



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 09:39 AM EDT

PDB ID : 6CKQ
BMRB ID : 30421
Title : Solution structure of the Burkholderia thailandensis transcription antitermination protein NusB (BTH_I1529) - Seattle Structural Genomics Center for Infectious Disease target ButhA.17903.a
Authors : Buchko, G.W.; Seattle Structural Genomics Center for Infectious Disease (SS-GCID)
Deposited on : 2018-02-28

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.33

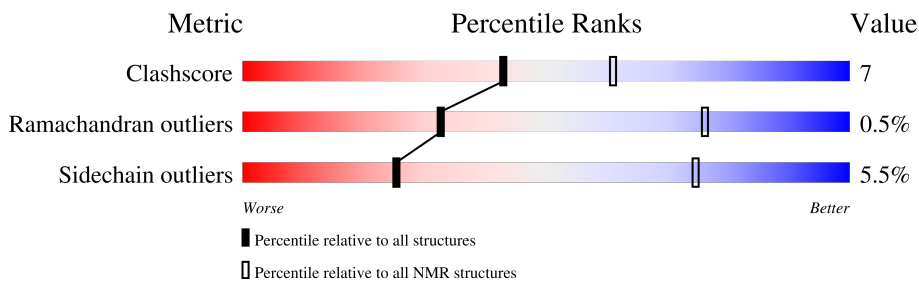
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 76%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 149 | 77% 15% 9% |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|-----------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:9-A:144 (136) | 1.21 | 1 |

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 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2327 atoms, of which 1179 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Transcription antitermination protein NusB.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 149 | 2327 | 721 | 1179 | 207 | 219 | 1 | 0 |

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

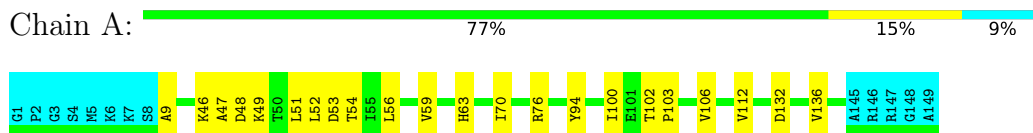
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 1 | GLY | - | expression tag | UNP Q2SYC5 |
| A | 2 | PRO | - | expression tag | UNP Q2SYC5 |
| A | 3 | GLY | - | expression tag | UNP Q2SYC5 |
| A | 4 | SER | - | expression tag | UNP Q2SYC5 |

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

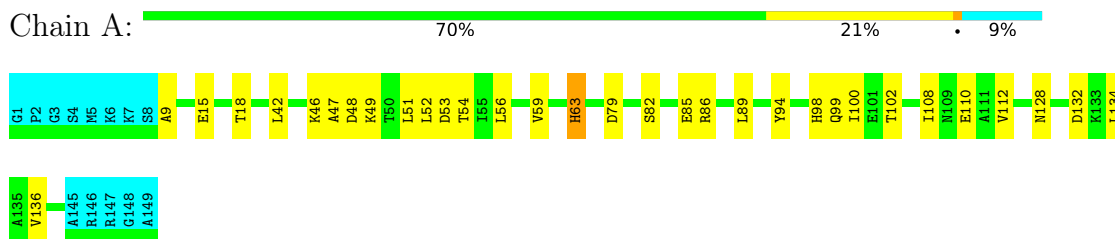


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section [4.1](#) above.

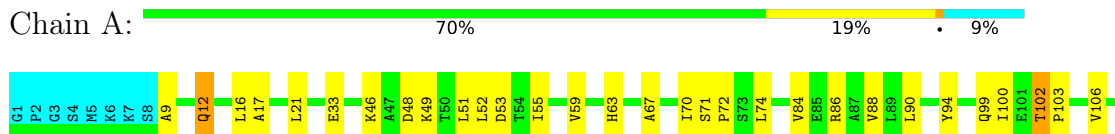
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

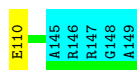
- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

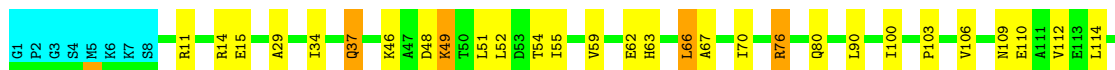




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A: 68% 20% 9%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A: 70% 19% 9%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

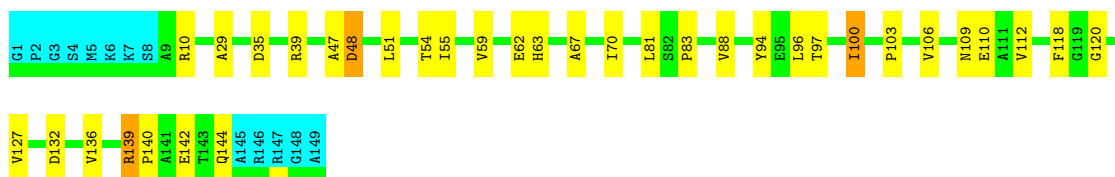
Chain A: 68% 23% 9%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

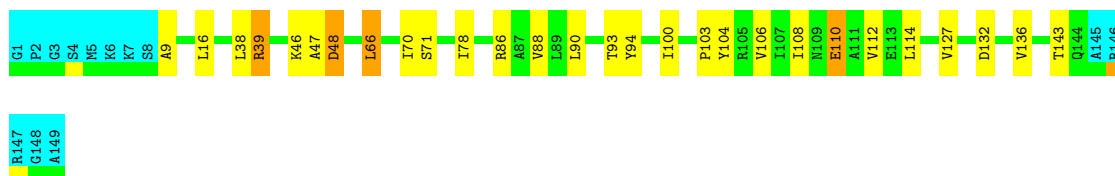
Chain A: 68% 21% 9%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

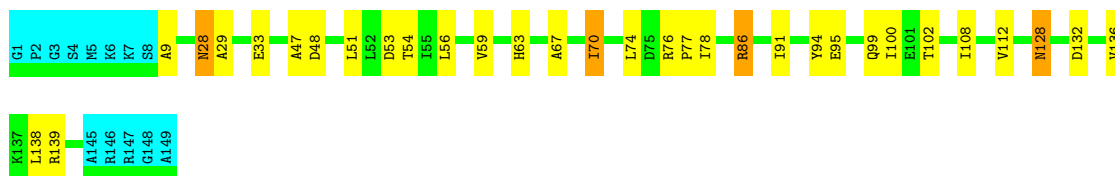
Chain A: 72% 16% 9%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

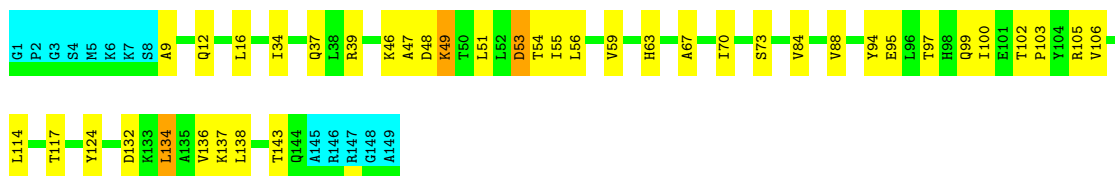
Chain A: 70% 19% 9%



4.2.9 Score per residue for model 9

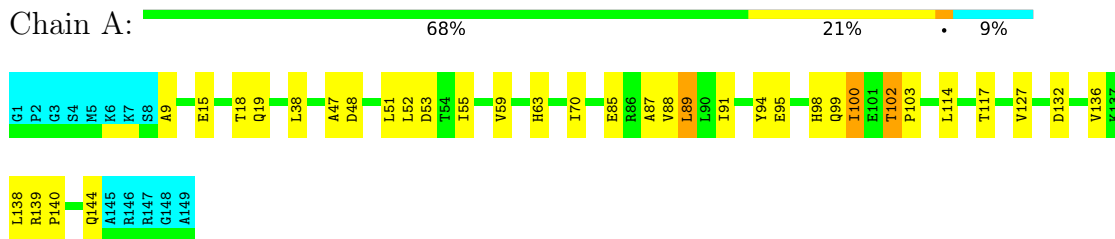
- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A: 64% 25% 9%



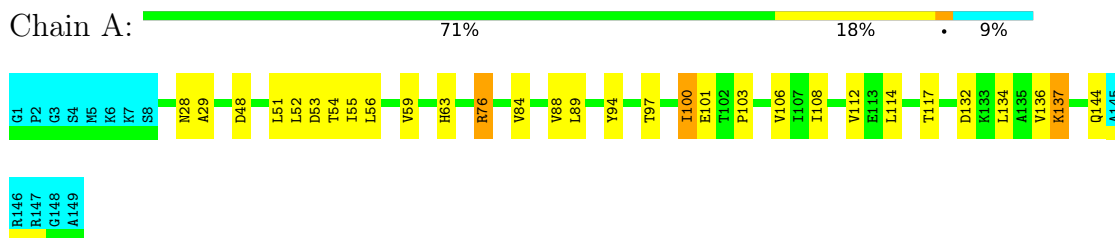
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB



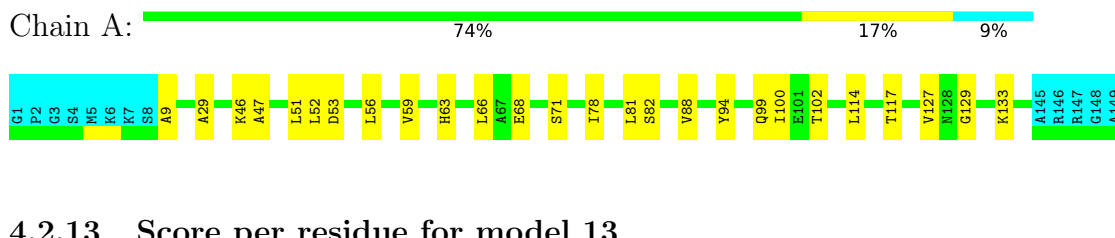
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB



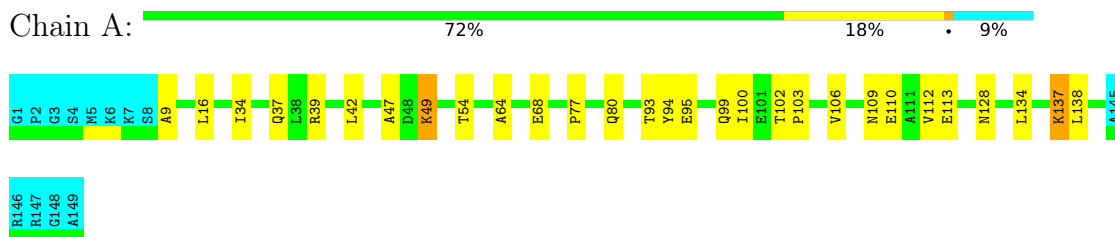
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A:  73% 17% 9%



A149

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A:  72% 19% 9%



R147
G148
A149

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A:  74% 15% 9%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A:  74% 15% 9%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

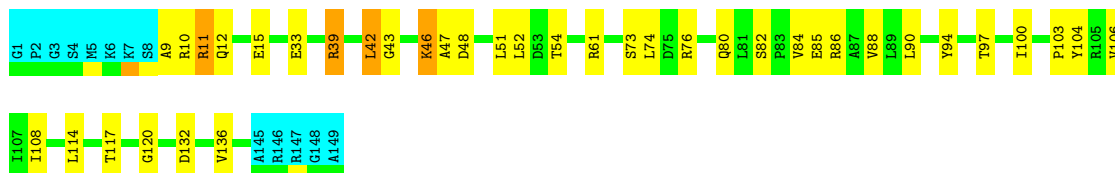
Chain A:  76% 15% 9%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A: 66% 23% 9%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transcription antitermination protein NusB

Chain A: 74% 16% 9%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CYANA | structure calculation | 2.1 |
| CNS | refinement | 1.1 |

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

| | |
|--|----------------|
| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1518 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1518 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 76% |

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 1058 | 1080 | 1077 | 15±3 |
| All | All | 21160 | 21600 | 21540 | 302 |

