



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 04:08 AM EDT

PDB ID : 5KS5
BMRB ID : 30135
Title : Structure of the C-terminal Helical Repeat Domain of Elongation Factor 2 Kinase
Authors : Piserchio, A.; Will, N.; Snyder, I.; Ferguson, S.B.; Giles, D.H.; Dalby, K.N.; Ghose, R.
Deposited on : 2016-07-07

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

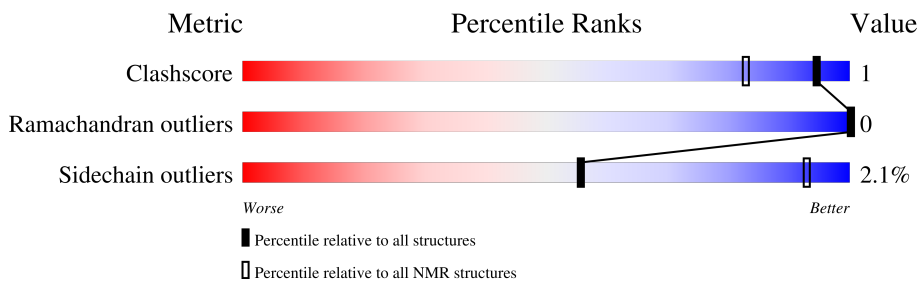
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 86%.

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 | 103 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 19 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|----------------------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:665-A:676, A:685-A:720 (48) | 0.27 | 19 |

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1568 atoms, of which 743 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic elongation factor 2 kinase.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|-------|---|
| | | | Total | C | H | N | O | | S |
| 1 | A | 103 | 1568 | 506 | 743 | 137 | 171 | 11 | 0 |

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

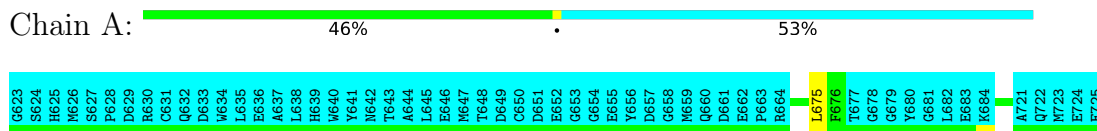
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 623 | GLY | - | expression tag | UNP O00418 |
| A | 624 | SER | - | expression tag | UNP O00418 |
| A | 625 | HIS | - | expression tag | UNP O00418 |
| A | 626 | MET | - | expression tag | UNP O00418 |

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: Eukaryotic elongation factor 2 kinase

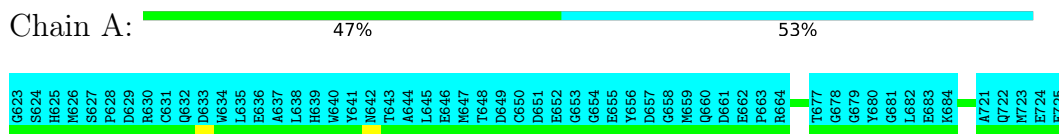


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

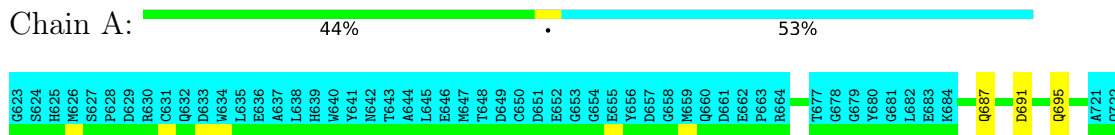
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



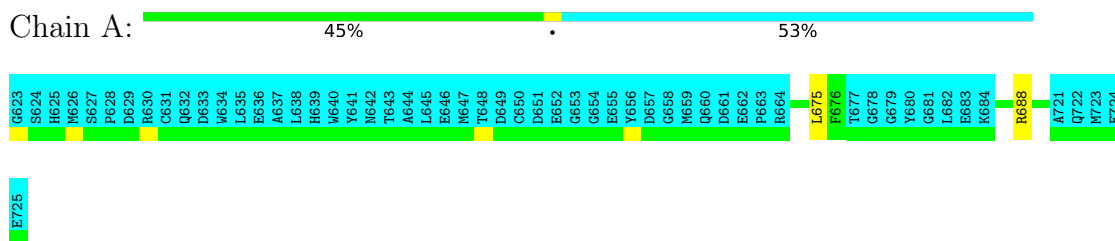
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



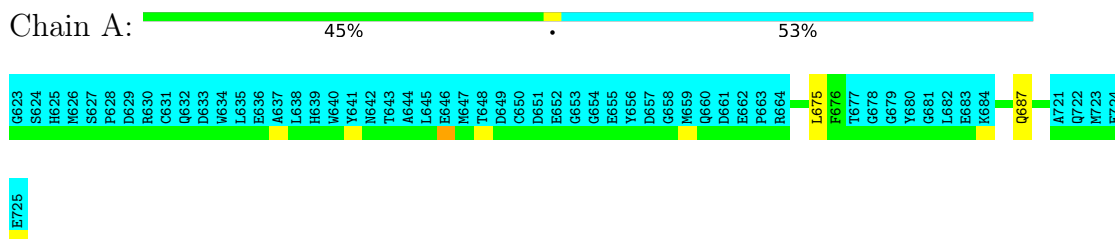
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



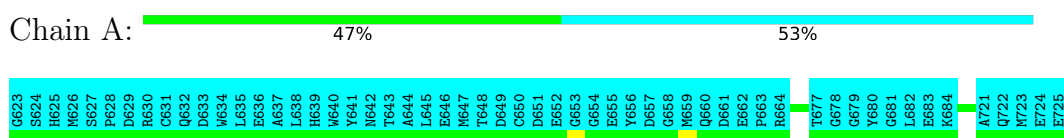
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



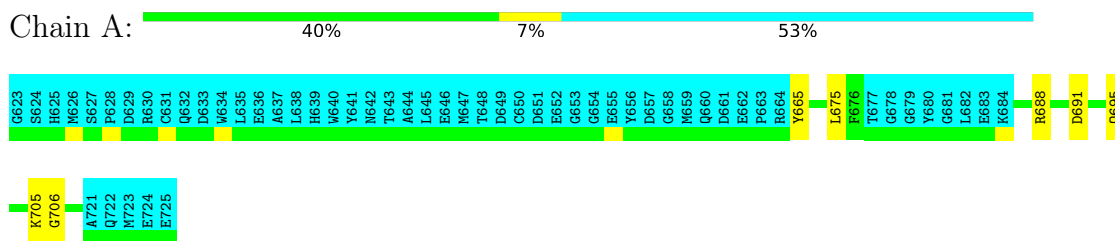
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



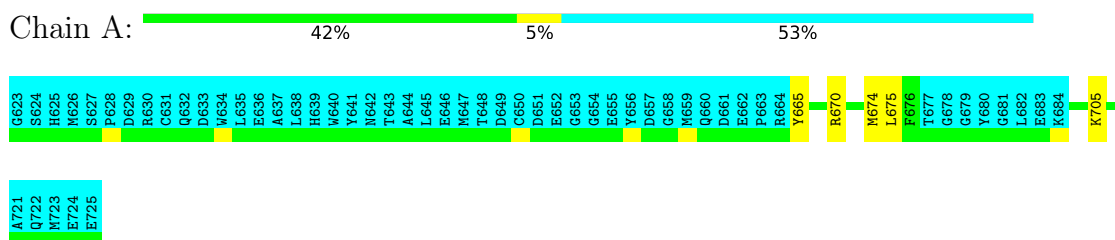
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



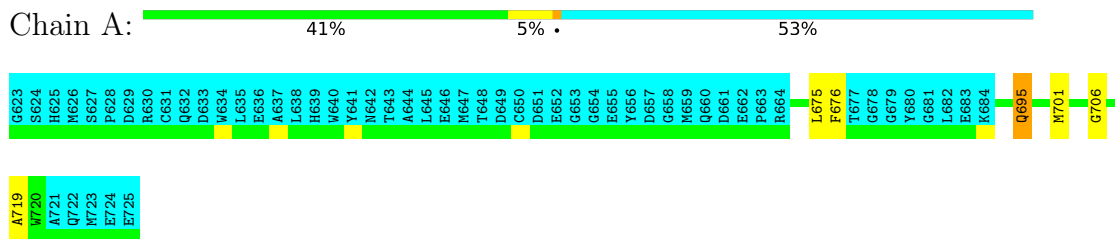
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



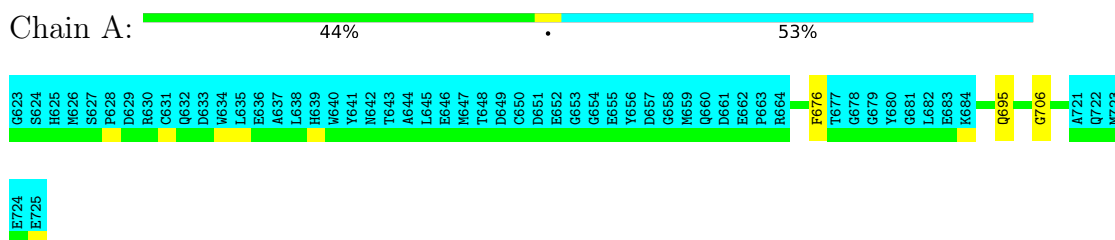
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



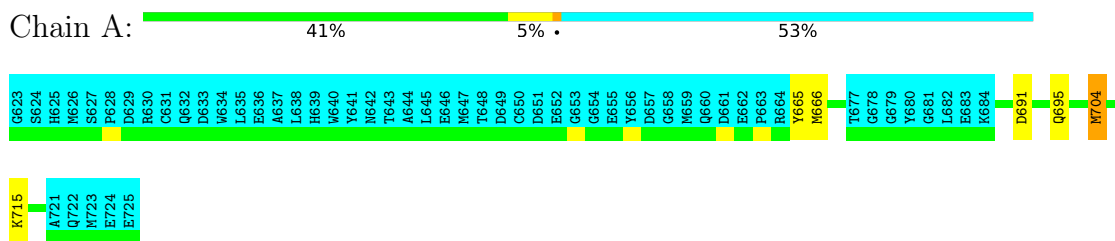
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



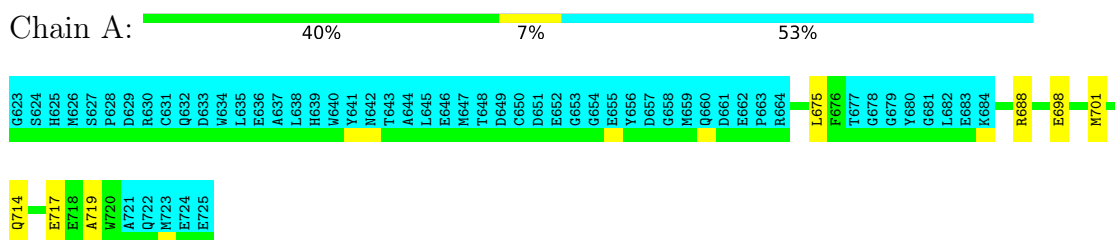
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



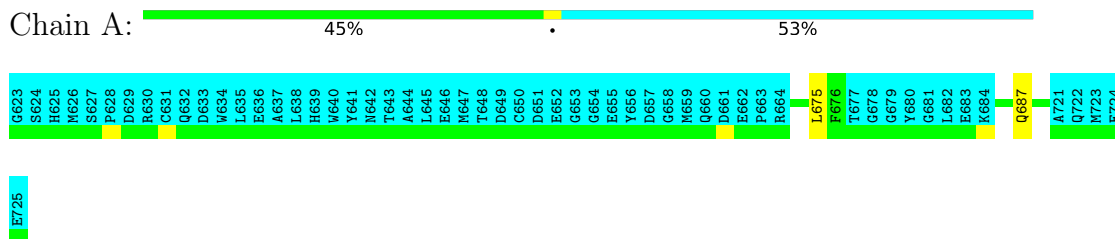
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



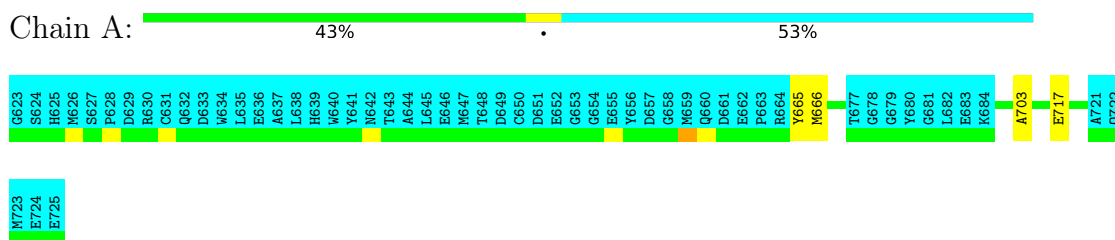
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



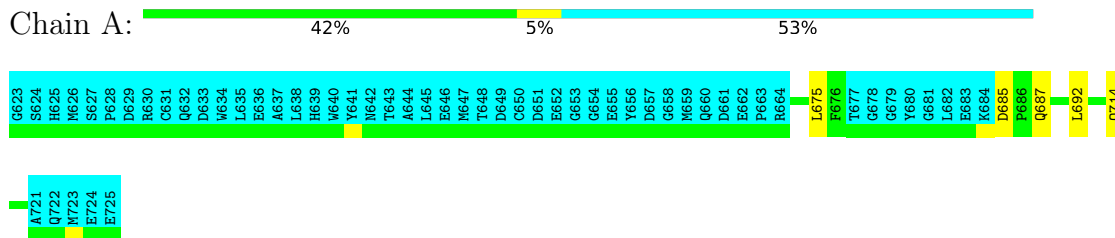
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



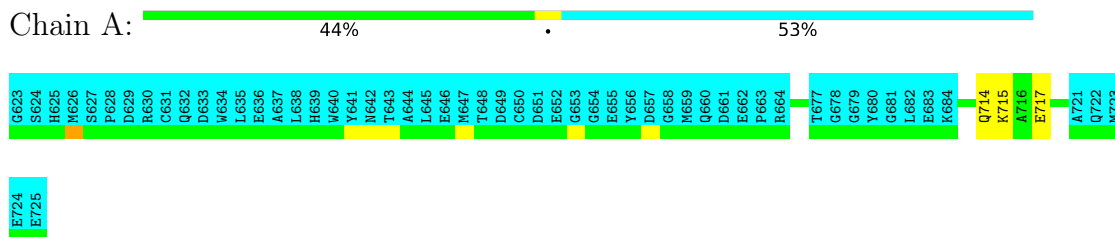
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



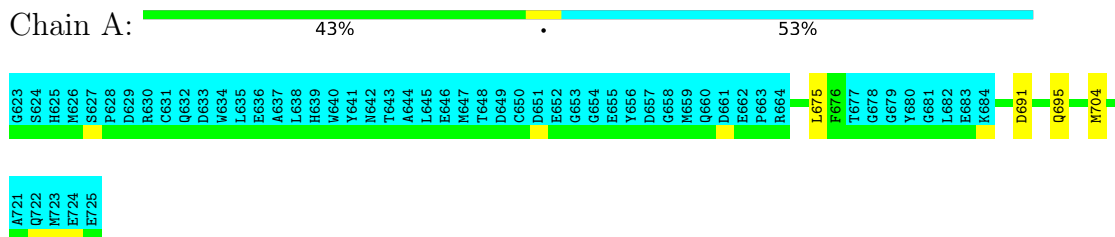
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



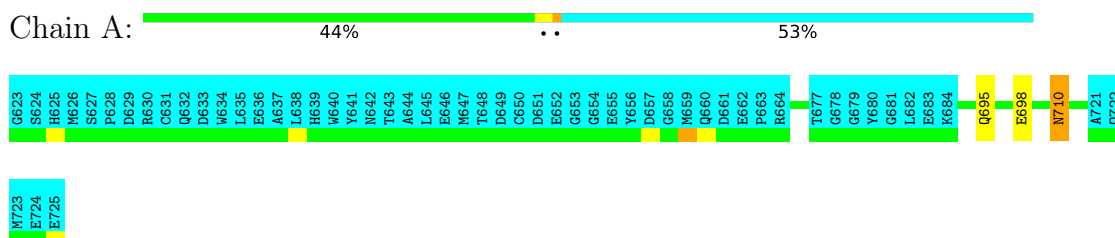
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



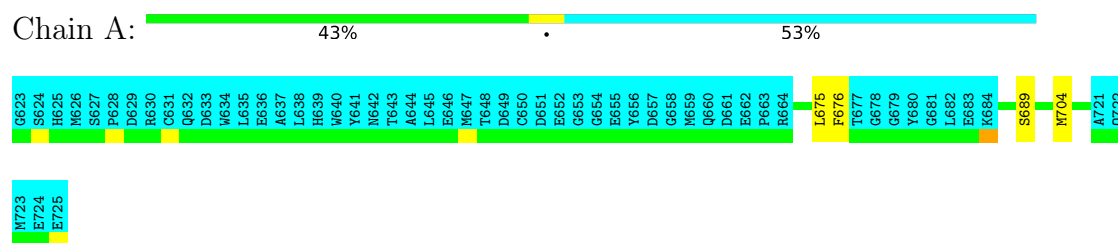
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



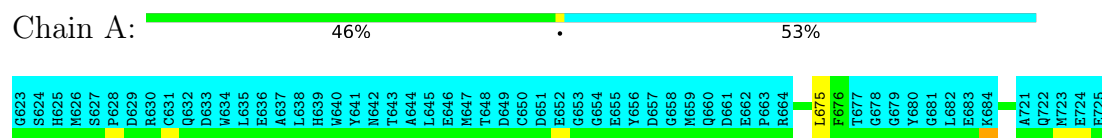
4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Eukaryotic elongation factor 2 kinase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|----------------|---------|
| ARIA | refinement | |

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 | 1138 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1138 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 86% |

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 | 388 | 366 | 366 | 1±1 |
| All | All | 7760 | 7320 | 7320 | 16 |

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 1.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:665:TYR:CE2 | 1:A:666:MET:HG3 | 0.53 | 2.39 | 11 | 2 |
| 1:A:665:TYR:OH | 1:A:705:LYS:HE2 | 0.52 | 2.05 | 8 | 1 |
| 1:A:665:TYR:OH | 1:A:705:LYS:HE3 | 0.50 | 2.06 | 7 | 1 |
| 1:A:676:PHE:CZ | 1:A:719:ALA:HA | 0.50 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:695:GLN:HA | 0.49 | 1.67 | 9 | 1 |
| 1:A:691:ASP:O | 1:A:695:GLN:HG2 | 0.48 | 2.08 | 2 | 2 |
| 1:A:691:ASP:O | 1:A:695:GLN:HG3 | 0.47 | 2.09 | 7 | 2 |
| 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:NH1 | 0.46 | 2.26 | 3 | 1 |
| 1:A:676:PHE:HB2 | 1:A:689:SER:OG | 0.43 | 2.13 | 19 | 1 |
| 1:A:698:GLU:O | 1:A:701:MET:HG2 | 0.43 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:670:ARG:O | 1:A:674:MET:HG3 | 0.42 | 2.15 | 8 | 1 |
| 1:A:710:ASN:HD22 | 1:A:710:ASN:C | 0.40 | 2.19 | 18 | 1 |
| 1:A:685:ASP:OD2 | 1:A:687:GLN:HB3 | 0.40 | 2.17 | 15 | 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 | 48/103 (47%) | 47±1 (98±1%) | 1±1 (2±1%) | 0±0 (0±0%) | 100 | 100 |
| All | All | 960/2060 (47%) | 939 (98%) | 21 (2%) | 0 (0%) | 100 | 100 |

There are no Ramachandran outliers.

