PHE:CG	1:A:229:ILE:CD1	0.41	3.04	1	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:560:ILE:HD12	1:A:561:ALA:N	0.41	2.31	1	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:641:HIS:NE2	1:A:645:TRP:CZ2	0.41	2.89	1	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:398:GLU:N	1:A:398:GLU:CD	0.41	2.75	3	1
1:A:135:TRP:O1:A:135:TRP:CE30.412.73411:A:273:ASP:O1:A:707:TYR:CZ0.412.74511:A:273:ASP:O1:A:707:TYR:CZ0.412.58511:A:452:GLY:O1:A:453:PHE:O0.412.38511:A:452:GLY:O1:A:451:PHE:O0.412.38511:A:501:LYS:HB31:A:501:LYS:HZ20.411.76511:A:542:THR:O1:A:546:LEU:CD10.412.69511:A:632:ARG:HE1:A:632:ARG:C0.412.19511:A:632:ARG:HE1:A:651:LEU:H0.412.20711:A:649:GLY:C1:A:651:LEU:H0.412.20711:A:454:LEU:HD121:A:651:LEU:H0.412.16811:A:498:LEU:CD21:A:498:LEU:C0.412.69911:A:101:GLU:O1:A:101:GLU:CG0.412.69911:A:101:GLU:O1:A:176:GLU:CG0.412.38911:A:127:ALA:O1:A:131:ALA:HB30.412.151011:A:127:ALA:O1:A:131:ALA:HB30.412.151011:A:133:SER:O1:A:262:ASN:CG0.412.591011:A:161:CU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:135:ASP:O1:A:105:ILE:CD10.402.54211:A:135:ASP:O1:A:195:ASP:O0.402.59211:A:135:ASP:O <td>1:A:583:GLU:OE2</td> <td>1:A:641:HIS:CD2</td> <td>0.41</td> <td>2.74</td> <td>3</td> <td>1</td>	1:A:583:GLU:OE2	1:A:641:HIS:CD2	0.41	2.74	3	1
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1:A:135:TRP:O	1:A:135:TRP:CE3	0.41	2.73	4	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:273:ASP:OD1	1:A:707:TYR:CZ	0.41	2.74	5	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:273:ASP:O	1:A:274:SER:C	0.41	2.58	5	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:O	0.41	2.38	5	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:501:LYS:HB3	1:A:501:LYS:HZ2	0.41	1.76	5	1
1:A:632:ARG:HE1:A:632:ARG:C0.412.19511:A:446:VAL:CG21:A:447:ALA:O0.412.68611:A:649:GLY:C1:A:651:LEU:H0.412.20711:A:454:LEU:HD121:A:651:LEU:H0.412.20711:A:454:LEU:HD121:A:651:LEU:H0.412.16811:A:498:LEU:CD21:A:498:LEU:C0.412.90811:A:101:GLU:O1:A:101:GLU:CG0.412.69911:A:172:ARG:O1:A:176:GLU:OE20.412.38911:A:172:ARG:O1:A:176:GLU:OE20.412.38911:A:127:ALA:O1:A:131:ALA:HB30.412.151011:A:181:GLU:N1:A:209:THR:O0.412.471011:A:661:GLU:OE21:A:333:SER:O1:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.70211:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.402.59311:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.5992 <td>1:A:542:THR:O</td> <td>1:A:546:LEU:CD1</td> <td>0.41</td> <td>2.69</td> <td>5</td> <td>1</td>	1:A:542:THR:O	1:A:546:LEU:CD1	0.41	2.69	5	1
1:A:446:VAL:CG2 $1:A:447:ALA:O$ 0.41 2.68 6 1 $1:A:649:GLY:C$ $1:A:651:LEU:H$ 0.41 2.20 7 1 $1:A:454:LEU:HD12$ $1:A:651:LEU:H$ 0.41 2.20 7 1 $1:A:454:LEU:CD2$ $1:A:651:LEU:C$ 0.41 2.90 8 1 $1:A:101:GLU:O2$ $1:A:498:LEU:C$ 0.41 2.90 8 1 $1:A:101:GLU:O$ $1:A:101:GLU:CG$ 0.41 2.69 9 1 $1:A:101:GLU:O$ $1:A:101:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:172:ARG:O$ $1:A:176:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:172:ARG:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.15 10 1 $1:A:127:ALA:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.15 10 1 $1:A:126:CD1$ $1:A:247$ 10 1 1 $1:A:13:GLU:N$ $1:A:209:THR:O$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:104:LE:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:243:ASP:H$	1:A:632:ARG:HE	1:A:632:ARG:C	0.41	2.19	5	1
1:A:649:GLY:C $1:A:651:LEU:H$ 0.41 2.20 7 1 $1:A:454:LEU:HD12$ $1:A:507:GLY:O$ 0.41 2.16 8 1 $1:A:498:LEU:CD2$ $1:A:498:LEU:C$ 0.41 2.90 8 1 $1:A:101:GLU:O$ $1:A:101:GLU:CG$ 0.41 2.69 9 1 $1:A:101:GLU:O$ $1:A:101:GLU:OE$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:172:ARG:O$ $1:A:176:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:172:ALA:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.15 10 1 $1:A:127:ALA:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.47 10 1 $1:A:181:GLU:N$ $1:A:209:THR:O$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:26:PRO:O$ $1:A:28:THR:N$ 0.40 2.54 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:20:LEU:HG$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:20:LEU:HG$ $1:A:332:ARG:NH2$ 0.40 2.59 3 1	1:A:446:VAL:CG2	1:A:447:ALA:O	0.41	2.68	6	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1:A:649:GLY:C	1:A:651:LEU:H	0.41	2.20	7	1