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 7.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:10:ARG:HA | 1:A:47:ALA:HB1 | 0.73 | 1.61 | 19 | 1 |
| 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG21 | 0.66 | 1.68 | 12 | 3 |
| 1:A:49:LYS:HZ2 | 1:A:49:LYS:HB3 | 0.64 | 1.51 | 13 | 1 |
| 1:A:82:SER:HB2 | 1:A:85:GLU:HG2 | 0.62 | 1.70 | 19 | 2 |
| 1:A:136:VAL:HA | 1:A:143:THR:HG21 | 0.62 | 1.70 | 7 | 2 |
| 1:A:48:ASP:HB3 | 1:A:51:LEU:HD23 | 0.61 | 1.72 | 3 | 7 |
| 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:80:GLN:HB3 | 0.59 | 1.73 | 17 | 1 |
| 1:A:95:GLU:HB3 | 1:A:99:GLN:HE21 | 0.59 | 1.57 | 13 | 1 |
| 1:A:19:GLN:NE2 | 1:A:96:LEU:HD12 | 0.58 | 2.14 | 16 | 1 |
| 1:A:49:LYS:HD3 | 1:A:49:LYS:H | 0.57 | 1.58 | 9 | 1 |
| 1:A:76:ARG:HB2 | 1:A:77:PRO:HD3 | 0.57 | 1.76 | 17 | 1 |
| 1:A:99:GLN:HB3 | 1:A:102:THR:HB | 0.57 | 1.76 | 13 | 6 |
| 1:A:100:ILE:HG12 | 1:A:101:GLU:HG2 | 0.57 | 1.77 | 11 | 1 |
| 1:A:49:LYS:H | 1:A:49:LYS:HD3 | 0.57 | 1.60 | 16 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:49:LYS:HD2 | 1:A:50:THR:N | 0.57 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:138:LEU:HD12 | 1:A:139:ARG:HG2 | 0.56 | 1.75 | 17 | 3 |
| 1:A:53:ASP:O | 1:A:56:LEU:HG | 0.56 | 2.00 | 4 | 8 |
| 1:A:11:ARG:HH11 | 1:A:11:ARG:HG2 | 0.56 | 1.60 | 17 | 1 |
| 1:A:79:ASP:HA | 1:A:86:ARG:NH1 | 0.56 | 2.16 | 1 | 1 |
| 1:A:55:ILE:HD13 | 1:A:97:THR:HG22 | 0.56 | 1.78 | 6 | 2 |
| 1:A:11:ARG:HH21 | 1:A:15:GLU:HG2 | 0.56 | 1.61 | 4 | 1 |
| 1:A:33:GLU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 0.55 | 1.77 | 2 | 1 |
| 1:A:105:ARG:NH2 | 1:A:143:THR:HA | 0.55 | 2.17 | 9 | 2 |
| 1:A:114:LEU:O | 1:A:117:THR:HG22 | 0.55 | 2.01 | 10 | 7 |
| 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:O | 0.55 | 2.01 | 13 | 9 |
| 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:98:HIS:NE2 | 0.54 | 2.17 | 15 | 1 |
| 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:HA | 0.54 | 1.79 | 19 | 2 |
| 1:A:104:TYR:CE1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 0.54 | 2.38 | 4 | 2 |
| 1:A:59:VAL:O | 1:A:63:HIS:HB2 | 0.54 | 2.03 | 12 | 12 |
| 1:A:52:LEU:HD22 | 1:A:98:HIS:HA | 0.53 | 1.81 | 16 | 2 |
| 1:A:67:ALA:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 0.53 | 1.80 | 2 | 1 |
| 1:A:133:LYS:HD2 | 1:A:133:LYS:N | 0.52 | 2.19 | 18 | 1 |
| 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:81:LEU:HD21 | 0.52 | 1.80 | 6 | 1 |
| 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 0.52 | 1.81 | 7 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:46:LYS:HD3 | 0.52 | 2.05 | 1 | 1 |
| 1:A:134:LEU:HD12 | 1:A:138:LEU:HD23 | 0.52 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:138:LEU:HD12 | 1:A:139:ARG:N | 0.51 | 2.20 | 8 | 3 |
| 1:A:56:LEU:O | 1:A:59:VAL:HG12 | 0.51 | 2.06 | 12 | 6 |
| 1:A:133:LYS:O | 1:A:137:LYS:HG2 | 0.51 | 2.05 | 18 | 1 |
| 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:43:GLY:HA3 | 0.51 | 1.82 | 18 | 1 |
| 1:A:103:PRO:O | 1:A:106:VAL:HG22 | 0.51 | 2.05 | 4 | 12 |
| 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:86:ARG:NH1 | 0.51 | 2.20 | 8 | 1 |
| 1:A:36:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 0.51 | 1.82 | 20 | 1 |
| 1:A:52:LEU:HD12 | 1:A:53:ASP:N | 0.50 | 2.20 | 12 | 6 |
| 1:A:129:GLY:O | 1:A:133:LYS:HG3 | 0.50 | 2.06 | 12 | 1 |
| 1:A:34:ILE:O | 1:A:37:GLN:HG3 | 0.50 | 2.07 | 3 | 1 |
| 1:A:109:ASN:O | 1:A:112:VAL:HG12 | 0.50 | 2.07 | 13 | 4 |
| 1:A:99:GLN:NE2 | 1:A:102:THR:HG21 | 0.49 | 2.21 | 1 | 2 |
| 1:A:17:ALA:O | 1:A:21:LEU:HG | 0.49 | 2.07 | 5 | 2 |
| 1:A:55:ILE:HG21 | 1:A:97:THR:HB | 0.49 | 1.83 | 11 | 1 |
| 1:A:47:ALA:O | 1:A:48:ASP:HB2 | 0.49 | 2.07 | 6 | 2 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:73:SER:HB3 | 0.49 | 1.83 | 9 | 1 |
| 1:A:33:GLU:HA | 1:A:74:LEU:HG | 0.49 | 1.84 | 19 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HB3 | 1:A:39:ARG:HH21 | 0.49 | 1.67 | 7 | 1 |
| 1:A:106:VAL:O | 1:A:110:GLU:HG2 | 0.49 | 2.07 | 2 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:67:ALA:O | 1:A:70:ILE:HG22 | 0.49 | 2.07 | 15 | 7 |
| 1:A:96:LEU:O | 1:A:100:ILE:HG23 | 0.49 | 2.07 | 6 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HD2 | 1:A:73:SER:HB3 | 0.49 | 1.85 | 19 | 1 |
| 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG21 | 0.48 | 1.84 | 10 | 1 |
| 1:A:109:ASN:O | 1:A:113:GLU:HG2 | 0.48 | 2.07 | 20 | 1 |
| 1:A:102:THR:OG1 | 1:A:103:PRO:HD2 | 0.48 | 2.09 | 10 | 2 |
| 1:A:81:LEU:HB2 | 1:A:86:ARG:HE | 0.48 | 1.68 | 14 | 1 |
| 1:A:49:LYS:HD3 | 1:A:49:LYS:N | 0.48 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:51:LEU:O | 1:A:55:ILE:HG12 | 0.48 | 2.08 | 10 | 3 |
| 1:A:132:ASP:O | 1:A:136:VAL:HG23 | 0.48 | 2.09 | 4 | 16 |
| 1:A:76:ARG:H | 1:A:76:ARG:HD2 | 0.48 | 1.68 | 11 | 1 |
| 1:A:70:ILE:HG21 | 1:A:86:ARG:HD2 | 0.48 | 1.86 | 7 | 1 |
| 1:A:71:SER:HB2 | 1:A:78:ILE:HB | 0.48 | 1.84 | 12 | 2 |
| 1:A:49:LYS:O | 1:A:52:LEU:HG | 0.48 | 2.08 | 3 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HA | 1:A:51:LEU:HG | 0.48 | 1.84 | 9 | 1 |
| 1:A:51:LEU:O | 1:A:54:THR:HG22 | 0.47 | 2.09 | 20 | 8 |
| 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:GLY:N | 0.47 | 2.25 | 19 | 1 |
| 1:A:95:GLU:HA | 1:A:98:HIS:CD2 | 0.47 | 2.44 | 10 | 2 |
| 1:A:12:GLN:OE1 | 1:A:12:GLN:N | 0.47 | 2.48 | 2 | 1 |
| 1:A:48:ASP:HB3 | 1:A:51:LEU:HG | 0.47 | 1.86 | 2 | 1 |
| 1:A:108:ILE:O | 1:A:112:VAL:HG23 | 0.47 | 2.09 | 5 | 6 |
| 1:A:10:ARG:O | 1:A:14:ARG:HG2 | 0.47 | 2.09 | 5 | 1 |
| 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:ND2 | 0.47 | 2.24 | 8 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:97:THR:HG21 | 0.47 | 1.86 | 15 | 1 |
| 1:A:110:GLU:O | 1:A:114:LEU:HG | 0.47 | 2.09 | 18 | 2 |
| 1:A:95:GLU:HB2 | 1:A:99:GLN:HE21 | 0.46 | 1.70 | 10 | 1 |
| 1:A:134:LEU:O | 1:A:137:LYS:HG3 | 0.46 | 2.10 | 13 | 1 |
| 1:A:37:GLN:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 0.46 | 1.87 | 18 | 1 |
| 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:98:HIS:HE2 | 0.46 | 1.68 | 15 | 1 |
| 1:A:105:ARG:NH1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 0.46 | 2.26 | 20 | 1 |
| 1:A:76:ARG:HB3 | 1:A:77:PRO:HD2 | 0.46 | 1.87 | 8 | 1 |
| 1:A:11:ARG:NH2 | 1:A:12:GLN:HE22 | 0.46 | 2.09 | 17 | 1 |
| 1:A:139:ARG:HD2 | 1:A:142:GLU:HG2 | 0.45 | 1.88 | 6 | 1 |
| 1:A:134:LEU:O | 1:A:138:LEU:HG | 0.45 | 2.11 | 15 | 4 |
| 1:A:11:ARG:HH22 | 1:A:100:ILE:HG13 | 0.45 | 1.71 | 17 | 1 |
| 1:A:84:VAL:O | 1:A:88:VAL:HG23 | 0.45 | 2.11 | 2 | 6 |
| 1:A:99:GLN:HB3 | 1:A:102:THR:CG2 | 0.45 | 2.41 | 10 | 2 |
| 1:A:11:ARG:O | 1:A:15:GLU:HG2 | 0.45 | 2.11 | 14 | 3 |
| 1:A:49:LYS:HB3 | 1:A:49:LYS:NZ | 0.45 | 2.25 | 13 | 1 |
| 1:A:38:LEU:O | 1:A:38:LEU:HD13 | 0.45 | 2.12 | 16 | 1 |
| 1:A:68:GLU:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 0.44 | 1.88 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:140:PRO:O | 1:A:144:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 6 | 1 |
| 1:A:15:GLU:O | 1:A:18:THR:HG22 | 0.44 | 2.13 | 1 | 2 |
| 1:A:95:GLU:HB3 | 1:A:99:GLN:NE2 | 0.44 | 2.27 | 13 | 2 |
| 1:A:133:LYS:NZ | 1:A:133:LYS:HB3 | 0.44 | 2.27 | 16 | 1 |
| 1:A:140:PRO:O | 1:A:144:GLN:HG2 | 0.44 | 2.12 | 10 | 1 |
| 1:A:110:GLU:O | 1:A:113:GLU:HB2 | 0.44 | 2.12 | 13 | 1 |
| 1:A:99:GLN:OE1 | 1:A:102:THR:HG21 | 0.44 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:71:SER:N | 1:A:72:PRO:HD2 | 0.44 | 2.28 | 2 | 1 |
| 1:A:52:LEU:HD22 | 1:A:97:THR:O | 0.44 | 2.13 | 19 | 1 |
| 1:A:77:PRO:O | 1:A:80:GLN:HG2 | 0.44 | 2.12 | 13 | 1 |
| 1:A:76:ARG:HD2 | 1:A:76:ARG:N | 0.44 | 2.28 | 3 | 1 |
| 1:A:49:LYS:HA | 1:A:52:LEU:HG | 0.43 | 1.90 | 1 | 1 |
| 1:A:104:TYR:OH | 1:A:143:THR:HA | 0.43 | 2.12 | 7 | 1 |
| 1:A:86:ARG:O | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.43 | 2.13 | 19 | 2 |
| 1:A:34:ILE:HA | 1:A:37:GLN:NE2 | 0.43 | 2.28 | 9 | 1 |
| 1:A:112:VAL:HB | 1:A:124:TYR:HB2 | 0.43 | 1.90 | 14 | 1 |
| 1:A:139:ARG:HD3 | 1:A:142:GLU:HG3 | 0.43 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HE2 | 1:A:46:LYS:N | 0.43 | 2.29 | 19 | 1 |
| 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:CD1 | 0.43 | 2.48 | 4 | 1 |
| 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:100:ILE:HD12 | 0.43 | 1.74 | 14 | 1 |
| 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HD23 | 0.43 | 1.74 | 13 | 1 |
| 1:A:83:PRO:HB2 | 1:A:118:PHE:HB3 | 0.43 | 1.91 | 6 | 1 |
| 1:A:91:ILE:O | 1:A:95:GLU:HG2 | 0.43 | 2.14 | 8 | 1 |
| 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 0.43 | 1.90 | 4 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:51:LEU:HD21 | 0.43 | 1.91 | 12 | 1 |
| 1:A:110:GLU:O | 1:A:114:LEU:HD12 | 0.42 | 2.14 | 7 | 1 |
| 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:47:ALA:O | 0.42 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:140:PRO:HA | 1:A:143:THR:OG1 | 0.42 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:33:GLU:HG3 | 1:A:81:LEU:HB2 | 0.42 | 1.90 | 20 | 1 |
| 1:A:134:LEU:HD22 | 1:A:134:LEU:N | 0.42 | 2.29 | 1 | 1 |
| 1:A:51:LEU:O | 1:A:54:THR:HB | 0.42 | 2.14 | 1 | 1 |
| 1:A:12:GLN:OE1 | 1:A:12:GLN:HA | 0.42 | 2.14 | 4 | 1 |
| 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:93:THR:HG23 | 0.42 | 1.92 | 7 | 2 |
| 1:A:134:LEU:O | 1:A:137:LYS:HG2 | 0.42 | 2.13 | 11 | 1 |
| 1:A:81:LEU:HD13 | 1:A:82:SER:N | 0.42 | 2.28 | 12 | 1 |
| 1:A:100:ILE:HG12 | 1:A:101:GLU:HG3 | 0.42 | 1.90 | 17 | 1 |
| 1:A:85:GLU:O | 1:A:89:LEU:HB2 | 0.42 | 2.15 | 10 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HA | 1:A:51:LEU:HD13 | 0.42 | 1.91 | 4 | 1 |
| 1:A:9:ALA:O | 1:A:12:GLN:HG2 | 0.42 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:133:LYS:HD2 | 1:A:133:LYS:H | 0.41 | 1.75 | 18 | 1 |
| 1:A:46:LYS:N | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.41 | 2.30 | 20 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:28:ASN:HD22 | 1:A:28:ASN:N | 0.41 | 2.14 | 8 | 1 |
| 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:O | 0.41 | 2.16 | 3 | 1 |
| 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HB2 | 0.41 | 1.93 | 16 | 1 |
| 1:A:70:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 0.41 | 1.92 | 2 | 1 |
| 1:A:87:ALA:O | 1:A:91:ILE:HD13 | 0.41 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:104:TYR:O | 1:A:108:ILE:HG13 | 0.41 | 2.15 | 19 | 1 |
| 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD21 | 0.41 | 1.92 | 3 | 1 |
| 1:A:76:ARG:N | 1:A:76:ARG:HD2 | 0.41 | 2.30 | 4 | 1 |
| 1:A:34:ILE:O | 1:A:37:GLN:HG2 | 0.41 | 2.16 | 4 | 2 |
| 1:A:86:ARG:NH1 | 1:A:90:LEU:HB2 | 0.41 | 2.30 | 16 | 1 |
| 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:114:LEU:HD12 | 0.41 | 1.92 | 5 | 1 |
| 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:N | 0.41 | 2.30 | 8 | 1 |
| 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:57:HIS:N | 0.41 | 2.31 | 17 | 1 |
| 1:A:100:ILE:N | 1:A:100:ILE:HD13 | 0.41 | 2.31 | 10 | 2 |
| 1:A:17:ALA:O | 1:A:21:LEU:HD13 | 0.40 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:64:ALA:O | 1:A:68:GLU:HG3 | 0.40 | 2.16 | 20 | 2 |
| 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:52:LEU:HD21 | 0.40 | 1.92 | 15 | 1 |
| 1:A:12:GLN:O | 1:A:16:LEU:HD13 | 0.40 | 2.15 | 2 | 2 |
| 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:55:ILE:HD11 | 0.40 | 1.93 | 3 | 1 |
| 1:A:35:ASP:O | 1:A:39:ARG:HG2 | 0.40 | 2.17 | 6 | 1 |
| 1:A:39:ARG:HD3 | 1:A:39:ARG:C | 0.40 | 2.36 | 19 | 1 |
| 1:A:67:ALA:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.40 | 1.94 | 5 | 1 |
| 1:A:129:GLY:O | 1:A:132:ASP:HB3 | 0.40 | 2.16 | 18 | 1 |

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|------------|-------------|----|
| 1 | A | 136/149 (91%) | 130±2 (96±2%) | 5±2 (4±1%) | 1±1 (1±1%) | 32 | 76 |
| All | All | 2720/2980 (91%) | 2607 (96%) | 99 (4%) | 14 (1%) | 32 | 76 |

All 6 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 29 | ALA | 4 |
| 1 | A | 48 | ASP | 3 |
| 1 | A | 76 | ARG | 3 |
| 1 | A | 120 | GLY | 2 |
| 1 | A | 77 | PRO | 1 |
| 1 | A | 119 | GLY | 1 |

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|-------------|
| 1 | A | 111/119 (93%) | 105±2 (94±2%) | 6±2 (6±2%) | 25 74 |
| All | All | 2220/2380 (93%) | 2097 (94%) | 123 (6%) | 25 74 |

All 41 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 100 | ILE | 20 |
| 1 | A | 94 | TYR | 18 |
| 1 | A | 49 | LYS | 7 |
| 1 | A | 54 | THR | 6 |
| 1 | A | 66 | LEU | 5 |
| 1 | A | 128 | ASN | 4 |
| 1 | A | 102 | THR | 4 |
| 1 | A | 70 | ILE | 4 |
| 1 | A | 89 | LEU | 3 |
| 1 | A | 110 | GLU | 3 |
| 1 | A | 46 | LYS | 3 |
| 1 | A | 76 | ARG | 3 |
| 1 | A | 39 | ARG | 3 |
| 1 | A | 137 | LYS | 3 |
| 1 | A | 37 | GLN | 2 |
| 1 | A | 62 | GLU | 2 |
| 1 | A | 80 | GLN | 2 |
| 1 | A | 10 | ARG | 2 |
| 1 | A | 15 | GLU | 2 |
| 1 | A | 125 | LYS | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 28 | ASN | 2 |
| 1 | A | 124 | TYR | 2 |
| 1 | A | 19 | GLN | 2 |
| 1 | A | 61 | ARG | 2 |
| 1 | A | 63 | HIS | 1 |
| 1 | A | 12 | GLN | 1 |
| 1 | A | 14 | ARG | 1 |
| 1 | A | 18 | THR | 1 |
| 1 | A | 116 | LYS | 1 |
| 1 | A | 122 | ASP | 1 |
| 1 | A | 139 | ARG | 1 |
| 1 | A | 33 | GLU | 1 |
| 1 | A | 86 | ARG | 1 |
| 1 | A | 53 | ASP | 1 |
| 1 | A | 134 | LEU | 1 |
| 1 | A | 38 | LEU | 1 |
| 1 | A | 57 | HIS | 1 |
| 1 | A | 11 | ARG | 1 |
| 1 | A | 42 | LEU | 1 |
| 1 | A | 96 | LEU | 1 |
| 1 | A | 109 | ASN | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 76% for the well-defined parts and 74% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *B03_BMRB_talos_edit2.txt*

7.1.1 Bookkeeping i

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

| | |
|---|------|
| Total number of shifts | 1518 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1518 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 7 |

7.1.2 Chemical shift referencing i

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction \pm precision, ppm | Suggested action |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 145 | -0.74 ± 0.19 | Should be checked |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 133 | -0.13 ± 0.09 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 82 | -0.24 ± 0.18 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 137 | 0.80 ± 0.30 | Should be applied |

7.1.3 Completeness of resonance assignments i

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 76%, i.e. 1424 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1877. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|----------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 580/677 (86%) | 246/275 (89%) | 208/272 (76%) | 126/130 (97%) |
| Sidechain | 774/1100 (70%) | 506/719 (70%) | 259/338 (77%) | 9/43 (21%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 70/100 (70%) | 35/47 (74%) | 34/46 (74%) | 1/7 (14%) |
| Overall | 1424/1877 (76%) | 787/1041 (76%) | 501/656 (76%) | 136/180 (76%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 74%, i.e. 1517 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2038. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 628/743 (85%) | 264/303 (87%) | 227/298 (76%) | 137/142 (96%) |
| Sidechain | 819/1195 (69%) | 528/780 (68%) | 282/364 (77%) | 9/51 (18%) |
| Aromatic | 70/100 (70%) | 35/47 (74%) | 34/46 (74%) | 1/7 (14%) |
| Overall | 1517/2038 (74%) | 827/1130 (73%) | 543/708 (77%) | 147/200 (74%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

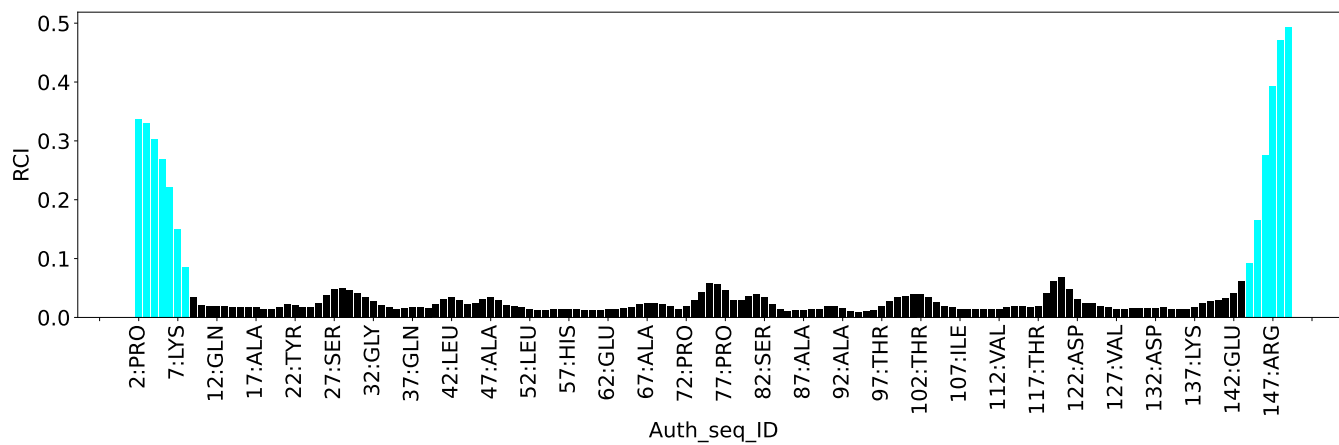
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 71 | SER | HB3 | 41.70 | 2.49 – 5.20 | 139.7 |
| 1 | A | 143 | THR | HG1 | 4.10 | 0.08 – 2.19 | 14.0 |
| 1 | A | 126 | TYR | CE2 | 128.70 | 111.68 – 124.17 | 8.6 |
| 1 | A | 137 | LYS | HE2 | 4.07 | 1.95 – 3.88 | 6.0 |
| 1 | A | 137 | LYS | HE3 | 4.07 | 1.92 – 3.89 | 5.9 |
| 1 | A | 16 | LEU | HB2 | 3.44 | -0.07 – 3.30 | 5.4 |
| 1 | A | 16 | LEU | HB3 | 3.44 | -0.26 – 3.31 | 5.3 |

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

The following table provides the summary of experimentally observed NMR restraints in different categories. Restraints are classified into different categories based on the sequence separation of the atoms involved.

| Description | Value |
|--|-------|
| Total distance restraints | 1490 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 460 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 457 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 283 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 218 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 72 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 232 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 11.6 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 1.5 |

¹Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

8.2 Residual restraint violations

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 33.9 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 42.6 | 0.32 |
| >0.5 (Large) | None | None |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model [i](#)

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|--|---------|
| 1.0-10.0 (Small) | 2.0 | 2.9 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