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 | 36/81 (44%) | 35±1 (98±2%) | 1±1 (2±2%) | 56 | 93 |
| All | All | 720/1620 (44%) | 705 (98%) | 15 (2%) | 56 | 93 |

All 9 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 | 687 | GLN | 3 |
| 1 | A | 695 | GLN | 3 |
| 1 | A | 688 | ARG | 2 |
| 1 | A | 715 | LYS | 2 |
| 1 | A | 714 | GLN | 1 |
| 1 | A | 704 | MET | 1 |
| 1 | A | 692 | LEU | 1 |
| 1 | A | 698 | GLU | 1 |
| 1 | A | 710 | 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 86% for the well-defined parts and 85% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *CS_calib_v2*

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 | 1138 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1138 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1 |

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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 101 | -0.40 ± 0.13 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 93 | 0.46 ± 0.10 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 100 | -0.30 ± 0.14 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 98 | -0.29 ± 0.21 | None needed (< 0.5 ppm) |

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 86%, i.e. 564 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 653. 0 out of 4 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|----------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 240/240 (100%) | 97/97 (100%) | 96/96 (100%) | 47/47 (100%) |
| Sidechain | 293/355 (83%) | 196/230 (85%) | 92/109 (84%) | 5/16 (31%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|----------|---------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Aromatic | 31/58 (53%) | 16/27 (59%) | 14/30 (47%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 564/653 (86%) | 309/354 (87%) | 202/235 (86%) | 53/64 (83%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1137 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1337. 0 out of 8 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|-----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Backbone | 502/518 (97%) | 204/212 (96%) | 201/206 (98%) | 97/100 (97%) |
| Sidechain | 566/694 (82%) | 374/445 (84%) | 184/222 (83%) | 8/27 (30%) |
| Aromatic | 69/125 (55%) | 35/59 (59%) | 31/59 (53%) | 3/7 (43%) |
| Overall | 1137/1337 (85%) | 613/716 (86%) | 416/487 (85%) | 108/134 (81%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

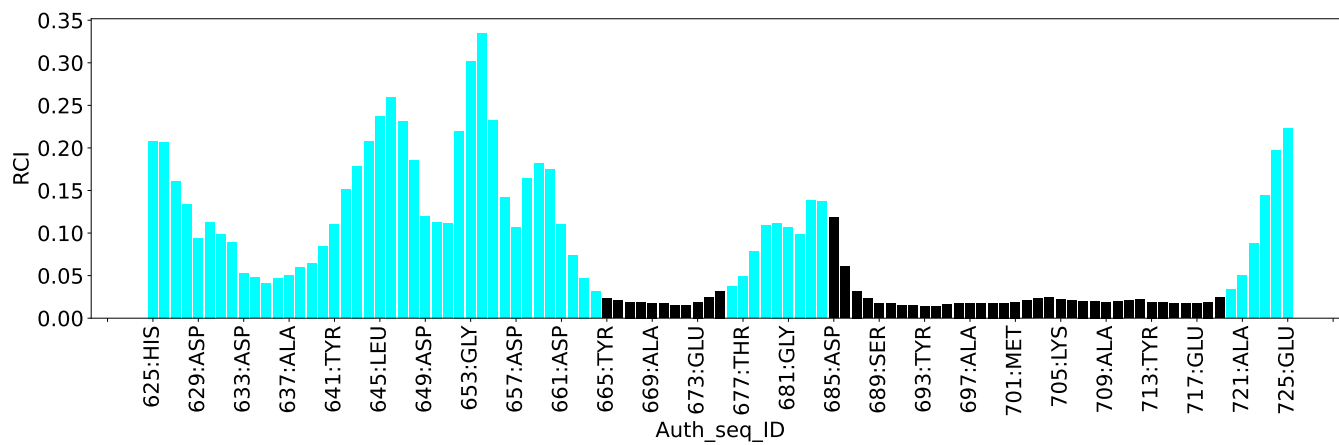
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 715 | LYS | HB3 | 0.16 | 0.46 – 3.04 | -6.2 |

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 | 1663 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 610 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 401 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 361 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 291 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 118 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 17.3 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 2.8 |

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) | 15.8 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 27.4 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 44.3 | 4.81 |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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) | 4.3 | 7.9 |
| 10.0-20.0 (Medium) | 0.1 | 10.6 |
| >20.0 (Large) | None | None |

9 Distance violation analysis

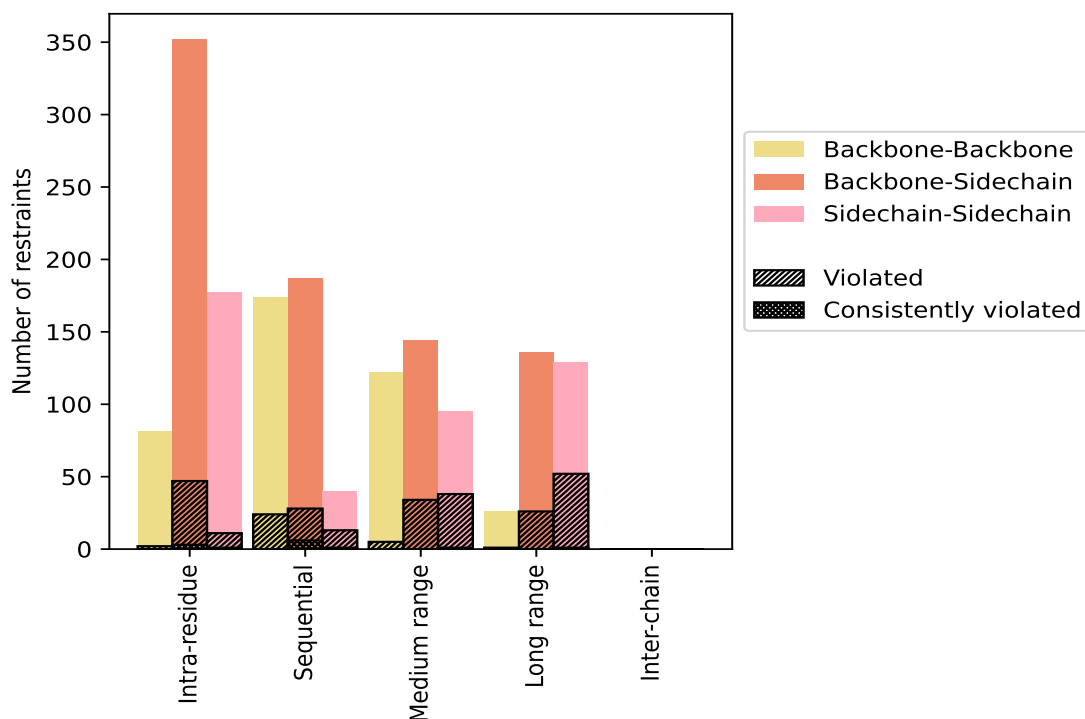
9.1 Summary of distance violations

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 ($i-j =0$) | 610 | 36.7 | 60 | 9.8 | 3.6 | 4 | 0.7 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 81 | 4.9 | 2 | 2.5 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 352 | 21.2 | 47 | 13.4 | 2.8 | 3 | 0.9 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 177 | 10.6 | 11 | 6.2 | 0.7 | 1 | 0.6 | 0.1 |
| Sequential ($i-j =1$) | 401 | 24.1 | 65 | 16.2 | 3.9 | 7 | 1.7 | 0.4 |
| Backbone-Backbone | 174 | 10.5 | 24 | 13.8 | 1.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 187 | 11.2 | 28 | 15.0 | 1.7 | 6 | 3.2 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 40 | 2.4 | 13 | 32.5 | 0.8 | 1 | 2.5 | 0.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 361 | 21.7 | 77 | 21.3 | 4.6 | 1 | 0.3 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 122 | 7.3 | 5 | 4.1 | 0.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 144 | 8.7 | 34 | 23.6 | 2.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 95 | 5.7 | 38 | 40.0 | 2.3 | 1 | 1.1 | 0.1 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 291 | 17.5 | 79 | 27.1 | 4.8 | 1 | 0.3 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 26 | 1.6 | 1 | 3.8 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 136 | 8.2 | 26 | 19.1 | 1.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 129 | 7.8 | 52 | 40.3 | 3.1 | 1 | 0.8 | 0.1 |
| 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 | 0 | 0.0 | 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 | 1663 | 100.0 | 281 | 16.9 | 16.9 | 13 | 0.8 | 0.8 |
| Backbone-Backbone | 403 | 24.2 | 32 | 7.9 | 1.9 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 819 | 49.2 | 135 | 16.5 | 8.1 | 9 | 1.1 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 441 | 26.5 | 114 | 25.9 | 6.9 | 4 | 0.9 | 0.2 |

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 | | | | | Total | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | | | | | |
| 1 | 23 | 23 | 21 | 23 | 0 | 90 | 0.76 | 2.96 | 0.56 | 0.61 |
| 2 | 22 | 26 | 13 | 16 | 0 | 77 | 0.62 | 2.74 | 0.53 | 0.42 |
| 3 | 22 | 23 | 16 | 26 | 0 | 87 | 0.57 | 2.2 | 0.46 | 0.44 |
| 4 | 18 | 26 | 24 | 28 | 0 | 96 | 0.7 | 4.14 | 0.66 | 0.48 |
| 5 | 20 | 25 | 24 | 23 | 0 | 92 | 0.65 | 2.86 | 0.56 | 0.5 |
| 6 | 16 | 29 | 32 | 30 | 0 | 107 | 0.77 | 3.07 | 0.62 | 0.6 |
| 7 | 16 | 29 | 14 | 17 | 0 | 76 | 0.69 | 2.29 | 0.52 | 0.54 |
| 8 | 20 | 23 | 24 | 30 | 0 | 97 | 0.67 | 2.6 | 0.55 | 0.49 |
| 9 | 19 | 33 | 18 | 22 | 0 | 92 | 0.58 | 2.24 | 0.44 | 0.48 |
| 10 | 14 | 26 | 18 | 27 | 0 | 85 | 0.76 | 3.61 | 0.7 | 0.49 |
| 11 | 18 | 25 | 18 | 20 | 0 | 81 | 0.78 | 4.74 | 0.73 | 0.53 |

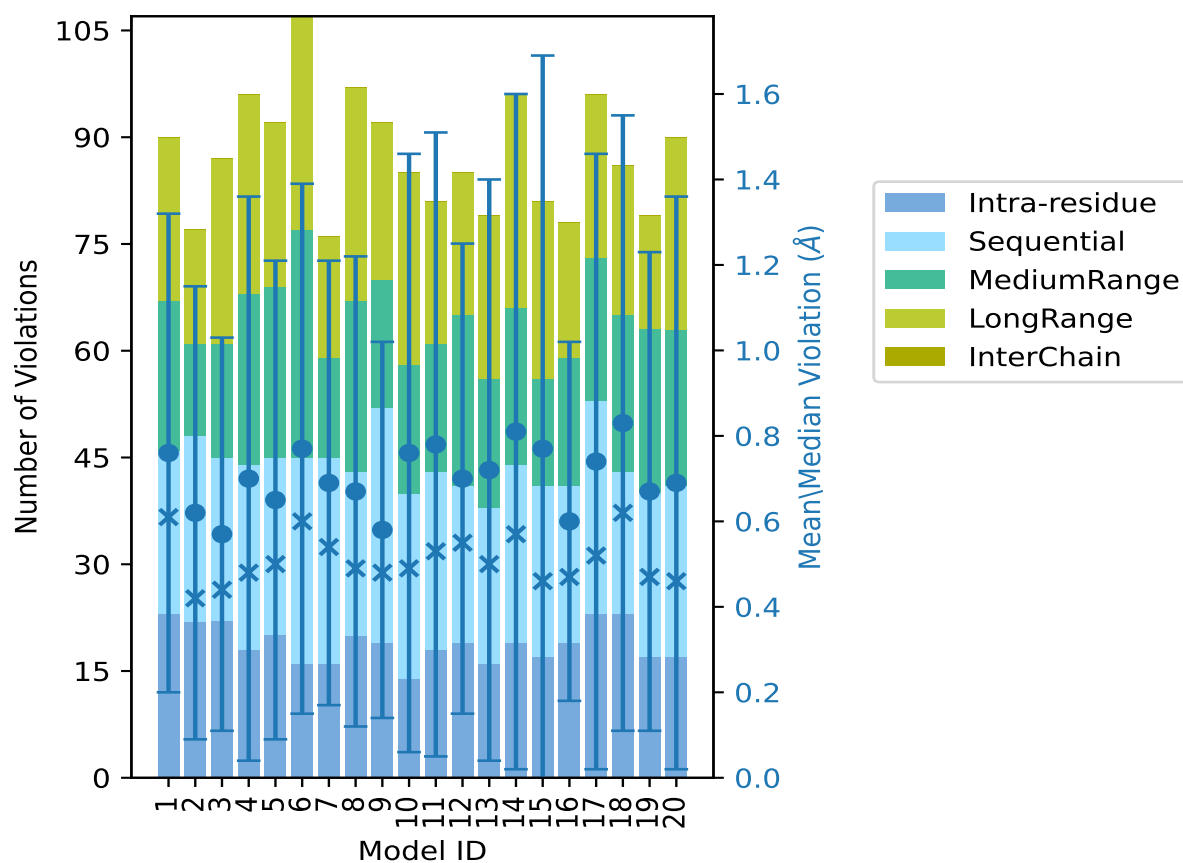
Continued on next page...

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 | 19 | 22 | 24 | 20 | 0 | 85 | 0.7 | 2.68 | 0.55 | 0.55 |
| 13 | 16 | 22 | 18 | 23 | 0 | 79 | 0.72 | 3.16 | 0.68 | 0.5 |
| 14 | 19 | 25 | 22 | 30 | 0 | 96 | 0.81 | 4.81 | 0.79 | 0.57 |
| 15 | 17 | 24 | 15 | 25 | 0 | 81 | 0.77 | 4.74 | 0.92 | 0.46 |
| 16 | 19 | 22 | 18 | 19 | 0 | 78 | 0.6 | 1.87 | 0.42 | 0.47 |
| 17 | 23 | 30 | 20 | 23 | 0 | 96 | 0.74 | 4.22 | 0.72 | 0.52 |
| 18 | 23 | 20 | 22 | 21 | 0 | 86 | 0.83 | 3.68 | 0.72 | 0.62 |
| 19 | 17 | 23 | 23 | 16 | 0 | 79 | 0.67 | 2.97 | 0.56 | 0.47 |
| 20 | 17 | 24 | 22 | 27 | 0 | 90 | 0.69 | 4.04 | 0.67 | 0.46 |

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 [\(i\)](#)



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

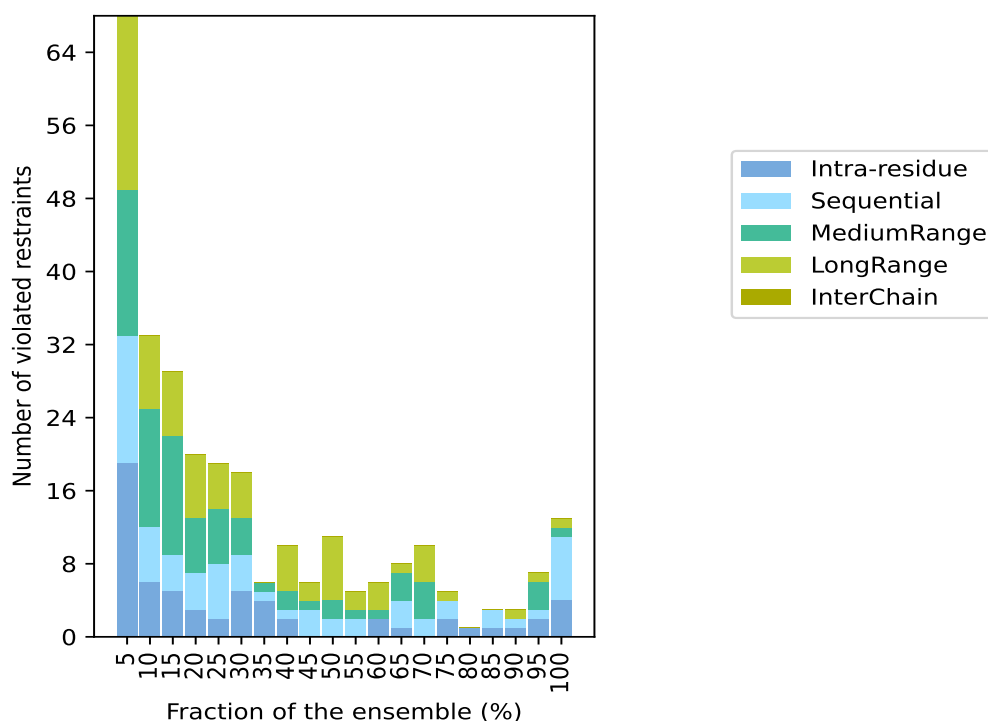
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 1382(IR:550, SQ:336, MR:284, LR:212, 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 | % |
| 19 | 14 | 16 | 19 | 0 | 68 | 1 | 5.0 |
| 6 | 6 | 13 | 8 | 0 | 33 | 2 | 10.0 |
| 5 | 4 | 13 | 7 | 0 | 29 | 3 | 15.0 |
| 3 | 4 | 6 | 7 | 0 | 20 | 4 | 20.0 |
| 2 | 6 | 6 | 5 | 0 | 19 | 5 | 25.0 |
| 5 | 4 | 4 | 5 | 0 | 18 | 6 | 30.0 |
| 4 | 1 | 1 | 0 | 0 | 6 | 7 | 35.0 |
| 2 | 1 | 2 | 5 | 0 | 10 | 8 | 40.0 |
| 0 | 3 | 1 | 2 | 0 | 6 | 9 | 45.0 |
| 0 | 2 | 2 | 7 | 0 | 11 | 10 | 50.0 |
| 0 | 2 | 1 | 2 | 0 | 5 | 11 | 55.0 |
| 2 | 0 | 1 | 3 | 0 | 6 | 12 | 60.0 |
| 1 | 3 | 3 | 1 | 0 | 8 | 13 | 65.0 |
| 0 | 2 | 4 | 4 | 0 | 10 | 14 | 70.0 |
| 2 | 2 | 0 | 1 | 0 | 5 | 15 | 75.0 |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 16 | 80.0 |
| 1 | 2 | 0 | 0 | 0 | 3 | 17 | 85.0 |
| 1 | 1 | 0 | 1 | 0 | 3 | 18 | 90.0 |
| 2 | 1 | 3 | 1 | 0 | 7 | 19 | 95.0 |
| 4 | 7 | 1 | 1 | 0 | 13 | 20 | 100.0 |