1:A:498:LEU:CD2 $1:A:498:LEU:C$ 0.41 2.90 8 1 $1:A:101:GLU:O$ $1:A:101:GLU:CG$ 0.41 2.69 9 1 $1:A:172:ARG:O$ $1:A:176:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:172:ARG:O$ $1:A:176:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:127:ALA:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.15 10 1 $1:A:181:GLU:N$ $1:A:209:THR:O$ 0.41 2.47 10 1 $1:A:333:SER:O$ $1:A:382:ARG:NH1$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:195:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:19:CLU:O$ $1:A:42:ILE:C$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:20:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.22 3 1 $1:A:20:ILE:HG$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:20:ILE:HG$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.54 4 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:332:ARG:NH2$ 0.40 2.59 9 2 <	1:A:454:LEU:HD12	1:A:507:GLY:O	0.41	2.16	8	1
1:A:101:GLU:O1:A:101:GLU:CG0.412.69911:A:172:ARG:O1:A:176:GLU:OE20.412.38911:A:127:ALA:O1:A:131:ALA:HB30.412.151011:A:181:GLU:N1:A:209:THR:O0.412.471011:A:333:SER:O1:A:382:ARG:NH10.412.501011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.54211:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.70211:A:195:ASP:OD11:A:195:ASP:O0.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:13:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.29311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.402.59311:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.5151	1:A:498:LEU:CD2	1:A:498:LEU:C	0.41	2.90	8	1
1:A:172:ARG:O $1:A:176:GLU:OE2$ 0.41 2.38 9 1 $1:A:127:ALA:O$ $1:A:131:ALA:HB3$ 0.41 2.15 10 1 $1:A:181:GLU:N$ $1:A:209:THR:O$ 0.41 2.47 10 1 $1:A:333:SER:O$ $1:A:382:ARG:NH1$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:333:SER:O$ $1:A:382:ARG:NH1$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:333:SER:O$ $1:A:382:ARG:NH1$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:26:PRO:O$ $1:A:28:THR:N$ 0.40 2.54 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:19:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:21:GLU:O$ $1:A:42:ILE:C$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.22 3 1 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:202:LEU:HG$ $1:A:32:ARG:NH2$ 0.40 2.54 4 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:33:2:ARG:NH2$ 0.40 2.59 9 2 <tr<< td=""><td>1:A:101:GLU:O</td><td>1:A:101:GLU:CG</td><td>0.41</td><td>2.69</td><td>9</td><td>1</td></tr<<>	1:A:101:GLU:O	1:A:101:GLU:CG	0.41	2.69	9	1
1:A:127:ALA:O1:A:131:ALA:HB30.412.151011:A:181:GLU:N1:A:209:THR:O0.412.471011:A:333:SER:O1:A:382:ARG:NH10.412.501011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:26:PRO:O1:A:28:THR:N0.402.54211:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.70211:A:195:ASP:OD11:A:195:ASP:O0.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:44:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE2	0.41	2.38	9	1
1:A:181:GLU:N1:A:209:THR:O0.412.471011:A:333:SER:O1:A:382:ARG:NH10.412.501011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:661:GLU:OE21:A:662:ASN:CG0.412.591011:A:26:PRO:O1:A:28:THR:N0.402.54211:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.70211:A:195:ASP:OD11:A:195:ASP:O0.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.402.59311:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:42:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB3	0.41	2.15	10	1