9 Distance violation analysis [i](#)

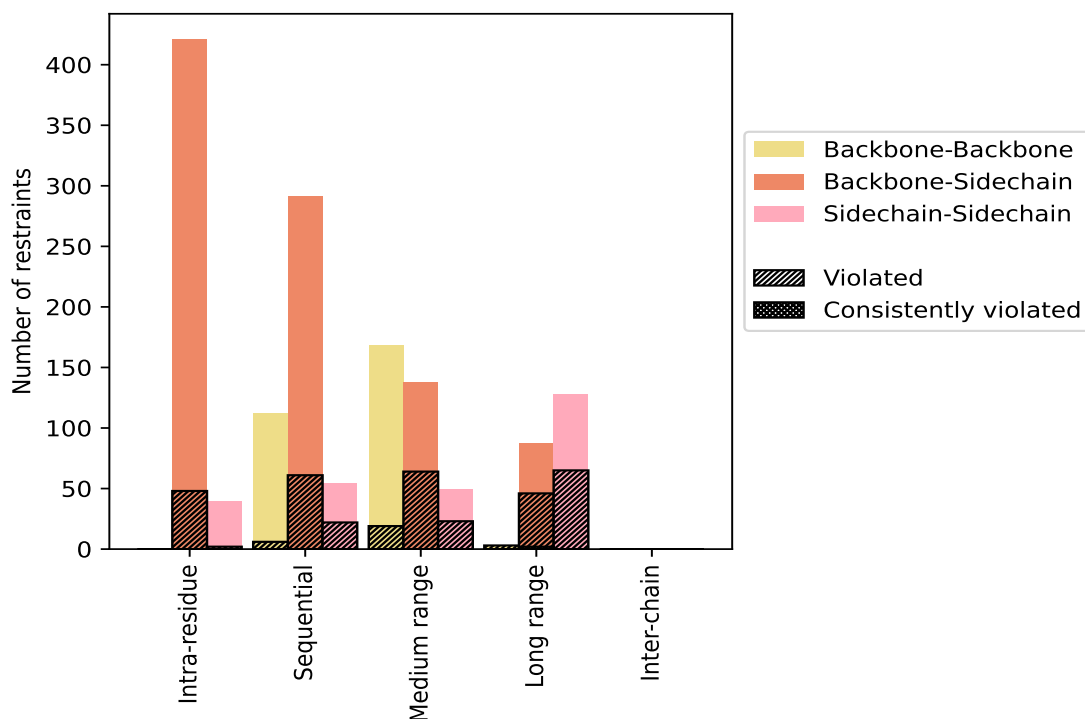
9.1 Summary of distance violations [i](#)

The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 460 | 30.9 | 50 | 10.9 | 3.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 421 | 28.3 | 48 | 11.4 | 3.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 39 | 2.6 | 2 | 5.1 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential ($i-j =1$) | 457 | 30.7 | 89 | 19.5 | 6.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 112 | 7.5 | 6 | 5.4 | 0.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 291 | 19.5 | 61 | 21.0 | 4.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 54 | 3.6 | 22 | 40.7 | 1.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 283 | 19.0 | 106 | 37.5 | 7.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 96 | 6.4 | 19 | 19.8 | 1.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 138 | 9.3 | 64 | 46.4 | 4.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 49 | 3.3 | 23 | 46.9 | 1.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 218 | 14.6 | 114 | 52.3 | 7.7 | 2 | 0.9 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 3 | 0.2 | 3 | 100.0 | 0.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 87 | 5.8 | 46 | 52.9 | 3.1 | 2 | 2.3 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 128 | 8.6 | 65 | 50.8 | 4.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 72 | 4.8 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1490 | 100.0 | 359 | 24.1 | 24.1 | 2 | 0.1 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 283 | 19.0 | 28 | 9.9 | 1.9 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 937 | 62.9 | 219 | 23.4 | 14.7 | 2 | 0.2 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 270 | 18.1 | 112 | 41.5 | 7.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |

¹ percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, ² percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, ³ violated in at least one model, ⁴ violated in all the models

9.1.1 Bar chart : Distribution of distance restraints and violations [i](#)



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and disulfid bonds are counted in their appropriate category on the x-axis

9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 6 | 21 | 28 | 27 | 0 | 82 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.2 |
| 2 | 6 | 16 | 25 | 24 | 0 | 71 | 0.21 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 3 | 8 | 19 | 20 | 33 | 0 | 80 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 4 | 6 | 17 | 15 | 38 | 0 | 76 | 0.22 | 0.31 | 0.05 | 0.22 |
| 5 | 9 | 20 | 29 | 34 | 0 | 92 | 0.2 | 0.32 | 0.05 | 0.21 |
| 6 | 11 | 20 | 20 | 31 | 0 | 82 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 7 | 13 | 15 | 21 | 17 | 0 | 66 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 8 | 7 | 15 | 21 | 31 | 0 | 74 | 0.21 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 9 | 5 | 15 | 24 | 35 | 0 | 79 | 0.21 | 0.29 | 0.04 | 0.21 |
| 10 | 9 | 23 | 22 | 26 | 0 | 80 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.2 |
| 11 | 6 | 18 | 23 | 18 | 0 | 65 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.2 |

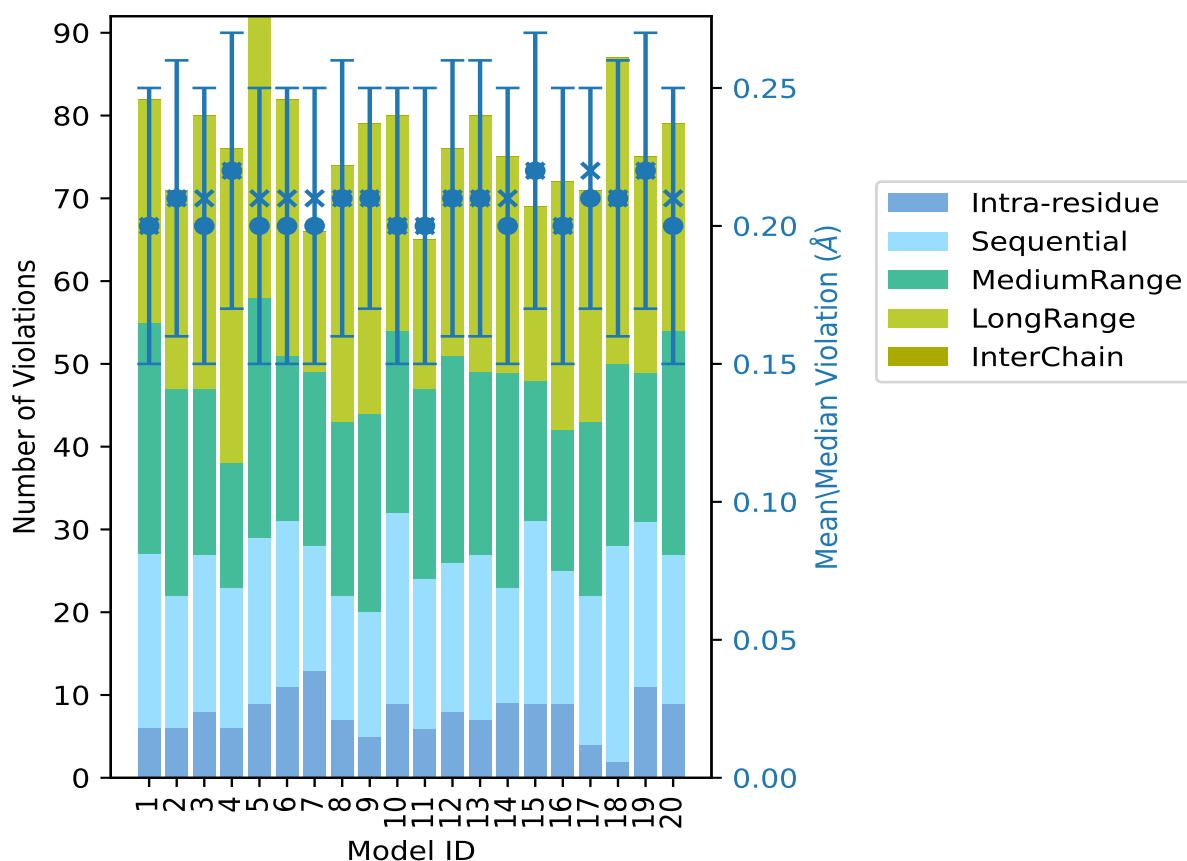
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | Total | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | | | | | |
| 12 | 8 | 18 | 25 | 25 | 0 | 76 | 0.21 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 13 | 7 | 20 | 22 | 31 | 0 | 80 | 0.21 | 0.3 | 0.05 | 0.21 |
| 14 | 9 | 14 | 26 | 26 | 0 | 75 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 15 | 9 | 22 | 17 | 21 | 0 | 69 | 0.22 | 0.29 | 0.05 | 0.22 |
| 16 | 9 | 16 | 17 | 30 | 0 | 72 | 0.2 | 0.28 | 0.05 | 0.2 |
| 17 | 4 | 18 | 21 | 28 | 0 | 71 | 0.21 | 0.3 | 0.04 | 0.22 |
| 18 | 2 | 26 | 22 | 37 | 0 | 87 | 0.21 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |
| 19 | 11 | 20 | 18 | 26 | 0 | 75 | 0.22 | 0.31 | 0.05 | 0.22 |
| 20 | 9 | 18 | 27 | 25 | 0 | 79 | 0.2 | 0.29 | 0.05 | 0.21 |

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model



The mean(dot),median(x) and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

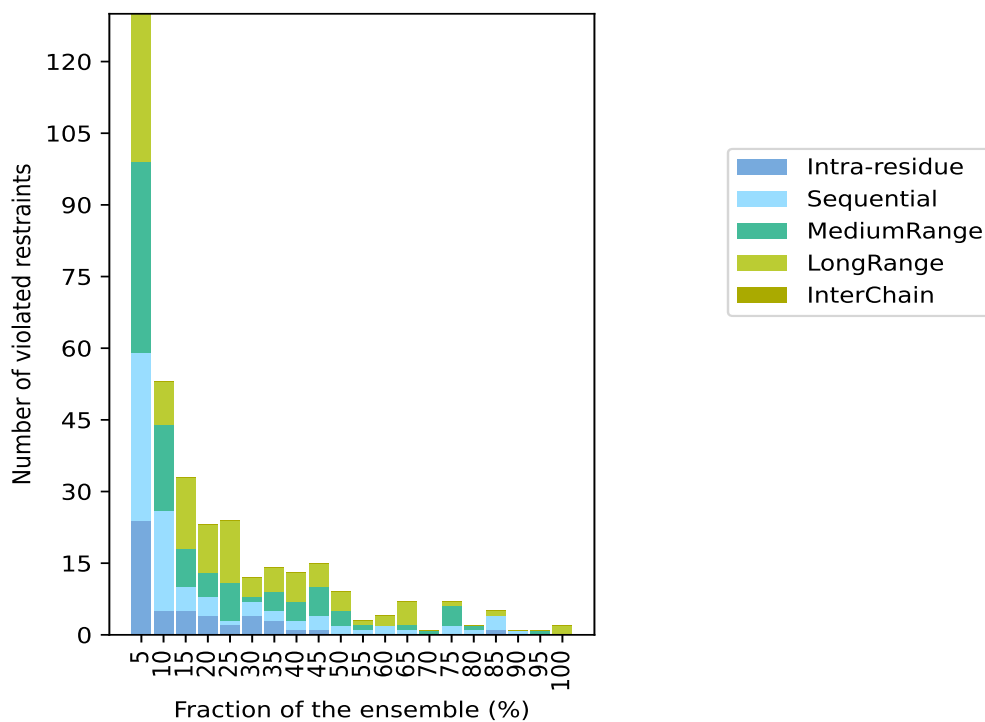
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1059(IR:410, SQ:368, MR:177, LR:104, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | Count ⁶ | % |
| 24 | 35 | 40 | 31 | 0 | 130 | 1 | 5.0 |
| 5 | 21 | 18 | 9 | 0 | 53 | 2 | 10.0 |
| 5 | 5 | 8 | 15 | 0 | 33 | 3 | 15.0 |
| 4 | 4 | 5 | 10 | 0 | 23 | 4 | 20.0 |
| 2 | 1 | 8 | 13 | 0 | 24 | 5 | 25.0 |
| 4 | 3 | 1 | 4 | 0 | 12 | 6 | 30.0 |
| 3 | 2 | 4 | 5 | 0 | 14 | 7 | 35.0 |
| 1 | 2 | 4 | 6 | 0 | 13 | 8 | 40.0 |
| 1 | 3 | 6 | 5 | 0 | 15 | 9 | 45.0 |
| 0 | 2 | 3 | 4 | 0 | 9 | 10 | 50.0 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 3 | 11 | 55.0 |
| 0 | 2 | 0 | 2 | 0 | 4 | 12 | 60.0 |
| 0 | 1 | 1 | 5 | 0 | 7 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 14 | 70.0 |
| 0 | 2 | 4 | 1 | 0 | 7 | 15 | 75.0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | 16 | 80.0 |
| 1 | 3 | 0 | 1 | 0 | 5 | 17 | 85.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 19 | 95.0 |
| 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 | 20 | 100.0 |

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶ Number of models with violations

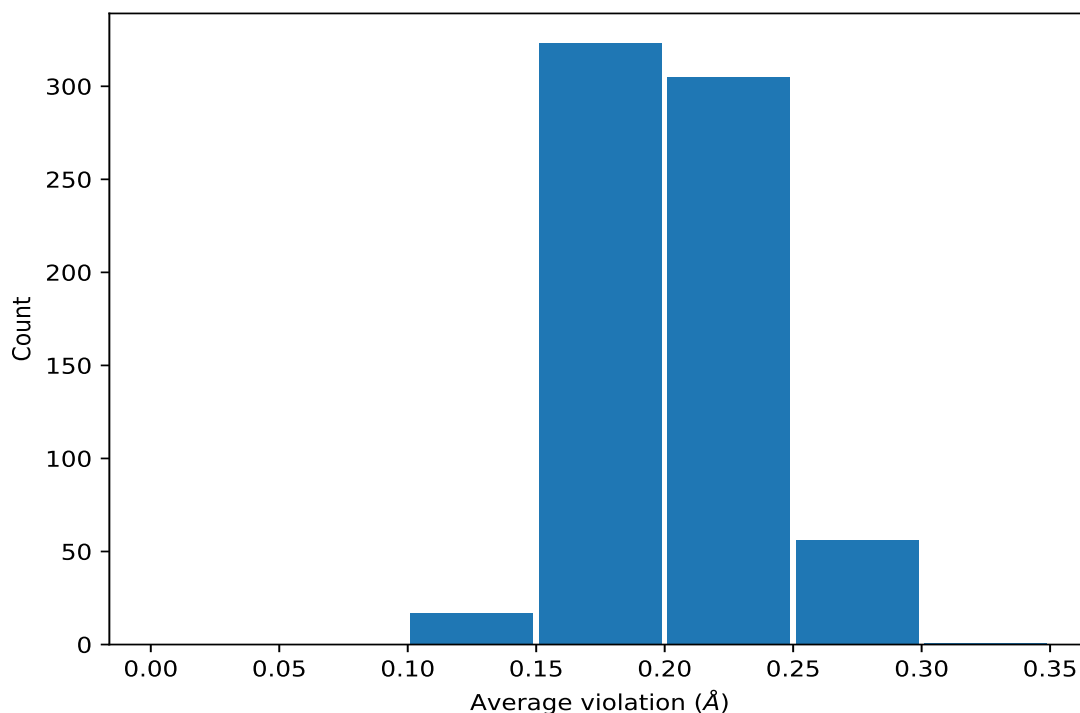
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations [i](#)