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

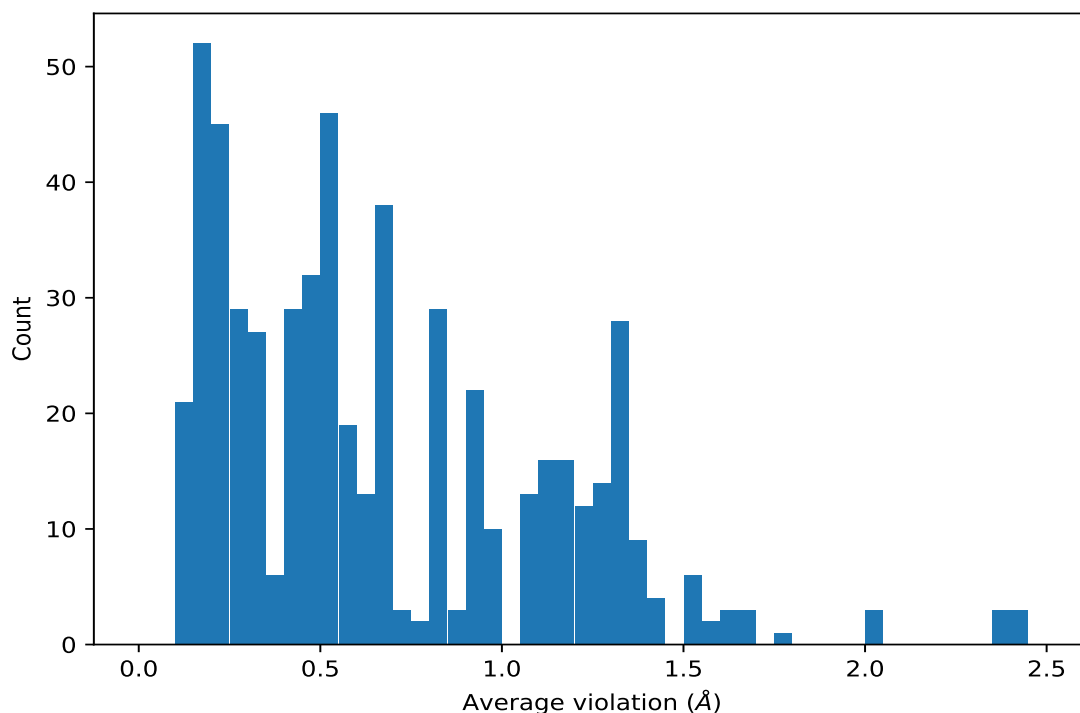
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 20 | 1.62 | 0.11 | 1.6 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 20 | 1.5 | 0.45 | 1.46 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 20 | 1.5 | 0.45 | 1.46 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 20 | 1.5 | 0.45 | 1.46 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 20 | 1.23 | 0.57 | 1.3 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 20 | 1.23 | 0.57 | 1.3 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 20 | 1.14 | 0.34 | 1.1 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 1.09 | 0.56 | 0.92 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 1.09 | 0.56 | 0.92 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 1.09 | 0.56 | 0.92 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 20 | 0.86 | 0.04 | 0.86 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 20 | 0.65 | 0.09 | 0.68 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 20 | 0.54 | 0.04 | 0.54 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 20 | 0.52 | 0.02 | 0.52 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 20 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 20 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 19 | 1.3 | 0.13 | 1.28 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 19 | 0.77 | 0.01 | 0.77 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 19 | 0.72 | 0.33 | 0.93 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 19 | 0.65 | 0.27 | 0.61 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.64 | 0.48 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.64 | 0.48 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.64 | 0.48 | 0.55 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 19 | 0.42 | 0.16 | 0.43 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 19 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.23 | 0.25 | 1.25 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.23 | 0.25 | 1.25 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.23 | 0.25 | 1.25 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 18 | 0.57 | 0.09 | 0.58 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 18 | 0.4 | 0.04 | 0.42 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 17 | 1.6 | 0.86 | 1.54 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 17 | 0.28 | 0.06 | 0.28 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 17 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 17 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 17 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 16 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 16 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 16 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 15 | 1.37 | 0.67 | 1.43 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 15 | 0.82 | 0.64 | 0.58 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 15 | 0.82 | 0.64 | 0.58 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 15 | 0.82 | 0.64 | 0.58 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 15 | 0.81 | 0.01 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 15 | 0.81 | 0.01 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 15 | 0.81 | 0.01 | 0.82 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 15 | 0.46 | 0.19 | 0.46 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 15 | 0.31 | 0.09 | 0.33 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 14 | 1.64 | 1.32 | 1.21 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 14 | 1.52 | 1.13 | 0.82 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 14 | 1.52 | 1.13 | 0.82 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 14 | 1.44 | 0.9 | 1.46 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 14 | 1.44 | 0.9 | 1.46 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 14 | 1.44 | 0.9 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 1.32 | 0.73 | 0.99 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 1.32 | 0.73 | 0.99 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 1.32 | 0.73 | 0.99 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 14 | 1.22 | 0.41 | 1.12 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.9 | 0.56 | 0.75 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.9 | 0.56 | 0.75 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.9 | 0.56 | 0.75 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.56 | 0.25 | 0.46 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.56 | 0.25 | 0.46 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.56 | 0.25 | 0.46 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 14 | 0.52 | 0.13 | 0.55 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 14 | 0.49 | 0.06 | 0.49 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.33 | 0.09 | 0.34 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.33 | 0.09 | 0.34 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.33 | 0.09 | 0.34 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 13 | 1.16 | 0.15 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 13 | 1.16 | 0.15 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 13 | 1.16 | 0.15 | 1.24 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 13 | 1.15 | 0.85 | 1.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 13 | 1.15 | 0.85 | 1.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 13 | 1.15 | 0.85 | 1.35 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 13 | 0.5 | 0.14 | 0.51 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 13 | 0.49 | 0.54 | 0.2 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.42 | 0.16 | 0.42 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.42 | 0.16 | 0.42 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.42 | 0.16 | 0.42 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.35 | 0.34 | 0.24 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.35 | 0.34 | 0.24 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.35 | 0.34 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.3 | 0.15 | 0.24 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 13 | 0.22 | 0.09 | 0.2 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 12 | 1.37 | 0.8 | 1.37 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 12 | 1.37 | 0.8 | 1.37 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 12 | 1.37 | 0.8 | 1.37 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 12 | 1.37 | 0.8 | 1.37 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 12 | 1.08 | 0.42 | 1.02 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 12 | 1.08 | 0.42 | 1.02 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 12 | 1.08 | 0.42 | 1.02 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 12 | 0.97 | 0.75 | 0.78 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 12 | 0.7 | 0.02 | 0.7 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.68 | 0.46 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.68 | 0.46 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.68 | 0.46 | 0.59 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 12 | 0.29 | 0.07 | 0.26 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 11 | 1.12 | 0.75 | 1.3 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 11 | 1.12 | 0.75 | 1.3 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 11 | 1.12 | 0.75 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 11 | 0.68 | 0.56 | 0.3 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 11 | 0.58 | 0.44 | 0.52 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 11 | 0.44 | 0.2 | 0.4 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 11 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 10 | 1.52 | 1.1 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.31 | 0.17 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 10 | 1.23 | 0.69 | 0.96 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 10 | 1.23 | 0.69 | 0.96 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 10 | 1.23 | 0.69 | 0.96 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 10 | 0.92 | 0.36 | 0.96 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.49 | 0.19 | 0.48 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.49 | 0.19 | 0.48 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.49 | 0.19 | 0.48 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 10 | 0.47 | 0.17 | 0.49 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 10 | 0.42 | 0.21 | 0.35 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 10 | 0.37 | 0.24 | 0.29 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 10 | 0.31 | 0.13 | 0.32 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 10 | 0.31 | 0.13 | 0.32 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 10 | 0.31 | 0.13 | 0.32 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 10 | 0.31 | 0.13 | 0.32 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 10 | 0.3 | 0.07 | 0.27 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 10 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 10 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 9 | 1.56 | 0.81 | 1.35 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 9 | 0.94 | 0.34 | 1.05 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 9 | 0.81 | 0.52 | 0.67 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 9 | 0.81 | 0.52 | 0.67 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 9 | 0.53 | 0.13 | 0.5 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 9 | 0.38 | 0.03 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 9 | 0.22 | 0.11 | 0.21 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 8 | 1.4 | 1.09 | 0.8 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 8 | 1.06 | 0.68 | 1.26 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 8 | 1.06 | 0.68 | 1.26 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 8 | 1.06 | 0.68 | 1.26 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.98 | 0.94 | 0.72 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.98 | 0.94 | 0.72 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.98 | 0.94 | 0.72 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 8 | 0.82 | 0.6 | 0.66 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 8 | 0.56 | 0.23 | 0.71 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 8 | 0.41 | 0.08 | 0.36 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 8 | 0.28 | 0.11 | 0.34 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 8 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 8 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 8 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 8 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 7 | 0.56 | 0.12 | 0.52 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 7 | 0.51 | 0.03 | 0.5 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 7 | 0.48 | 0.0 | 0.48 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 7 | 0.41 | 0.26 | 0.29 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 7 | 0.41 | 0.26 | 0.29 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 7 | 0.37 | 0.08 | 0.37 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 7 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 7 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 7 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 2.37 | 1.66 | 1.98 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 2.37 | 1.66 | 1.98 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 2.37 | 1.66 | 1.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 6 | 1.26 | 0.7 | 1.09 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 1.16 | 0.85 | 1.16 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 1.16 | 0.85 | 1.16 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 1.16 | 0.85 | 1.16 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 6 | 0.87 | 0.45 | 1.06 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 6 | 0.73 | 0.32 | 0.75 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 6 | 0.69 | 0.46 | 0.7 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.67 | 0.5 | 0.6 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.67 | 0.5 | 0.6 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.67 | 0.5 | 0.6 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 6 | 0.67 | 0.05 | 0.7 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 0.65 | 0.29 | 0.65 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 6 | 0.55 | 0.2 | 0.54 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.53 | 0.24 | 0.52 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 0.44 | 0.01 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 0.44 | 0.01 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 0.44 | 0.01 | 0.44 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 6 | 0.37 | 0.16 | 0.4 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.17 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 6 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 6 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 6 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 6 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 5 | 1.3 | 0.63 | 1.53 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 5 | 1.3 | 0.63 | 1.53 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 5 | 1.3 | 0.63 | 1.53 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 5 | 1.3 | 1.72 | 0.47 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 5 | 1.3 | 1.72 | 0.47 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 5 | 1.3 | 1.72 | 0.47 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 5 | 1.22 | 0.86 | 0.97 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 5 | 1.22 | 0.86 | 0.97 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 5 | 1.22 | 0.86 | 0.97 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 5 | 1.17 | 0.95 | 0.79 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 5 | 1.17 | 0.95 | 0.79 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 5 | 1.12 | 0.76 | 1.28 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 5 | 0.92 | 0.55 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.85 | 0.38 | 0.87 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.85 | 0.38 | 0.87 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.85 | 0.38 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 5 | 0.83 | 0.1 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 5 | 0.83 | 0.1 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 5 | 0.83 | 0.1 | 0.87 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 5 | 0.82 | 0.7 | 0.62 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 5 | 0.82 | 0.7 | 0.62 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 5 | 0.82 | 0.7 | 0.62 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 5 | 0.75 | 0.41 | 0.91 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 0.61 | 0.29 | 0.56 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 0.61 | 0.29 | 0.56 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 0.61 | 0.29 | 0.56 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 5 | 0.58 | 0.45 | 0.34 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 5 | 0.58 | 0.45 | 0.34 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 5 | 0.58 | 0.3 | 0.53 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 5 | 0.58 | 0.3 | 0.53 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 5 | 0.54 | 0.18 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 5 | 0.4 | 0.1 | 0.42 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 5 | 0.36 | 0.27 | 0.25 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 5 | 0.33 | 0.17 | 0.29 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 5 | 0.28 | 0.13 | 0.23 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 5 | 0.28 | 0.13 | 0.23 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:714:GLN:HG2 | 4 | 2.43 | 1.29 | 2.35 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:717:GLU:HG2 | 4 | 2.43 | 1.29 | 2.35 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:647:MET:HG3 | 4 | 2.43 | 1.29 | 2.35 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB2 | 1:A:718:GLU:HB2 | 4 | 2.04 | 1.45 | 1.37 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB1 | 1:A:718:GLU:HB2 | 4 | 2.04 | 1.45 | 1.37 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB3 | 1:A:718:GLU:HB2 | 4 | 2.04 | 1.45 | 1.37 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 4 | 1.69 | 1.7 | 0.98 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 4 | 1.69 | 1.7 | 0.98 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 4 | 1.69 | 1.7 | 0.98 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD22 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD21 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD23 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD22 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD21 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD23 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD22 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD21 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD23 | 4 | 0.93 | 0.72 | 0.82 |
| (2,7) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 4 | 0.86 | 0.51 | 0.64 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD12 | 4 | 0.84 | 0.38 | 1.04 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD11 | 4 | 0.84 | 0.38 | 1.04 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD13 | 4 | 0.84 | 0.38 | 1.04 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG21 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.81 | 0.68 | 0.74 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG22 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.81 | 0.68 | 0.74 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG23 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.81 | 0.68 | 0.74 |
| (1,972) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:715:LYS:HD2 | 4 | 0.63 | 0.22 | 0.71 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:632:GLN:HB2 | 4 | 0.45 | 0.31 | 0.38 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:632:GLN:HB2 | 4 | 0.45 | 0.31 | 0.38 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:632:GLN:HB2 | 4 | 0.45 | 0.31 | 0.38 |
| (1,727) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:723:MET:H | 4 | 0.42 | 0.24 | 0.4 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 4 | 0.35 | 0.21 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 4 | 0.35 | 0.21 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 4 | 0.35 | 0.21 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HD2 | 4 | 0.35 | 0.21 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:655:GLU:HA | 4 | 0.34 | 0.09 | 0.3 |
| (1,1190) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:722:GLN:HE22 | 4 | 0.33 | 0.16 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1160) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:686:PRO:HB2 | 4 | 0.31 | 0.27 | 0.16 |
| (1,480) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:627:SER:HA | 4 | 0.28 | 0.18 | 0.22 |
| (1,215) | 1:A:670:ARG:HD2 | 1:A:670:ARG:HB2 | 4 | 0.25 | 0.01 | 0.24 |
| (1,1045) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 4 | 0.24 | 0.13 | 0.22 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB2 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB1 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB3 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,895) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:HA2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,992) | 1:A:687:GLN:HE22 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 3 | 1.77 | 0.27 | 1.64 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 1.28 | 0.23 | 1.43 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 1.28 | 0.23 | 1.43 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 1.28 | 0.23 | 1.43 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.26 | 0.37 | 1.06 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.26 | 0.37 | 1.06 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.26 | 0.37 | 1.06 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.2 | 1.06 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.2 | 1.06 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.2 | 1.06 | 0.68 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:671:GLU:HA | 3 | 1.06 | 0.44 | 1.37 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:671:GLU:HA | 3 | 1.06 | 0.44 | 1.37 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:671:GLU:HA | 3 | 1.06 | 0.44 | 1.37 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD22 | 3 | 0.96 | 0.07 | 1.0 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD21 | 3 | 0.96 | 0.07 | 1.0 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD23 | 3 | 0.96 | 0.07 | 1.0 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG21 | 3 | 0.91 | 0.14 | 0.82 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG22 | 3 | 0.91 | 0.14 | 0.82 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG23 | 3 | 0.91 | 0.14 | 0.82 |
| (1,1235) | 1:A:723:MET:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 3 | 0.85 | 0.13 | 0.92 |
| (1,1229) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HA | 3 | 0.74 | 0.37 | 0.5 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.7 | 0.29 | 0.84 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.7 | 0.29 | 0.84 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.7 | 0.29 | 0.84 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG2 | 1:A:725:GLU:HB2 | 3 | 0.67 | 0.18 | 0.75 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:725:GLU:HB2 | 3 | 0.67 | 0.18 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB2 | 3 | 0.64 | 0.13 | 0.71 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB1 | 3 | 0.64 | 0.13 | 0.71 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB3 | 3 | 0.64 | 0.13 | 0.71 |
| (1,430) | 1:A:708:LEU:HG | 1:A:705:LYS:HB2 | 3 | 0.53 | 0.39 | 0.3 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE2 | 3 | 0.51 | 0.09 | 0.47 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE1 | 3 | 0.51 | 0.09 | 0.47 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE3 | 3 | 0.51 | 0.09 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.5 | 0.29 | 0.56 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.49 | 0.39 | 0.23 |
| (1,939) | 1:A:723:MET:H | 1:A:723:MET:HG2 | 3 | 0.46 | 0.37 | 0.24 |
| (1,969) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:722:GLN:HB3 | 3 | 0.4 | 0.01 | 0.39 |
| (1,452) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:647:MET:HA | 3 | 0.38 | 0.07 | 0.39 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 3 | 0.34 | 0.16 | 0.37 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 3 | 0.34 | 0.16 | 0.37 |
| (2,5) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:H | 3 | 0.31 | 0.24 | 0.16 |
| (1,933) | 1:A:629:ASP:H | 1:A:628:PRO:HA | 3 | 0.3 | 0.07 | 0.29 |
| (1,211) | 1:A:688:ARG:HB2 | 1:A:691:ASP:HB2 | 3 | 0.29 | 0.03 | 0.27 |
| (1,1046) | 1:A:658:GLY:H | 1:A:657:ASP:HA | 3 | 0.23 | 0.05 | 0.26 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HA | 3 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HA | 3 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HA | 3 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB2 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB3 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:666:MET:HB3 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.15 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG21 | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG22 | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG23 | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1154) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:711:GLN:HG3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1230) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HB3 | 2 | 1.56 | 0.63 | 1.56 |
| (1,14) | 1:A:628:PRO:HA | 1:A:631:CYS:HB2 | 2 | 1.44 | 0.84 | 1.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 2 | 1.4 | 0.01 | 1.4 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 2 | 1.4 | 0.01 | 1.4 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 2 | 1.4 | 0.01 | 1.4 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD12 | 2 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD11 | 2 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD13 | 2 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE2 | 1:A:686:PRO:HG3 | 2 | 1.16 | 0.18 | 1.16 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE3 | 1:A:686:PRO:HG3 | 2 | 1.16 | 0.18 | 1.16 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:707:ARG:HG3 | 2 | 1.1 | 0.05 | 1.1 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:707:ARG:HG3 | 2 | 1.1 | 0.05 | 1.1 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:707:ARG:HG3 | 2 | 1.1 | 0.05 | 1.1 |
| (2,3) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:724:GLU:HG2 | 2 | 1.05 | 0.31 | 1.05 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 2 | 0.98 | 0.24 | 0.98 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:633:ASP:HB2 | 2 | 0.98 | 0.24 | 0.98 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:633:ASP:HB2 | 2 | 0.98 | 0.24 | 0.98 |
| (1,576) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.94 | 0.32 | 0.94 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB3 | 2 | 0.92 | 0.08 | 0.92 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB3 | 2 | 0.92 | 0.08 | 0.92 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB3 | 2 | 0.92 | 0.08 | 0.92 |
| (1,468) | 1:A:663:PRO:HD3 | 1:A:659:MET:HA | 2 | 0.84 | 0.32 | 0.84 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 2 | 0.8 | 0.12 | 0.8 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 2 | 0.8 | 0.12 | 0.8 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 2 | 0.8 | 0.12 | 0.8 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE2 | 2 | 0.7 | 0.01 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE1 | 2 | 0.7 | 0.01 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE3 | 2 | 0.7 | 0.01 | 0.7 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB2 | 2 | 0.63 | 0.17 | 0.63 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB2 | 2 | 0.63 | 0.17 | 0.63 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB2 | 2 | 0.63 | 0.17 | 0.63 |
| (1,116) | 1:A:678:GLY:HA2 | 1:A:684:LYS:HD2 | 2 | 0.6 | 0.06 | 0.6 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD12 | 2 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD11 | 2 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD13 | 2 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.56 | 0.03 | 0.56 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.56 | 0.03 | 0.56 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.56 | 0.03 | 0.56 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 2 | 0.54 | 0.01 | 0.54 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 2 | 0.54 | 0.01 | 0.54 |
| (3,27) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HG2 | 2 | 0.54 | 0.01 | 0.54 |
| (1,852) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:635:LEU:HB2 | 2 | 0.46 | 0.09 | 0.46 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG21 | 2 | 0.42 | 0.18 | 0.42 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG22 | 2 | 0.42 | 0.18 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