1:A:333:SER:O $1:A:382:ARG:NH1$ 0.41 2.50 10 1 $1:A:661:GLU:OE2$ $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:26:PRO:O$ $1:A:62:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:26:PRO:O$ $1:A:28:THR:N$ 0.40 2.54 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:713:HIS:O$ $1:A:717:LEU:N$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:41:GLU:O$ $1:A:42:ILE:C$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.22 3 1 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:332:ARG:NH2$ 0.40 2.54 4 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:10:THR:N$ 0.40 2.59 9 2 $1:A:106:ASP:O$ $1:A:110:THR:N$ 0.40 2.51 5 1 $1:A:428:GLU:C$ $1:A:430:ARG:H$ 0.40 2.19 5 1	1:A:181:GLU:N	1:A:209:THR:O	0.41	2.47	10	1
1:A:661:GLU:OE2 $1:A:662:ASN:CG$ 0.41 2.59 10 1 $1:A:26:PRO:O$ $1:A:28:THR:N$ 0.40 2.54 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:713:HIS:O$ $1:A:717:LEU:N$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:717:LEU:N$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:332:ARG:NH2$ 0.40 2.54 4 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:84:PHE:C$ 0.40 2.59 9 2 $1:A:106:ASP:O$ $1:A:110:THR:N$ 0.40 2.51 5 1 $1:A:428:GLU:C$ $1:A:430:ARG:H$ 0.40 2.19 5 1	1:A:333:SER:O	1:A:382:ARG:NH1	0.41	2.50	10	1
1:A:26:PRO:O $1:A:28:THR:N$ 0.40 2.54 2 1 $1:A:103:THR:O$ $1:A:105:ILE:CD1$ 0.40 2.70 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:195:ASP:OD1$ $1:A:195:ASP:O$ 0.40 2.39 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 1.59 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:243:ASP:H$ $1:A:257:ASN:HD22$ 0.40 2.40 2 1 $1:A:21:IE:O$ $1:A:41:GLU:O$ $1:A:42:ILE:C$ 0.40 2.60 6 2 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.22 3 1 $1:A:265:ILE:H$ $1:A:265:ILE:CD1$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:202:LEU:HG$ $1:A:207:GLU:H$ 0.40 2.59 3 1 $1:A:296:GLY:O$ $1:A:332:ARG:NH2$ 0.40 2.54 4 1 $1:A:83:SER:O$ $1:A:10:THR:N$ 0.40 2.59 9 2 $1:A:106:ASP:O$ $1:A:110:THR:N$ 0.40 2.51 5 1 $1:A:428:GLU:C$ $1:A:430:ARG:H$ 0.40 2.19 5 1	1:A:661:GLU:OE2	1:A:662:ASN:CG	0.41	2.59	10	1
1:A:103:THR:O1:A:105:ILE:CD10.402.70211:A:195:ASP:OD11:A:195:ASP:O0.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:26:PRO:O	1:A:28:THR:N	0.40	2.54	2	1
1:A:195:ASP:OD11:A:195:ASP:O0.402.39211:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:103:THR:O	1:A:105:ILE:CD1	0.40	2.70	2	1
1:A:243:ASP:H1:A:257:ASN:HD220.401.59211:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:195:ASP:OD1	1:A:195:ASP:O	0.40	2.39	2	1
1:A:713:HIS:O1:A:717:LEU:N0.402.40211:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:243:ASP:H	1:A:257:ASN:HD22	0.40	1.59	2	1
1:A:41:GLU:O1:A:42:ILE:C0.402.60621:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:713:HIS:O	1:A:717:LEU:N	0.40	2.40	2	1
1:A:265:ILE:H1:A:265:ILE:CD10.402.22311:A:584:ASN:OD11:A:584:ASN:C0.402.59311:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:41:GLU:O	1:A:42:ILE:C	0.40	2.60	6	2
1:A:584:ASN:OD1 1:A:584:ASN:C 0.40 2.59 3 1 1:A:202:LEU:HG 1:A:207:GLU:H 0.40 1.76 4 1 1:A:296:GLY:O 1:A:332:ARG:NH2 0.40 2.54 4 1 1:A:83:SER:O 1:A:84:PHE:C 0.40 2.59 9 2 1:A:106:ASP:O 1:A:110:THR:N 0.40 2.51 5 1 1:A:428:GLU:C 1:A:430:ARG:H 0.40 2.19 5 1	1:A:265:ILE:H	1:A:265:ILE:CD1	0.40	2.22	3	1
1:A:202:LEU:HG1:A:207:GLU:H0.401.76411:A:296:GLY:O1:A:332:ARG:NH20.402.54411:A:83:SER:O1:A:84:PHE:C0.402.59921:A:106:ASP:O1:A:110:THR:N0.402.51511:A:428:GLU:C1:A:430:ARG:H0.402.1951	1:A:584:ASN:OD1	1:A:584:ASN:C	0.40	2.59	3	1
1:A:296:GLY:O 1:A:332:ARG:NH2 0.40 2.54 4 1 1:A:83:SER:O 1:A:84:PHE:C 0.40 2.59 9 2 1:A:106:ASP:O 1:A:110:THR:N 0.40 2.51 5 1 1:A:428:GLU:C 1:A:430:ARG:H 0.40 2.19 5 1	1:A:202:LEU:HG	1:A:207:GLU:H	0.40	1.76	4	1
1:A:83:SER:O 1:A:84:PHE:C 0.40 2.59 9 2 1:A:106:ASP:O 1:A:110:THR:N 0.40 2.51 5 1 1:A:428:GLU:C 1:A:430:ARG:H 0.40 2.19 5 1	1:A:296:GLY:O	1:A:332:ARG:NH2	0.40	2.54	4	1
1:A:106:ASP:O 1:A:110:THR:N 0.40 2.51 5 1 1:A:428:GLU:C 1:A:430:ARG:H 0.40 2.19 5 1	1:A:83:SER:O	1:A:84:PHE:C	0.40	2.59	9	2
1:A:428:GLU:C 1:A:430:ARG:H 0.40 2.19 5 1	1:A:106:ASP:O	1:A:110:THR:N	0.40	2.51	5	1
	1:A:428:GLU:C	1:A:430:ARG:H	0.40	2.19	5	1