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models in the ensemble



9.4.2 Table: Most violated distance restraints [i](#)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 19 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 19 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 19 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 18 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 18 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 17 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 17 | 0.23 | 0.05 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 17 | 0.22 | 0.03 | 0.24 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 17 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 17 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 15 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 15 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.25 | 0.04 | 0.27 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 15 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 15 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 15 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 14 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 13 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 13 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 13 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 13 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 13 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 13 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 13 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 13 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.25 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 12 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 12 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 11 | 0.22 | 0.04 | 0.25 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 11 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 11 | 0.19 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 11 | 0.19 | 0.05 | 0.22 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 10 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 10 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 10 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 10 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 10 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 10 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 10 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 10 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 10 | 0.2 | 0.03 | 0.22 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 10 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 10 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 9 | 0.27 | 0.01 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 0.26 | 0.04 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 0.26 | 0.04 | 0.27 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 9 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 9 | 0.25 | 0.05 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 9 | 0.25 | 0.05 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 9 | 0.25 | 0.05 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 9 | 0.24 | 0.05 | 0.27 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 9 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 9 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 9 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 9 | 0.18 | 0.03 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 9 | 0.17 | 0.03 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 9 | 0.17 | 0.03 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 9 | 0.17 | 0.03 | 0.2 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.28 | 0.03 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.28 | 0.03 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.28 | 0.03 | 0.29 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 8 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 8 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 8 | 0.25 | 0.06 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 8 | 0.25 | 0.06 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 8 | 0.25 | 0.06 | 0.29 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 8 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 8 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 8 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 8 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 | 0.03 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 | 0.03 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 | 0.03 | 0.22 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 8 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 8 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 8 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 8 | 0.2 | 0.04 | 0.18 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 8 | 0.19 | 0.03 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 8 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 8 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 8 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 8 | 0.16 | 0.05 | 0.13 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 8 | 0.16 | 0.05 | 0.13 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 7 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 7 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 7 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.26 | 0.04 | 0.28 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 7 | 0.22 | 0.03 | 0.23 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 7 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 7 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 7 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 7 | 0.22 | 0.07 | 0.27 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 7 | 0.22 | 0.03 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 7 | 0.22 | 0.03 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 7 | 0.22 | 0.03 | 0.23 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 7 | 0.2 | 0.05 | 0.23 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 7 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 7 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 7 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 7 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 6 | 0.22 | 0.02 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 6 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 6 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.18 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 6 | 0.18 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 6 | 0.18 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 6 | 0.18 | 0.03 | 0.2 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 5 | 0.26 | 0.04 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 5 | 0.26 | 0.04 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 5 | 0.26 | 0.04 | 0.29 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 5 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 5 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 5 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.23 | 0.01 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.23 | 0.01 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.23 | 0.01 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 5 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 5 | 0.23 | 0.04 | 0.21 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 5 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.06 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.06 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.06 | 0.19 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 5 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 5 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 5 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 5 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 5 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 5 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 5 | 0.19 | 0.01 | 0.2 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 5 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 5 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 5 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD2 | 4 | 0.26 | 0.03 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD2 | 4 | 0.26 | 0.03 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD2 | 4 | 0.26 | 0.03 | 0.28 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB2 | 4 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB3 | 4 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB2 | 4 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB3 | 4 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,19) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:89:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.04 | 0.24 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:74:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:74:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,541) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:76:ARG:H | 4 | 0.21 | 0.02 | 0.22 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG21 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.23 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG22 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.23 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG23 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.23 |
| (2,441) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 4 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,442) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 4 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (2,706) | 1:A:65:THR:H | 1:A:65:THR:HB | 4 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,345) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.23 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE22 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,627) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 4 | 0.2 | 0.06 | 0.21 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:66:LEU:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:66:LEU:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:66:LEU:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:119:GLY:H | 4 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG11 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG12 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG13 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG21 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG22 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG23 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG11 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG12 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG13 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG21 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG22 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG23 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG11 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG12 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG13 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG21 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG22 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG23 | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (2,556) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:H | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (2,737) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:73:SER:H | 4 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG21 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG22 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG23 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG21 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG22 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG23 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG21 | 4 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG22 | 4 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG23 | 4 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (2,1024) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB3 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,1023) | 1:A:145:ALA:HA | 1:A:146:ARG:H | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:41:ALA:H | 3 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:H | 3 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:H | 3 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,54) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HG3 | 3 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG2 | 3 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG3 | 3 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:129:GLY:H | 3 | 0.23 | 0.05 | 0.25 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:129:GLY:H | 3 | 0.23 | 0.05 | 0.25 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:129:GLY:H | 3 | 0.23 | 0.05 | 0.25 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD11 | 3 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD12 | 3 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD13 | 3 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HD2 | 3 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HD2 | 3 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HD2 | 3 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,589) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:36:ALA:H | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG2 | 3 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,652) | 1:A:52:LEU:HG | 1:A:53:ASP:H | 3 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.17 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.17 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.17 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG21 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG22 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG23 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD11 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD12 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD13 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD11 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD12 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD13 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD11 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD12 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD13 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:HB3 | 3 | 0.2 | 0.06 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:HB3 | 3 | 0.2 | 0.06 | 0.23 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:HB3 | 3 | 0.2 | 0.06 | 0.23 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 3 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1055) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:128:ASN:HD22 | 3 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD2 | 3 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD3 | 3 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1031) | 1:A:146:ARG:HB2 | 1:A:147:ARG:H | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.01 | 0.19 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:57:HIS:H | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.15 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:57:HIS:H | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.15 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:57:HIS:H | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HB2 | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.2 |
| (2,529) | 1:A:81:LEU:HG | 1:A:82:SER:H | 3 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |
| (2,725) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:H | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.19 |
| (2,57) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:35:ASP:HA | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,461) | 1:A:57:HIS:HA | 1:A:57:HIS:HD2 | 3 | 0.17 | 0.03 | 0.19 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HD2 | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,731) | 1:A:71:SER:H | 1:A:72:PRO:HG2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB1 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB3 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,133) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:68:GLU:HG2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,719) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:71:SER:H | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (2,473) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HA | 2 | 0.3 | 0.02 | 0.3 |
| (2,1048) | 1:A:144:GLN:HA | 1:A:144:GLN:HE22 | 2 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:38:LEU:H | 2 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:38:LEU:H | 2 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD2 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,377) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:HD3 | 2 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:95:GLU:HA | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:95:GLU:HA | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:95:GLU:HA | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,678) | 1:A:58:GLY:H | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:86:ARG:HD2 | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:86:ARG:HD2 | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:86:ARG:HD2 | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,350) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:138:LEU:HG | 2 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,1038) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:12:GLN:HE21 | 2 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG2 | 1:A:138:LEU:HG | 2 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG3 | 1:A:138:LEU:HG | 2 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG2 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG3 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG2 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG3 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG2 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG3 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,455) | 1:A:44:TYR:HD1 | 1:A:45:ASP:H | 2 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:43:GLY:H | 2 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1019) | 1:A:145:ALA:H | 1:A:146:ARG:H | 2 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,644) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:52:LEU:H | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,297) | 1:A:133:LYS:HA | 1:A:136:VAL:HB | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG2 | 1:A:62:GLU:H | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,990) | 1:A:137:LYS:HA | 1:A:139:ARG:H | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (2,462) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:98:HIS:HD2 | 2 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,1021) | 1:A:144:GLN:HB2 | 1:A:145:ALA:H | 2 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD11 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD12 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD13 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD11 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD12 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD13 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD11 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD12 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD13 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,694) | 1:A:59:VAL:HA | 1:A:62:GLU:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,699) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 2 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,605) | 1:A:39:ARG:HA | 1:A:41:ALA:H | 2 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:56:LEU:H | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:56:LEU:H | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:56:LEU:H | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE21 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE22 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG11 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG12 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG13 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG21 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG22 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG23 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,72) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD3 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD11 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD12 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD13 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD21 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD22 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD23 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD11 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD12 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD13 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD21 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD22 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD23 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (2,1027) | 1:A:146:ARG:HA | 1:A:147:ARG:H | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB1 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB3 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,1005) | 1:A:143:THR:H | 1:A:143:THR:HG1 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB2 | 1:A:45:ASP:H | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB3 | 1:A:45:ASP:H | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

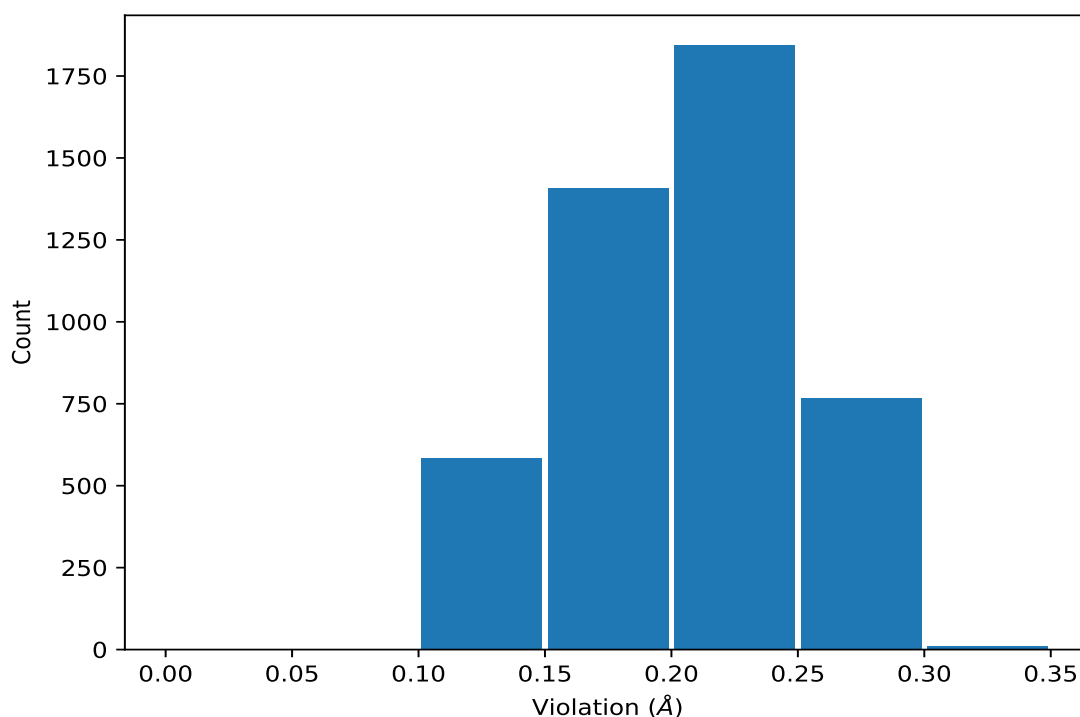
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1026) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB2 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,343) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:93:THR:HB | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:93:THR:HB | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:93:THR:HB | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HE1 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HE1 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HE1 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,459) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HE2 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations [i](#)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