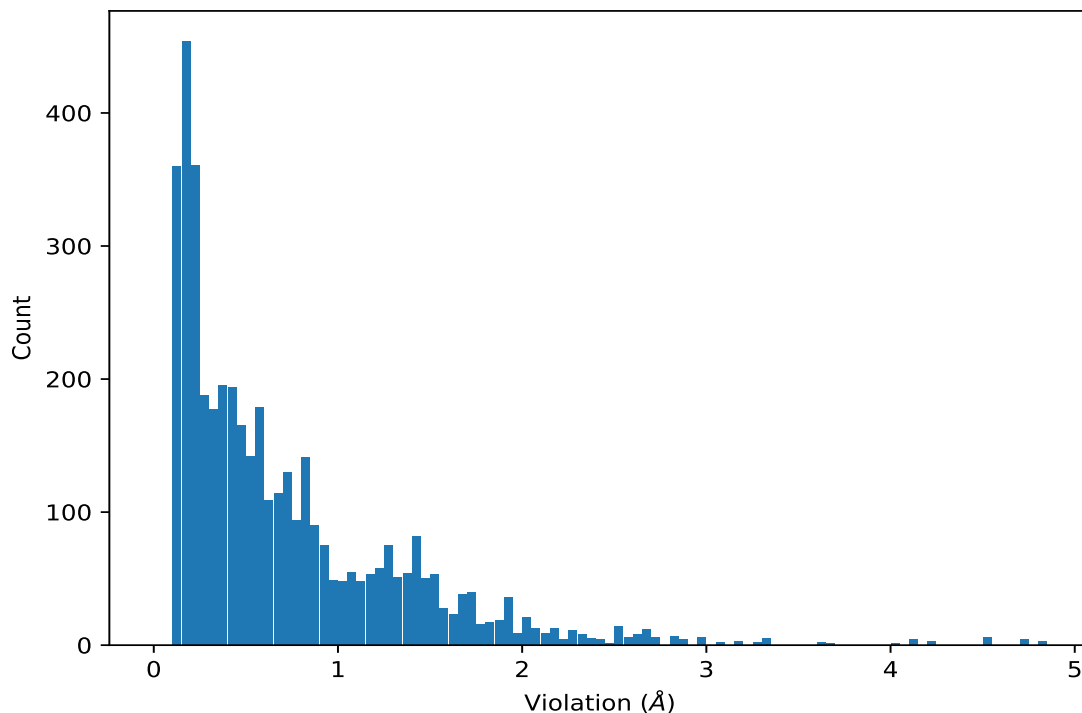
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG23 | 2 | 0.42 | 0.18 | 0.42 |
| (1,798) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HA | 2 | 0.41 | 0.27 | 0.41 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 2 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (1,1012) | 1:A:704:MET:H | 1:A:704:MET:HG2 | 2 | 0.34 | 0.04 | 0.34 |
| (1,81) | 1:A:659:MET:HA | 1:A:659:MET:HG3 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HA | 2 | 0.29 | 0.04 | 0.29 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HA | 2 | 0.29 | 0.04 | 0.29 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HA | 2 | 0.29 | 0.04 | 0.29 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HG3 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HG3 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HG3 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,1005) | 1:A:689:SER:H | 1:A:684:LYS:HA | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HG | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HG | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HG | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HG2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1027) | 1:A:678:GLY:H | 1:A:679:GLY:HA2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,834) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:710:ASN:HB2 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1168) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:656:TYR:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB3 | 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) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 14 | 4.81 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 14 | 4.81 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 14 | 4.81 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 15 | 4.74 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 15 | 4.74 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 15 | 4.74 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 11 | 4.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 15 | 4.54 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 15 | 4.54 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 15 | 4.54 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB2 | 1:A:718:GLU:HB2 | 15 | 4.52 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB1 | 1:A:718:GLU:HB2 | 15 | 4.52 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB3 | 1:A:718:GLU:HB2 | 15 | 4.52 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 17 | 4.22 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 17 | 4.22 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 17 | 4.22 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:714:GLN:HG2 | 4 | 4.14 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:717:GLU:HG2 | 4 | 4.14 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:647:MET:HG3 | 4 | 4.14 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 17 | 4.1 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 20 | 4.04 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 18 | 3.68 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 10 | 3.61 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 10 | 3.61 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 20 | 3.34 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 14 | 3.34 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 14 | 3.34 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 14 | 3.34 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 14 | 3.31 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 4 | 3.29 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 4 | 3.29 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:714:GLN:HG2 | 13 | 3.16 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:717:GLU:HG2 | 13 | 3.16 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:647:MET:HG3 | 13 | 3.16 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 6 | 3.07 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 6 | 3.07 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 11 | 2.99 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 11 | 2.99 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 19 | 2.97 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 19 | 2.97 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 19 | 2.97 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 1 | 2.96 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 13 | 2.88 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 13 | 2.88 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 13 | 2.88 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 5 | 2.86 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 13 | 2.82 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 13 | 2.82 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 13 | 2.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 13 | 2.82 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 2.81 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 2.81 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 2.81 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 2 | 2.74 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 2 | 2.74 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 2 | 2.74 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 10 | 2.71 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 10 | 2.71 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 10 | 2.71 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 2.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 2.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB2 | 1:A:644:ALA:HB2 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB2 | 1:A:644:ALA:HB1 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB2 | 1:A:644:ALA:HB3 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB1 | 1:A:644:ALA:HB2 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB1 | 1:A:644:ALA:HB1 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB1 | 1:A:644:ALA:HB3 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB3 | 1:A:644:ALA:HB2 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB3 | 1:A:644:ALA:HB1 | 15 | 2.68 |
| (1,320) | 1:A:721:ALA:HB3 | 1:A:644:ALA:HB3 | 15 | 2.68 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 6 | 2.64 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 2.62 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 2.62 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 2.62 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 8 | 2.6 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 8 | 2.6 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 8 | 2.6 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 8 | 2.6 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 18 | 2.59 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 18 | 2.59 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 18 | 2.59 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 5 | 2.58 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 5 | 2.58 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 5 | 2.58 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 6 | 2.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 6 | 2.53 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 6 | 2.53 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 12 | 2.51 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 12 | 2.51 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 12 | 2.51 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 18 | 2.5 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 18 | 2.5 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 18 | 2.5 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 14 | 2.49 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 10 | 2.44 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 18 | 2.42 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 18 | 2.42 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 18 | 2.42 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 6 | 2.38 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 6 | 2.38 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 6 | 2.38 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 12 | 2.36 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 17 | 2.36 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 1 | 2.34 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 1 | 2.34 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 1 | 2.34 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 18 | 2.33 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 18 | 2.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 10 | 2.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 10 | 2.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 10 | 2.3 |
| (1,53) | 1:A:636:GLU:HA | 1:A:640:TRP:HD1 | 7 | 2.29 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 12 | 2.29 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 12 | 2.29 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 12 | 2.29 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 2.28 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 2.28 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 2.28 |
| (1,14) | 1:A:628:PRO:HA | 1:A:631:CYS:HB2 | 18 | 2.28 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 11 | 2.25 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 11 | 2.25 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 14 | 2.25 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 9 | 2.24 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 9 | 2.21 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 3 | 2.2 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 3 | 2.2 |
| (1,1230) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HB3 | 1 | 2.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 8 | 2.17 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 8 | 2.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 2 | 2.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 2 | 2.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 2 | 2.17 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 2.17 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 2.17 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 2.17 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 8 | 2.16 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 8 | 2.16 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 8 | 2.16 |
| (1,992) | 1:A:687:GLN:HE22 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 20 | 2.15 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 13 | 2.14 |
| (1,434) | 1:A:682:LEU:HG | 1:A:671:GLU:HA | 14 | 2.14 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 14 | 2.13 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 8 | 2.13 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 8 | 2.13 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 8 | 2.13 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 10 | 2.12 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 10 | 2.12 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 10 | 2.12 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 2.09 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 2.09 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 2.09 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 6 | 2.08 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 2.08 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 2.08 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 2.08 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 6 | 2.07 |
| (1,351) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:662:GLU:HA | 18 | 2.06 |
| (1,351) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:662:GLU:HA | 18 | 2.06 |
| (1,351) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:662:GLU:HA | 18 | 2.06 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 13 | 2.05 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 4 | 2.05 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 10 | 2.04 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 10 | 2.04 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 10 | 2.04 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 10 | 2.02 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 10 | 2.02 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 10 | 2.02 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 10 | 2.02 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 3 | 2.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 15 | 2.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 15 | 2.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 15 | 2.01 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 11 | 2.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 20 | 2.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 20 | 2.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 20 | 2.0 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 18 | 2.0 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 18 | 2.0 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 18 | 2.0 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 2.0 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 2.0 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 2.0 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 8 | 1.96 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 8 | 1.96 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 8 | 1.96 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 8 | 1.96 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 8 | 1.96 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 8 | 1.96 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 17 | 1.95 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 17 | 1.95 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 17 | 1.95 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 19 | 1.94 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 7 | 1.94 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 7 | 1.94 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 7 | 1.94 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 10 | 1.93 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 5 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD22 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD21 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD23 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD22 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD21 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD23 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD22 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD21 | 14 | 1.92 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD23 | 14 | 1.92 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 19 | 1.91 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 19 | 1.91 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 19 | 1.91 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 19 | 1.91 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 6 | 1.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 6 | 1.91 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 6 | 1.91 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 6 | 1.91 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 6 | 1.91 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 6 | 1.91 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 18 | 1.91 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 20 | 1.91 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 20 | 1.91 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 20 | 1.91 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 20 | 1.91 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 20 | 1.91 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 20 | 1.91 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 19 | 1.9 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 19 | 1.9 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 19 | 1.9 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 19 | 1.89 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 19 | 1.89 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 13 | 1.89 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 13 | 1.89 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 13 | 1.89 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 10 | 1.89 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 10 | 1.89 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 10 | 1.89 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 4 | 1.88 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 16 | 1.87 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 19 | 1.86 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 19 | 1.86 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 19 | 1.86 |
| (1,253) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 2 | 1.86 |
| (1,253) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 2 | 1.86 |
| (1,253) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 2 | 1.86 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 13 | 1.85 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 13 | 1.85 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 13 | 1.85 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 7 | 1.84 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 1 | 1.84 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 6 | 1.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 6 | 1.82 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 6 | 1.82 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 14 | 1.81 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 14 | 1.81 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 1 | 1.81 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 1 | 1.81 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 1 | 1.81 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 15 | 1.8 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 4 | 1.78 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 4 | 1.78 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 4 | 1.78 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 18 | 1.78 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 18 | 1.78 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 18 | 1.78 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 1.77 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 1.77 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 1.77 |
| (1,273) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 6 | 1.76 |
| (1,273) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 6 | 1.76 |
| (1,273) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 6 | 1.76 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 15 | 1.75 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.75 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.75 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 1.75 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 5 | 1.74 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 5 | 1.74 |
| (2,7) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 17 | 1.74 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 16 | 1.74 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 4 | 1.74 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 4 | 1.74 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 4 | 1.74 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 3 | 1.74 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 10 | 1.74 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 4 | 1.72 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 4 | 1.72 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 4 | 1.72 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 4 | 1.72 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 17 | 1.72 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 17 | 1.72 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 3 | 1.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 3 | 1.71 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 3 | 1.71 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 3 | 1.71 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 1.71 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 1.71 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 1.71 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 7 | 1.71 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 7 | 1.71 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 7 | 1.71 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 13 | 1.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 13 | 1.7 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 19 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 13 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 13 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 13 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 14 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 14 | 1.7 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 14 | 1.7 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 1 | 1.69 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 1 | 1.69 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 18 | 1.69 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 4 | 1.69 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 4 | 1.69 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 4 | 1.69 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 2 | 1.69 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 12 | 1.69 |
| (1,361) | 1:A:663:PRO:HB3 | 1:A:659:MET:HE2 | 18 | 1.68 |
| (1,361) | 1:A:663:PRO:HB3 | 1:A:659:MET:HE1 | 18 | 1.68 |
| (1,361) | 1:A:663:PRO:HB3 | 1:A:659:MET:HE3 | 18 | 1.68 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 8 | 1.68 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 8 | 1.68 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 8 | 1.68 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 14 | 1.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 18 | 1.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 18 | 1.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 18 | 1.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 6 | 1.67 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 6 | 1.67 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 6 | 1.67 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 15 | 1.67 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 15 | 1.67 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 15 | 1.67 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 15 | 1.66 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 1 | 1.65 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 19 | 1.65 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 19 | 1.65 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 19 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD12 | 1:A:674:MET:HE2 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD12 | 1:A:674:MET:HE1 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD12 | 1:A:674:MET:HE3 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD11 | 1:A:674:MET:HE2 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD11 | 1:A:674:MET:HE1 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD11 | 1:A:674:MET:HE3 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD13 | 1:A:674:MET:HE2 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD13 | 1:A:674:MET:HE1 | 1 | 1.65 |
| (1,260) | 1:A:682:LEU:HD13 | 1:A:674:MET:HE3 | 1 | 1.65 |
| (1,992) | 1:A:687:GLN:HE22 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 18 | 1.64 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 13 | 1.64 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 13 | 1.64 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 13 | 1.64 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 5 | 1.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 6 | 1.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 6 | 1.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 6 | 1.63 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG21 | 1:A:673:GLU:HG3 | 15 | 1.63 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG22 | 1:A:673:GLU:HG3 | 15 | 1.63 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG23 | 1:A:673:GLU:HG3 | 15 | 1.63 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 10 | 1.63 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 17 | 1.62 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 20 | 1.62 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB2 | 1:A:718:GLU:HB2 | 14 | 1.62 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB1 | 1:A:718:GLU:HB2 | 14 | 1.62 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB3 | 1:A:718:GLU:HB2 | 14 | 1.62 |
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:666:MET:HG2 | 6 | 1.62 |
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:666:MET:HG3 | 6 | 1.62 |
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:666:MET:HG2 | 6 | 1.62 |
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:666:MET:HG3 | 6 | 1.62 |
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:666:MET:HG2 | 6 | 1.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,276) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:666:MET:HG3 | 6 | 1.62 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 2 | 1.58 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 2 | 1.58 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 2 | 1.58 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 7 | 1.58 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 8 | 1.58 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 18 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 17 | 1.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 17 | 1.58 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 15 | 1.58 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 15 | 1.58 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 15 | 1.58 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 14 | 1.57 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 14 | 1.57 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 9 | 1.56 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 9 | 1.56 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 9 | 1.56 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 2 | 1.55 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 2 | 1.55 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 2 | 1.55 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 12 | 1.55 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 13 | 1.55 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 2 | 1.54 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 7 | 1.54 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 19 | 1.54 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 19 | 1.54 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 19 | 1.54 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 5 | 1.54 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:714:GLN:HG2 | 6 | 1.53 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:717:GLU:HG2 | 6 | 1.53 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:647:MET:HG3 | 6 | 1.53 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 11 | 1.53 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 17 | 1.53 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 17 | 1.53 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 17 | 1.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 11 | 1.53 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 11 | 1.52 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 11 | 1.52 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 6 | 1.52 |
| (1,992) | 1:A:687:GLN:HE22 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 5 | 1.52 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 16 | 1.52 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 1 | 1.51 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 1 | 1.51 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 9 | 1.51 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 9 | 1.51 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 12 | 1.51 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 12 | 1.51 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 12 | 1.51 |
| (1,271) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 6 | 1.51 |
| (1,271) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 6 | 1.51 |
| (1,271) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 6 | 1.51 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 9 | 1.5 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 9 | 1.5 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 9 | 1.5 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 2 | 1.5 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 2 | 1.5 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 2 | 1.5 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 6 | 1.5 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 11 | 1.5 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 13 | 1.49 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 7 | 1.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 7 | 1.49 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 7 | 1.49 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 1 | 1.48 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 1 | 1.48 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 3 | 1.48 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 3 | 1.48 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 3 | 1.48 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 12 | 1.47 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 12 | 1.47 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 12 | 1.47 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 17 | 1.47 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 17 | 1.47 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 17 | 1.47 |
| (1,418) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:634:TRP:HZ2 | 9 | 1.46 |
| (1,418) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:634:TRP:HZ2 | 9 | 1.46 |
| (1,418) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:634:TRP:HZ2 | 9 | 1.46 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 4 | 1.46 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 9 | 1.46 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 7 | 1.46 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 7 | 1.46 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 7 | 1.46 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 13 | 1.45 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 13 | 1.45 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 17 | 1.45 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 17 | 1.45 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 17 | 1.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD12 | 12 | 1.45 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD11 | 12 | 1.45 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD13 | 12 | 1.45 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 3 | 1.45 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 3 | 1.45 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 3 | 1.45 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 9 | 1.44 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 9 | 1.44 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 9 | 1.44 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 9 | 1.44 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 16 | 1.44 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 16 | 1.44 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 16 | 1.44 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 7 | 1.43 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 10 | 1.43 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD12 | 14 | 1.43 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD11 | 14 | 1.43 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD13 | 14 | 1.43 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 12 | 1.43 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 7 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 16 | 1.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 16 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 16 | 1.42 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 10 | 1.42 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 10 | 1.42 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 1 | 1.42 |
| (1,387) | 1:A:664:ARG:HA | 1:A:663:PRO:HG3 | 6 | 1.42 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 5 | 1.42 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 2 | 1.41 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 2 | 1.41 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 10 | 1.41 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 17 | 1.4 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 17 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 17 | 1.4 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 17 | 1.4 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 17 | 1.4 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 17 | 1.4 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 16 | 1.39 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 16 | 1.39 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 1 | 1.39 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 8 | 1.39 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 8 | 1.39 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 8 | 1.39 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 6 | 1.39 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 6 | 1.39 |
| (1,249) | 1:A:696:ALA:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 6 | 1.39 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 15 | 1.39 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 8 | 1.38 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 8 | 1.38 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 1.38 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 1.38 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 1.38 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 1 | 1.38 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 19 | 1.38 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:671:GLU:HA | 8 | 1.37 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:671:GLU:HA | 8 | 1.37 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:671:GLU:HA | 8 | 1.37 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 17 | 1.36 |
| (2,3) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:724:GLU:HG2 | 14 | 1.36 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 4 | 1.36 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 4 | 1.36 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 4 | 1.36 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 18 | 1.36 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 1.35 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 1.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 7 | 1.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 7 | 1.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 7 | 1.35 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 8 | 1.35 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 16 | 1.34 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 16 | 1.34 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 16 | 1.34 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 18 | 1.34 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 14 | 1.33 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 14 | 1.33 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 17 | 1.33 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG21 | 1:A:673:GLU:HG3 | 6 | 1.33 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG22 | 1:A:673:GLU:HG3 | 6 | 1.33 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG23 | 1:A:673:GLU:HG3 | 6 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 19 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 19 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 19 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 20 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 20 | 1.33 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 20 | 1.33 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 15 | 1.33 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE2 | 1:A:686:PRO:HG3 | 11 | 1.33 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE3 | 1:A:686:PRO:HG3 | 11 | 1.33 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 7 | 1.33 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 20 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD22 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD21 | 1 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD23 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD22 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD21 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD23 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD22 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD21 | 1 | 1.32 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD23 | 1 | 1.32 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 20 | 1.32 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 16 | 1.31 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 16 | 1.31 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 11 | 1.3 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 11 | 1.3 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 11 | 1.3 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 11 | 1.3 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 15 | 1.3 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 14 | 1.3 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 14 | 1.3 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 14 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 5 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 5 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 5 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 15 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 15 | 1.3 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 15 | 1.3 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 17 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 8 | 1.29 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 17 | 1.29 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 17 | 1.29 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 17 | 1.29 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 4 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 4 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 4 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 4 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 4 | 1.28 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 4 | 1.28 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.28 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.28 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.28 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 6 | 1.28 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 3 | 1.28 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 1 | 1.28 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 1.27 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 1.27 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 20 | 1.27 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 20 | 1.27 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 20 | 1.27 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 5 | 1.27 |
| (1,576) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 14 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 14 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 14 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 19 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 19 | 1.27 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 19 | 1.27 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 5 | 1.27 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 12 | 1.26 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 12 | 1.26 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 11 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 2 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 2 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 2 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 7 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 7 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 7 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 13 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 13 | 1.26 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 13 | 1.26 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 5 | 1.26 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 5 | 1.26 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 5 | 1.26 |
| (1,1229) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HA | 11 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 12 | 1.26 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 11 | 1.25 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 11 | 1.25 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 11 | 1.25 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 3 | 1.25 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 1.25 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 1.25 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 1.25 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 7 | 1.25 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 9 | 1.25 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 18 | 1.24 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 18 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 11 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 11 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 11 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 16 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 16 | 1.24 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 16 | 1.24 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 11 | 1.24 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 11 | 1.24 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 11 | 1.24 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 13 | 1.24 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:633:ASP:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:633:ASP:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 1 | 1.23 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 1 | 1.23 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 1 | 1.23 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 18 | 1.22 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 19 | 1.22 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 15 | 1.22 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 20 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 20 | 1.21 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 20 | 1.21 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 11 | 1.21 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 2 | 1.21 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 2 | 1.21 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 2 | 1.21 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 20 | 1.21 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 20 | 1.21 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 20 | 1.21 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 16 | 1.21 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 15 | 1.21 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 19 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 6 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 6 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 6 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 9 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 9 | 1.2 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 9 | 1.2 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 16 | 1.2 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 16 | 1.2 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 16 | 1.2 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD12 | 18 | 1.19 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD11 | 18 | 1.19 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD13 | 18 | 1.19 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 1 | 1.19 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 15 | 1.18 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 15 | 1.18 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 11 | 1.18 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 11 | 1.18 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 11 | 1.18 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 8 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 17 | 1.18 |
| (1,890) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HG2 | 10 | 1.17 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 3 | 1.17 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 3 | 1.17 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 3 | 1.17 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 14 | 1.17 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 1.16 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 1.16 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 12 | 1.16 |
| (1,468) | 1:A:663:PRO:HD3 | 1:A:659:MET:HA | 18 | 1.16 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 9 | 1.16 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 9 | 1.16 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 9 | 1.16 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD12 | 4 | 1.16 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD11 | 4 | 1.16 |