1:A:401:PHE:O

Continued on next page...

2.46

6

1



0.40

1:A:405:LEU:N

Atom 1	Atom 2	$Clash(\hat{\lambda})$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:517:ASP:O	1:A:518:MET:C	0.40	2.60	6	1	
1:A:66:GLU:O	1:A:67:TRP:C	0.40	2.58	7	1	
1:A:339:ASN:HD21	1:A:389:VAL:C	0.40	2.20	7	1	
1:A:461:MET:C	1:A:463:SER:N	0.40	2.74	7	1	
1:A:559:ASN:C	1:A:559:ASN:HD22	0.40	2.19	7	1	
1:A:282:ASP:OD1	1:A:282:ASP:C	0.40	2.60	8	1	
1:A:630:GLU:C	1:A:631:ASP:OD1	0.40	2.59	8	1	
1:A:346:ILE:H	1:A:359:GLU:HG3	0.40	1.75	9	1	
1:A:383:THR:O	1:A:384:GLY:C	0.40	2.57	9	1	
1:A:402:ALA:O	1:A:403:ASN:C	0.40	2.59	9	1	
1:A:38:ASN:O	1:A:42:ILE:CG2	0.40	2.69	10	1	
1:A:134:ARG:HG2	1:A:263:ALA:HB3	0.40	1.93	10	1	
1:A:490:VAL:HG22	1:A:529:GLY:O	0.40	2.15	10	1	
1:A:719:GLU:OE1	1:A:719:GLU:C	0.40	2.59	10	1	
1:A:402:ALA:HB1	1:A:406:PHE:CE1	0.40	2.50	1	1	
1:A:486:GLU:O	1:A:486:GLU:OE1	0.40	2.39	1	1	
1:A:568:GLU:OE1	1:A:568:GLU:CA	0.40	2.69	1	1	
1:A:116:GLN:CD	1:A:266:SER:OG	0.40	2.60	2	1	
1:A:719:GLU:O	1:A:723:HIS:CE1	0.40	2.74	3	1	
1:A:135:TRP:O	1:A:135:TRP:CG	0.40	2.73	4	1	
1:A:583:GLU:OE1	1:A:645:TRP:CH2	0.40	2.74	4	1	
1:A:18:ARG:O	1:A:22:GLU:CG	0.40	2.69	6	1	
1:A:116:GLN:OE1	1:A:450:ASN:CG	0.40	2.60	6	1	
1:A:453:PHE:O	1:A:454:LEU:CB	0.40	2.68	6	1	
1:A:597:ASP:OD1	1:A:598:ASN:N	0.40	2.53	6	1	
1:A:368:GLY:O	1:A:371:ALA:CB	0.40	2.68	8	1	
1:A:651:LEU:HD12	1:A:651:LEU:O	0.40	2.16	8	1	
1:A:41:GLU:O	1:A:45:ASP:CG	0.40	2.60	9	1	
1:A:336:PHE:CE1	1:A:421:LYS:CE	0.40	3.04	9	1	
1:A:569:PHE:HA	1:A:572:LEU:HD12	0.40	1.91	9	1	
1:A:606:TYR:CD1	1:A:606:TYR:O	0.40	2.74	9	1	
1:A:252:ASP:OD2	1:A:256:ILE:O	0.40	2.38	10	1	
1:A:347:PRO:O	1:A:348:VAL:CG2	0.40	2.69	10	1	
1:A:430:ARG:O	1:A:431:THR:O	0.40	2.38	10	1	
1:A:547:HIS:O	1:A:548:TYR:C	0.40	2.59	10	1	
1:A:270:ASP:OD1	1:A:270:ASP:N	0.40	2.54	1	1	
1:A:437:SER:OG	1:A:438:CYS:N	0.40	2.55	1	1	
1:A:452:GLY:O	1:A:453:PHE:C	0.40	2.60	1	1	
1:A:135:TRP:CH2	1:A:239:GLU:OE2	0.40	2.75	2	1	
1:A:600:VAL:CG1	1:A:601:GLN:N	0.40	2.84	2	1	
1:A:652:THR:O	1:A:653:LYS:C	0.40	2.60	2	1	