9.5.2 Table : All distance violations [i](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,473) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HA | 5 | 0.32 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 19 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 19 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 19 | 0.31 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 13 | 0.3 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 17 | 0.3 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 17 | 0.3 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 17 | 0.3 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.29 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 2 | 0.29 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 2 | 0.29 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 2 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 2 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 2 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 2 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 8 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 8 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 8 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 12 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 12 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 12 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 15 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 15 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 15 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 17 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 17 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 17 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 18 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 18 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 18 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 20 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 20 | 0.29 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 20 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 17 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 17 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 17 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 18 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 18 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 18 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 19 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 19 | 0.29 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 19 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 1 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 1 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 1 | 0.29 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.29 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 15 | 0.29 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 19 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 2 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 2 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 2 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 7 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 7 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 7 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 15 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 15 | 0.29 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 15 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:41:ALA:H | 1 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:H | 1 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:H | 1 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:H | 8 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:41:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:41:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,606) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:41:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,54) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HG3 | 8 | 0.29 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 8 | 0.29 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 8 | 0.29 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 8 | 0.29 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 1 | 0.29 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 9 | 0.29 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 14 | 0.29 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 14 | 0.29 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 14 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 13 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 13 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 13 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 15 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 15 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 15 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 17 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 17 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 17 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 19 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 19 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 19 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 20 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 20 | 0.29 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 20 | 0.29 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 6 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 6 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 6 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 10 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 10 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 10 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 14 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 14 | 0.29 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 14 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 3 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 3 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 3 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 4 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 4 | 0.29 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 4 | 0.29 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:38:LEU:H | 18 | 0.29 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:38:LEU:H | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 8 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 13 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.29 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 10 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 10 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 10 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 10 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 10 | 0.29 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 10 | 0.29 |
| (2,1048) | 1:A:144:GLN:HA | 1:A:144:GLN:HE22 | 13 | 0.29 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 4 | 0.29 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 7 | 0.29 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 11 | 0.29 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 1 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 2 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 11 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 16 | 0.28 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:129:GLY:H | 8 | 0.28 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:129:GLY:H | 8 | 0.28 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:129:GLY:H | 8 | 0.28 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 5 | 0.28 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 5 | 0.28 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 5 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 1 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 1 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 1 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 9 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 9 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 9 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 10 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 10 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 10 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 13 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 13 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 13 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 16 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 16 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 16 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 19 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 19 | 0.28 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 19 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 7 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 7 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 7 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 13 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 13 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 13 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 15 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 15 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 15 | 0.28 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 18 | 0.28 |
| (2,678) | 1:A:58:GLY:H | 1:A:94:TYR:HE2 | 3 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 15 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 15 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 15 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 16 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 16 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 16 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 1 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 3 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 4 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 10 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 11 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 16 | 0.28 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 18 | 0.28 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 18 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 18 | 0.28 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 18 | 0.28 |
| (2,54) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HG3 | 13 | 0.28 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.28 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.28 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.28 |
| (2,491) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:16:LEU:H | 19 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 1 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 9 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 13 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 13 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 13 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 15 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 15 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 15 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 19 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 19 | 0.28 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 19 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD2 | 19 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD2 | 19 | 0.28 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD2 | 19 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 19 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 19 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 19 | 0.28 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.28 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 12 | 0.28 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 14 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 4 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 8 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 12 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 13 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 17 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.28 |
| (2,387) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:44:TYR:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,386) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:44:TYR:HB2 | 11 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 4 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 4 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 4 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 16 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 16 | 0.28 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 16 | 0.28 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.28 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.28 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.28 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 18 | 0.28 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.28 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 8 | 0.28 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 8 | 0.28 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 8 | 0.28 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 2 | 0.28 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 6 | 0.28 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 14 | 0.28 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 15 | 0.28 |
| (2,294) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:135:ALA:HB1 | 9 | 0.28 |
| (2,294) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:135:ALA:HB2 | 9 | 0.28 |
| (2,294) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:135:ALA:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 8 | 0.28 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 8 | 0.28 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 8 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 7 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 7 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 7 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 8 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 8 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 8 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 17 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 17 | 0.28 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 17 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,139) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:70:ILE:HG21 | 16 | 0.28 |
| (2,139) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:70:ILE:HG22 | 16 | 0.28 |
| (2,139) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:70:ILE:HG23 | 16 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 1 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 1 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 1 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 2 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 2 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 2 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 7 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 7 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 7 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 8 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 8 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 8 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 11 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 11 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 11 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 18 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 18 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 18 | 0.28 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:38:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (2,1155) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:38:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 1 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 10 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 15 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 17 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 17 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 17 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 17 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 17 | 0.28 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 17 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 3 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 3 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 4 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 4 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 9 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 9 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 11 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 11 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 12 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 12 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 19 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 19 | 0.28 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 20 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 20 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 17 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.28 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 8 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 8 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.28 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.28 |
| (2,1048) | 1:A:144:GLN:HA | 1:A:144:GLN:HE22 | 6 | 0.28 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 1 | 0.28 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 16 | 0.28 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 20 | 0.28 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.27 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 10 | 0.27 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 10 | 0.27 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 10 | 0.27 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 3 | 0.27 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 3 | 0.27 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 3 | 0.27 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 9 | 0.27 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 9 | 0.27 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 9 | 0.27 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 4 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 4 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 4 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 13 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 13 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 13 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 6 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 7 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 8 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 9 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 10 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 14 | 0.27 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 15 | 0.27 |
| (2,54) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.27 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 12 | 0.27 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 12 | 0.27 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 12 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HA | 15 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 6 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 10 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 14 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 19 | 0.27 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,419) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.27 |
| (2,419) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.27 |
| (2,419) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.27 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 18 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 1 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 3 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 5 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 6 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 11 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 14 | 0.27 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 18 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 4 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 4 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 4 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.27 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.27 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 8 | 0.27 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.27 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 12 | 0.27 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 12 | 0.27 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 12 | 0.27 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 8 | 0.27 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 19 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 14 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 14 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 14 | 0.27 |
| (2,1398) | 1:A:140:PRO:HB2 | 1:A:144:GLN:HE21 | 5 | 0.27 |
| (2,1398) | 1:A:140:PRO:HB3 | 1:A:144:GLN:HE21 | 5 | 0.27 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 18 | 0.27 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 18 | 0.27 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 10 | 0.27 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 10 | 0.27 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 10 | 0.27 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD2 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.27 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 3 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 7 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 9 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 9 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 9 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 9 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 9 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 9 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 8 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 8 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 10 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 10 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 13 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 13 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 17 | 0.27 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 17 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.27 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 0.27 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 0.27 |
| (2,1051) | 1:A:136:VAL:HG21 | 1:A:144:GLN:HE21 | 6 | 0.27 |
| (2,1051) | 1:A:136:VAL:HG22 | 1:A:144:GLN:HE21 | 6 | 0.27 |
| (2,1051) | 1:A:136:VAL:HG23 | 1:A:144:GLN:HE21 | 6 | 0.27 |
| (2,1050) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:144:GLN:HE21 | 2 | 0.27 |
| (2,1050) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:144:GLN:HE21 | 2 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1050) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:144:GLN:HE21 | 2 | 0.27 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 1 | 0.27 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 15 | 0.27 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 16 | 0.27 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 7 | 0.26 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 15 | 0.26 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 4 | 0.26 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 4 | 0.26 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 4 | 0.26 |
| (2,784) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:95:GLU:HG2 | 6 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 18 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 18 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 18 | 0.26 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.26 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.26 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.26 |
| (2,626) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:45:ASP:H | 9 | 0.26 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 4 | 0.26 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 13 | 0.26 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 19 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 4 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 4 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 15 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 15 | 0.26 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 15 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 4 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 4 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 5 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 5 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 5 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 9 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 9 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 9 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 17 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 17 | 0.26 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 17 | 0.26 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,417) | 1:A:17:ALA:H | 1:A:18:THR:HG21 | 4 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,417) | 1:A:17:ALA:H | 1:A:18:THR:HG22 | 4 | 0.26 |
| (2,417) | 1:A:17:ALA:H | 1:A:18:THR:HG23 | 4 | 0.26 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 2 | 0.26 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 10 | 0.26 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.26 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.26 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.26 |
| (2,381) | 1:A:39:ARG:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 19 | 0.26 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 4 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 18 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 18 | 0.26 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 18 | 0.26 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 0.26 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 0.26 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 1 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 1 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 1 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 14 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 14 | 0.26 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 14 | 0.26 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 3 | 0.26 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 3 | 0.26 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 4 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 4 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 4 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 1 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 1 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 3 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 3 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 20 | 0.26 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 20 | 0.26 |
| (2,1372) | 1:A:132:ASP:H | 1:A:133:LYS:HG2 | 18 | 0.26 |
| (2,1372) | 1:A:132:ASP:H | 1:A:133:LYS:HG3 | 18 | 0.26 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 5 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 5 | 0.26 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD2 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.26 |
| (2,1181) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.26 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 1 | 0.26 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 1 | 0.26 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 2 | 0.26 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 2 | 0.26 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 19 | 0.26 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 20 | 0.26 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 10 | 0.26 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 12 | 0.26 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:129:GLY:H | 10 | 0.25 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:129:GLY:H | 10 | 0.25 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:129:GLY:H | 10 | 0.25 |
| (2,94) | 1:A:55:ILE:HG21 | 1:A:59:VAL:HA | 20 | 0.25 |
| (2,94) | 1:A:55:ILE:HG22 | 1:A:59:VAL:HA | 20 | 0.25 |
| (2,94) | 1:A:55:ILE:HG23 | 1:A:59:VAL:HA | 20 | 0.25 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 17 | 0.25 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 13 | 0.25 |
| (2,680) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:58:GLY:H | 2 | 0.25 |
| (2,680) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:58:GLY:H | 2 | 0.25 |
| (2,680) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:58:GLY:H | 2 | 0.25 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:57:HIS:H | 17 | 0.25 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:57:HIS:H | 17 | 0.25 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:57:HIS:H | 17 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 0.25 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 0.25 |
| (2,627) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 17 | 0.25 |
| (2,589) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:36:ALA:H | 9 | 0.25 |
| (2,589) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:36:ALA:H | 20 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 4 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 4 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 5 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 5 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 19 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 19 | 0.25 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 13 | 0.25 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 13 | 0.25 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 13 | 0.25 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 9 | 0.25 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 4 | 0.25 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 10 | 0.25 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 12 | 0.25 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,415) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD3 | 19 | 0.25 |
| (2,377) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:HD3 | 14 | 0.25 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 11 | 0.25 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 20 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 3 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 3 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 3 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 4 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 4 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 4 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 9 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 9 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 9 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.25 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 2 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 5 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 8 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 9 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 10 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 14 | 0.25 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 17 | 0.25 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 15 | 0.25 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 20 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 7 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 17 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG21 | 3 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG22 | 3 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG23 | 3 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG21 | 17 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG22 | 17 | 0.25 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG23 | 17 | 0.25 |
| (2,19) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:89:LEU:HG | 3 | 0.25 |
| (2,19) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:89:LEU:HG | 9 | 0.25 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 9 | 0.25 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG2 | 17 | 0.25 |
| (2,1378) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:137:LYS:HG3 | 17 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG11 | 12 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG12 | 12 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG13 | 12 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG21 | 12 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG22 | 12 | 0.25 |
| (2,1363) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:130:VAL:HG23 | 12 | 0.25 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG2 | 18 | 0.25 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG3 | 18 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 10 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 15 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 15 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 17 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 19 | 0.25 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 5 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 5 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 5 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 5 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 5 | 0.25 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 5 | 0.25 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 6 | 0.25 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 6 | 0.25 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.25 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.25 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 19 | 0.25 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 4 | 0.25 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 11 | 0.25 |
| (2,1036) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:12:GLN:HE22 | 2 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 2 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 5 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 8 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 11 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 13 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 14 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 16 | 0.25 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 20 | 0.25 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.24 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 19 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 9 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 20 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 19 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 19 | 0.24 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 19 | 0.24 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 16 | 0.24 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 14 | 0.24 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 14 | 0.24 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 14 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:91:ILE:HD11 | 17 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,771) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:91:ILE:HD12 | 17 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:91:ILE:HD13 | 17 | 0.24 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 2 | 0.24 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,699) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 17 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG21 | 6 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG22 | 6 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:THR:HG23 | 6 | 0.24 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.24 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.24 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.24 |
| (2,627) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 17 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 17 | 0.24 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 17 | 0.24 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 6 | 0.24 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 20 | 0.24 |
| (2,556) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:H | 16 | 0.24 |
| (2,529) | 1:A:81:LEU:HG | 1:A:82:SER:H | 3 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 8 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 13 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 13 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 13 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 1 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 3 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 6 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 16 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 18 | 0.24 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 2 | 0.24 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 15 | 0.24 |
| (2,441) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 5 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 1 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 3 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 5 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 6 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 7 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 8 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 11 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 14 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 16 | 0.24 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 18 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 19 | 0.24 |
| (2,377) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:HD3 | 12 | 0.24 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 12 | 0.24 |
| (2,344) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HG2 | 18 | 0.24 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 18 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 1 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 3 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 10 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 12 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 2 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 10 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 14 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 17 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 18 | 0.24 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.24 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 10 | 0.24 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 10 | 0.24 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 10 | 0.24 |
| (2,19) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:89:LEU:HG | 8 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:95:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:95:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:95:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:95:GLU:HA | 18 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:95:GLU:HA | 18 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:95:GLU:HA | 18 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:86:ARG:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:86:ARG:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:86:ARG:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG2 | 1:A:138:LEU:HG | 3 | 0.24 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG3 | 1:A:138:LEU:HG | 3 | 0.24 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG2 | 14 | 0.24 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG3 | 14 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 7 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 7 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.24 |
| (2,1277) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.24 |
| (2,1249) | 1:A:84:VAL:H | 1:A:85:GLU:HG2 | 10 | 0.24 |
| (2,1249) | 1:A:84:VAL:H | 1:A:85:GLU:HG3 | 10 | 0.24 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 14 | 0.24 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 14 | 0.24 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 14 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 14 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 14 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 14 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 14 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 14 | 0.24 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 14 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 7 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.24 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB3 | 1 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB3 | 1 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 20 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 20 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 20 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.24 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG2 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG3 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG2 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG3 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG2 | 6 | 0.24 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG3 | 6 | 0.24 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 7 | 0.24 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,1020) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:145:ALA:H | 19 | 0.24 |
| (2,990) | 1:A:137:LYS:HA | 1:A:139:ARG:H | 4 | 0.23 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 13 | 0.23 |
| (2,966) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 0.23 |
| (2,966) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 0.23 |
| (2,966) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 0.23 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 10 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 7 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 7 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 7 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 12 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 12 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 12 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 13 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 13 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 13 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 16 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 16 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 16 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 18 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 18 | 0.23 |
| (2,909) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 18 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 4 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 4 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 4 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,86) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,86) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,86) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 3 | 0.23 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 8 | 0.23 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 15 | 0.23 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 17 | 0.23 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 19 | 0.23 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 2 | 0.23 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 15 | 0.23 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 16 | 0.23 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 18 | 0.23 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 20 | 0.23 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 15 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HG21 | 15 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HG22 | 15 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HG23 | 15 | 0.23 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 3 | 0.23 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 14 | 0.23 |
| (2,71) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 17 | 0.23 |
| (2,694) | 1:A:59:VAL:HA | 1:A:62:GLU:H | 13 | 0.23 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 16 | 0.23 |
| (2,605) | 1:A:39:ARG:HA | 1:A:41:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 1 | 0.23 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 13 | 0.23 |
| (2,556) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:H | 9 | 0.23 |
| (2,541) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:76:ARG:H | 17 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 7 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 7 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 7 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 14 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 14 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 14 | 0.23 |
| (2,470) | 1:A:22:TYR:HD1 | 1:A:23:GLN:H | 20 | 0.23 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 3 | 0.23 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 7 | 0.23 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 15 | 0.23 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 20 | 0.23 |
| (2,458) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HD2 | 18 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 7 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 8 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 18 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 19 | 0.23 |
| (2,442) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 8 | 0.23 |
| (2,442) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,442) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,441) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 1 | 0.23 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 18 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 5 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 5 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 5 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 1 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 1 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 1 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 7 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 7 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 7 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 18 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 18 | 0.23 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 18 | 0.23 |
| (2,383) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:86:ARG:HD3 | 11 | 0.23 |
| (2,383) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:86:ARG:HD3 | 11 | 0.23 |
| (2,383) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:86:ARG:HD3 | 11 | 0.23 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 19 | 0.23 |
| (2,350) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:138:LEU:HG | 2 | 0.23 |
| (2,350) | 1:A:135:ALA:HA | 1:A:138:LEU:HG | 12 | 0.23 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 15 | 0.23 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 15 | 0.23 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 15 | 0.23 |
| (2,345) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,345) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,345) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 7 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 7 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 7 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 12 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 12 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 12 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 15 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 15 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 15 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.23 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.23 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,315) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,315) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,315) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 1 | 0.23 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 7 | 0.23 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 19 | 0.23 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HD1 | 6 | 0.23 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HD1 | 6 | 0.23 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HD1 | 6 | 0.23 |
| (2,242) | 1:A:109:ASN:HA | 1:A:112:VAL:HB | 14 | 0.23 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.23 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.23 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.23 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:86:ARG:HD2 | 3 | 0.23 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:86:ARG:HD2 | 3 | 0.23 |
| (2,165) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:86:ARG:HD2 | 3 | 0.23 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,1401) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:142:GLU:HG2 | 12 | 0.23 |
| (2,1401) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:142:GLU:HG3 | 12 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 3 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 3 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 3 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (2,1301) | 1:A:106:VAL:HA | 1:A:109:ASN:HD21 | 20 | 0.23 |
| (2,1301) | 1:A:106:VAL:HA | 1:A:109:ASN:HD22 | 20 | 0.23 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 3 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 3 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 3 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 5 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 5 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 5 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 6 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 6 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 6 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 8 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 8 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 8 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 13 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 13 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 13 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 15 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 15 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 15 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 16 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 16 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 16 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 18 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 18 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 18 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 19 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 19 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 19 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 20 | 0.23 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG2 | 1:A:62:GLU:H | 17 | 0.23 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 17 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HE2 | 4 | 0.23 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.23 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.23 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 6 | 0.23 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 6 | 0.23 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 16 | 0.23 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 16 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:34:ILE:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:34:ILE:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:34:ILE:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:34:ILE:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:34:ILE:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,1109) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:34:ILE:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE21 | 7 | 0.23 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE22 | 7 | 0.23 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE21 | 10 | 0.23 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 19 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 19 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 20 | 0.23 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.23 |
| (2,1044) | 1:A:99:GLN:HB2 | 1:A:99:GLN:HE22 | 6 | 0.23 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,1038) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:12:GLN:HE21 | 2 | 0.23 |
| (2,1038) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.23 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.22 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 17 | 0.22 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 1 | 0.22 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 3 | 0.22 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 6 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 1 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 4 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 5 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 6 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 7 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 9 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 11 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 14 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 18 | 0.22 |
| (2,846) | 1:A:103:PRO:HG2 | 1:A:105:ARG:H | 20 | 0.22 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 20 | 0.22 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 20 | 0.22 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 20 | 0.22 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 5 | 0.22 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (2,652) | 1:A:52:LEU:HG | 1:A:53:ASP:H | 18 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 5 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 6 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 7 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.22 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 2 | 0.22 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 9 | 0.22 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 12 | 0.22 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 17 | 0.22 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 20 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:43:GLY:H | 13 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:43:GLY:H | 19 | 0.22 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:H | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (2,541) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:76:ARG:H | 11 | 0.22 |
| (2,541) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:76:ARG:H | 16 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 5 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 5 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 5 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 15 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 15 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 15 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 16 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 16 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 16 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 18 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 18 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 18 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 8 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 8 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 8 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 12 | 0.22 |
| (2,455) | 1:A:44:TYR:HD1 | 1:A:45:ASP:H | 6 | 0.22 |
| (2,455) | 1:A:44:TYR:HD1 | 1:A:45:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 10 | 0.22 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 15 | 0.22 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 15 | 0.22 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 15 | 0.22 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 0.22 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 0.22 |
| (2,39) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 0.22 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 0.22 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 5 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 5 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 5 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 18 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 18 | 0.22 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 18 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 6 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 6 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 6 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 8 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 8 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 8 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 10 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 10 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 10 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 17 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 17 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 17 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 18 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 18 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 18 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 19 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 19 | 0.22 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 19 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 1 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 1 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 1 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 17 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 17 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 17 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 13 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 13 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 13 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.22 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.22 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.22 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 7 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 7 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 7 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.22 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HD1 | 15 | 0.22 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HD1 | 15 | 0.22 |
| (2,272) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HD1 | 15 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ILE:HG21 | 1:A:101:GLU:H | 15 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ILE:HG22 | 1:A:101:GLU:H | 15 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ILE:HG23 | 1:A:101:GLU:H | 15 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG21 | 17 | 0.22 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG22 | 17 | 0.22 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG23 | 17 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 5 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 5 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 5 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 15 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 15 | 0.22 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 15 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 4 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 4 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 4 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 20 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 20 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 20 | 0.22 |
| (2,140) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HG21 | 16 | 0.22 |
| (2,140) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HG22 | 16 | 0.22 |
| (2,140) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HG23 | 16 | 0.22 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG2 | 1:A:138:LEU:HG | 17 | 0.22 |
| (2,1394) | 1:A:137:LYS:HG3 | 1:A:138:LEU:HG | 17 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 11 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 11 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 11 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 11 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 11 | 0.22 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 11 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG2 | 5 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HG3 | 5 | 0.22 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 9 | 0.22 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 12 | 0.22 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 20 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:74:LEU:HG | 8 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:74:LEU:HG | 8 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:74:LEU:HG | 18 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:74:LEU:HG | 18 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:74:LEU:HG | 19 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:74:LEU:HG | 19 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:74:LEU:HG | 20 | 0.22 |
| (2,1228) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:74:LEU:HG | 20 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (2,1223) | 1:A:71:SER:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 2 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 2 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 2 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 10 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 10 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 10 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 12 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 12 | 0.22 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 12 | 0.22 |
| (2,1217) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:71:SER:HB2 | 11 | 0.22 |
| (2,1217) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:71:SER:HB3 | 11 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 12 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 12 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 12 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 12 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 12 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 12 | 0.22 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 6 | 0.22 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 6 | 0.22 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 19 | 0.22 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 19 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 2 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 2 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 2 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.22 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.22 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 7 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 7 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 10 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 10 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HG | 19 | 0.22 |
| (2,1112) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HG | 19 | 0.22 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HA | 14 | 0.22 |
| (2,1110) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HA | 14 | 0.22 |
| (2,1103) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:TRP:H | 20 | 0.22 |
| (2,1103) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:24:TRP:H | 20 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 17 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 17 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 17 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 17 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 17 | 0.22 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 17 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG21 | 15 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG22 | 15 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG23 | 15 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG21 | 15 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG22 | 15 | 0.22 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG23 | 15 | 0.22 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE22 | 4 | 0.22 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 6 | 0.22 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 6 | 0.22 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 7 | 0.22 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 7 | 0.22 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 2 | 0.22 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 6 | 0.22 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 6 | 0.22 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD11 | 1 | 0.22 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD12 | 1 | 0.22 |
| (2,1042) | 1:A:99:GLN:HE22 | 1:A:107:ILE:HD13 | 1 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 5 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 5 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 5 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 8 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 8 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 8 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 12 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 12 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 12 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 17 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 17 | 0.22 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 17 | 0.22 |
| (2,1019) | 1:A:145:ALA:H | 1:A:146:ARG:H | 9 | 0.22 |
| (2,1019) | 1:A:145:ALA:H | 1:A:146:ARG:H | 14 | 0.22 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 16 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 19 | 0.21 |
| (2,818) | 1:A:100:ILE:HG13 | 1:A:101:GLU:H | 6 | 0.21 |
| (2,8) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,725) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:H | 19 | 0.21 |
| (2,706) | 1:A:65:THR:H | 1:A:65:THR:HB | 9 | 0.21 |
| (2,652) | 1:A:52:LEU:HG | 1:A:53:ASP:H | 20 | 0.21 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 8 | 0.21 |
| (2,644) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:52:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,63) | 1:A:37:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 8 | 0.21 |
| (2,63) | 1:A:37:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 8 | 0.21 |
| (2,63) | 1:A:37:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 8 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 1 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 4 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 7 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 16 | 0.21 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 19 | 0.21 |
| (2,61) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG2 | 3 | 0.21 |
| (2,61) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 5 | 0.21 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 5 | 0.21 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (2,573) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 15 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,53) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HG2 | 18 | 0.21 |
| (2,526) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:25:LEU:H | 12 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 8 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 8 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 8 | 0.21 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (2,522) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 17 | 0.21 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 17 | 0.21 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 17 | 0.21 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 7 | 0.21 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,486) | 1:A:14:ARG:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 7 | 0.21 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 9 | 0.21 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 4 | 0.21 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 4 | 0.21 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 4 | 0.21 |
| (2,462) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:98:HIS:HD2 | 18 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,437) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 9 | 0.21 |
| (2,41) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:H | 3 | 0.21 |
| (2,41) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:H | 3 | 0.21 |
| (2,41) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:H | 3 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 9 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 9 | 0.21 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 9 | 0.21 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 2 | 0.21 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 2 | 0.21 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 2 | 0.21 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 4 | 0.21 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 18 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.21 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.21 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.21 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 19 | 0.21 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 19 | 0.21 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 19 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 1 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 1 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 1 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 6 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 6 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 6 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 17 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 17 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 17 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 18 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 4 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG21 | 9 | 0.21 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG22 | 9 | 0.21 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG23 | 9 | 0.21 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 2 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 3 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 5 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 9 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 13 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 17 | 0.21 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.21 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 15 | 0.21 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 18 | 0.21 |