| (1,278) | 1:A:675:LEU:HA | 1:A:675:LEU:HD13 | 4 | 1.16 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 5 | 1.16 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 8 | 1.16 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 8 | 1.16 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 1.15 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 1.15 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 8 | 1.15 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:707:ARG:HG3 | 4 | 1.15 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:707:ARG:HG3 | 4 | 1.15 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:707:ARG:HG3 | 4 | 1.15 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 4 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 16 | 1.15 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 11 | 1.14 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 1 | 1.14 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.13 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.13 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 1.13 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 5 | 1.13 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 1.12 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 1.12 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 1 | 1.12 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 8 | 1.12 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 8 | 1.12 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 8 | 1.12 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 8 | 1.12 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB2 | 1:A:718:GLU:HB2 | 17 | 1.12 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB1 | 1:A:718:GLU:HB2 | 17 | 1.12 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB3 | 1:A:718:GLU:HB2 | 17 | 1.12 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 12 | 1.12 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 2 | 1.12 |
| (1,207) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:709:ALA:HA | 4 | 1.12 |
| (1,1234) | 1:A:659:MET:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 12 | 1.12 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 1 | 1.12 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 9 | 1.11 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 9 | 1.11 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 9 | 1.11 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG21 | 6 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG22 | 6 | 1.11 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG23 | 6 | 1.11 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 7 | 1.11 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 7 | 1.11 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 7 | 1.11 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 20 | 1.1 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 1 | 1.1 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 12 | 1.09 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 12 | 1.09 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 7 | 1.09 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 3 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 2 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 2 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 2 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 3 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 3 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 3 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 7 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 7 | 1.09 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 7 | 1.09 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 7 | 1.09 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 7 | 1.09 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 7 | 1.09 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 7 | 1.09 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 17 | 1.08 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 2 | 1.08 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 2 | 1.08 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 2 | 1.08 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 20 | 1.08 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 20 | 1.08 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 20 | 1.08 |
| (1,288) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:695:GLN:HG2 | 7 | 1.08 |
| (1,288) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:695:GLN:HG2 | 7 | 1.08 |
| (1,288) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:695:GLN:HG2 | 7 | 1.08 |
| (1,287) | 1:A:692:LEU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 7 | 1.08 |
| (1,287) | 1:A:692:LEU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 7 | 1.08 |
| (1,287) | 1:A:692:LEU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 7 | 1.08 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD12 | 4 | 1.08 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD11 | 4 | 1.08 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD13 | 4 | 1.08 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 11 | 1.08 |
| (1,430) | 1:A:708:LEU:HG | 1:A:705:LYS:HB2 | 6 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 19 | 1.07 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 13 | 1.06 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 13 | 1.06 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 13 | 1.06 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD12 | 1 | 1.06 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD11 | 1 | 1.06 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD13 | 1 | 1.06 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 4 | 1.06 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 10 | 1.06 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.06 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.06 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 1.06 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 14 | 1.05 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 14 | 1.05 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 10 | 1.05 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 14 | 1.05 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:707:ARG:HG3 | 20 | 1.05 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:707:ARG:HG3 | 20 | 1.05 |
| (1,277) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:707:ARG:HG3 | 20 | 1.05 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 5 | 1.05 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 1.04 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 1.04 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 1.04 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 6 | 1.04 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 6 | 1.04 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 6 | 1.04 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 11 | 1.04 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 11 | 1.04 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 14 | 1.04 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 2 | 1.04 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 1 | 1.03 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD12 | 20 | 1.03 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD11 | 20 | 1.03 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD13 | 20 | 1.03 |
| (1,272) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 6 | 1.02 |
| (1,272) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 6 | 1.02 |
| (1,272) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 6 | 1.02 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 18 | 1.01 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 18 | 1.01 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 18 | 1.01 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 16 | 1.01 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 9 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 9 | 1.01 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 9 | 1.01 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 19 | 1.01 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 19 | 1.01 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 19 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 4 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 4 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 4 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 11 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 11 | 1.01 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 11 | 1.01 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD22 | 20 | 1.01 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD21 | 20 | 1.01 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD23 | 20 | 1.01 |
| (1,212) | 1:A:683:GLU:HB3 | 1:A:684:LYS:HG3 | 3 | 1.01 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 12 | 1.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 1.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 1.0 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 1.0 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB3 | 18 | 1.0 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB3 | 18 | 1.0 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB3 | 18 | 1.0 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD22 | 10 | 1.0 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD21 | 10 | 1.0 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD23 | 10 | 1.0 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 4 | 1.0 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 7 | 0.99 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 8 | 0.99 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 18 | 0.99 |
| (1,939) | 1:A:723:MET:H | 1:A:723:MET:HG2 | 2 | 0.98 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 10 | 0.98 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 10 | 0.98 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 10 | 0.98 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 14 | 0.98 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 14 | 0.98 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 14 | 0.98 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE2 | 1:A:686:PRO:HG3 | 12 | 0.98 |
| (1,138) | 1:A:684:LYS:HE3 | 1:A:686:PRO:HG3 | 12 | 0.98 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 14 | 0.98 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 14 | 0.97 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 11 | 0.97 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 13 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 13 | 0.97 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 13 | 0.97 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 5 | 0.97 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 5 | 0.97 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 5 | 0.97 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.97 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.97 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.97 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 7 | 0.96 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 7 | 0.96 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 18 | 0.96 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 17 | 0.96 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 17 | 0.96 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 17 | 0.96 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD12 | 5 | 0.96 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD11 | 5 | 0.96 |
| (1,47) | 1:A:641:TYR:HA | 1:A:638:LEU:HD13 | 5 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 16 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 16 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 16 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 18 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 18 | 0.96 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 18 | 0.96 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 2 | 0.95 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 3 | 0.95 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 15 | 0.95 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.95 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.95 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 0.95 |
| (1,1235) | 1:A:723:MET:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 17 | 0.95 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 12 | 0.94 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 20 | 0.94 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 6 | 0.94 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 6 | 0.94 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 6 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.93 |
| (3,93) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.93 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 10 | 0.93 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 9 | 0.93 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 9 | 0.93 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 9 | 0.93 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 1 | 0.93 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 1 | 0.93 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 1 | 0.93 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 3 | 0.93 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 3 | 0.93 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 3 | 0.93 |
| (1,1230) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HB3 | 11 | 0.93 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.93 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.93 |
| (1,1) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.93 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 6 | 0.92 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,1235) | 1:A:723:MET:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 1 | 0.92 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 12 | 0.91 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 12 | 0.91 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 1 | 0.91 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 1 | 0.91 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 1 | 0.91 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 17 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 10 | 0.91 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 5 | 0.91 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 14 | 0.91 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 20 | 0.91 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 14 | 0.91 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB2 | 1:A:718:GLU:HB2 | 20 | 0.91 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB1 | 1:A:718:GLU:HB2 | 20 | 0.91 |
| (1,319) | 1:A:644:ALA:HB3 | 1:A:718:GLU:HB2 | 20 | 0.91 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 19 | 0.91 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 17 | 0.91 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 17 | 0.91 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 17 | 0.91 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 8 | 0.91 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 6 | 0.91 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:714:GLN:HG2 | 18 | 0.9 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:717:GLU:HG2 | 18 | 0.9 |
| (3,189) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:647:MET:HG3 | 18 | 0.9 |
| (1,984) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HA | 14 | 0.9 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 3 | 0.9 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 17 | 0.9 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 3 | 0.9 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 20 | 0.89 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.89 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.89 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.89 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:632:GLN:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:632:GLN:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:632:GLN:HB2 | 10 | 0.89 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 4 | 0.88 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 12 | 0.88 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 11 | 0.88 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 18 | 0.88 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 8 | 0.88 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 8 | 0.88 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 8 | 0.88 |
| (1,119) | 1:A:688:ARG:HD2 | 1:A:675:LEU:HG | 10 | 0.88 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 18 | 0.87 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 7 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 9 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 6 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 6 | 0.87 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 6 | 0.87 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 6 | 0.87 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 6 | 0.87 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 6 | 0.87 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 13 | 0.87 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 1 | 0.86 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 1 | 0.86 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 11 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 4 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 4 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 4 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 16 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 16 | 0.86 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 16 | 0.86 |
| (1,367) | 1:A:720:TRP:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 1 | 0.86 |
| (1,367) | 1:A:720:TRP:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 1 | 0.86 |
| (1,367) | 1:A:720:TRP:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 1 | 0.86 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 17 | 0.86 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 17 | 0.86 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 17 | 0.86 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD22 | 16 | 0.86 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD21 | 16 | 0.86 |
| (1,279) | 1:A:645:LEU:HA | 1:A:645:LEU:HD23 | 16 | 0.86 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 20 | 0.86 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 20 | 0.85 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 20 | 0.85 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 20 | 0.85 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 20 | 0.85 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 3 | 0.85 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 3 | 0.85 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG2 | 1:A:725:GLU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:725:GLU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 8 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.85 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.85 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 6 | 0.85 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 2 | 0.85 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 15 | 0.85 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 19 | 0.85 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 19 | 0.85 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 19 | 0.85 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 5 | 0.85 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 5 | 0.85 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 5 | 0.85 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 1 | 0.85 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 1 | 0.85 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 1 | 0.85 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 0.85 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 0.85 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 3 | 0.85 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 1 | 0.85 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 1 | 0.85 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 1 | 0.85 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB3 | 4 | 0.85 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB3 | 4 | 0.85 |
| (1,282) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB3 | 4 | 0.85 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 9 | 0.85 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 6 | 0.84 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 6 | 0.84 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 6 | 0.84 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 6 | 0.84 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 16 | 0.84 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 16 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 9 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 9 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 9 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 15 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 15 | 0.84 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 15 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 3 | 0.84 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 8 | 0.84 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 12 | 0.84 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 19 | 0.84 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 15 | 0.84 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 15 | 0.84 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 15 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 14 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 14 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 14 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 14 | 0.83 |
| (1,972) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:715:LYS:HD2 | 5 | 0.83 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 4 | 0.83 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 18 | 0.83 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 7 | 0.83 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.83 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.83 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.83 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 13 | 0.83 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 18 | 0.82 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 18 | 0.82 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 18 | 0.82 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.82 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.82 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.82 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 4 | 0.82 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 4 | 0.82 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG21 | 12 | 0.82 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG22 | 12 | 0.82 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG23 | 12 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 3 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 3 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 3 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 4 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 4 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 4 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 11 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 11 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 11 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 12 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 12 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 12 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 13 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 13 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 13 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 12 | 0.82 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 12 | 0.82 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 12 | 0.82 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 13 | 0.82 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 20 | 0.81 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 20 | 0.81 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 16 | 0.81 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.81 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.81 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 14 | 0.81 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 20 | 0.81 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 20 | 0.81 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 20 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 1 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 1 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 1 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 8 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 8 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 8 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 14 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 14 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 14 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 16 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 16 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 16 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.81 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 6 | 0.81 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 1 | 0.8 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 1 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 10 | 0.8 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 10 | 0.8 |
| (1,615) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:645:LEU:H | 14 | 0.8 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG21 | 16 | 0.8 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG22 | 16 | 0.8 |
| (1,292) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:694:THR:HG23 | 16 | 0.8 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 20 | 0.8 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 20 | 0.8 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 20 | 0.8 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 19 | 0.8 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 19 | 0.8 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 19 | 0.8 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB2 | 18 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 9 | 0.8 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 9 | 0.8 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 1 | 0.79 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 1 | 0.79 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 9 | 0.79 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 9 | 0.79 |
| (1,972) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:715:LYS:HD2 | 8 | 0.79 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 18 | 0.79 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 15 | 0.79 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 17 | 0.79 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 20 | 0.79 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 2 | 0.79 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 2 | 0.79 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 2 | 0.79 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 9 | 0.79 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 9 | 0.79 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 9 | 0.79 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD22 | 1:A:692:LEU:HB2 | 2 | 0.79 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD21 | 1:A:692:LEU:HB2 | 2 | 0.79 |
| (1,290) | 1:A:692:LEU:HD23 | 1:A:692:LEU:HB2 | 2 | 0.79 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 18 | 0.79 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 20 | 0.78 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 20 | 0.78 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 18 | 0.78 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 7 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 1 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 4 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 6 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 7 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 11 | 0.78 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 19 | 0.78 |
| (1,788) | 1:A:671:GLU:H | 1:A:670:ARG:HB2 | 1 | 0.78 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 9 | 0.78 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 18 | 0.78 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 13 | 0.78 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 2 | 0.78 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 2 | 0.78 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 2 | 0.78 |
| (1,1160) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:686:PRO:HB2 | 12 | 0.78 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 8 | 0.77 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 8 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 19 | 0.77 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 19 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 17 | 0.77 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 17 | 0.77 |
| (2,2) | 1:A:691:ASP:HB2 | 1:A:695:GLN:HG2 | 12 | 0.77 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 6 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 2 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 3 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 5 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 9 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 13 | 0.77 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 12 | 0.77 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 19 | 0.77 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 1 | 0.77 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 6 | 0.77 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 17 | 0.77 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 4 | 0.77 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 4 | 0.77 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 4 | 0.77 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 2 | 0.77 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 18 | 0.76 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 8 | 0.76 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 16 | 0.76 |
| (1,887) | 1:A:701:MET:H | 1:A:701:MET:HB2 | 18 | 0.76 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 9 | 0.76 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 9 | 0.76 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 9 | 0.76 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 4 | 0.76 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 4 | 0.76 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 4 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 9 | 0.76 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 9 | 0.76 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 9 | 0.76 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG2 | 1:A:725:GLU:HB2 | 2 | 0.75 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:725:GLU:HB2 | 2 | 0.75 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 9 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB2 | 12 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB1 | 12 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB3 | 12 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 5 | 0.75 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 18 | 0.75 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 8 | 0.74 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 8 | 0.74 |
| (3,169) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:715:LYS:HD3 | 14 | 0.74 |
| (3,169) | 1:A:715:LYS:HD3 | 1:A:719:ALA:HA | 14 | 0.74 |
| (2,3) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:724:GLU:HG2 | 1 | 0.74 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 5 | 0.74 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 15 | 0.74 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 1 | 0.74 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 1 | 0.74 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 1 | 0.74 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 6 | 0.74 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:633:ASP:HB2 | 6 | 0.74 |
| (1,527) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:633:ASP:HB2 | 6 | 0.74 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 8 | 0.74 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 15 | 0.74 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 19 | 0.73 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 19 | 0.73 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 19 | 0.73 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 5 | 0.73 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 5 | 0.73 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 1 | 0.73 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 10 | 0.73 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 17 | 0.73 |
| (1,727) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:723:MET:H | 17 | 0.73 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 15 | 0.73 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 15 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 15 | 0.73 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 20 | 0.73 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 20 | 0.73 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 20 | 0.73 |
| (1,254) | 1:A:682:LEU:HD12 | 1:A:682:LEU:HA | 14 | 0.73 |
| (1,254) | 1:A:682:LEU:HD11 | 1:A:682:LEU:HA | 14 | 0.73 |
| (1,254) | 1:A:682:LEU:HD13 | 1:A:682:LEU:HA | 14 | 0.73 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 9 | 0.72 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 10 | 0.72 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 17 | 0.72 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 2 | 0.72 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 10 | 0.72 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 4 | 0.72 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.72 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.72 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.72 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 10 | 0.72 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 8 | 0.71 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 8 | 0.71 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 8 | 0.71 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HD2 | 8 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.71 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.71 |
| (2,7) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 4 | 0.71 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 12 | 0.71 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 14 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 16 | 0.71 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 12 | 0.71 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 16 | 0.71 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 7 | 0.71 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 8 | 0.71 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 13 | 0.71 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 13 | 0.71 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 13 | 0.71 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE2 | 16 | 0.71 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE1 | 16 | 0.71 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE3 | 16 | 0.71 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB2 | 6 | 0.71 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB1 | 6 | 0.71 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB3 | 6 | 0.71 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG21 | 6 | 0.71 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG22 | 6 | 0.71 |
| (1,291) | 1:A:676:PHE:HD2 | 1:A:677:THR:HG23 | 6 | 0.71 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 6 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 6 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 4 | 0.7 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 4 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 16 | 0.7 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 4 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.7 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 15 | 0.7 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 20 | 0.7 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 6 | 0.7 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 15 | 0.7 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 9 | 0.7 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 9 | 0.7 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 9 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE2 | 12 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE1 | 12 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:659:MET:HG2 | 1:A:659:MET:HE3 | 12 | 0.7 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HB2 | 12 | 0.7 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HB2 | 12 | 0.7 |
| (1,419) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HB2 | 12 | 0.7 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 8 | 0.7 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 8 | 0.7 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 8 | 0.7 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 5 | 0.69 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 5 | 0.69 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 19 | 0.69 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 19 | 0.69 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 7 | 0.69 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 20 | 0.69 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 17 | 0.69 |
| (1,704) | 1:A:684:LYS:H | 1:A:684:LYS:HG2 | 3 | 0.69 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 7 | 0.69 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 13 | 0.69 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 13 | 0.69 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 13 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 14 | 0.68 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 14 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 11 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 11 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 11 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 11 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 11 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 11 | 0.68 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 1 | 0.68 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 6 | 0.68 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 19 | 0.68 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 6 | 0.68 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 20 | 0.68 |
| (1,798) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HA | 17 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.68 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD22 | 6 | 0.68 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD21 | 6 | 0.68 |
| (1,248) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:668:LEU:HD23 | 6 | 0.68 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 13 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 14 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 14 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 14 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 14 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 14 | 0.67 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 14 | 0.67 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 2 | 0.67 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 2 | 0.67 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 16 | 0.67 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 16 | 0.67 |
| (1,979) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 8 | 0.67 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 17 | 0.67 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 13 | 0.67 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 15 | 0.67 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 13 | 0.67 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 10 | 0.67 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 10 | 0.67 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 10 | 0.67 |
| (1,283) | 1:A:682:LEU:HD22 | 1:A:674:MET:HB2 | 14 | 0.67 |
| (1,283) | 1:A:682:LEU:HD21 | 1:A:674:MET:HB2 | 14 | 0.67 |
| (1,283) | 1:A:682:LEU:HD23 | 1:A:674:MET:HB2 | 14 | 0.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 5 | 0.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 5 | 0.67 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 5 | 0.67 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 5 | 0.67 |
| (1,1235) | 1:A:723:MET:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 5 | 0.67 |
| (1,116) | 1:A:678:GLY:HA2 | 1:A:684:LYS:HD2 | 9 | 0.67 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 0.67 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 0.67 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 0.67 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 5 | 0.66 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 5 | 0.66 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 1 | 0.66 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 5 | 0.66 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 20 | 0.66 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 6 | 0.65 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 6 | 0.65 |
| (2,5) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:H | 20 | 0.65 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 11 | 0.65 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 12 | 0.65 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 9 | 0.65 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 9 | 0.65 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 9 | 0.65 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 16 | 0.65 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 16 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 16 | 0.65 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 5 | 0.65 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 5 | 0.65 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 5 | 0.65 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 7 | 0.65 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 12 | 0.64 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 12 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 8 | 0.64 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 14 | 0.64 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 16 | 0.64 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 18 | 0.64 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 2 | 0.64 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:636:GLU:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:636:GLU:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,515) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:636:GLU:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 11 | 0.64 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 11 | 0.64 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 11 | 0.64 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 7 | 0.63 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE2 | 5 | 0.63 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE1 | 5 | 0.63 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE3 | 5 | 0.63 |
| (1,972) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:715:LYS:HD2 | 11 | 0.63 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 19 | 0.63 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 9 | 0.63 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 8 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 7 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 7 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 7 | 0.63 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 17 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 17 | 0.63 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 17 | 0.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 9 | 0.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 9 | 0.63 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 9 | 0.63 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 1 | 0.63 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 1 | 0.63 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 1 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 14 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 14 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 14 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 17 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 17 | 0.63 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 17 | 0.63 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 17 | 0.62 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 14 | 0.62 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 14 | 0.62 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 14 | 0.62 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 13 | 0.62 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 5 | 0.62 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 19 | 0.62 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 19 | 0.62 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 19 | 0.62 |
| (1,576) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 14 | 0.62 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 11 | 0.62 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 11 | 0.62 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 11 | 0.62 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 10 | 0.61 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 10 | 0.61 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 10 | 0.61 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 10 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 6 | 0.61 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 6 | 0.61 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 10 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 16 | 0.61 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 1 | 0.61 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 1 | 0.61 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 1 | 0.61 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 11 | 0.61 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 11 | 0.61 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 11 | 0.61 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 5 | 0.61 |