Atom 1	Atom 2	$\mathrm{Clash}(\mathrm{\AA})$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2			Worst	Total	
1:A:571:PRO:O	1:A:574:ASP:CG	0.40	2.59	3	1	
1:A:148:ILE:O	1:A:149:PRO:C	0.40	2.59	4	1	
1:A:609:ARG:NH2	1:A:613:GLN:OE1	0.40	2.55	4	1	
1:A:509:TRP:CG	1:A:510:ALA:N	0.40	2.89	5	1	
1:A:661:GLU:CG	1:A:662:ASN:N	0.40	2.85	5	1	
1:A:136:GLY:O	1:A:137:SER:C	0.40	2.59	6	1	
1:A:367:THR:C	1:A:369:ALA:N	0.40	2.74	6	1	
1:A:511:MET:O	1:A:513:ASP:OD2	0.40	2.39	6	1	
1:A:599:ASN:O	1:A:600:VAL:C	0.40	2.59	6	1	
1:A:334:LEU:N	1:A:334:LEU:CD1	0.40	2.84	7	1	
1:A:436:ARG:N	1:A:436:ARG:CD	0.40	2.84	7	1	
1:A:237:HIS:O	1:A:262:GLU:CD	0.40	2.60	8	1	
1:A:270:ASP:C	1:A:338:ARG:HH21	0.40	2.19	9	1	
1:A:450:ASN:ND2	1:A:534:TRP:CZ2	0.40	2.89	9	1	
1:A:233:ASN:ND2	1:A:233:ASN:N	0.40	2.70	10	1	
1:A:668:ASP:O	1:A:669:GLN:C	0.40	2.59	10	1	
1:A:461:MET:O	1:A:462:HIS:C	0.40	2.58	1	1	
1:A:461:MET:O	1:A:465:MET:CB	0.40	2.69	1	1	
1:A:495:PHE:CZ	1:A:561:ALA:HB2	0.40	2.51	1	1	
1:A:123:ASN:ND2	1:A:125:ARG:H	0.40	2.14	3	1	
1:A:547:HIS:CD2	1:A:547:HIS:C	0.40	2.95	3	1	
1:A:403:ASN:O	1:A:403:ASN:ND2	0.40	2.54	5	1	
1:A:510:ALA:O	1:A:511:MET:C	0.40	2.60	5	1	
1:A:108:GLU:CD	1:A:108:GLU:N	0.40	2.74	7	1	
1:A:466:GLU:CD	1:A:466:GLU:O	0.40	2.60	8	1	
1:A:553:VAL:CG2	1:A:554:GLN:N	0.40	2.85	8	1	
1:A:299:GLN:O	1:A:299:GLN:CD	0.40	2.59	9	1	
1:A:344:MET:C	1:A:345:THR:OG1	0.40	2.59	9	1	
1:A:268:ILE:HD11	1:A:338:ARG:N	0.40	2.31	10	1	
1:A:145:SER:OG	1:A:539:THR:HG21	0.40	2.16	1	1	
1:A:360:GLY:O	1:A:362:LEU:N	0.40	2.55	1	1	
1:A:188:VAL:HG13	1:A:200:ILE:HG23	0.40	1.93	3	1	
1:A:545:ALA:O	1:A:549:HIS:CD2	0.40	2.75	3	1	
1:A:49:GLU:O	1:A:53:LEU:HD12	0.40	2.17	4	1	
1:A:22:GLU:O	1:A:26:PRO:CG	0.40	2.70	5	1	
1:A:96:GLU:OE1	1:A:96:GLU:N	0.40	2.44	5	1	
1:A:418:ASN:CG	1:A:419:THR:H	0.40	2.19	6	1	
1:A:576:LEU:O	1:A:578:THR:N	0.40	2.54	6	1	
1:A:606:TYR:CD1	1:A:630:GLU:O	0.40	2.75	6	1	
1:A:270:ASP:CG	1:A:271:CYS:H	0.40	2.19	7	1	
1:A:353:GLU:O	1:A:354:GLY:C	0.40	2.58	7	1	

Continued from previous page.



Atom 1	Atom 2	$Clack(\lambda)$	Distance (Å)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:579:ILE:O	1:A:579:ILE:CD1	0.40	2.70	7	1
1:A:649:GLY:O	1:A:650:ILE:C	0.40	2.60	8	1
1:A:185:TYR:O	1:A:185:TYR:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:484:ALA:O	1:A:487:ARG:CG	0.40	2.69	9	1
1:A:508:MET:C	1:A:509:TRP:CG	0.40	2.95	9	1
1:A:702:LYS:HD2	1:A:702:LYS:H	0.40	1.75	9	1
1:A:550:GLN:O	1:A:550:GLN:HG3	0.40	2.16	10	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	А	677/731~(93%)	520±10 (77±1%)	$109 \pm 9 (16 \pm 1\%)$	$48 \pm 4 \ (7 \pm 1\%)$	2 16
All	All	6770/7310 (93%)	5202 (77%)	1090~(16%)	478 (7%)	2 16

All 180 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	195	ASP	10
1	А	278	VAL	10
1	А	444	ASN	10
1	А	500	GLY	9
1	А	440	ALA	8
1	А	105	ILE	7
1	А	356	GLU	7
1	А	415	MET	7
1	А	426	ASP	7
1	А	330	HIS	7
1	А	391	PRO	7
1	А	121	ALA	6
1	А	211	ARG	6
1	А	417	PRO	6
1	А	414	GLY	6



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	445	ARG	6
1	А	298	LEU	5
1	А	325	SER	5
1	А	358	PRO	5
1	А	394	HIS	5
1	А	442	ALA	5
1	А	499	ARG	5
1	А	506	LYS	5
1	А	513	ASP	5
1	А	314	ASN	5
1	А	272	GLU	5
1	А	74	PRO	4
1	А	149	PRO	4
1	А	160	PRO	4
1	А	378	GLN	4
1	А	420	LEU	4
1	А	428	GLU	4
1	А	446	VAL	4
1	А	626	VAL	4
1	А	650	ILE	4
1	А	124	ALA	4
1	А	283	LYS	4
1	А	418	ASN	4
1	А	580	PRO	4
1	А	618	SER	4
1	А	706	GLY	4
1	А	30	LEU	4
1	А	150	GLN	4
1	А	432	SER	4
1	A	111	SER	4
1	A	203	LYS	4
1	A	76	LYS	3
1	A	270	ASP	3
1	A	280	ALA	3
1	A	453	PHE	3
1	A	179	PRO	3
1	A	255	HIS	3
1	A	326	GLU	3
1	А	585	ALA	3
1	A	704	PRO	3
1	A	95	PRO	3
1	А	113	ALA	3