| (2,176) | 1:A:91:ILE:HD11 | 1:A:92:ALA:H | 17 | 0.21 |
| (2,176) | 1:A:91:ILE:HD12 | 1:A:92:ALA:H | 17 | 0.21 |
| (2,176) | 1:A:91:ILE:HD13 | 1:A:92:ALA:H | 17 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 4 | 0.21 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 19 | 0.21 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 19 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 6 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 6 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 6 | 0.21 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD2 | 15 | 0.21 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD3 | 15 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 18 | 0.21 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD22 | 18 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1318) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG11 | 10 | 0.21 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG12 | 10 | 0.21 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG13 | 10 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG21 | 10 | 0.21 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG22 | 10 | 0.21 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG23 | 10 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.21 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.21 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 5 | 0.21 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 6 | 0.21 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 8 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HD2 | 5 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 1 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 1 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 1 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 9 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 9 | 0.21 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HD2 | 9 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HE2 | 11 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:54:THR:H | 1:A:55:ILE:HG12 | 4 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:54:THR:H | 1:A:55:ILE:HG13 | 4 | 0.21 |
| (2,1176) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 5 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1176) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD3 | 5 | 0.21 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 12 | 0.21 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 12 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 1 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 14 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 17 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:29:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:29:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,1105) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:29:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 10 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (2,1090) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 1 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 7 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.21 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:19:GLN:HG3 | 13 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:19:GLN:HG3 | 13 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (2,1082) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:19:GLN:HG3 | 13 | 0.21 |
| (2,1074) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:48:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (2,1074) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:48:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 11 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 11 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 13 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 15 | 0.21 |
| (2,1055) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:128:ASN:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,1040) | 1:A:99:GLN:HE21 | 1:A:102:THR:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,1031) | 1:A:146:ARG:HB2 | 1:A:147:ARG:H | 6 | 0.21 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 7 | 0.21 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.2 |
| (2,922) | 1:A:124:TYR:H | 1:A:124:TYR:HE1 | 5 | 0.2 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 17 | 0.2 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 17 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 17 | 0.2 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 3 | 0.2 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 20 | 0.2 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 16 | 0.2 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 16 | 0.2 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 16 | 0.2 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,706) | 1:A:65:THR:H | 1:A:65:THR:HB | 7 | 0.2 |
| (2,706) | 1:A:65:THR:H | 1:A:65:THR:HB | 10 | 0.2 |
| (2,706) | 1:A:65:THR:H | 1:A:65:THR:HB | 13 | 0.2 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 18 | 0.2 |
| (2,644) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:52:LEU:H | 10 | 0.2 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 1 | 0.2 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 6 | 0.2 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 8 | 0.2 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 10 | 0.2 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 14 | 0.2 |
| (2,61) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG2 | 7 | 0.2 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD21 | 1:A:41:ALA:H | 9 | 0.2 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:41:ALA:H | 9 | 0.2 |
| (2,607) | 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:ALA:H | 9 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 3 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 6 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 9 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 16 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 15 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 15 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 15 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 16 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 8 | 0.2 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 18 | 0.2 |
| (2,472) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:22:TYR:HD1 | 2 | 0.2 |
| (2,441) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 4 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 16 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 10 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 10 | 0.2 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 10 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 6 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 6 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 6 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 8 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 8 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 8 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 10 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 10 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 10 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 12 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 12 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 12 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 13 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 13 | 0.2 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 13 | 0.2 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 9 | 0.2 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 15 | 0.2 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,297) | 1:A:133:LYS:HA | 1:A:136:VAL:HB | 12 | 0.2 |
| (2,297) | 1:A:133:LYS:HA | 1:A:136:VAL:HB | 18 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 5 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 5 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 5 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 8 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 12 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 12 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 13 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 13 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 13 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 18 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 18 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 18 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 10 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 10 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 10 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 12 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 12 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 12 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 16 | 0.2 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 16 | 0.2 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 16 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,1415) | 1:A:146:ARG:HB2 | 1:A:147:ARG:H | 5 | 0.2 |
| (2,1415) | 1:A:146:ARG:HB3 | 1:A:147:ARG:H | 5 | 0.2 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 15 | 0.2 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 15 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 3 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 3 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 3 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 5 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 5 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 1 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 2 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 2 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 2 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 2 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 2 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 2 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 3 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 4 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 5 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 8 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 19 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 19 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 19 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 19 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 19 | 0.2 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 19 | 0.2 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD2 | 10 | 0.2 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 7 | 0.2 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 7 | 0.2 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 8 | 0.2 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD11 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD12 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD13 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD21 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD22 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:96:LEU:HD23 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD11 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD12 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD13 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD21 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD22 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:96:LEU:HD23 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD11 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD12 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD13 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD21 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD22 | 17 | 0.2 |
| (2,1275) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:96:LEU:HD23 | 17 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:119:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:H | 17 | 0.2 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:H | 17 | 0.2 |
| (2,122) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:H | 17 | 0.2 |
| (2,121) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,121) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HB2 | 20 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1197) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 11 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 11 | 0.2 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 11 | 0.2 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (2,1177) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD2 | 19 | 0.2 |
| (2,1177) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 19 | 0.2 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE21 | 14 | 0.2 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE22 | 14 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 3 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 3 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 3 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 3 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 3 | 0.2 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 3 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 17 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 17 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 17 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 17 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 17 | 0.2 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 17 | 0.2 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,1111) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 5 | 0.2 |
| (2,1063) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HG3 | 5 | 0.2 |
| (2,1055) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:128:ASN:HD22 | 14 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 5 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 5 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 5 | 0.2 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG21 | 1 | 0.2 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG22 | 1 | 0.2 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG23 | 1 | 0.2 |
| (2,1021) | 1:A:144:GLN:HB2 | 1:A:145:ALA:H | 11 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 3 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 9 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 13 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 15 | 0.2 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 17 | 0.19 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 18 | 0.19 |
| (2,891) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:114:LEU:H | 14 | 0.19 |
| (2,891) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:114:LEU:H | 14 | 0.19 |
| (2,891) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:114:LEU:H | 14 | 0.19 |
| (2,883) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:112:VAL:HB | 14 | 0.19 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 1 | 0.19 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 14 | 0.19 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 14 | 0.19 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 14 | 0.19 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 6 | 0.19 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 6 | 0.19 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 6 | 0.19 |
| (2,786) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:95:GLU:HG3 | 6 | 0.19 |
| (2,741) | 1:A:36:ALA:HB1 | 1:A:73:SER:H | 18 | 0.19 |
| (2,741) | 1:A:36:ALA:HB2 | 1:A:73:SER:H | 18 | 0.19 |
| (2,741) | 1:A:36:ALA:HB3 | 1:A:73:SER:H | 18 | 0.19 |
| (2,737) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:73:SER:H | 10 | 0.19 |
| (2,737) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:73:SER:H | 11 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,737) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:73:SER:H | 12 | 0.19 |
| (2,725) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:H | 18 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:66:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:66:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:66:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:66:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:66:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:66:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:66:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:66:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,709) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:66:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,678) | 1:A:58:GLY:H | 1:A:94:TYR:HE2 | 1 | 0.19 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:56:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:56:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:56:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,652) | 1:A:52:LEU:HG | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 1 | 0.19 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.19 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.19 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.19 |
| (2,622) | 1:A:44:TYR:HB3 | 1:A:45:ASP:H | 3 | 0.19 |
| (2,617) | 1:A:42:LEU:HG | 1:A:44:TYR:H | 19 | 0.19 |
| (2,613) | 1:A:44:TYR:H | 1:A:44:TYR:HD2 | 15 | 0.19 |
| (2,57) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:35:ASP:HA | 18 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 8 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 8 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 8 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:57:HIS:HA | 1:A:57:HIS:HD2 | 8 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:57:HIS:HA | 1:A:57:HIS:HD2 | 9 | 0.19 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 19 | 0.19 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 7 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,428) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:34:ILE:HG13 | 4 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 8 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 8 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 8 | 0.19 |
| (2,42) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (2,42) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (2,42) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 8 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 8 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 8 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 17 | 0.19 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 17 | 0.19 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 17 | 0.19 |
| (2,358) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:74:LEU:H | 11 | 0.19 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 4 | 0.19 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 4 | 0.19 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 4 | 0.19 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 9 | 0.19 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 9 | 0.19 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 9 | 0.19 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.19 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.19 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 9 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 1 | 0.19 |
| (2,320) | 1:A:24:TRP:HB3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,320) | 1:A:24:TRP:HB3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,320) | 1:A:24:TRP:HB3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 2 | 0.19 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 2 | 0.19 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 2 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 8 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 19 | 0.19 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 19 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:106:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:106:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:106:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:106:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:106:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:106:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:106:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:106:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (2,219) | 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:106:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,157) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 20 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 20 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 20 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG11 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG12 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG13 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG11 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG12 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG13 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG11 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG12 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG13 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG23 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 11 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 16 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 16 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 16 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 20 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 20 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 20 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 20 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 20 | 0.19 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 20 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 2 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 2 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 10 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 10 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 13 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 13 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 14 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 14 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 19 | 0.19 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 19 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1320) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 2 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,1314) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 18 | 0.19 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 17 | 0.19 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 17 | 0.19 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:119:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1259) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:119:GLY:H | 17 | 0.19 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 6 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 6 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 6 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 6 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 6 | 0.19 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 6 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 15 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 15 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 15 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:128:ASN:HD21 | 12 | 0.19 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:128:ASN:HD21 | 12 | 0.19 |
| (2,1053) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:128:ASN:HD21 | 12 | 0.19 |
| (2,1024) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB3 | 17 | 0.19 |
| (2,1023) | 1:A:145:ALA:HA | 1:A:146:ARG:H | 6 | 0.19 |
| (2,1016) | 1:A:143:THR:HG21 | 1:A:144:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,1016) | 1:A:143:THR:HG22 | 1:A:144:GLN:H | 17 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1016) | 1:A:143:THR:HG23 | 1:A:144:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 12 | 0.18 |
| (2,956) | 1:A:132:ASP:H | 1:A:132:ASP:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 2 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 5 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 9 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 11 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 9 | 0.18 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 9 | 0.18 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 9 | 0.18 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 11 | 0.18 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 8 | 0.18 |
| (2,633) | 1:A:13:SER:H | 1:A:48:ASP:H | 20 | 0.18 |
| (2,627) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 5 | 0.18 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 5 | 0.18 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,482) | 1:A:13:SER:H | 1:A:47:ALA:HA | 16 | 0.18 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 10 | 0.18 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 10 | 0.18 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 10 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 5 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 5 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 5 | 0.18 |
| (2,434) | 1:A:124:TYR:HD1 | 1:A:125:LYS:HA | 13 | 0.18 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 20 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 20 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 20 | 0.18 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 20 | 0.18 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 20 | 0.18 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 20 | 0.18 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,333) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:57:HIS:HD2 | 18 | 0.18 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 10 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 14 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:123:GLY:H | 19 | 0.18 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:123:GLY:H | 19 | 0.18 |
| (2,267) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:123:GLY:H | 19 | 0.18 |
| (2,252) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:113:GLU:H | 10 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,252) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:113:GLU:H | 10 | 0.18 |
| (2,252) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:113:GLU:H | 10 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 6 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 6 | 0.18 |
| (2,228) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 6 | 0.18 |
| (2,187) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HA | 17 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG11 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG12 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG13 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG11 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG12 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG13 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG11 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG12 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG13 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 18 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 18 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 18 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 18 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 18 | 0.18 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 18 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 18 | 0.18 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 18 | 0.18 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 18 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,1297) | 1:A:105:ARG:H | 1:A:105:ARG:HG2 | 7 | 0.18 |
| (2,1297) | 1:A:105:ARG:H | 1:A:105:ARG:HG3 | 7 | 0.18 |
| (2,1247) | 1:A:82:SER:HB2 | 1:A:84:VAL:H | 17 | 0.18 |
| (2,1247) | 1:A:82:SER:HB3 | 1:A:84:VAL:H | 17 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD11 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD12 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD13 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD21 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD22 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1245) | 1:A:81:LEU:HD23 | 1:A:82:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (2,1243) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 9 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 9 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 9 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB2 | 1:A:45:ASP:H | 3 | 0.18 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB3 | 1:A:45:ASP:H | 3 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:34:ILE:HA | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 0.18 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 20 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 20 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 20 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.18 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.18 |
| (2,1077) | 1:A:17:ALA:HA | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG21 | 18 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG22 | 18 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG23 | 18 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG21 | 18 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG22 | 18 | 0.18 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG23 | 18 | 0.18 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG21 | 18 | 0.18 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG22 | 18 | 0.18 |
| (2,1037) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:100:ILE:HG23 | 18 | 0.18 |
| (2,1024) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,1021) | 1:A:144:GLN:HB2 | 1:A:145:ALA:H | 6 | 0.18 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 18 | 0.17 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG21 | 1:A:129:GLY:H | 13 | 0.17 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG22 | 1:A:129:GLY:H | 13 | 0.17 |
| (2,941) | 1:A:108:ILE:HG23 | 1:A:129:GLY:H | 13 | 0.17 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 10 | 0.17 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 6 | 0.17 |
| (2,780) | 1:A:94:TYR:HD2 | 1:A:95:GLU:H | 13 | 0.17 |
| (2,731) | 1:A:71:SER:H | 1:A:72:PRO:HG2 | 8 | 0.17 |
| (2,731) | 1:A:71:SER:H | 1:A:72:PRO:HG2 | 19 | 0.17 |
| (2,72) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD3 | 10 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 12 | 0.17 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 13 | 0.17 |
| (2,65) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 9 | 0.17 |
| (2,65) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 9 | 0.17 |
| (2,65) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 9 | 0.17 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 17 | 0.17 |
| (2,604) | 1:A:38:LEU:HA | 1:A:41:ALA:H | 10 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:35:ASP:HA | 2 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:29:ALA:H | 1:A:34:ILE:HG13 | 20 | 0.17 |
| (2,541) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:76:ARG:H | 19 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (2,462) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:98:HIS:HD2 | 7 | 0.17 |
| (2,460) | 1:A:57:HIS:H | 1:A:57:HIS:HD2 | 1 | 0.17 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.17 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.17 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 5 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 11 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 11 | 0.17 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 11 | 0.17 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 8 | 0.17 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 8 | 0.17 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 8 | 0.17 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 1 | 0.17 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.17 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.17 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.17 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.17 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.17 |
| (2,323) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.17 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 1 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 7 | 0.17 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 7 | 0.17 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 7 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 9 | 0.17 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 9 | 0.17 |
| (2,1406) | 1:A:144:GLN:H | 1:A:144:GLN:HG2 | 3 | 0.17 |
| (2,1406) | 1:A:144:GLN:H | 1:A:144:GLN:HG3 | 3 | 0.17 |
| (2,1403) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:142:GLU:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,1403) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:142:GLU:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 12 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 12 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG21 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG22 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:136:VAL:HG23 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG21 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG22 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:136:VAL:HG23 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG21 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG22 | 12 | 0.17 |
| (2,1379) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:136:VAL:HG23 | 12 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 9 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 9 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 9 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1315) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HE2 | 20 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,1285) | 1:A:100:ILE:H | 1:A:101:GLU:HB3 | 20 | 0.17 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 10 | 0.17 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG2 | 1:A:62:GLU:H | 10 | 0.17 |
| (2,1210) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 10 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG11 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG12 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG13 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG21 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG22 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1203) | 1:A:59:VAL:HG23 | 1:A:94:TYR:HD2 | 4 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:55:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:55:ILE:HG13 | 15 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:55:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:55:ILE:HG13 | 15 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:55:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (2,1187) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:55:ILE:HG13 | 15 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:37:GLN:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:37:GLN:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,1140) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:37:GLN:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.17 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 19 | 0.17 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 19 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG21 | 7 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG22 | 7 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG23 | 7 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG21 | 7 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG22 | 7 | 0.17 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG23 | 7 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1055) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:128:ASN:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:146:ARG:HB2 | 1:A:147:ARG:H | 1 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:146:ARG:HB2 | 1:A:147:ARG:H | 10 | 0.17 |
| (2,1026) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,1005) | 1:A:143:THR:H | 1:A:143:THR:HG1 | 8 | 0.17 |
| (2,990) | 1:A:137:LYS:HA | 1:A:139:ARG:H | 7 | 0.16 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 7 | 0.16 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 16 | 0.16 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 16 | 0.16 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 16 | 0.16 |
| (2,832) | 1:A:102:THR:HG21 | 1:A:104:TYR:H | 14 | 0.16 |
| (2,832) | 1:A:102:THR:HG22 | 1:A:104:TYR:H | 14 | 0.16 |
| (2,832) | 1:A:102:THR:HG23 | 1:A:104:TYR:H | 14 | 0.16 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 16 | 0.16 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 2 | 0.16 |
| (2,603) | 1:A:41:ALA:H | 1:A:42:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (2,600) | 1:A:39:ARG:H | 1:A:39:ARG:HD3 | 10 | 0.16 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 20 | 0.16 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 20 | 0.16 |
| (2,515) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 20 | 0.16 |
| (2,451) | 1:A:94:TYR:HA | 1:A:94:TYR:HE2 | 5 | 0.16 |
| (2,441) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB3 | 17 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 12 | 0.16 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 12 | 0.16 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 12 | 0.16 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 3 | 0.16 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 12 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:H | 13 | 0.16 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (2,312) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (2,286) | 1:A:128:ASN:HA | 1:A:131:LEU:HG | 11 | 0.16 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 16 | 0.16 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 16 | 0.16 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 16 | 0.16 |
| (2,19) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:89:LEU:HG | 14 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 9 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 9 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 9 | 0.16 |
| (2,133) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:68:GLU:HG2 | 8 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 18 | 0.16 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 18 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1319) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.16 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.16 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 1 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG21 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG22 | 17 | 0.16 |
| (2,1261) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:127:VAL:HG23 | 17 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HD2 | 11 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB3 | 3 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB1 | 1:A:73:SER:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB1 | 1:A:73:SER:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB2 | 1:A:73:SER:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB2 | 1:A:73:SER:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB3 | 1:A:73:SER:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,1146) | 1:A:36:ALA:HB3 | 1:A:73:SER:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,1128) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD21 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD22 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:81:LEU:HD23 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD21 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD22 | 10 | 0.16 |
| (2,1113) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:81:LEU:HD23 | 10 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB1 | 18 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB1 | 18 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 18 | 0.16 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 18 | 0.16 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 12 | 0.16 |
| (2,1029) | 1:A:147:ARG:H | 1:A:147:ARG:HG3 | 11 | 0.16 |
| (2,1027) | 1:A:146:ARG:HA | 1:A:147:ARG:H | 3 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:136:VAL:HB | 1:A:137:LYS:H | 18 | 0.15 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 20 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:119:GLY:H | 1:A:120:GLY:H | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 5 | 0.15 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 17 | 0.15 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 6 | 0.15 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 6 | 0.15 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 6 | 0.15 |
| (2,72) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD3 | 5 | 0.15 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:57:HIS:H | 9 | 0.15 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:57:HIS:H | 9 | 0.15 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:57:HIS:H | 9 | 0.15 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:56:LEU:H | 16 | 0.15 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:56:LEU:H | 16 | 0.15 |
| (2,669) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:56:LEU:H | 16 | 0.15 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 0.15 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 0.15 |
| (2,632) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 0.15 |
| (2,625) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.15 |
| (2,625) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.15 |
| (2,625) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 17 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 17 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 17 | 0.15 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,459) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HE2 | 1 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:117:THR:H | 1:A:118:PHE:HD2 | 4 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.15 |
| (2,43) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 14 | 0.15 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 4 | 0.15 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:93:THR:HB | 4 | 0.15 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:93:THR:HB | 4 | 0.15 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:93:THR:HB | 4 | 0.15 |
| (2,359) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:72:PRO:HG2 | 1 | 0.15 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 10 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 10 | 0.15 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 10 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG21 | 1 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG22 | 1 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:71:SER:HA | 1:A:78:ILE:HG23 | 1 | 0.15 |
| (2,324) | 1:A:108:ILE:HA | 1:A:131:LEU:HG | 20 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:34:ILE:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,322) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 13 | 0.15 |
| (2,275) | 1:A:124:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:124:TYR:HD2 | 8 | 0.15 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (2,23) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (2,204) | 1:A:105:ARG:HA | 1:A:108:ILE:HD11 | 15 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,204) | 1:A:105:ARG:HA | 1:A:108:ILE:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,204) | 1:A:105:ARG:HA | 1:A:108:ILE:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:92:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:92:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG21 | 1:A:92:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:92:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:92:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG22 | 1:A:92:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:92:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:92:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,173) | 1:A:91:ILE:HG23 | 1:A:92:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,1377) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:137:LYS:HG2 | 20 | 0.15 |
| (2,1377) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:137:LYS:HG3 | 20 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (2,1352) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD2 | 16 | 0.15 |
| (2,1346) | 1:A:125:LYS:HA | 1:A:125:LYS:HD3 | 16 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 5 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (2,1328) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (2,1325) | 1:A:113:GLU:HA | 1:A:114:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE21 | 1:A:29:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1108) | 1:A:23:GLN:HE22 | 1:A:29:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,1091) | 1:A:20:GLY:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 0.15 |
| (2,1071) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.15 |
| (2,1068) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.15 |
| (2,1027) | 1:A:146:ARG:HA | 1:A:147:ARG:H | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1024) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 18 | 0.15 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (2,926) | 1:A:128:ASN:H | 1:A:128:ASN:HB3 | 16 | 0.14 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD11 | 3 | 0.14 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD12 | 3 | 0.14 |
| (2,886) | 1:A:112:VAL:H | 1:A:131:LEU:HD13 | 3 | 0.14 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 19 | 0.14 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 8 | 0.14 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 8 | 0.14 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 8 | 0.14 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 15 | 0.14 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 15 | 0.14 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 15 | 0.14 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 8 | 0.14 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 20 | 0.14 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.14 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.14 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.14 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB1 | 13 | 0.14 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB2 | 13 | 0.14 |
| (2,75) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:41:ALA:HB3 | 13 | 0.14 |
| (2,719) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:71:SER:H | 2 | 0.14 |
| (2,719) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:71:SER:H | 20 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:67:ALA:H | 1:A:91:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:67:ALA:H | 1:A:91:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:67:ALA:H | 1:A:91:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (2,694) | 1:A:59:VAL:HA | 1:A:62:GLU:H | 2 | 0.14 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG21 | 1:A:57:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG22 | 1:A:57:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (2,673) | 1:A:54:THR:HG23 | 1:A:57:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 12 | 0.14 |
| (2,620) | 1:A:44:TYR:HD2 | 1:A:45:ASP:H | 20 | 0.14 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 9 | 0.14 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,57) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:35:ASP:HA | 8 | 0.14 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 11 | 0.14 |
| (2,529) | 1:A:81:LEU:HG | 1:A:82:SER:H | 5 | 0.14 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,48) | 1:A:29:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,442) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 17 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 17 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 17 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.14 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.14 |
| (2,416) | 1:A:58:GLY:HA2 | 1:A:94:TYR:HE2 | 3 | 0.14 |
| (2,414) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 18 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 18 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 18 | 0.14 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 13 | 0.14 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 19 | 0.14 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 19 | 0.14 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 19 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:95:GLU:HG3 | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.14 |
| (2,273) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (2,273) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (2,273) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HE1 | 6 | 0.14 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HE1 | 6 | 0.14 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HE1 | 6 | 0.14 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG11 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG12 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG13 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG21 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG22 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,1370) | 1:A:130:VAL:HG23 | 1:A:131:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:91:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:91:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (2,131) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:91:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG2 | 1:A:102:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG2 | 1:A:102:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG2 | 1:A:102:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG3 | 1:A:102:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG3 | 1:A:102:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (2,1283) | 1:A:99:GLN:HG3 | 1:A:102:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (2,1244) | 1:A:81:LEU:HB2 | 1:A:82:SER:H | 1 | 0.14 |
| (2,1244) | 1:A:81:LEU:HB3 | 1:A:82:SER:H | 1 | 0.14 |
| (2,1145) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD2 | 1 | 0.14 |
| (2,1145) | 1:A:36:ALA:HA | 1:A:39:ARG:HD3 | 1 | 0.14 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 2 | 0.13 |
| (2,967) | 1:A:135:ALA:H | 1:A:136:VAL:HB | 4 | 0.13 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 8 | 0.13 |
| (2,943) | 1:A:129:GLY:H | 1:A:131:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (2,935) | 1:A:126:TYR:H | 1:A:126:TYR:HD2 | 18 | 0.13 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (2,895) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:115:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 12 | 0.13 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 12 | 0.13 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 12 | 0.13 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (2,737) | 1:A:70:ILE:HA | 1:A:73:SER:H | 9 | 0.13 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,699) | 1:A:61:ARG:HG3 | 1:A:62:GLU:H | 10 | 0.13 |
| (2,684) | 1:A:59:VAL:H | 1:A:60:ILE:HB | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,605) | 1:A:39:ARG:HA | 1:A:41:ALA:H | 20 | 0.13 |
| (2,589) | 1:A:34:ILE:HB | 1:A:36:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (2,538) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:26:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (2,529) | 1:A:81:LEU:HG | 1:A:82:SER:H | 13 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD11 | 6 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD12 | 6 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:34:ILE:HD13 | 6 | 0.13 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB1 | 1 | 0.13 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB2 | 1 | 0.13 |
| (2,523) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (2,50) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD11 | 1 | 0.13 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD12 | 1 | 0.13 |
| (2,463) | 1:A:24:TRP:HE3 | 1:A:34:ILE:HD13 | 1 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:95:GLU:H | 1:A:107:ILE:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,393) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (2,393) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (2,393) | 1:A:98:HIS:H | 1:A:100:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 5 | 0.13 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 5 | 0.13 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 5 | 0.13 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (2,378) | 1:A:105:ARG:HD2 | 1:A:106:VAL:H | 15 | 0.13 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 13 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 13 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 17 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 17 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 17 | 0.13 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD11 | 16 | 0.13 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD12 | 16 | 0.13 |
| (2,331) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:60:ILE:HD13 | 16 | 0.13 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 3 | 0.13 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 3 | 0.13 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 3 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:71:SER:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:71:SER:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:71:SER:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.13 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG21 | 6 | 0.13 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG22 | 6 | 0.13 |
| (2,304) | 1:A:104:TYR:HD1 | 1:A:143:THR:HG23 | 6 | 0.13 |
| (2,244) | 1:A:109:ASN:HA | 1:A:112:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (2,244) | 1:A:109:ASN:HA | 1:A:112:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (2,244) | 1:A:109:ASN:HA | 1:A:112:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 1 | 0.13 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 1 | 0.13 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 1 | 0.13 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 7 | 0.13 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 7 | 0.13 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD11 | 14 | 0.13 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD12 | 14 | 0.13 |
| (2,138) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:70:ILE:HD13 | 14 | 0.13 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB2 | 1:A:114:LEU:HG | 18 | 0.13 |
| (2,1327) | 1:A:113:GLU:HB3 | 1:A:114:LEU:HG | 18 | 0.13 |
| (2,128) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (2,1264) | 1:A:85:GLU:HG2 | 1:A:86:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (2,1264) | 1:A:85:GLU:HG3 | 1:A:86:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD11 | 13 | 0.13 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD12 | 13 | 0.13 |
| (2,126) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:HD13 | 13 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,1257) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 6 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG11 | 20 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG12 | 20 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG13 | 20 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (2,1189) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:59:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (2,1165) | 1:A:39:ARG:H | 1:A:39:ARG:HD2 | 10 | 0.13 |
| (2,1165) | 1:A:39:ARG:H | 1:A:39:ARG:HD3 | 10 | 0.13 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE21 | 7 | 0.13 |
| (2,1150) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HE22 | 7 | 0.13 |
| (2,1130) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (2,1130) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (2,1095) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (2,1086) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:HG2 | 10 | 0.13 |
| (2,1086) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:HG3 | 10 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (2,1085) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 1 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,1045) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:99:GLN:HE21 | 15 | 0.13 |
| (2,1023) | 1:A:145:ALA:HA | 1:A:146:ARG:H | 12 | 0.13 |
| (2,1013) | 1:A:142:GLU:H | 1:A:144:GLN:H | 8 | 0.13 |
| (2,1005) | 1:A:143:THR:H | 1:A:143:THR:HG1 | 11 | 0.13 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (2,919) | 1:A:121:SER:HA | 1:A:123:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:107:ILE:HG21 | 1:A:110:GLU:H | 12 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:107:ILE:HG22 | 1:A:110:GLU:H | 12 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:107:ILE:HG23 | 1:A:110:GLU:H | 12 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:44:TYR:HA | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:44:TYR:HA | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:44:TYR:HA | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 13 | 0.12 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 13 | 0.12 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 13 | 0.12 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (2,827) | 1:A:102:THR:H | 1:A:106:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 3 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 3 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 3 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG22 | 14 | 0.12 |
| (2,825) | 1:A:102:THR:H | 1:A:102:THR:HG23 | 14 | 0.12 |
| (2,82) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD3 | 1 | 0.12 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 1 | 0.12 |
| (2,807) | 1:A:99:GLN:H | 1:A:100:ILE:HB | 19 | 0.12 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 10 | 0.12 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 10 | 0.12 |
| (2,790) | 1:A:96:LEU:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 10 | 0.12 |
| (2,731) | 1:A:71:SER:H | 1:A:72:PRO:HG2 | 11 | 0.12 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.12 |
| (2,648) | 1:A:50:THR:HA | 1:A:53:ASP:H | 2 | 0.12 |
| (2,601) | 1:A:38:LEU:HA | 1:A:40:GLY:H | 20 | 0.12 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG21 | 1:A:35:ASP:HB2 | 20 | 0.12 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG22 | 1:A:35:ASP:HB2 | 20 | 0.12 |
| (2,58) | 1:A:34:ILE:HG23 | 1:A:35:ASP:HB2 | 20 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,565) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:H | 1 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:24:TRP:HD1 | 1:A:29:ALA:H | 8 | 0.12 |
| (2,556) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:33:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (2,467) | 1:A:126:TYR:HD2 | 1:A:127:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (2,461) | 1:A:57:HIS:HA | 1:A:57:HIS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:94:TYR:HB3 | 2 | 0.12 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:94:TYR:HB3 | 2 | 0.12 |
| (2,424) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:94:TYR:HB3 | 2 | 0.12 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB1 | 1:A:124:TYR:HD1 | 16 | 0.12 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB2 | 1:A:124:TYR:HD1 | 16 | 0.12 |
| (2,420) | 1:A:115:ALA:HB3 | 1:A:124:TYR:HD1 | 16 | 0.12 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB1 | 1:A:142:GLU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB2 | 1:A:142:GLU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,409) | 1:A:141:ALA:HB3 | 1:A:142:GLU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 20 | 0.12 |
| (2,4) | 1:A:20:GLY:HA3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (2,4) | 1:A:20:GLY:HA3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (2,4) | 1:A:20:GLY:HA3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (2,392) | 1:A:100:ILE:HD11 | 1:A:102:THR:H | 6 | 0.12 |
| (2,392) | 1:A:100:ILE:HD12 | 1:A:102:THR:H | 6 | 0.12 |
| (2,392) | 1:A:100:ILE:HD13 | 1:A:102:THR:H | 6 | 0.12 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG21 | 13 | 0.12 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG22 | 13 | 0.12 |
| (2,384) | 1:A:92:ALA:H | 1:A:107:ILE:HG23 | 13 | 0.12 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:93:THR:HB | 17 | 0.12 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:93:THR:HB | 17 | 0.12 |
| (2,382) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:93:THR:HB | 17 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 11 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 11 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 11 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG21 | 18 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG22 | 18 | 0.12 |
| (2,371) | 1:A:104:TYR:HA | 1:A:106:VAL:HG23 | 18 | 0.12 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 0.12 |
| (2,36) | 1:A:22:TYR:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (2,334) | 1:A:55:ILE:HA | 1:A:94:TYR:HD2 | 1 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB1 | 1:A:48:ASP:H | 11 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB2 | 1:A:48:ASP:H | 11 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:9:ALA:HB3 | 1:A:48:ASP:H | 11 | 0.12 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,317) | 1:A:34:ILE:H | 1:A:34:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (2,287) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:HG | 16 | 0.12 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,270) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |
| (2,179) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,158) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:81:LEU:HA | 1:A:81:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (2,141) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HG | 8 | 0.12 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 8 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG11 | 10 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG12 | 10 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG13 | 10 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (2,1351) | 1:A:126:TYR:HE2 | 1:A:130:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (2,133) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:68:GLU:HG2 | 6 | 0.12 |
| (2,133) | 1:A:68:GLU:H | 1:A:68:GLU:HG2 | 13 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1310) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG21 | 5 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG22 | 5 | 0.12 |
| (2,1306) | 1:A:111:ALA:H | 1:A:112:VAL:HG23 | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1271) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:115:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG21 | 1:A:71:SER:HB2 | 11 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG21 | 1:A:71:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG22 | 1:A:71:SER:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG22 | 1:A:71:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG23 | 1:A:71:SER:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1218) | 1:A:70:ILE:HG23 | 1:A:71:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB2 | 1:A:45:ASP:H | 11 | 0.12 |
| (2,1172) | 1:A:44:TYR:HB3 | 1:A:45:ASP:H | 11 | 0.12 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (2,1144) | 1:A:36:ALA:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (2,1101) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (2,1089) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:89:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG21 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG22 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:100:ILE:HG23 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG21 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG22 | 4 | 0.12 |
| (2,1075) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:100:ILE:HG23 | 4 | 0.12 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE21 | 14 | 0.12 |
| (2,1064) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.12 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 7 | 0.12 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB2 | 9 | 0.12 |
| (2,1058) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 9 | 0.12 |
| (2,1035) | 1:A:109:ASN:HB2 | 1:A:109:ASN:HD22 | 20 | 0.12 |
| (2,1023) | 1:A:145:ALA:HA | 1:A:146:ARG:H | 5 | 0.12 |
| (2,950) | 1:A:130:VAL:HB | 1:A:131:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (2,904) | 1:A:118:PHE:HD1 | 1:A:119:GLY:H | 8 | 0.11 |
| (2,840) | 1:A:104:TYR:HE2 | 1:A:105:ARG:H | 9 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 7 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 7 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 7 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (2,835) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:108:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG11 | 7 | 0.11 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG12 | 7 | 0.11 |
| (2,834) | 1:A:104:TYR:H | 1:A:106:VAL:HG13 | 7 | 0.11 |
| (2,81) | 1:A:46:LYS:HA | 1:A:46:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (2,725) | 1:A:67:ALA:HA | 1:A:70:ILE:H | 12 | 0.11 |
| (2,721) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:69:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (2,721) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:69:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (2,721) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:69:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (2,719) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:71:SER:H | 12 | 0.11 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,716) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,627) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,574) | 1:A:33:GLU:H | 1:A:36:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:33:GLU:H | 2 | 0.11 |
| (2,558) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:29:ALA:H | 14 | 0.11 |
| (2,556) | 1:A:24:TRP:HE1 | 1:A:29:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,488) | 1:A:12:GLN:HA | 1:A:15:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:47:ALA:HA | 8 | 0.11 |
| (2,459) | 1:A:114:LEU:HG | 1:A:118:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:77:PRO:HB2 | 1:A:78:ILE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 3 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 3 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 3 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:60:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD11 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.11 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD12 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.11 |
| (2,390) | 1:A:108:ILE:HD13 | 1:A:109:ASN:H | 16 | 0.11 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,355) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:34:ILE:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD11 | 18 | 0.11 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD12 | 18 | 0.11 |
| (2,348) | 1:A:95:GLU:HG2 | 1:A:107:ILE:HD13 | 18 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD11 | 5 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD12 | 5 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:107:ILE:HD13 | 5 | 0.11 |
| (2,345) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,343) | 1:A:95:GLU:HA | 1:A:99:GLN:H | 14 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG11 | 1:A:143:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,299) | 1:A:136:VAL:HG13 | 1:A:143:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG21 | 1:A:114:LEU:H | 19 | 0.11 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG22 | 1:A:114:LEU:H | 19 | 0.11 |
| (2,253) | 1:A:112:VAL:HG23 | 1:A:114:LEU:H | 19 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG21 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG22 | 2 | 0.11 |
| (2,182) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:107:ILE:HG23 | 2 | 0.11 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (2,178) | 1:A:92:ALA:HA | 1:A:131:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG21 | 1 | 0.11 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,174) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:91:ILE:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,1381) | 1:A:136:VAL:H | 1:A:137:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB1 | 1:A:78:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB2 | 1:A:78:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (2,130) | 1:A:67:ALA:HB3 | 1:A:78:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (2,1292) | 1:A:101:GLU:HG2 | 1:A:102:THR:H | 11 | 0.11 |
| (2,1292) | 1:A:101:GLU:HG3 | 1:A:102:THR:H | 11 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,1258) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:118:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (2,121) | 1:A:66:LEU:HG | 1:A:94:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,1159) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:89:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (2,1143) | 1:A:34:ILE:HG13 | 1:A:89:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (2,1026) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,1024) | 1:A:146:ARG:H | 1:A:146:ARG:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,1023) | 1:A:145:ALA:HA | 1:A:146:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (2,1014) | 1:A:143:THR:HG1 | 1:A:144:GLN:H | 14 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis [i](#)