| (1,14) | 1:A:628:PRO:HA | 1:A:631:CYS:HB2 | 1 | 0.61 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 8 | 0.6 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG21 | 6 | 0.6 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG22 | 6 | 0.6 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG23 | 6 | 0.6 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 14 | 0.6 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 6 | 0.6 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 6 | 0.6 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 6 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 15 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 15 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 15 | 0.6 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 13 | 0.6 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 13 | 0.6 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 13 | 0.6 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 1 | 0.6 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 1 | 0.6 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 1 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 1 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 1 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 1 | 0.6 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 18 | 0.6 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.59 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.59 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 6 | 0.59 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 15 | 0.59 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 3 | 0.59 |
| (1,819) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:HA | 18 | 0.59 |
| (1,770) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:654:GLY:HA3 | 1 | 0.59 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 8 | 0.59 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD12 | 17 | 0.59 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD11 | 17 | 0.59 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD13 | 17 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 12 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 17 | 0.59 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 17 | 0.59 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 17 | 0.59 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:632:GLN:HB2 | 2 | 0.59 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:632:GLN:HB2 | 2 | 0.59 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:632:GLN:HB2 | 2 | 0.59 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 19 | 0.59 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 19 | 0.59 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 19 | 0.59 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 8 | 0.59 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 8 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 8 | 0.58 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 8 | 0.58 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 18 | 0.58 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 18 | 0.58 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 18 | 0.58 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 18 | 0.58 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 2 | 0.58 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 2 | 0.58 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 1 | 0.58 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 7 | 0.58 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:723:MET:H | 15 | 0.58 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 11 | 0.58 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 12 | 0.58 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD12 | 6 | 0.58 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD11 | 6 | 0.58 |
| (1,64) | 1:A:668:LEU:HA | 1:A:668:LEU:HD13 | 6 | 0.58 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 13 | 0.58 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 13 | 0.58 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 13 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 16 | 0.58 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 16 | 0.58 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 8 | 0.58 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 8 | 0.58 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 8 | 0.58 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 9 | 0.58 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 9 | 0.58 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 9 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 20 | 0.58 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 3 | 0.57 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 17 | 0.57 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 17 | 0.57 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 17 | 0.57 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.57 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.57 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 10 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 15 | 0.57 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 3 | 0.57 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 3 | 0.56 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 3 | 0.56 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 3 | 0.56 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 3 | 0.56 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 3 | 0.56 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 3 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 0.56 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 0.56 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 0.56 |
| (2,7) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 10 | 0.56 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 6 | 0.56 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 17 | 0.56 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 12 | 0.56 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 1 | 0.56 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 1 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 1 | 0.56 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 19 | 0.56 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 19 | 0.56 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 19 | 0.56 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 12 | 0.56 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 12 | 0.56 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 12 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:627:SER:HA | 4 | 0.56 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG21 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 0.56 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG22 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 0.56 |
| (1,301) | 1:A:643:THR:HG23 | 1:A:646:GLU:HG2 | 6 | 0.56 |
| (1,1190) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:722:GLN:HE22 | 6 | 0.56 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 14 | 0.56 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 14 | 0.56 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 14 | 0.56 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 5 | 0.56 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 5 | 0.56 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 5 | 0.56 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 7 | 0.55 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 7 | 0.55 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 7 | 0.55 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.55 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.55 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 7 | 0.55 |
| (1,893) | 1:A:659:MET:H | 1:A:657:ASP:HA | 12 | 0.55 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 6 | 0.55 |
| (1,852) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:635:LEU:HB2 | 9 | 0.55 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 7 | 0.55 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 1 | 0.55 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 19 | 0.55 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 12 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 5 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 5 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 5 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 16 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 16 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 16 | 0.55 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE2 | 4 | 0.55 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE1 | 4 | 0.55 |
| (1,347) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:659:MET:HE3 | 4 | 0.55 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 15 | 0.55 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 8 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 8 | 0.54 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 8 | 0.54 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 8 | 0.54 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 8 | 0.54 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 8 | 0.54 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 14 | 0.54 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 14 | 0.54 |
| (3,27) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HG2 | 14 | 0.54 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 7 | 0.54 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 7 | 0.54 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 10 | 0.54 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 2 | 0.54 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 14 | 0.54 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 17 | 0.54 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 19 | 0.54 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.54 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.54 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 3 | 0.54 |
| (1,116) | 1:A:678:GLY:HA2 | 1:A:684:LYS:HD2 | 14 | 0.54 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 1 | 0.54 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 4 | 0.54 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 16 | 0.54 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 17 | 0.54 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 19 | 0.54 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 11 | 0.53 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 11 | 0.53 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 11 | 0.53 |
| (3,27) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 11 | 0.53 |
| (3,27) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HG2 | 11 | 0.53 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 5 | 0.53 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 5 | 0.53 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 5 | 0.53 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 9 | 0.53 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 17 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 3 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 9 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 11 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 19 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 18 | 0.53 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 3 | 0.53 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 6 | 0.53 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 13 | 0.53 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 13 | 0.53 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 13 | 0.53 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,335) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 11 | 0.53 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 11 | 0.53 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 11 | 0.53 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 12 | 0.53 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 13 | 0.53 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 12 | 0.52 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 12 | 0.52 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 9 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 10 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 12 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 14 | 0.52 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 17 | 0.52 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 7 | 0.52 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 13 | 0.52 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 16 | 0.52 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 16 | 0.52 |
| (1,503) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 16 | 0.52 |
| (1,468) | 1:A:663:PRO:HD3 | 1:A:659:MET:HA | 15 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:638:LEU:HA | 1:A:638:LEU:HD12 | 12 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:638:LEU:HA | 1:A:638:LEU:HD11 | 12 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:638:LEU:HA | 1:A:638:LEU:HD13 | 12 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 7 | 0.52 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 17 | 0.52 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 5 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 10 | 0.52 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 10 | 0.51 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 10 | 0.51 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 11 | 0.51 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 15 | 0.51 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 3 | 0.51 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 14 | 0.51 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 20 | 0.51 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 1 | 0.51 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 17 | 0.51 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 7 | 0.51 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 7 | 0.51 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 7 | 0.51 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 9 | 0.51 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 11 | 0.51 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 14 | 0.51 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 3 | 0.5 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 3 | 0.5 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 1 | 0.5 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 20 | 0.5 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 2 | 0.5 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 4 | 0.5 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 18 | 0.5 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 3 | 0.5 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 8 | 0.5 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 15 | 0.5 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 20 | 0.5 |
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 6 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 9 | 0.5 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 7 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 19 | 0.5 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 19 | 0.5 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 17 | 0.5 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 17 | 0.5 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 17 | 0.5 |
| (1,1229) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HA | 1 | 0.5 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 5 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 11 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 11 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 11 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.49 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 11 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,928) | 1:A:627:SER:H | 1:A:626:MET:HA | 10 | 0.49 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 5 | 0.49 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 14 | 0.49 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 9 | 0.49 |
| (1,742) | 1:A:708:LEU:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 8 | 0.49 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 8 | 0.49 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 13 | 0.49 |
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 4 | 0.49 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 11 | 0.49 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 17 | 0.49 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 13 | 0.49 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 8 | 0.49 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 8 | 0.49 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 8 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 7 | 0.49 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 9 | 0.49 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 15 | 0.49 |
| (1,1086) | 1:A:629:ASP:H | 1:A:628:PRO:HD2 | 19 | 0.49 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 6 | 0.49 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 8 | 0.49 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:646:GLU:HB2 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE2 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE1 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:647:MET:HE3 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE2 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE1 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:701:MET:HE3 | 18 | 0.48 |
| (3,178) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:714:GLN:HB3 | 18 | 0.48 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:701:MET:HA | 8 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:702:GLU:HA | 8 | 0.48 |
| (3,166) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:704:MET:HA | 8 | 0.48 |
| (1,746) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:655:GLU:HA | 15 | 0.48 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 4 | 0.48 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 4 | 0.48 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 11 | 0.48 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 2 | 0.48 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 2 | 0.48 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 2 | 0.48 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 8 | 0.48 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 16 | 0.48 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 18 | 0.48 |
| (1,222) | 1:A:636:GLU:HB2 | 1:A:636:GLU:HG2 | 19 | 0.48 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 3 | 0.48 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 3 | 0.48 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 3 | 0.48 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 9 | 0.48 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 9 | 0.48 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 9 | 0.48 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 3 | 0.47 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 3 | 0.47 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 13 | 0.47 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 13 | 0.47 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE2 | 12 | 0.47 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE1 | 12 | 0.47 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE3 | 12 | 0.47 |
| (1,777) | 1:A:633:ASP:H | 1:A:633:ASP:HB2 | 17 | 0.47 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 1 | 0.47 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 2 | 0.47 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 5 | 0.47 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,645) | 1:A:683:GLU:H | 1:A:683:GLU:HB3 | 19 | 0.47 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 12 | 0.47 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 12 | 0.47 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 12 | 0.47 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 3 | 0.47 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 3 | 0.47 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 3 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,147) | 1:A:684:LYS:HE2 | 1:A:677:THR:HA | 20 | 0.47 |
| (1,147) | 1:A:684:LYS:HE3 | 1:A:677:THR:HA | 20 | 0.47 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 10 | 0.47 |
| (1,1043) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:666:MET:HB3 | 9 | 0.47 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 15 | 0.46 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 15 | 0.46 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 17 | 0.46 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,452) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:647:MET:HA | 20 | 0.46 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB2 | 16 | 0.46 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB1 | 16 | 0.46 |
| (1,323) | 1:A:713:TYR:HD2 | 1:A:716:ALA:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:685:ASP:HB2 | 4 | 0.46 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:685:ASP:HB2 | 4 | 0.46 |
| (1,281) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:685:ASP:HB2 | 4 | 0.46 |
| (1,1229) | 1:A:654:GLY:H | 1:A:651:ASP:HA | 20 | 0.46 |
| (2,7) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 2 | 0.45 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 16 | 0.45 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 18 | 0.45 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 9 | 0.45 |
| (1,826) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:667:MET:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 4 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 4 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 4 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 11 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 11 | 0.45 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 11 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 17 | 0.45 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 17 | 0.45 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 17 | 0.45 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.45 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.45 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.45 |
| (1,238) | 1:A:670:ARG:HG3 | 1:A:670:ARG:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 2 | 0.45 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.45 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.45 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.45 |
| (1,1169) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:626:MET:HB3 | 4 | 0.45 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 4 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 4 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 19 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 19 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 19 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 19 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 19 | 0.44 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 19 | 0.44 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 6 | 0.44 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 12 | 0.44 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 17 | 0.44 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 18 | 0.44 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 4 | 0.44 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 3 | 0.44 |
| (1,620) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:643:THR:H | 11 | 0.44 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 10 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 16 | 0.44 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 16 | 0.44 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 16 | 0.44 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:671:GLU:HA | 1 | 0.44 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:671:GLU:HA | 1 | 0.44 |
| (1,355) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:671:GLU:HA | 1 | 0.44 |
| (1,267) | 1:A:715:LYS:HG2 | 1:A:712:TYR:HB2 | 17 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 1 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 1 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 1 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 19 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 19 | 0.44 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 19 | 0.44 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 17 | 0.43 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 17 | 0.43 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 19 | 0.43 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 10 | 0.43 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 1 | 0.43 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 11 | 0.43 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 11 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 11 | 0.43 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 20 | 0.43 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 20 | 0.43 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 20 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 15 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 15 | 0.43 |
| (1,261) | 1:A:638:LEU:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 15 | 0.43 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 6 | 0.43 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 14 | 0.43 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG2 | 1:A:725:GLU:HB2 | 5 | 0.42 |
| (3,137) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:725:GLU:HB2 | 5 | 0.42 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE2 | 15 | 0.42 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE1 | 15 | 0.42 |
| (1,987) | 1:A:648:THR:H | 1:A:647:MET:HE3 | 15 | 0.42 |
| (1,969) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:722:GLN:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 20 | 0.42 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.42 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 2 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 1 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 9 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 14 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 17 | 0.42 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 4 | 0.42 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 4 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 4 | 0.42 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 12 | 0.42 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 12 | 0.42 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 12 | 0.42 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 5 | 0.42 |
| (1,1045) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,99) | 1:A:663:PRO:HB3 | 1:A:708:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (3,99) | 1:A:663:PRO:HB3 | 1:A:708:LEU:HG | 6 | 0.41 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 6 | 0.41 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 18 | 0.41 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 20 | 0.41 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 20 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 20 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 20 | 0.41 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 17 | 0.41 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 18 | 0.41 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 5 | 0.4 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 5 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 5 | 0.4 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 5 | 0.4 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 5 | 0.4 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 5 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,868) | 1:A:688:ARG:H | 1:A:687:GLN:HB2 | 2 | 0.4 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 19 | 0.4 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.4 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 7 | 0.4 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 18 | 0.4 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 5 | 0.4 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 11 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 14 | 0.4 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:713:TYR:HE2 | 12 | 0.4 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:713:TYR:HE2 | 12 | 0.4 |
| (1,496) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:713:TYR:HE2 | 12 | 0.4 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 4 | 0.4 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 4 | 0.4 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 14 | 0.4 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 17 | 0.4 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 18 | 0.4 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,969) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:722:GLN:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,969) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:722:GLN:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,933) | 1:A:629:ASP:H | 1:A:628:PRO:HA | 17 | 0.39 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,865) | 1:A:666:MET:H | 1:A:666:MET:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 12 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 12 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 12 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 19 | 0.39 |
| (1,452) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:647:MET:HA | 9 | 0.39 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.39 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.39 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 15 | 0.38 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 15 | 0.38 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 15 | 0.38 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 15 | 0.38 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 15 | 0.38 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 15 | 0.38 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 15 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 12 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 12 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 12 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 12 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 12 | 0.38 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 12 | 0.38 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 2 | 0.38 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 10 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,852) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:635:LEU:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 19 | 0.38 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 9 | 0.38 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 9 | 0.38 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 9 | 0.38 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 3 | 0.38 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 2 | 0.38 |
| (1,312) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,312) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 10 | 0.38 |
| (1,312) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1012) | 1:A:704:MET:H | 1:A:704:MET:HG2 | 4 | 0.38 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 8 | 0.38 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 20 | 0.37 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 20 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 17 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 17 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 17 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 17 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 4 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 4 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 4 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 4 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 9 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 9 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 9 | 0.37 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 9 | 0.37 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 6 | 0.37 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 6 | 0.37 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 8 | 0.37 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 13 | 0.37 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 19 | 0.37 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 15 | 0.37 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 8 | 0.37 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,443) | 1:A:702:GLU:HB2 | 1:A:699:ALA:HA | 8 | 0.37 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 17 | 0.37 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 17 | 0.37 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 17 | 0.37 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 11 | 0.37 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 3 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 15 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 15 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 15 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.36 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 15 | 0.36 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 13 | 0.36 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 13 | 0.36 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 4 | 0.36 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 4 | 0.36 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 4 | 0.36 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,746) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:655:GLU:HA | 6 | 0.36 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,709) | 1:A:699:ALA:H | 1:A:698:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 9 | 0.36 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE2 | 1:A:663:PRO:HA | 5 | 0.36 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE1 | 1:A:663:PRO:HA | 5 | 0.36 |
| (1,497) | 1:A:666:MET:HE3 | 1:A:663:PRO:HA | 5 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.36 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.36 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 19 | 0.36 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 2 | 0.36 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 2 | 0.36 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 2 | 0.36 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 17 | 0.36 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE2 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE1 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:666:MET:HE3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE2 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE1 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:666:MET:HE3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE2 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE1 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:666:MET:HE3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HG3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HG3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HG3 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:714:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:714:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (3,89) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:714:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 9 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 9 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 9 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 14 | 0.35 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 14 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 8 | 0.35 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 8 | 0.35 |
| (1,955) | 1:A:639:HIS:H | 1:A:639:HIS:HB3 | 8 | 0.35 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 8 | 0.35 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 5 | 0.35 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 5 | 0.35 |
| (1,667) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HG | 10 | 0.35 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 10 | 0.35 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 20 | 0.35 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 1 | 0.35 |
| (1,553) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 20 | 0.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 20 | 0.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 20 | 0.35 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 20 | 0.35 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 3 | 0.35 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 3 | 0.35 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 3 | 0.35 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 19 | 0.35 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 1 | 0.34 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 1 | 0.34 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 1 | 0.34 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 1 | 0.34 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 1 | 0.34 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 1 | 0.34 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 20 | 0.34 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 20 | 0.34 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 20 | 0.34 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 20 | 0.34 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 16 | 0.34 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 16 | 0.34 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 16 | 0.34 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 16 | 0.34 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 8 | 0.34 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 8 | 0.34 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 4 | 0.34 |
| (1,81) | 1:A:659:MET:HA | 1:A:659:MET:HG3 | 2 | 0.34 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 10 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 12 | 0.34 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 2 | 0.34 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 2 | 0.34 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 2 | 0.34 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 15 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.34 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 19 | 0.33 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 19 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:638:LEU:HD12 | 1:A:634:TRP:HB2 | 18 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:638:LEU:HD11 | 1:A:634:TRP:HB2 | 18 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:638:LEU:HD13 | 1:A:634:TRP:HB2 | 18 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:634:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 18 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:634:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 18 | 0.33 |
| (3,131) | 1:A:634:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 18 | 0.33 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 15 | 0.33 |
| (1,81) | 1:A:659:MET:HA | 1:A:659:MET:HG3 | 5 | 0.33 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 20 | 0.33 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 5 | 0.33 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 4 | 0.33 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 4 | 0.33 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 4 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.33 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,480) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:627:SER:HA | 2 | 0.33 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 20 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD22 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD21 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD23 | 12 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD22 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD21 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD23 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD22 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD21 | 12 | 0.33 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD23 | 12 | 0.33 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 17 | 0.33 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 17 | 0.33 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 17 | 0.33 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 6 | 0.33 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 6 | 0.33 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 6 | 0.33 |
| (1,211) | 1:A:688:ARG:HB2 | 1:A:691:ASP:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,1190) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:722:GLN:HE22 | 20 | 0.33 |
| (1,1126) | 1:A:712:TYR:H | 1:A:711:GLN:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 6 | 0.33 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 2 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:665:TYR:HB3 | 9 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:665:TYR:HB3 | 9 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:665:TYR:HB3 | 9 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.32 |
| (3,80) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.32 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 16 | 0.32 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 16 | 0.32 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 2 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 2 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 12 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 12 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 20 | 0.32 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 20 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 16 | 0.32 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 15 | 0.32 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 15 | 0.32 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 15 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 0.32 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 0.32 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HA | 4 | 0.32 |
| (1,1045) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 2 | 0.32 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 8 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 8 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 8 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 8 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 13 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 13 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 13 | 0.31 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 13 | 0.31 |
| (3,289) | 1:A:645:LEU:H | 1:A:645:LEU:HB3 | 16 | 0.31 |
| (3,289) | 1:A:645:LEU:H | 1:A:645:LEU:HG | 16 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 14 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 14 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 14 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 14 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 14 | 0.31 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 14 | 0.31 |
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 7 | 0.31 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 1 | 0.31 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 2 | 0.31 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 18 | 0.31 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 20 | 0.31 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 20 | 0.31 |
| (1,551) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 20 | 0.31 |
| (1,508) | 1:A:625:HIS:HB3 | 1:A:656:TYR:HD2 | 12 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 11 | 0.31 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 11 | 0.31 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 11 | 0.31 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 5 | 0.31 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 15 | 0.3 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 15 | 0.3 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 15 | 0.3 |
| (2,1) | 1:A:656:TYR:HA | 1:A:625:HIS:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 10 | 0.3 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 4 | 0.3 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 20 | 0.3 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 4 | 0.3 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 7 | 0.3 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 1 | 0.3 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 1 | 0.3 |
| (1,617) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.3 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.3 |
| (1,523) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 10 | 0.3 |
| (1,430) | 1:A:708:LEU:HG | 1:A:705:LYS:HB2 | 4 | 0.3 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1190) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:722:GLN:HE22 | 7 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:704:MET:H | 1:A:704:MET:HG2 | 7 | 0.3 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 5 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 5 | 0.29 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 5 | 0.29 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 18 | 0.29 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,933) | 1:A:629:ASP:H | 1:A:628:PRO:HA | 10 | 0.29 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,772) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:655:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,666) | 1:A:692:LEU:H | 1:A:692:LEU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,452) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:647:MET:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 16 | 0.29 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 6 | 0.28 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 6 | 0.28 |