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	120	PRO	3
1	А	135	TRP	3
1	А	197	GLN	3
1	А	217	VAL	3
1	А	392	LYS	3
1	А	429	ARG	3
1	А	451	THR	3
1	А	638	SER	3
1	А	137	SER	3
1	А	345	THR	3
1	А	384	GLY	3
1	А	90	TYR	3
1	А	416	ALA	3
1	А	122	MET	3
1	А	348	VAL	3
1	A	344	MET	2
1	А	372	LEU	2
1	А	511	MET	2
1	А	616	GLY	2
1	А	627	ALA	2
1	А	637	ILE	2
1	А	180	LEU	2
1	А	342	HIS	2
1	А	466	GLU	2
1	А	505	GLY	2
1	А	508	MET	2
1	А	133	ALA	2
1	А	151	GLU	2
1	А	152	GLY	2
1	А	379	LYS	2
1	A	419	THR	2
1	А	441	GLN	2
1	A	452	GLY	2
1	А	576	LEU	2
1	A	700	GLY	2
1	A	214	ALA	2
1	А	315	ASP	2
1	A	341	GLY	2
1	А	360	GLY	2
1	А	395	GLY	2
1	А	456	ARG	2
1	А	564	GLU	2



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	707	TYR	2
1	А	291	LEU	2
1	А	357	ILE	2
1	А	431	THR	2
1	А	443	ARG	2
1	А	519	TYR	2
1	А	577	LEU	2
1	А	26	PRO	2
1	А	106	ASP	2
1	А	249	GLY	2
1	А	455	ASP	2
1	А	184	SER	2
1	А	245	ASN	2
1	A	584	ASN	2
1	А	153	ALA	2
1	A	226	PRO	2
1	А	89	GLY	1
1	А	93	PRO	1
1	А	427	GLU	1
1	А	454	LEU	1
1	А	512	PRO	1
1	А	614	GLY	1
1	А	227	THR	1
1	А	279	ASP	1
1	А	699	LEU	1
1	А	210	LEU	1
1	А	271	CYS	1
1	А	322	ALA	1
1	А	563	THR	1
1	А	243	ASP	1
1	А	244	ALA	1
1	A	367	THR	1
1	А	393	MET	1
1	А	507	GLY	1
1	А	530	ALA	1
1	А	587	TRP	1
1	А	623	ILE	1
1	А	721	GLU	1
1	А	157	GLY	1
1	А	274	SER	1
1	A	297	THR	1
1	А	632	ARG	1



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	705	ASN	1
1	А	8	SER	1
1	А	465	MET	1
1	А	501	LYS	1
1	А	531	ASN	1
1	А	566	ASN	1
1	А	586	ASN	1
1	А	619	LYS	1
1	А	646	LEU	1
1	А	3	GLN	1
1	А	36	TRP	1
1	А	423	GLY	1
1	А	578	THR	1
1	А	636	ARG	1
1	А	71	ASN	1
1	А	72	PRO	1
1	А	148	ILE	1
1	А	189	VAL	1
1	А	430	ARG	1
1	А	498	LEU	1
1	А	115	PRO	1
1	А	234	ASN	1
1	А	296	GLY	1
1	А	362	LEU	1
1	А	459	ASP	1
1	А	583	GLU	1
1	А	29	GLY	1
1	А	78	LYS	1
1	А	181	GLU	1
1	А	188	VAL	1
1	А	254	ALA	1
1	А	313	LEU	1
1	А	340	VAL	1
1	А	492	SER	1
1	А	542	THR	1
1	А	543	LEU	1
1	А	547	HIS	1
1	А	550	GLN	1
1	А	565	PHE	1

Continued from previous page...



6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Perc	entiles
1	А	563/607~(93%)	$469 \pm 4 (83 \pm 1\%)$	94 \pm 4 (17 \pm 1%)	5	41
All	All	5630/6070~(93%)	4690 (83%)	940 (17%)	5	41

All 396 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	498	LEU	9
1	А	191	PHE	8
1	А	494	LEU	8
1	А	10	LEU	7
1	А	128	LEU	7
1	А	491	LEU	7
1	А	298	LEU	7
1	А	105	ILE	6
1	А	279	ASP	6
1	А	362	LEU	6
1	А	444	ASN	6
1	А	506	LYS	6
1	А	313	LEU	6
1	А	449	ILE	6
1	А	579	ILE	6
1	А	632	ARG	6
1	А	12	ILE	5
1	А	143	TYR	5
1	А	330	HIS	5
1	А	433	LEU	5
1	А	499	ARG	5
1	А	515	MET	5
1	А	551	THR	5
1	A	204	ASN	5
1	А	335	LEU	5
1	А	336	PHE	5
1	А	482	ILE	5
1	А	485	TYR	5
1	A	387	TYR	5



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	418	ASN	5
1	А	443	ARG	5
1	А	584	ASN	5
1	А	647	ARG	5
1	А	18	ARG	4
1	А	59	ARG	4
1	А	90	TYR	4
1	А	108	GLU	4
1	А	122	MET	4
1	А	206	LYS	4
1	А	273	ASP	4
1	А	285	LEU	4
1	А	312	LYS	4
1	А	339	ASN	4
1	А	429	ARG	4
1	А	450	ASN	4
1	А	453	PHE	4
1	А	519	TYR	4
1	А	132	ASN	4
1	А	138	LEU	4
1	А	247	ARG	4
1	А	269	LEU	4
1	А	294	MET	4
1	А	372	LEU	4
1	А	445	ARG	4
1	А	446	VAL	4
1	А	501	LYS	4
1	А	534	TRP	4
1	А	552	ASN	4
1	А	36	TRP	4
1	А	88	LEU	4
1	А	135	TRP	4
1	A	211	ARG	4
1	A	268	ILE	4
1	А	646	LEU	4
1	A	94	GLN	4
1	A	266	SER	4
1	А	409	ILE	4
1	A	532	THR	4
1	A	576	LEU	4
1	А	702	LYS	4
1	А	4	THR	3

Continued from previous page...