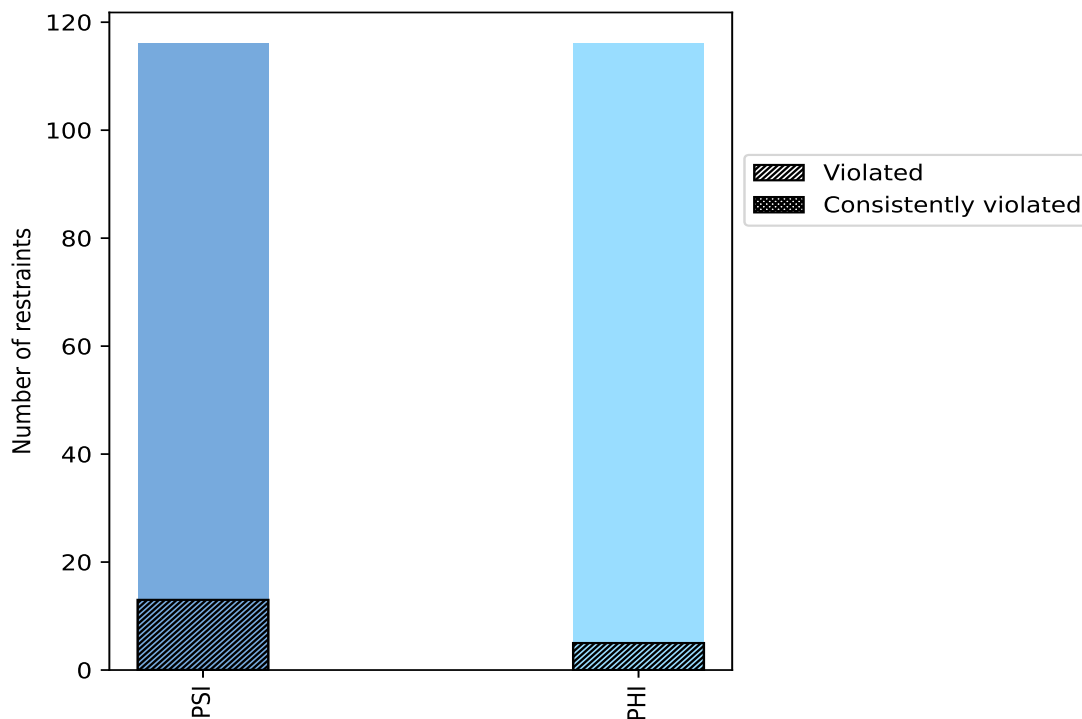
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