| (3,56) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:719:ALA:HA | 17 | 0.28 |
| (3,56) | 1:A:722:GLN:HG3 | 1:A:725:GLU:HA | 17 | 0.28 |
| (1,972) | 1:A:717:GLU:H | 1:A:715:LYS:HD2 | 16 | 0.28 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 12 | 0.28 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 5 | 0.28 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 8 | 0.28 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD12 | 16 | 0.28 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD11 | 16 | 0.28 |
| (1,604) | 1:A:634:TRP:HE1 | 1:A:635:LEU:HD13 | 16 | 0.28 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HA | 19 | 0.28 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HA | 19 | 0.28 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HA | 19 | 0.28 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HD2 | 20 | 0.28 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HD2 | 20 | 0.28 |
| (1,490) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HD2 | 20 | 0.28 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 13 | 0.28 |
| (1,1005) | 1:A:689:SER:H | 1:A:684:LYS:HA | 14 | 0.28 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 5 | 0.27 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 5 | 0.27 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 5 | 0.27 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 5 | 0.27 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 5 | 0.27 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 5 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 1 | 0.27 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 1 | 0.27 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 1 | 0.27 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 1 | 0.27 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 1 | 0.27 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 1 | 0.27 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 14 | 0.27 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 15 | 0.27 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,754) | 1:A:685:ASP:H | 1:A:675:LEU:HD12 | 4 | 0.27 |
| (1,754) | 1:A:685:ASP:H | 1:A:675:LEU:HD11 | 4 | 0.27 |
| (1,754) | 1:A:685:ASP:H | 1:A:675:LEU:HD13 | 4 | 0.27 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 10 | 0.27 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 10 | 0.27 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 10 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:672:ALA:HA | 15 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:672:ALA:HA | 15 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:672:ALA:HA | 15 | 0.27 |
| (1,215) | 1:A:670:ARG:HD2 | 1:A:670:ARG:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,211) | 1:A:688:ARG:HB2 | 1:A:691:ASP:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB1 | 20 | 0.27 |
| (1,1128) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:644:ALA:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,1046) | 1:A:658:GLY:H | 1:A:657:ASP:HA | 7 | 0.27 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 17 | 0.26 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 9 | 0.26 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 19 | 0.26 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD12 | 14 | 0.26 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD11 | 14 | 0.26 |
| (1,522) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:635:LEU:HD13 | 14 | 0.26 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 14 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 14 | 0.26 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 14 | 0.26 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB1 | 10 | 0.26 |
| (1,469) | 1:A:721:ALA:HA | 1:A:644:ALA:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 1 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 1 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 1 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 5 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 5 | 0.26 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 5 | 0.26 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 3 | 0.26 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.26 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.26 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 13 | 0.26 |
| (1,211) | 1:A:688:ARG:HB2 | 1:A:691:ASP:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 14 | 0.26 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 14 | 0.26 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 14 | 0.26 |
| (1,1046) | 1:A:658:GLY:H | 1:A:657:ASP:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 5 | 0.26 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:633:ASP:HB2 | 14 | 0.25 |
| (3,75) | 1:A:628:PRO:HG2 | 1:A:657:ASP:HB2 | 14 | 0.25 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HB2 | 1 | 0.25 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE2 | 1 | 0.25 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE1 | 1 | 0.25 |
| (3,61) | 1:A:704:MET:HG3 | 1:A:659:MET:HE3 | 1 | 0.25 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 13 | 0.25 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 13 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 19 | 0.25 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 19 | 0.25 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 10 | 0.25 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,746) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:655:GLU:HA | 3 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:655:GLU:HA | 18 | 0.25 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HA | 18 | 0.25 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HA | 18 | 0.25 |
| (1,241) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HA | 18 | 0.25 |
| (1,215) | 1:A:670:ARG:HD2 | 1:A:670:ARG:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 7 | 0.25 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 14 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 14 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 14 | 0.24 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HD2 | 14 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (1,939) | 1:A:723:MET:H | 1:A:723:MET:HG2 | 15 | 0.24 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,748) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:656:TYR:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 18 | 0.24 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 6 | 0.24 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 6 | 0.24 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 6 | 0.24 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.24 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.24 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 20 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB2 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB1 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB2 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB1 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB3 | 12 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB2 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB1 | 12 | 0.24 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD22 | 1:A:671:GLU:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD21 | 1:A:671:GLU:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,243) | 1:A:675:LEU:HD23 | 1:A:671:GLU:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,215) | 1:A:670:ARG:HD2 | 1:A:670:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,215) | 1:A:670:ARG:HD2 | 1:A:670:ARG:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,151) | 1:A:708:LEU:HB3 | 1:A:705:LYS:HB2 | 16 | 0.24 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 6 | 0.23 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 5 | 0.23 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 5 | 0.23 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 5 | 0.23 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 5 | 0.23 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 6 | 0.23 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 6 | 0.23 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 9 | 0.23 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 9 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 3 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 3 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 3 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 2 | 0.23 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 2 | 0.23 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 17 | 0.23 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 17 | 0.23 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 17 | 0.23 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB2 | 5 | 0.23 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB3 | 5 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:666:MET:HB3 | 5 | 0.23 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 10 | 0.23 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 10 | 0.23 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HD2 | 10 | 0.23 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 9 | 0.23 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,727) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:723:MET:H | 3 | 0.23 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 17 | 0.23 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG21 | 14 | 0.23 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG22 | 14 | 0.23 |
| (1,534) | 1:A:641:TYR:HD2 | 1:A:643:THR:HG23 | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE2 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE1 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:659:MET:HE3 | 1:A:705:LYS:HE2 | 9 | 0.23 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 12 | 0.23 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 12 | 0.23 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 12 | 0.23 |
| (1,286) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HG2 | 8 | 0.23 |
| (1,286) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HG2 | 8 | 0.23 |
| (1,286) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HG2 | 8 | 0.23 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 7 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 7 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 7 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 14 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 14 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 14 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:695:GLN:HE21 | 1:A:692:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 3 | 0.23 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HG | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HG | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HG | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG23 | 16 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG23 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG23 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG23 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG23 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG21 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG22 | 16 | 0.22 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG23 | 16 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 20 | 0.22 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 12 | 0.22 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 12 | 0.22 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HB2 | 13 | 0.22 |
| (3,196) | 1:A:634:TRP:HZ2 | 1:A:638:LEU:HG | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 18 | 0.22 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 20 | 0.22 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 10 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 2 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 2 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 2 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 9 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 9 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 9 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 15 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 15 | 0.22 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 15 | 0.22 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,311) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 13 | 0.22 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 13 | 0.22 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 13 | 0.22 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,182) | 1:A:671:GLU:HG3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (1,182) | 1:A:671:GLU:HG3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (1,182) | 1:A:671:GLU:HG3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 2 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 2 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 2 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:708:LEU:HB2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (3,68) | 1:A:718:GLU:HB2 | 1:A:676:PHE:HE2 | 2 | 0.21 |
| (3,68) | 1:A:676:PHE:HZ | 1:A:718:GLU:HB2 | 2 | 0.21 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 13 | 0.21 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 13 | 0.21 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 11 | 0.21 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 11 | 0.21 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 11 | 0.21 |
| (3,188) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:705:LYS:HD2 | 11 | 0.21 |
| (1,933) | 1:A:629:ASP:H | 1:A:628:PRO:HA | 15 | 0.21 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 11 | 0.21 |
| (1,840) | 1:A:718:GLU:H | 1:A:717:GLU:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,823) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 18 | 0.21 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 15 | 0.21 |
| (1,726) | 1:A:672:ALA:H | 1:A:671:GLU:HG3 | 13 | 0.21 |
| (1,698) | 1:A:637:ALA:H | 1:A:636:GLU:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,674) | 1:A:649:ASP:H | 1:A:648:THR:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,674) | 1:A:649:ASP:H | 1:A:648:THR:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,674) | 1:A:649:ASP:H | 1:A:648:THR:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 9 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 13 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 18 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,430) | 1:A:708:LEU:HG | 1:A:705:LYS:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB2 | 1:A:689:SER:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB1 | 1:A:689:SER:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB3 | 1:A:689:SER:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 5 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 5 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 5 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 10 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 10 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 10 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 13 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 13 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 2 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 2 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 2 | 0.21 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,1166) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:H | 11 | 0.21 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HE2 | 7 | 0.2 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HE2 | 7 | 0.2 |
| (3,87) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HE2 | 7 | 0.2 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (3,87) | 1:A:713:TYR:HE2 | 1:A:709:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 7 | 0.2 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 7 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB2 | 12 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:666:MET:HB3 | 12 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG21 | 17 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG22 | 17 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:643:THR:HG23 | 17 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG21 | 17 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG22 | 17 | 0.2 |
| (3,191) | 1:A:641:TYR:HE2 | 1:A:648:THR:HG23 | 17 | 0.2 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 1 | 0.2 |
| (1,656) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:718:GLU:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HA | 5 | 0.2 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HA | 5 | 0.2 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HA | 5 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 12 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 12 | 0.2 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 12 | 0.2 |
| (1,353) | 1:A:704:MET:HE2 | 1:A:704:MET:HA | 14 | 0.2 |
| (1,353) | 1:A:704:MET:HE1 | 1:A:704:MET:HA | 14 | 0.2 |
| (1,353) | 1:A:704:MET:HE3 | 1:A:704:MET:HA | 14 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 3 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 3 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 3 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 8 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 8 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 8 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 14 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 14 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 14 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 17 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 17 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 17 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 18 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 18 | 0.2 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 18 | 0.2 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 2 | 0.2 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 2 | 0.2 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 2 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 0.2 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (3,67) | 1:A:701:MET:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 8 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 8 | 0.19 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 8 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB2 | 1:A:638:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB1 | 1:A:638:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (3,121) | 1:A:709:ALA:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 15 | 0.19 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,845) | 1:A:630:ARG:H | 1:A:631:CYS:H | 13 | 0.19 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,71) | 1:A:655:GLU:HA | 1:A:626:MET:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 17 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 5 | 0.19 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 5 | 0.19 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 5 | 0.19 |
| (1,305) | 1:A:703:ALA:HB2 | 1:A:665:TYR:HD2 | 6 | 0.19 |
| (1,305) | 1:A:703:ALA:HB1 | 1:A:665:TYR:HD2 | 6 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,305) | 1:A:703:ALA:HB3 | 1:A:665:TYR:HD2 | 6 | 0.19 |
| (1,1231) | 1:A:656:TYR:H | 1:A:626:MET:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,1162) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB2 | 17 | 0.19 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,7) | 1:A:631:CYS:HA | 1:A:634:TRP:HB2 | 13 | 0.18 |
| (3,7) | 1:A:631:CYS:HA | 1:A:634:TRP:HB3 | 13 | 0.18 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 13 | 0.18 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 13 | 0.18 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 13 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:699:ALA:HB2 | 1:A:712:TYR:HD2 | 20 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:699:ALA:HB1 | 1:A:712:TYR:HD2 | 20 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:699:ALA:HB3 | 1:A:712:TYR:HD2 | 20 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:699:ALA:HB2 | 20 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:699:ALA:HB1 | 20 | 0.18 |
| (3,122) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:699:ALA:HB3 | 20 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 4 | 0.18 |
| (1,93) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HG2 | 1 | 0.18 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 17 | 0.18 |
| (1,654) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:657:ASP:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 1 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 1 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 1 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 6 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 6 | 0.18 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 6 | 0.18 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 20 | 0.18 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 19 | 0.17 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 19 | 0.17 |
| (3,28) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (3,28) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:724:GLU:HB3 | 20 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD12 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD11 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:695:GLN:HA | 1:A:692:LEU:HD13 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD12 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD11 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:635:LEU:HD13 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD22 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD21 | 1 | 0.17 |
| (3,13) | 1:A:702:GLU:HA | 1:A:638:LEU:HD23 | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 1 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 1 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 20 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 20 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 20 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 20 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 20 | 0.17 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 20 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG21 | 2 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG22 | 2 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG23 | 2 | 0.17 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 19 | 0.17 |
| (1,80) | 1:A:716:ALA:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 12 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,70) | 1:A:722:GLN:HA | 1:A:723:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,673) | 1:A:649:ASP:H | 1:A:649:ASP:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 11 | 0.17 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 17 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,581) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:HA | 15 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:670:ARG:HG3 | 18 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:670:ARG:HG3 | 18 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:670:ARG:HG3 | 18 | 0.17 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB2 | 1:A:689:SER:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB1 | 1:A:689:SER:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB3 | 1:A:689:SER:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,289) | 1:A:671:GLU:HB2 | 1:A:692:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (1,275) | 1:A:708:LEU:HA | 1:A:708:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD22 | 1 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:668:LEU:HB3 | 1:A:692:LEU:HD23 | 1 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:686:PRO:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:644:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:644:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:644:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:668:LEU:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:668:LEU:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:668:LEU:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:692:LEU:HG | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:692:LEU:HG | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:692:LEU:HG | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:700:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:700:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (3,85) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:700:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 7 | 0.16 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 7 | 0.16 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 7 | 0.16 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB2 | 16 | 0.16 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:662:GLU:HB3 | 16 | 0.16 |
| (3,221) | 1:A:664:ARG:H | 1:A:666:MET:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,5) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:H | 4 | 0.16 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 7 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,898) | 1:A:659:MET:H | 1:A:659:MET:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 16 | 0.16 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,729) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:724:GLU:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 6 | 0.16 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 6 | 0.16 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 6 | 0.16 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 2 | 0.16 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 2 | 0.16 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 2 | 0.16 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 15 | 0.16 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 15 | 0.16 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 15 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:632:GLN:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:632:GLN:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:632:GLN:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,302) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,302) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,302) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:703:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:686:PRO:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,1046) | 1:A:658:GLY:H | 1:A:657:ASP:HA | 16 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1027) | 1:A:678:GLY:H | 1:A:679:GLY:HA2 | 4 | 0.16 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 6 | 0.15 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 6 | 0.15 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 9 | 0.15 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 9 | 0.15 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 15 | 0.15 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 15 | 0.15 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HB2 | 7 | 0.15 |
| (3,306) | 1:A:659:MET:H | 1:A:704:MET:HG3 | 7 | 0.15 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 5 | 0.15 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 5 | 0.15 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 5 | 0.15 |
| (3,270) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:661:ASP:HB3 | 5 | 0.15 |
| (3,270) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:704:MET:HB2 | 5 | 0.15 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 10 | 0.15 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,939) | 1:A:723:MET:H | 1:A:723:MET:HG2 | 3 | 0.15 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,834) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:710:ASN:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HG2 | 18 | 0.15 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 3 | 0.15 |
| (1,734) | 1:A:634:TRP:H | 1:A:633:ASP:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:693:TYR:H | 1:A:693:TYR:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,571) | 1:A:712:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,571) | 1:A:712:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,571) | 1:A:712:TYR:HD2 | 1:A:708:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HA | 13 | 0.15 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HA | 13 | 0.15 |
| (1,528) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HA | 13 | 0.15 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 3 | 0.15 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 3 | 0.15 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 3 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 3 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 3 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 3 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 7 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 13 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 13 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 13 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:667:MET:HG2 | 14 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:667:MET:HG2 | 14 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:667:MET:HG2 | 14 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 14 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 14 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 14 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE2 | 1:A:682:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE1 | 1:A:682:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,360) | 1:A:674:MET:HE3 | 1:A:682:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB2 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB1 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB3 | 1:A:689:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB2 | 1:A:715:LYS:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB1 | 1:A:715:LYS:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,333) | 1:A:716:ALA:HB3 | 1:A:715:LYS:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 8 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 15 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 20 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:642:ASN:H | 1:A:640:TRP:HA | 12 | 0.15 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:635:LEU:HG | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:635:LEU:HG | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:635:LEU:HG | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:643:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:643:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:643:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:648:THR:HG23 | 18 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:648:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (3,92) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:648:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 5 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 17 | 0.14 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 17 | 0.14 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 17 | 0.14 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 17 | 0.14 |
| (3,3) | 1:A:689:SER:HB2 | 1:A:675:LEU:HA | 14 | 0.14 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:665:TYR:HA | 14 | 0.14 |
| (3,3) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:713:TYR:HA | 14 | 0.14 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB2 | 2 | 0.14 |
| (3,129) | 1:A:631:CYS:HB2 | 1:A:634:TRP:HB3 | 2 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:637:ALA:HA | 3 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:637:ALA:HA | 3 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:637:ALA:HA | 3 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:638:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:638:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (3,124) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:638:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (1,990) | 1:A:687:GLN:HE21 | 1:A:720:TRP:HZ2 | 17 | 0.14 |
| (1,895) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:HA2 | 8 | 0.14 |
| (1,895) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:HA2 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,895) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:HA2 | 13 | 0.14 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,798) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HA | 7 | 0.14 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,727) | 1:A:724:GLU:H | 1:A:723:MET:H | 2 | 0.14 |
| (1,701) | 1:A:652:GLU:H | 1:A:652:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,608) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:725:GLU:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 3 | 0.14 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 8 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 8 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 8 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD22 | 1:A:632:GLN:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD21 | 1:A:632:GLN:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:635:LEU:HD23 | 1:A:632:GLN:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG21 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG22 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG23 | 1:A:673:GLU:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG21 | 1:A:673:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG22 | 1:A:673:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (1,300) | 1:A:677:THR:HG23 | 1:A:673:GLU:HG3 | 5 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG21 | 1:A:716:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG22 | 1:A:716:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:694:THR:HG23 | 1:A:716:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD22 | 1:A:664:ARG:HD2 | 20 | 0.14 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD21 | 1:A:664:ARG:HD2 | 20 | 0.14 |
| (1,251) | 1:A:668:LEU:HD23 | 1:A:664:ARG:HD2 | 20 | 0.14 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 5 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 5 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 5 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 8 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 8 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 8 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:656:TYR:H | 20 | 0.14 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG2 | 14 | 0.13 |
| (3,57) | 1:A:630:ARG:HA | 1:A:632:GLN:HG3 | 14 | 0.13 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:634:TRP:H | 8 | 0.13 |
| (3,372) | 1:A:636:GLU:H | 1:A:639:HIS:H | 8 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 10 | 0.13 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,892) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:H | 5 | 0.13 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:646:GLU:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 16 | 0.13 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 19 | 0.13 |
| (1,649) | 1:A:651:ASP:H | 1:A:650:CYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,549) | 1:A:680:TYR:HE2 | 1:A:680:TYR:HA | 3 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB2 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 18 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB1 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 18 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:637:ALA:HB3 | 1:A:634:TRP:HZ3 | 18 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:669:ALA:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:669:ALA:HB1 | 4 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:669:ALA:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB2 | 1:A:698:GLU:HA | 4 | 0.13 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB1 | 1:A:698:GLU:HA | 4 | 0.13 |
| (1,341) | 1:A:697:ALA:HB3 | 1:A:698:GLU:HA | 4 | 0.13 |
| (1,28) | 1:A:648:THR:HA | 1:A:648:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,28) | 1:A:648:THR:HA | 1:A:648:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,28) | 1:A:648:THR:HA | 1:A:648:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,246) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:645:LEU:HB2 | 1:A:645:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,1154) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:711:GLN:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,1045) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1027) | 1:A:678:GLY:H | 1:A:679:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:667:MET:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:667:MET:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:667:MET:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:671:GLU:HG3 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:671:GLU:HG3 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:671:GLU:HG3 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB2 | 1:A:711:GLN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB1 | 1:A:711:GLN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,91) | 1:A:669:ALA:HB3 | 1:A:711:GLN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,72) | 1:A:637:ALA:HA | 1:A:640:TRP:HB3 | 19 | 0.12 |
| (3,72) | 1:A:640:TRP:HB3 | 1:A:638:LEU:HA | 19 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 1 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 1 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 2 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 2 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 3 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 3 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 4 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 4 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 5 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 5 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 7 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 7 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 8 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 8 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 9 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 9 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 10 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 10 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 11 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 11 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 12 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 12 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 13 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 14 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 14 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 15 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 15 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 16 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 16 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 17 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 18 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 18 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 20 | 0.12 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 20 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD22 | 8 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD21 | 8 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD23 | 8 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (3,52) | 1:A:710:ASN:HB3 | 1:A:638:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (3,283) | 1:A:668:LEU:H | 1:A:668:LEU:HG | 18 | 0.12 |
| (3,283) | 1:A:676:PHE:H | 1:A:675:LEU:HB3 | 18 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:663:PRO:HB3 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:665:TYR:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (3,104) | 1:A:673:GLU:HA | 1:A:692:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:648:THR:H | 1:A:648:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,904) | 1:A:709:ALA:H | 1:A:708:LEU:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,895) | 1:A:659:MET:H | 1:A:658:GLY:HA2 | 7 | 0.12 |
| (1,859) | 1:A:703:ALA:H | 1:A:702:GLU:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,837) | 1:A:646:GLU:H | 1:A:645:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,821) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:660:GLN:HG2 | 20 | 0.12 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,74) | 1:A:709:ALA:HA | 1:A:713:TYR:HA | 11 | 0.12 |
| (1,660) | 1:A:662:GLU:H | 1:A:661:ASP:HA | 18 | 0.12 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,605) | 1:A:725:GLU:H | 1:A:724:GLU:HA | 9 | 0.12 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |
| (1,495) | 1:A:710:ASN:H | 1:A:637:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:698:GLU:HG3 | 1:A:701:MET:HE3 | 4 | 0.12 |
| (1,480) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:627:SER:HA | 9 | 0.12 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD12 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD11 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,421) | 1:A:708:LEU:HD13 | 1:A:711:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD12 | 1:A:688:ARG:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD11 | 1:A:688:ARG:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,414) | 1:A:675:LEU:HD13 | 1:A:688:ARG:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,394) | 1:A:692:LEU:HD12 | 1:A:671:GLU:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,394) | 1:A:692:LEU:HD11 | 1:A:671:GLU:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,394) | 1:A:692:LEU:HD13 | 1:A:671:GLU:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:686:PRO:HG2 | 1:A:723:MET:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB2 | 1:A:689:SER:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB1 | 1:A:689:SER:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,354) | 1:A:719:ALA:HB3 | 1:A:689:SER:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,322) | 1:A:665:TYR:HD2 | 1:A:699:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:711:GLN:HG2 | 1:A:707:ARG:HG2 | 16 | 0.12 |
| (1,121) | 1:A:630:ARG:HD2 | 1:A:630:ARG:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,1190) | 1:A:719:ALA:H | 1:A:722:GLN:HE22 | 14 | 0.12 |
| (1,1160) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:686:PRO:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1154) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:711:GLN:HG3 | 5 | 0.12 |
| (1,1032) | 1:A:653:GLY:H | 1:A:653:GLY:HA2 | 20 | 0.12 |
| (1,1005) | 1:A:689:SER:H | 1:A:684:LYS:HA | 2 | 0.12 |
| (3,74) | 1:A:664:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (3,74) | 1:A:693:TYR:HA | 1:A:670:ARG:HG3 | 10 | 0.11 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:697:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (3,74) | 1:A:707:ARG:HG3 | 1:A:711:GLN:HA | 10 | 0.11 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 6 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 6 | 0.11 |
| (3,63) | 1:A:701:MET:HG2 | 1:A:701:MET:HB2 | 19 | 0.11 |
| (3,63) | 1:A:674:MET:HB2 | 1:A:674:MET:HG2 | 19 | 0.11 |
| (3,55) | 1:A:724:GLU:HG2 | 1:A:725:GLU:HA | 4 | 0.11 |
| (3,55) | 1:A:683:GLU:HG2 | 1:A:684:LYS:HA | 4 | 0.11 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:674:MET:HA | 2 | 0.11 |
| (3,177) | 1:A:680:TYR:HD2 | 1:A:678:GLY:HA2 | 2 | 0.11 |
| (3,119) | 1:A:712:TYR:HD2 | 1:A:710:ASN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (3,119) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:710:ASN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 6 | 0.11 |
| (2,6) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:711:GLN:HE22 | 19 | 0.11 |
| (2,5) | 1:A:712:TYR:HE2 | 1:A:665:TYR:H | 15 | 0.11 |
| (2,4) | 1:A:664:ARG:HG2 | 1:A:663:PRO:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,994) | 1:A:643:THR:H | 1:A:642:ASN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,970) | 1:A:722:GLN:H | 1:A:725:GLU:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 7 | 0.11 |
| (1,891) | 1:A:660:GLN:H | 1:A:659:MET:H | 9 | 0.11 |
| (1,866) | 1:A:666:MET:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,834) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:710:ASN:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,800) | 1:A:661:ASP:H | 1:A:660:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:705:LYS:H | 1:A:705:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,651) | 1:A:657:ASP:H | 1:A:658:GLY:H | 12 | 0.11 |
| (1,616) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HA | 13 | 0.11 |
| (1,616) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HA | 14 | 0.11 |
| (1,616) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,616) | 1:A:644:ALA:H | 1:A:644:ALA:HA | 17 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:713:TYR:H | 1:A:713:TYR:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD12 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.11 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD11 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.11 |
| (1,524) | 1:A:635:LEU:HD13 | 1:A:706:GLY:HA3 | 8 | 0.11 |
| (1,480) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:627:SER:HA | 17 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE2 | 1:A:668:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE1 | 1:A:668:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,362) | 1:A:667:MET:HE3 | 1:A:668:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE1 | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|------------|-----------------|------------------|-----------------|----------------------|
| (1,349) | 1:A:665:TYR:HE2 | 1:A:659:MET:HE3 | 10 | 0.11 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,274) | 1:A:682:LEU:HA | 1:A:682:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,1168) | 1:A:655:GLU:H | 1:A:656:TYR:H | 8 | 0.11 |
| (1,1154) | 1:A:711:GLN:H | 1:A:711:GLN:HG3 | 3 | 0.11 |
| (1,1045) | 1:A:665:TYR:H | 1:A:663:PRO:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:628:PRO:HD2 | 1:A:655:GLU:HG2 | 10 | 0.11 |
| (1,1007) | 1:A:689:SER:H | 1:A:688:ARG:HB2 | 9 | 0.11 |