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	30	LEU	3
1	А	57	ARG	3
1	А	78	LYS	3
1	А	125	ARG	3
1	А	139	TYR	3
1	А	142	LEU	3
1	А	148	ILE	3
1	А	185	TYR	3
1	А	186	GLN	3
1	А	212	THR	3
1	А	245	ASN	3
1	А	278	VAL	3
1	А	281	GLU	3
1	А	379	LYS	3
1	А	401	PHE	3
1	А	412	MET	3
1	А	420	LEU	3
1	А	526	LEU	3
1	А	618	SER	3
1	А	651	LEU	3
1	А	711	LEU	3
1	А	712	LEU	3
1	А	16	PHE	3
1	А	67	TRP	3
1	А	76	LYS	3
1	А	81	TYR	3
1	А	129	ASN	3
1	А	134	ARG	3
1	А	297	THR	3
1	A	319	TYR	3
1	A	374	ASP	3
1	A	376	LYS	3
1	A	394	HIS	3
1	A	451	THR	3
1	A	489	ASN	3
1	A	543	LEU	3
1	A	631	ASP	3
1	A	641	HIS	3
1	A	82	LYS	3
1	A	91	LEU	3
1	А	182	ASN	3
1	А	234	ASN	3



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	293	LEU	3
1	А	334	LEU	3
1	А	355	ASN	3
1	А	537	SER	3
1	А	586	ASN	3
1	А	587	TRP	3
1	А	645	TRP	3
1	А	707	TYR	3
1	А	45	ASP	3
1	А	117	LEU	3
1	А	199	ARG	3
1	А	201	GLN	3
1	А	208	THR	3
1	А	215	GLN	3
1	А	338	ARG	3
1	А	345	THR	3
1	А	456	ARG	3
1	А	481	TRP	3
1	А	548	TYR	3
1	А	557	GLN	3
1	А	559	ASN	3
1	А	25	LEU	3
1	А	232	LYS	3
1	А	287	TYR	3
1	А	628	LEU	3
1	А	102	THR	3
1	А	325	SER	3
1	А	346	ILE	3
1	А	421	LYS	3
1	A	427	GLU	3
1	A	465	MET	3
1	A	696	LEU	3
1	A	393	MET	3
1	A	283	LYS	3
1	A	19	PHE	2
1	A	85	LEU	2
1	A	97	ARG	2
1	A	147	ILE	2
1	A	169	TRP	2
1	A	192	LYS	2
1	A	238	ILE	2
1	А	271	CYS	2



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	314	ASN	2
1	А	366	MET	2
1	А	378	GLN	2
1	А	382	ARG	2
1	А	388	ILE	2
1	А	487	ARG	2
1	А	503	GLN	2
1	А	511	MET	2
1	А	550	GLN	2
1	А	563	THR	2
1	А	601	GLN	2
1	А	663	MET	2
1	А	698	PHE	2
1	А	6	THR	2
1	А	23	GLU	2
1	А	31	ASP	2
1	А	137	SER	2
1	А	209	THR	2
1	А	242	ILE	2
1	А	250	LYS	2
1	А	299	GLN	2
1	А	406	PHE	2
1	А	415	MET	2
1	А	518	MET	2
1	А	591	GLU	2
1	А	604	LEU	2
1	А	619	LYS	2
1	А	660	LEU	2
1	А	709	GLU	2
1	А	720	LYS	2
1	A	37	ARG	2
1	А	53	LEU	2
1	А	146	ASP	2
1	А	158	TYR	2
1	A	177	SER	2
1	A	210	LEU	2
1	А	233	ASN	2
1	A	237	HIS	2
1	А	265	ILE	2
1	А	290	LEU	2
1	А	359	GLU	2
1	А	381	SER	2



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	405	LEU	2
1	А	419	THR	2
1	А	448	PHE	2
1	А	462	HIS	2
1	А	574	ASP	2
1	А	575	ASP	2
1	А	594	GLN	2
1	А	595	GLU	2
1	А	652	THR	2
1	А	655	GLN	2
1	А	38	ASN	2
1	А	103	THR	2
1	А	112	GLN	2
1	А	200	ILE	2
1	А	257	ASN	2
1	А	410	GLU	2
1	А	430	ARG	2
1	А	432	SER	2
1	А	435	LEU	2
1	А	488	ASN	2
1	А	496	CYS	2
1	А	539	THR	2
1	А	598	ASN	2
1	А	606	TYR	2
1	А	609	ARG	2
1	А	636	ARG	2
1	А	9	ARG	2
1	А	69	ARG	2
1	А	197	GLN	2
1	A	227	THR	2
1	A	228	CYS	2
1	A	239	GLU	2
1	A	267	THR	2
1	A	342	HIS	2
1	A	408	ARG	2
1	A	454	LEU	2
1	A	525	GLN	2
1	A	542	THR	2
1	A	635	LEU	2
1	A	638	SER	2
1	A	644	ASN	2
1	А	715	TRP	2