| Angle type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| PSI | 116 | 50.0 | 13 | 11.2 | 5.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PHI | 116 | 50.0 | 5 | 4.3 | 2.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 232 | 100.0 | 18 | 7.8 | 7.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |

¹ percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, ² percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, ³ violated in at least one model, ⁴ violated in all the models

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations [i](#)



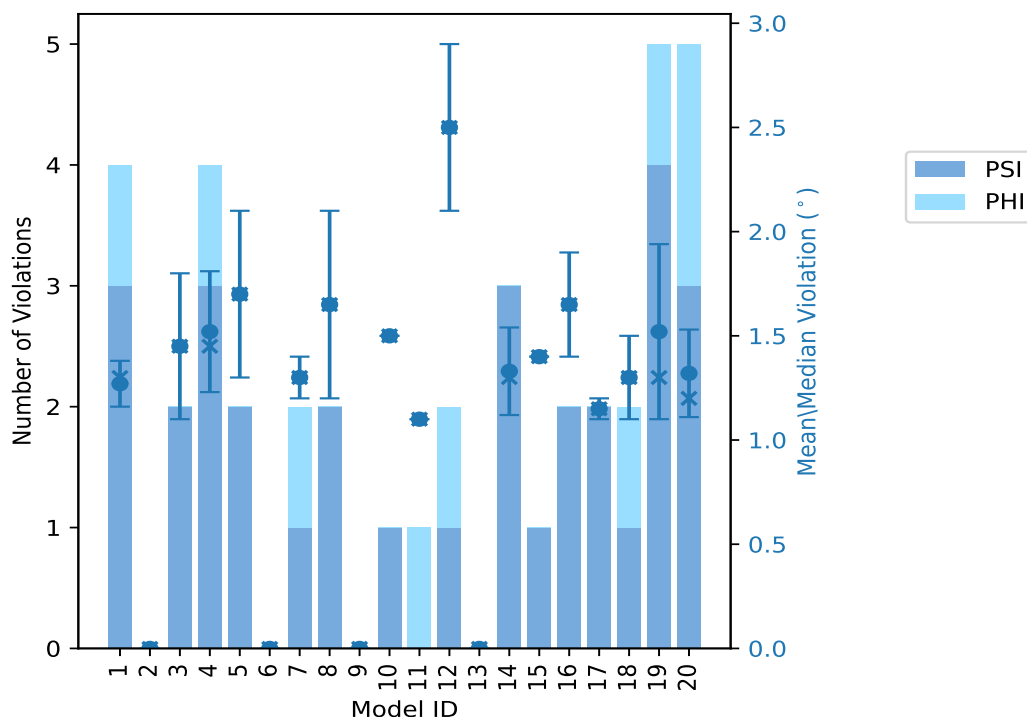
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model [i](#)

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PSI | PHI | Total | | | | |
| 1 | 3 | 1 | 4 | 1.27 | 1.4 | 0.11 | 1.3 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 3 | 2 | 0 | 2 | 1.45 | 1.8 | 0.35 | 1.45 |
| 4 | 3 | 1 | 4 | 1.52 | 2.0 | 0.29 | 1.45 |
| 5 | 2 | 0 | 2 | 1.7 | 2.1 | 0.4 | 1.7 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 7 | 1 | 1 | 2 | 1.3 | 1.4 | 0.1 | 1.3 |
| 8 | 2 | 0 | 2 | 1.65 | 2.1 | 0.45 | 1.65 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 10 | 1 | 0 | 1 | 1.5 | 1.5 | 0.0 | 1.5 |
| 11 | 0 | 1 | 1 | 1.1 | 1.1 | 0.0 | 1.1 |
| 12 | 1 | 1 | 2 | 2.5 | 2.9 | 0.4 | 2.5 |
| 13 | 0 | 0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 14 | 3 | 0 | 3 | 1.33 | 1.6 | 0.21 | 1.3 |
| 15 | 1 | 0 | 1 | 1.4 | 1.4 | 0.0 | 1.4 |
| 16 | 2 | 0 | 2 | 1.65 | 1.9 | 0.25 | 1.65 |
| 17 | 2 | 0 | 2 | 1.15 | 1.2 | 0.05 | 1.15 |
| 18 | 1 | 1 | 2 | 1.3 | 1.5 | 0.2 | 1.3 |
| 19 | 4 | 1 | 5 | 1.52 | 2.3 | 0.42 | 1.3 |
| 20 | 3 | 2 | 5 | 1.32 | 1.7 | 0.21 | 1.2 |

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model [i](#)



The mean(dot),median(x) and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of ensemble.

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|------|
| PSI | PHI | Total | Count ¹ | % |
| 6 | 3 | 9 | 1 | 5.0 |
| 3 | 0 | 3 | 2 | 10.0 |
| 2 | 2 | 4 | 3 | 15.0 |
| 0 | 0 | 0 | 4 | 20.0 |
| 0 | 0 | 0 | 5 | 25.0 |
| 1 | 0 | 1 | 6 | 30.0 |
| 1 | 0 | 1 | 7 | 35.0 |
| 0 | 0 | 0 | 8 | 40.0 |
| 0 | 0 | 0 | 9 | 45.0 |
| 0 | 0 | 0 | 10 | 50.0 |
| 0 | 0 | 0 | 11 | 55.0 |

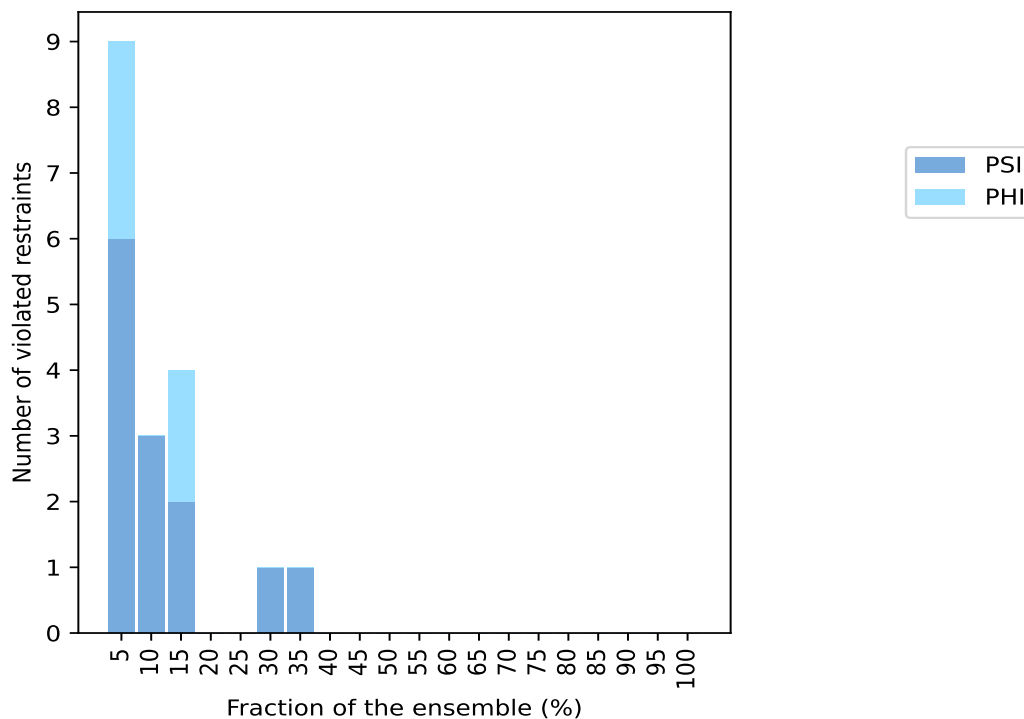
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PSI | PHI | Total | Count ¹ | % |
| 0 | 0 | 0 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 0 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 15 | 75.0 |
| 0 | 0 | 0 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 0 | 0 | 0 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 |
| 0 | 0 | 0 | 20 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)

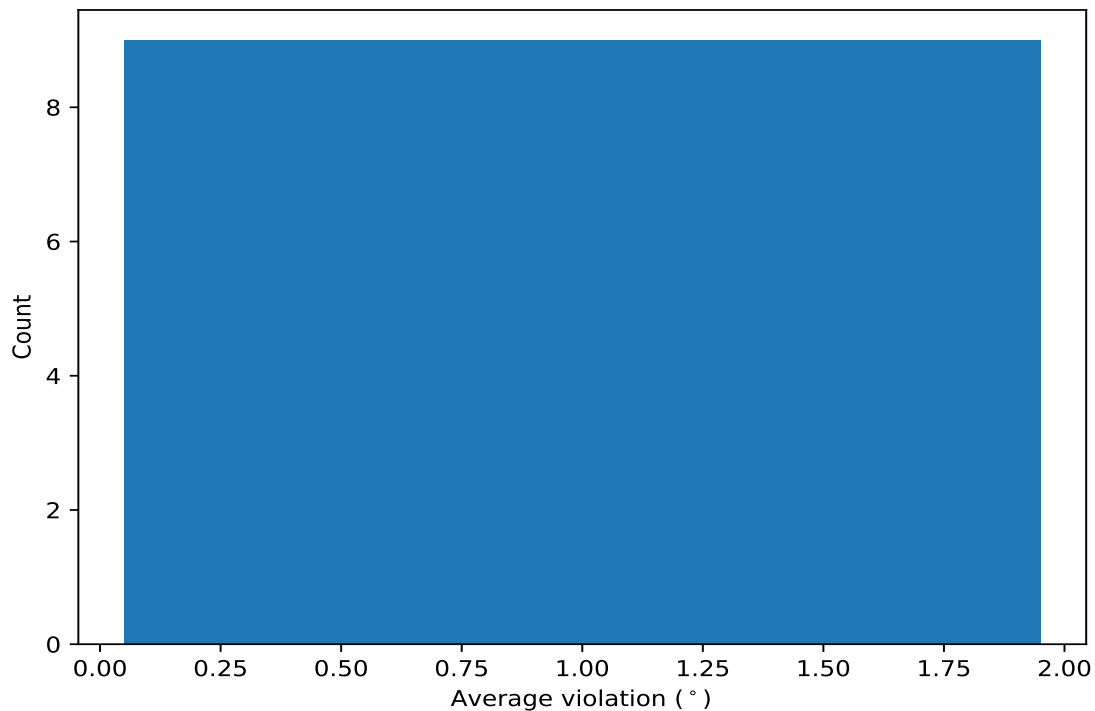


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations [i](#)

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints [i](#)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

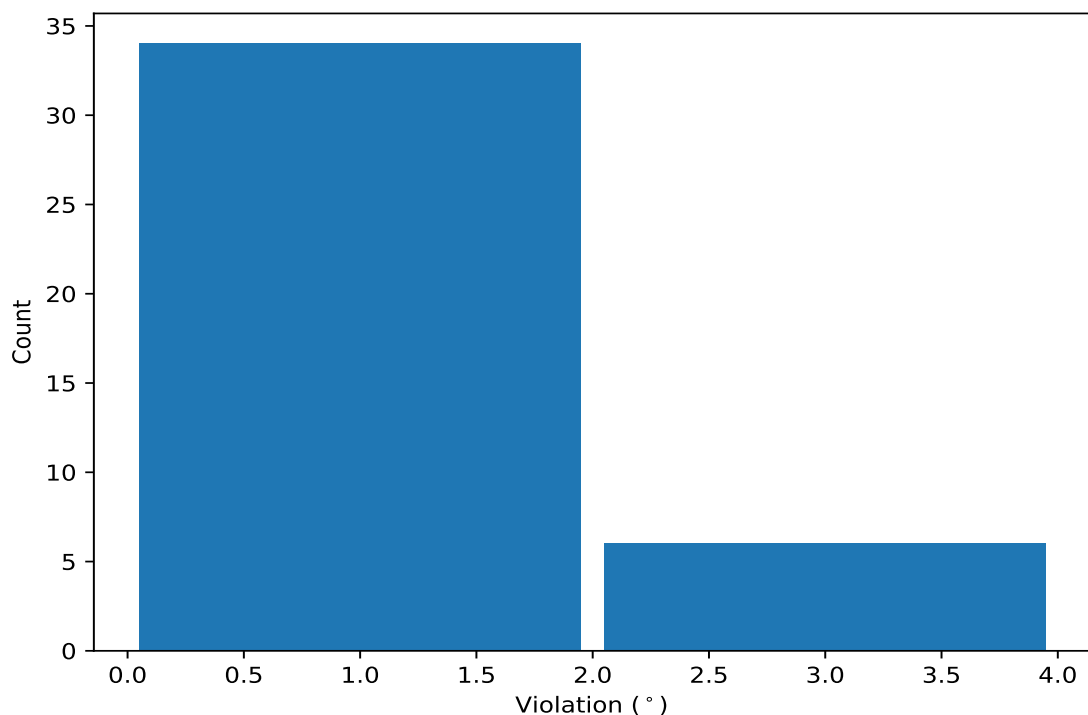
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 7 | 1.5 | 0.33 | 1.5 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 6 | 1.38 | 0.29 | 1.3 |
| (1,6) | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 3 | 2.0 | 0.65 | 1.7 |
| (1,7) | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 1:A:11:ARG:CA | 1:A:11:ARG:C | 3 | 1.5 | 0.42 | 1.2 |
| (1,144) | 1:A:93:THR:N | 1:A:93:THR:CA | 1:A:93:THR:C | 1:A:94:TYR:N | 3 | 1.37 | 0.38 | 1.1 |
| (1,5) | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 3 | 1.27 | 0.12 | 1.3 |
| (1,2) | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 1:A:9:ALA:N | 2 | 1.85 | 0.25 | 1.85 |
| (1,136) | 1:A:89:LEU:N | 1:A:89:LEU:CA | 1:A:89:LEU:C | 1:A:90:LEU:N | 2 | 1.3 | 0.1 | 1.3 |
| (1,4) | 1:A:9:ALA:N | 1:A:9:ALA:CA | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 2 | 1.15 | 0.05 | 1.15 |

¹ Number of violated models, ²Standard deviation, All angle values are in degree (°)

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [i](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,6) | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 12 | 2.9 |
| (1,80) | 1:A:54:THR:N | 1:A:54:THR:CA | 1:A:54:THR:C | 1:A:55:ILE:N | 19 | 2.3 |
| (1,7) | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 1:A:11:ARG:CA | 1:A:11:ARG:C | 12 | 2.1 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 5 | 2.1 |
| (1,2) | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 1:A:9:ALA:N | 8 | 2.1 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 4 | 2.0 |
| (1,144) | 1:A:93:THR:N | 1:A:93:THR:CA | 1:A:93:THR:C | 1:A:94:TYR:N | 16 | 1.9 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 3 | 1.8 |
| (1,6) | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 20 | 1.7 |
| (1,8) | 1:A:11:ARG:N | 1:A:11:ARG:CA | 1:A:11:ARG:C | 1:A:12:GLN:N | 19 | 1.6 |
| (1,2) | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 1:A:9:ALA:N | 14 | 1.6 |
| (1,74) | 1:A:51:LEU:N | 1:A:51:LEU:CA | 1:A:51:LEU:C | 1:A:52:LEU:N | 18 | 1.5 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 4 | 1.5 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 10 | 1.5 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 16 | 1.4 |
| (1,6) | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 4 | 1.4 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 7 | 1.4 |
| (1,5) | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 20 | 1.4 |
| (1,136) | 1:A:89:LEU:N | 1:A:89:LEU:CA | 1:A:89:LEU:C | 1:A:90:LEU:N | 1 | 1.4 |
| (1,114) | 1:A:71:SER:N | 1:A:71:SER:CA | 1:A:71:SER:C | 1:A:72:PRO:N | 15 | 1.4 |
| (1,81) | 1:A:54:THR:C | 1:A:55:ILE:N | 1:A:55:ILE:CA | 1:A:55:ILE:C | 19 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 1 | 1.3 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 14 | 1.3 |
| (1,5) | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 1 | 1.3 |
| (1,14) | 1:A:14:ARG:N | 1:A:14:ARG:CA | 1:A:14:ARG:C | 1:A:15:GLU:N | 5 | 1.3 |
| (1,12) | 1:A:13:SER:N | 1:A:13:SER:CA | 1:A:13:SER:C | 1:A:14:ARG:N | 19 | 1.3 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 8 | 1.2 |
| (1,7) | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 1:A:11:ARG:CA | 1:A:11:ARG:C | 4 | 1.2 |
| (1,7) | 1:A:10:ARG:C | 1:A:11:ARG:N | 1:A:11:ARG:CA | 1:A:11:ARG:C | 20 | 1.2 |
| (1,51) | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 1:A:36:ALA:CA | 1:A:36:ALA:C | 7 | 1.2 |
| (1,4) | 1:A:9:ALA:N | 1:A:9:ALA:CA | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 20 | 1.2 |
| (1,136) | 1:A:89:LEU:N | 1:A:89:LEU:CA | 1:A:89:LEU:C | 1:A:90:LEU:N | 17 | 1.2 |
| (1,76) | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 1:A:53:ASP:N | 20 | 1.1 |
| (1,75) | 1:A:51:LEU:C | 1:A:52:LEU:N | 1:A:52:LEU:CA | 1:A:52:LEU:C | 18 | 1.1 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 17 | 1.1 |
| (1,50) | 1:A:35:ASP:N | 1:A:35:ASP:CA | 1:A:35:ASP:C | 1:A:36:ALA:N | 19 | 1.1 |
| (1,5) | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 1:A:10:ARG:CA | 1:A:10:ARG:C | 11 | 1.1 |
| (1,4) | 1:A:9:ALA:N | 1:A:9:ALA:CA | 1:A:9:ALA:C | 1:A:10:ARG:N | 1 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:93:THR:N | 1:A:93:THR:CA | 1:A:93:THR:C | 1:A:94:TYR:N | 3 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:93:THR:N | 1:A:93:THR:CA | 1:A:93:THR:C | 1:A:94:TYR:N | 14 | 1.1 |