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

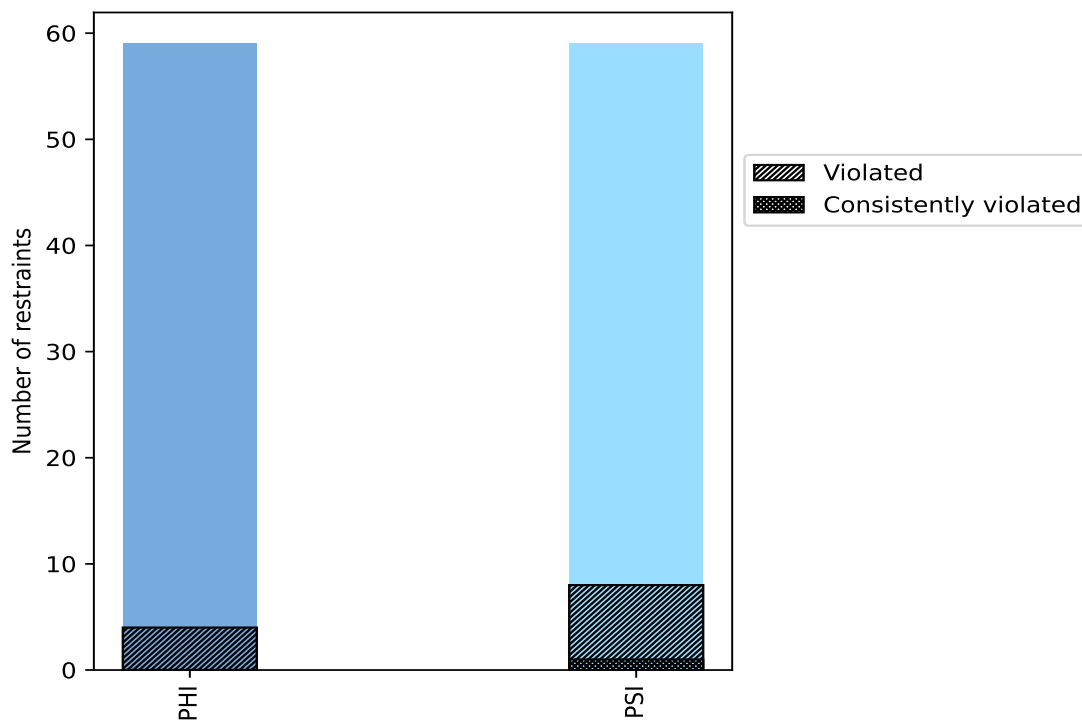
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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 |
| PHI | 59 | 50.0 | 4 | 6.8 | 3.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PSI | 59 | 50.0 | 8 | 13.6 | 6.8 | 1 | 1.7 | 0.8 |
| Total | 118 | 100.0 | 12 | 10.2 | 10.2 | 1 | 0.8 | 0.8 |

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](#)



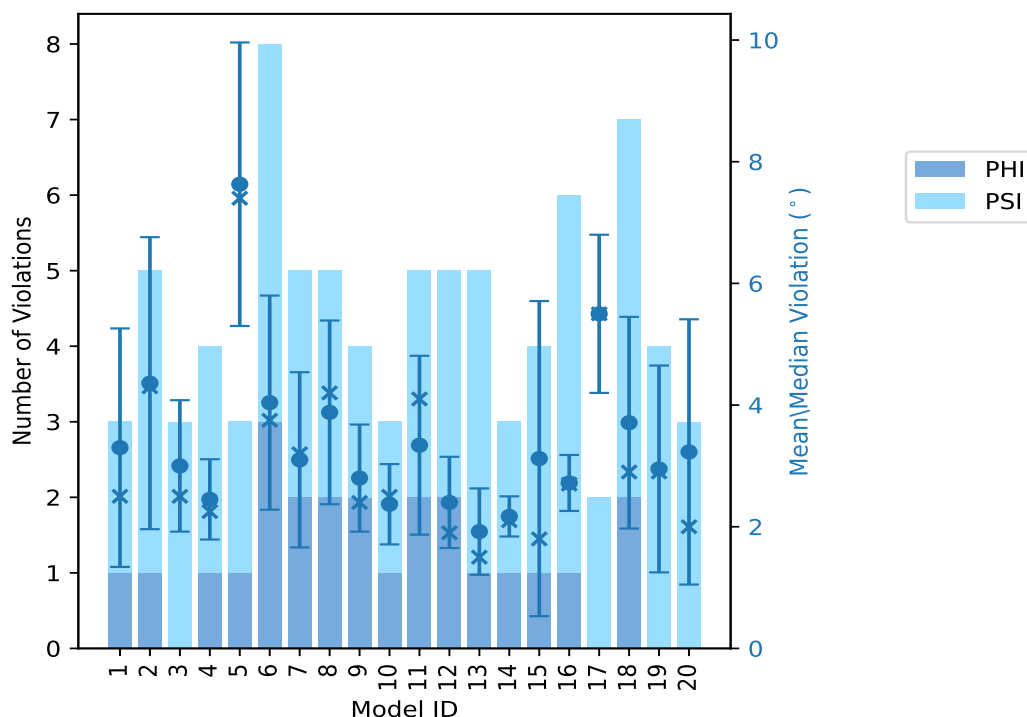
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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 (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PHI | PSI | Total | | | | |
| 1 | 1 | 2 | 3 | 3.3 | 6.0 | 1.96 | 2.5 |
| 2 | 1 | 4 | 5 | 4.36 | 7.9 | 2.4 | 4.3 |
| 3 | 0 | 3 | 3 | 3.0 | 4.5 | 1.08 | 2.5 |
| 4 | 1 | 3 | 4 | 2.45 | 3.5 | 0.66 | 2.25 |
| 5 | 1 | 2 | 3 | 7.63 | 10.6 | 2.33 | 7.4 |
| 6 | 3 | 5 | 8 | 4.04 | 7.5 | 1.76 | 3.75 |
| 7 | 2 | 3 | 5 | 3.1 | 5.6 | 1.44 | 3.2 |
| 8 | 2 | 3 | 5 | 3.88 | 6.1 | 1.51 | 4.2 |
| 9 | 2 | 2 | 4 | 2.8 | 4.3 | 0.88 | 2.4 |
| 10 | 1 | 2 | 3 | 2.37 | 3.1 | 0.66 | 2.5 |
| 11 | 2 | 3 | 5 | 3.34 | 5.0 | 1.47 | 4.1 |
| 12 | 2 | 3 | 5 | 2.4 | 3.7 | 0.75 | 1.9 |
| 13 | 1 | 4 | 5 | 1.92 | 3.2 | 0.71 | 1.5 |
| 14 | 1 | 2 | 3 | 2.17 | 2.6 | 0.33 | 2.1 |
| 15 | 1 | 3 | 4 | 3.12 | 7.6 | 2.59 | 1.8 |
| 16 | 1 | 5 | 6 | 2.72 | 3.3 | 0.46 | 2.7 |
| 17 | 0 | 2 | 2 | 5.5 | 6.8 | 1.3 | 5.5 |
| 18 | 2 | 5 | 7 | 3.71 | 6.2 | 1.74 | 2.9 |
| 19 | 0 | 4 | 4 | 2.95 | 4.8 | 1.7 | 2.9 |
| 20 | 0 | 3 | 3 | 3.23 | 6.3 | 2.18 | 2.0 |

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

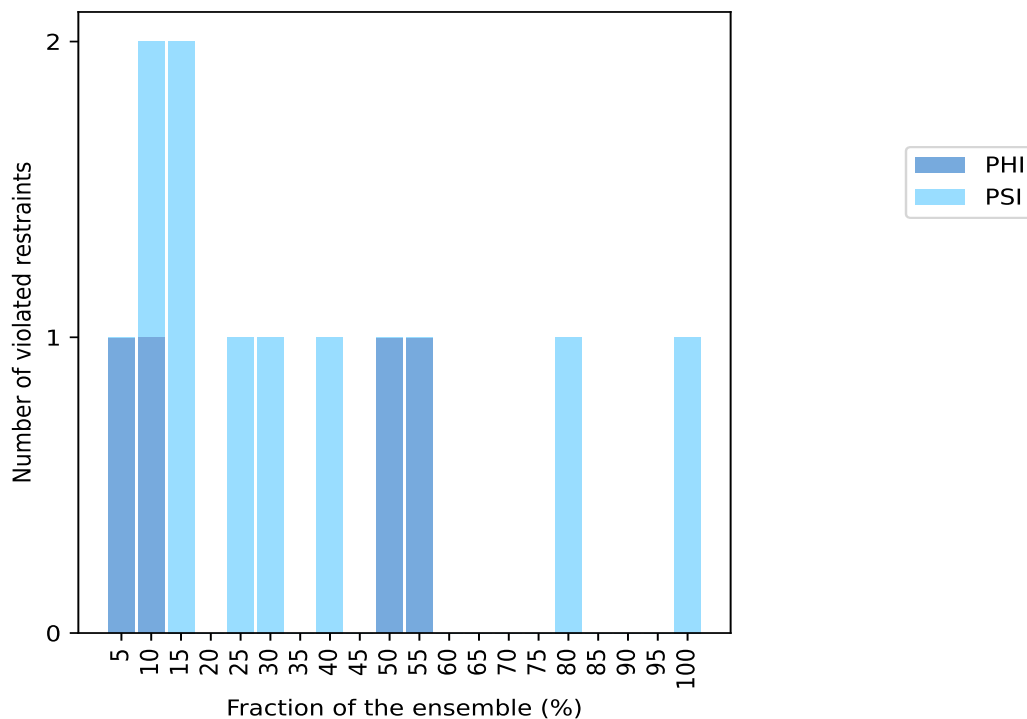
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI | PSI | 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 | 1 | 1 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 0 | 0 | 0 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 |
| 0 | 1 | 1 | 20 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

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

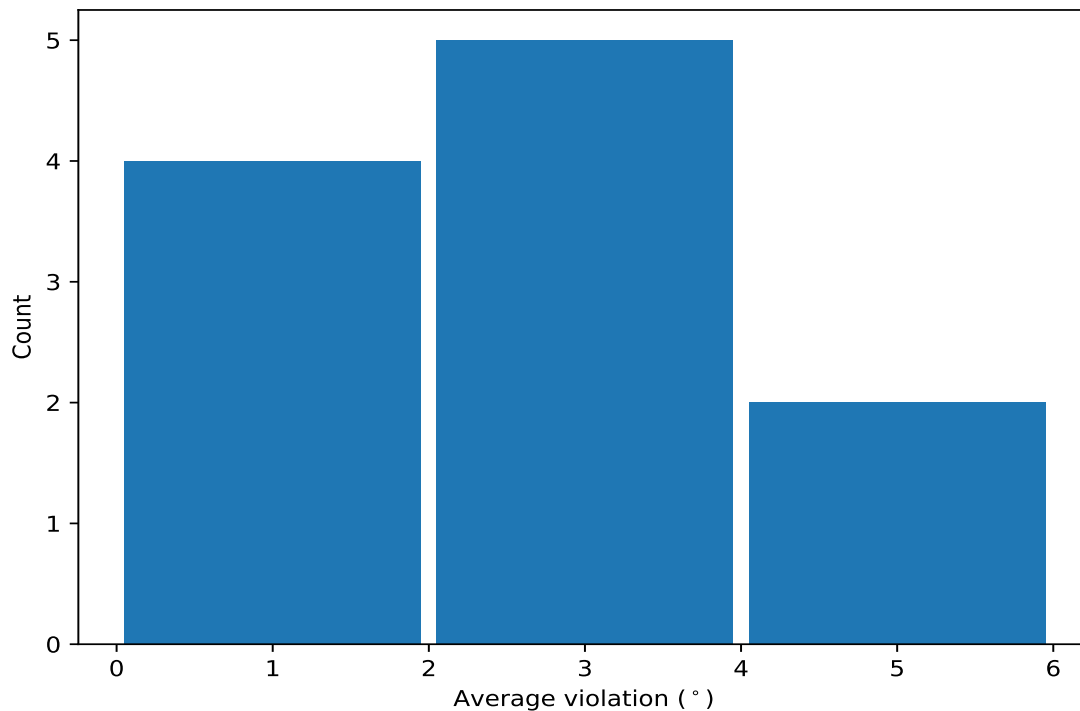


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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.

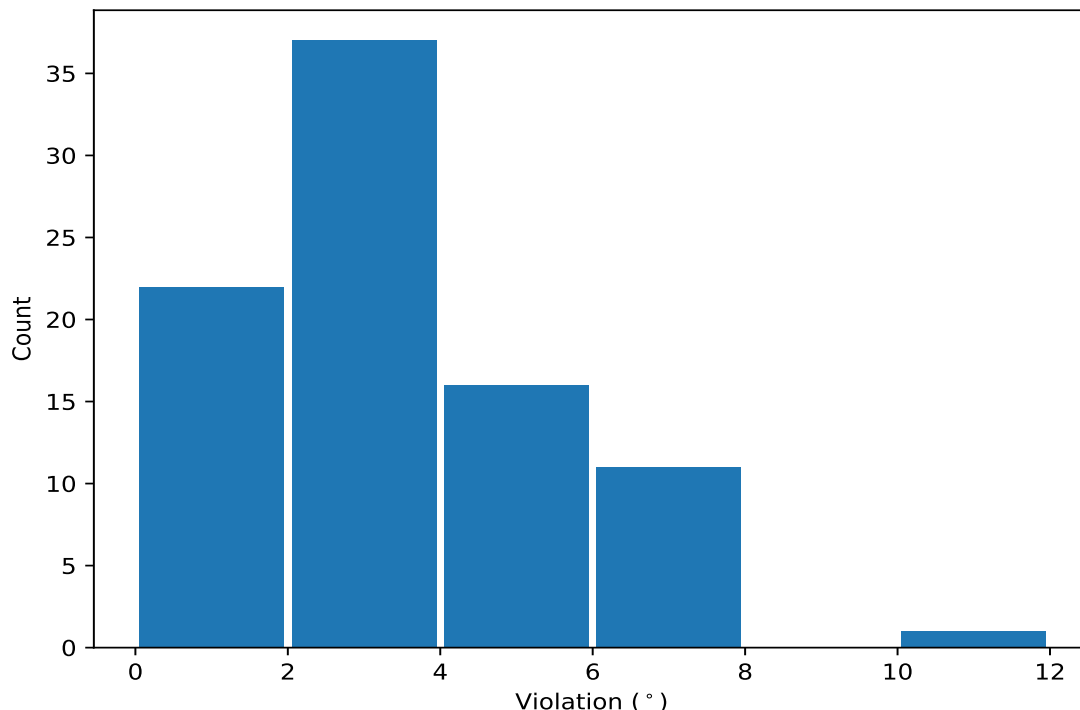
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 20 | 4.65 | 2.35 | 4.25 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 16 | 4.21 | 1.6 | 4.3 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 11 | 3.32 | 1.67 | 2.5 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 10 | 3.01 | 1.09 | 2.95 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 8 | 2.41 | 1.01 | 2.1 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 6 | 2.95 | 1.22 | 2.7 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 5 | 1.3 | 0.11 | 1.3 |
| (2,14) | 1:A:638:LEU:N | 1:A:638:LEU:CA | 1:A:638:LEU:C | 1:A:639:HIS:N | 3 | 1.6 | 0.28 | 1.8 |
| (2,2) | 1:A:629:ASP:N | 1:A:629:ASP:CA | 1:A:629:ASP:C | 1:A:630:ARG:N | 3 | 1.53 | 0.33 | 1.3 |
| (2,6) | 1:A:634:TRP:N | 1:A:634:TRP:CA | 1:A:634:TRP:C | 1:A:635:LEU:N | 2 | 2.3 | 0.1 | 2.3 |
| (2,51) | 1:A:681:GLY:C | 1:A:682:LEU:N | 1:A:682:LEU:CA | 1:A:682:LEU:C | 2 | 1.8 | 0.3 | 1.8 |

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 (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 5 | 10.6 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 2 | 7.9 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 15 | 7.6 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 6 | 7.5 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 5 | 7.4 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 17 | 6.8 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 20 | 6.3 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 18 | 6.2 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 8 | 6.1 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1 | 6.0 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 18 | 6.0 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 2 | 6.0 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 7 | 5.6 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 6 | 5.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 6 | 5.0 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 11 | 5.0 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 5 | 4.9 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 19 | 4.8 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 3 | 4.5 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 8 | 4.5 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 19 | 4.5 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 11 | 4.4 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 2 | 4.3 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 9 | 4.3 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 18 | 4.3 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 8 | 4.2 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 17 | 4.2 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 11 | 4.1 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 6 | 3.9 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 12 | 3.7 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 6 | 3.6 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 4 | 3.5 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 7 | 3.3 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 16 | 3.3 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 7 | 3.2 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 16 | 3.2 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 13 | 3.2 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 10 | 3.1 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 8 | 3.0 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 18 | 2.9 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 16 | 2.9 |
| (2,19) | 1:A:661:ASP:C | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 6 | 2.9 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 18 | 2.9 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 12 | 2.8 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 14 | 2.6 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 18 | 2.6 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 1 | 2.5 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 9 | 2.5 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 3 | 2.5 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 10 | 2.5 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 4 | 2.5 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 16 | 2.5 |
| (2,6) | 1:A:634:TRP:N | 1:A:634:TRP:CA | 1:A:634:TRP:C | 1:A:635:LEU:N | 16 | 2.4 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 2 | 2.3 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 9 | 2.3 |
| (2,6) | 1:A:634:TRP:N | 1:A:634:TRP:CA | 1:A:634:TRP:C | 1:A:635:LEU:N | 6 | 2.2 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 13 | 2.2 |
| (2,51) | 1:A:681:GLY:C | 1:A:682:LEU:N | 1:A:682:LEU:CA | 1:A:682:LEU:C | 14 | 2.1 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 9 | 2.1 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 7 | 2.0 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 11 | 2.0 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 16 | 2.0 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 4 | 2.0 |
| (2,2) | 1:A:629:ASP:N | 1:A:629:ASP:CA | 1:A:629:ASP:C | 1:A:630:ARG:N | 20 | 2.0 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 3 | 2.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 12 | 1.9 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 12 | 1.9 |
| (2,23) | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 1:A:664:ARG:CA | 1:A:664:ARG:C | 15 | 1.8 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 15 | 1.8 |
| (2,14) | 1:A:638:LEU:N | 1:A:638:LEU:CA | 1:A:638:LEU:C | 1:A:639:HIS:N | 6 | 1.8 |
| (2,14) | 1:A:638:LEU:N | 1:A:638:LEU:CA | 1:A:638:LEU:C | 1:A:639:HIS:N | 14 | 1.8 |
| (2,118) | 1:A:722:GLN:N | 1:A:722:GLN:CA | 1:A:722:GLN:C | 1:A:723:MET:N | 4 | 1.8 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 12 | 1.7 |
| (2,20) | 1:A:662:GLU:N | 1:A:662:GLU:CA | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 8 | 1.6 |
| (2,51) | 1:A:681:GLY:C | 1:A:682:LEU:N | 1:A:682:LEU:CA | 1:A:682:LEU:C | 10 | 1.5 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 13 | 1.5 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 1 | 1.4 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 7 | 1.4 |
| (2,22) | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 1:A:664:ARG:N | 20 | 1.4 |
| (2,21) | 1:A:662:GLU:C | 1:A:663:PRO:N | 1:A:663:PRO:CA | 1:A:663:PRO:C | 13 | 1.4 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 2 | 1.3 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 19 | 1.3 |
| (2,2) | 1:A:629:ASP:N | 1:A:629:ASP:CA | 1:A:629:ASP:C | 1:A:630:ARG:N | 13 | 1.3 |
| (2,2) | 1:A:629:ASP:N | 1:A:629:ASP:CA | 1:A:629:ASP:C | 1:A:630:ARG:N | 15 | 1.3 |
| (2,18) | 1:A:640:TRP:N | 1:A:640:TRP:CA | 1:A:640:TRP:C | 1:A:641:TYR:N | 11 | 1.2 |
| (2,14) | 1:A:638:LEU:N | 1:A:638:LEU:CA | 1:A:638:LEU:C | 1:A:639:HIS:N | 19 | 1.2 |
| (2,56) | 1:A:687:GLN:N | 1:A:687:GLN:CA | 1:A:687:GLN:C | 1:A:688:ARG:N | 18 | 1.1 |