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	77	ASP	2
1	А	99	THR	2
1	А	109	ILE	2
1	А	380	ASN	2
1	А	389	VAL	2
1	А	565	PHE	2
1	А	577	LEU	2
1	А	625	ASN	2
1	А	671	ASN	2
1	А	220	ARG	2
1	А	343	LEU	2
1	А	361	ILE	2
1	А	373	TYR	2
1	А	383	THR	2
1	А	436	ARG	2
1	А	441	GLN	2
1	А	17	LYS	2
1	А	46	LEU	2
1	А	171	ARG	2
1	А	187	ASP	2
1	А	236	LEU	2
1	А	344	MET	2
1	А	370	ILE	2
1	А	522	LYS	2
1	А	569	PHE	2
1	А	653	LYS	2
1	А	332	ARG	2
1	А	718	ARG	2
1	А	11	ARG	1
1	А	44	HIS	1
1	А	116	GLN	1
1	A	150	GLN	1
1	A	260	ILE	1
1	A	397	GLN	1
1	А	434	ASN	1
1	A	568	GLU	1
1	A	630	GLU	1
1	А	3	GLN	1
1	A	21	ASP	1
1	A	375	LEU	1
1	А	404	LYS	1
1	А	413	LEU	1



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	422	MET	1
1	А	508	MET	1
1	А	637	ILE	1
1	А	699	LEU	1
1	А	703	GLN	1
1	А	13	ASP	1
1	А	15	ASN	1
1	А	54	LEU	1
1	А	65	ASP	1
1	А	216	PHE	1
1	А	231	LEU	1
1	А	252	ASP	1
1	А	275	VAL	1
1	A	352	SER	1
1	А	437	SER	1
1	А	51	ARG	1
1	А	123	ASN	1
1	А	295	GLN	1
1	А	318	HIS	1
1	А	323	ASP	1
1	А	337	ILE	1
1	А	407	THR	1
1	А	439	ILE	1
1	А	531	ASN	1
1	А	549	HIS	1
1	А	162	ARG	1
1	А	178	LEU	1
1	А	207	GLU	1
1	А	316	ASP	1
1	А	350	TRP	1
1	A	357	ILE	1
1	A	459	ASP	1
1	A	460	GLU	1
1	A	544	HIS	1
1	A	573	LEU	1
1	A	592	ILE	1
1	А	622	ASP	1
1	A	623	ILE	1
1	A	661	GLU	1
1	А	690	PHE	1
1	A	22	GLU	1
1	А	41	GLU	1

Continued from previous page...



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	56	GLU	1
1	А	161	GLN	1
1	А	164	GLU	1
1	А	272	GLU	1
1	А	390	LYS	1
1	А	483	LYS	1
1	А	492	SER	1
1	А	517	ASP	1
1	А	572	LEU	1
1	А	650	ILE	1
1	А	691	LYS	1
1	А	28	THR	1
1	А	71	ASN	1
1	A	106	ASP	1
1	A	172	ARG	1
1	А	173	PHE	1
1	А	262	GLU	1
1	А	317	ARG	1
1	А	320	THR	1
1	А	385	SER	1
1	А	411	THR	1
1	А	457	THR	1
1	А	509	TRP	1
1	А	524	ASP	1
1	А	578	THR	1
1	А	612	GLU	1
1	А	629	MET	1
1	А	634	THR	1
1	А	668	ASP	1
1	A	669	GLN	1
1	A	717	LEU	1
1	A	86	ARG	1
1	A	140	ASP	1
1	A	$19\overline{6}$	LYS	1
1	A	198	LEU	1
1	A	$24\overline{1}$	GLN	1
1	A	243	ASP	1
1	A	$28\overline{2}$	ASP	1
1	A	289	ASN	1
1	A	392	LYS	1
1	A	428	GLU	1
1	А	514	LEU	1



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	570	GLU	1
1	А	603	ILE	1
1	А	610	TRP	1
1	А	654	GLU	1
1	А	665	LYS	1
1	А	49	GLU	1
1	А	58	ASP	1
1	А	101	GLU	1
1	А	126	TYR	1
1	А	151	GLU	1
1	А	176	GLU	1
1	А	326	GLU	1
1	А	425	MET	1
1	А	546	LEU	1
1	А	599	ASN	1
1	А	662	ASN	1
1	А	670	GLN	1
1	А	697	ILE	1
1	А	713	HIS	1
1	А	7	GLN	1
1	А	96	GLU	1
1	А	159	ASP	1
1	А	219	TYR	1
1	А	230	LEU	1
1	А	270	ASP	1
1	А	288	ARG	1
1	А	333	SER	1
1	А	398	GLU	1
1	А	461	MET	1
1	А	504	ILE	1
1	А	564	GLU	1

Continued from previous page...

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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



6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

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 (i)

No chemical shift data were provided

